

## 幾何学的推定のための最適化手法：最小化を越えて\*

## Optimization Techniques for Geometric Estimation: Beyond Minimization

金谷健一

Kenichi Kanatani

岡山大学大学院自然科学研究科

Department of Computer Science, Okayama University

E-mail: kanatani@suri.cs.okayama-u.ac.jp

## 概要

本稿ではコンピュータビジョンにおいてノイズのあるデータからの幾何学的推定を最適に行う手法についてまとめる。まず最適性の解釈を述べ、幾何学的推定が通常の統計的推定とは異なることを指摘する。そして、ノイズのモデル化、および KCR 下界と呼ぶ精度の理論限界について述べる。次に与えられた評価関数を最小化する方法として、最小二乗法、最尤推定（その特別の場合が再投影誤差最小化）、サンブソン誤差最小化を定式化する。そして、それらのバンドル調整や FNS 法による数値解法、および最尤推定解の精度をさらに高める超精度補正について述べる。次に、何らの評価関数も最小化しない方法として、重み反復法、くりこみ法、超精度くりこみ法について述べる。最後に数値実験例を示し、超精度くりこみ法が従来から最も精度が高いと考えられている最尤推定よりも精度が高く、現時点では最も優れた手法であることを結論する。

## 目次

1. はじめに	1
2. 背景	2
2.1 幾何学的問題の最適化	2
2.2 幾何学的推定	2
2.3 ノイズのモデル化	3
2.4 統計的モデルと統計的推定	4
2.5 幾何学的モデルと幾何学的推定	4
2.6 KCR 下界	5
3. 最小化に基づく方法	5
3.1 最小二乗法	5
3.2 最尤推定	5
3.3 バンドル調整	6
3.4 攪乱母数とセミパラメトリックモデル	7
3.5 変換データ空間のノイズの正規近似	7
3.6 サンブソン誤差最小化	7
3.7 厳密な最尤推定解の計算	8
3.8 最尤推定解の超精度補正	8
4. 最小化に基づかない法	9
4.1 重み反復法	9
4.2 くりこみ法	10
4.3 共分散と偏差の解析	11
4.4 超精度くりこみ法	11
4.5 最小化に基づかない方法のまとめ	12
5. 実験例	13
5.1 精度の評価	13
5.2 楕円当てはめ	13

5.3 基礎行列の計算	15
6. まとめ	16
6.1 幾何学的推定	16
6.2 最小化に基づく方法	16
6.3 最小化に基づかない方法	16
6.4 手法間の比較	16

## 1 はじめに

コンピュータビジョンの最も重要な基礎技術の一つは、幾何学的拘束 (geometric constraint) を利用して対象の 2 次元および 3 次元形状を計算することである。ここで幾何学的拘束というのは、対象が直線である、平面である、平行である、直交する、あるいはカメラの撮像が透視投影であるのような、比較的簡単な方程式で表される図形の性質のことを言う。このような幾何学的拘束に基づく推論を以下、幾何学的推定 (geometric estimation) と呼ぶ。観測データにノイズ（以下、データの誤差を“ノイズ”と呼ぶ）がなければ、これは単に方程式の計算であり、何の問題もない。しかしノイズがあると、成り立つべき幾何学的拘束が成り立たない。このような状況で幾何学的推定を“最適”に行う研究は 1980 年代から筆者を含む多くの研究者によって精力的に研究されてきた。本稿ではこれを最新の結果を含めて概説する。

本稿のメッセージの中心は、“最適”な推定を何らかの評価関数を最大または最小にすると理解する必要はないということである。まず 2 節で幾何学的推定の最適性の解釈を述べ、幾何学的推定が通常の統計的推定とは異なることを指摘する。そして、幾何学的推定が仮定したノイズの統計的性質に依存すること、およびノイズをどのようにモデル化するかを述べ、KCR 下界と呼ぶ精度の理論限界が存在することを指摘する。3 節では最小化に基づく幾何学的推定をまとめる。代表的な方法は最小二乗法、最尤推定（その特別の場合が再投影誤差最小化）、サンブソン誤差最小化であり、それらのバンドル調整や FNS 法による数値解法を述べる。さらに、最尤推定解の精度をさらに高める超精度補正

\*本稿は 2012 年 3 月の情報処理学会コンピュータビジョン研究会における講演原稿 [25] に加筆したものである。

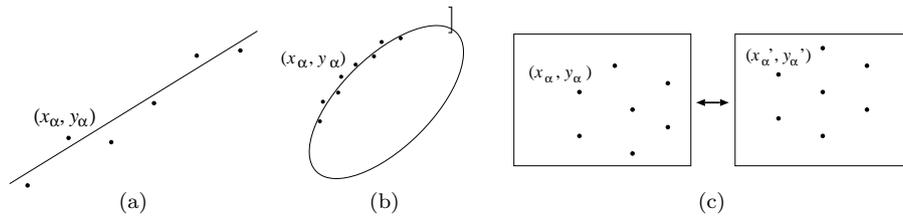


図 1 (a) 直線の当てはめ . (b) 楕円の当てはめ . (c) 基礎行列の計算 .

を述べる . 4 節では最小化に基づかない幾何学的推定をまとめる . そして , 重み反復法 , くりこみ法 , およびくりこみ法を改良した超精度くりこみ法について述べる . 5 節では手法間の精度を比較する実験例を示し , 超精度くりこみ法が従来から最も精度が高いと考えられている最尤推定よりも精度が高いことを指摘する . そして , これがノイズにロバストであり , 現時点では最も優れた手法であることを結論する .

## 2 背景

### 2.1 幾何学的問題の最適化

幾何学的推定の最適化は普通の意味の “最適化” とは異なる . 普通の意味の “最適化” とは与えられた評価関数を最大または最小にする解を求めることである . これは利益や利得や効率を最大にする解を計算したり , 損失や誤差や遅延を最小にする解を計算するなど , 工学のあらゆる問題の基礎である . しかし , これから述べるように , コンピュータビジョンの幾何学的推定は “与えられた方程式の解を求める” ことである . それならただ解けばよいように思えるが , 問題は

- ノイズを含むデータから構成した方程式には解が存在しない

ということである . そこで

- データにノイズがなければその方程式は唯一の解を持つ

と仮定して , その解を推定する . 観測が理想的である場合に得られると期待される値をデータの “真の値” , そのときに方程式が持つ唯一の解を “真の解” と呼ぶ . これらを推定する手掛かりはノイズの統計的な性質である . すなわち , 本稿で述べる幾何学的推定とは

- ノイズの統計的な性質を適切に仮定し , それを利用して , 方程式がデータの真値から構成された場合に持つであろう解を推論する

ということである . この意味で , 幾何学的推定は仮定するノイズの統計的な性質に依存する . この問題を何らかの評価関数を最小にするという通常最適化に帰着させて解くことも可能であるが , 本稿で強調したいこ

とは , 必ずしもその必要はないということである . 実際 , 幾何学的推定は何らの評価関数を最小にすることなしに実行できる . 以下ではこのことを系統的に説明する .

### 2.2 幾何学的推定

本稿で考える幾何学的推定は次のように数学的に定式化される . 理想的に観察される (ベクトル) データ  $x$  は ,  $\theta$  をパラメータ (ベクトル) とするある方程式

$$F(x; \theta) = 0 \quad (1)$$

を満たすとす . これを幾何学的拘束 (geometric constraint) と呼ぶ . 課題はノイズを含むデータ  $x_\alpha$  ,  $\alpha = 1, \dots, N$  から  $\theta$  を推定することである . 具体的には

$$F(x_\alpha; \theta) \approx 0, \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (2)$$

となる  $\theta$  を計算することである . コンピュータビジョンの多くの問題では , このようにして求めた  $\theta$  から画像に写っている対象の位置や形状や運動を計算することができる . 多くの問題ではパラメータを付け替えて ,  $F(x; \theta)$  を  $\theta$  に関して線形 (しかし , データ  $x$  に関しては非線形) に記述することができる . その場合は式 (1) は次の形になる .

$$(\xi(x), \theta) = 0 \quad (3)$$

ここに  $\xi(x)$  は  $x$  のある (ベクトル値) 非線形関数であり , 各成分  $\xi_i(x)$  はパラメータ  $\theta_i$  のかかっている  $x$  の (非線形) 項をまとめたものである . 式 (1) にパラメータのかかっていない  $x$  の項が足されている場合も , 形式的に未知数がかかっていると見なす . 以下 , 本稿ではベクトル  $a, b$  の内積を  $(a, b)$  と書く . 式 (3) の形から分かるように  $\theta$  に定数倍の不定性がある . これを除くために以下  $\theta$  を  $\|\theta\| = 1$  と単位ベクトルに正規化する .

【例 1】 (直線の当てはめ) 与えられた点列  $(x_\alpha, y_\alpha)$  ,  $\alpha = 1, \dots, N$  に直線

$$Ax + By + C = 0 \quad (4)$$

を当てはめる (図 1(a)) . このとき

$$\xi(x, y) \equiv (x, y, 1)^\top, \quad \theta \equiv (A, B, C)^\top \quad (5)$$

と置けば、式 (4) は次のように書ける .

$$(\xi(x, y), \theta) = 0 \quad (6)$$

【例 2】 (楕円の当てはめ) 与えられた点列  $(x_\alpha, y_\alpha)$ ,  $\alpha = 1, \dots, N$  に楕円

$$Ax^2 + 2Bxy + Cy^2 + 2(Dx + Ey) + F = 0 \quad (7)$$

を当てはめる (図 1(b)). このとき

$$\begin{aligned} \xi(x, y) &\equiv (x^2, 2xy, y^2, 2x, 2y, 1)^\top, \\ \theta &\equiv (A, B, C, D, E, F)^\top \end{aligned} \quad (8)$$

と置けば、楕円の式 (7) は次のように書ける .

$$(\xi(x, y), \theta) = 0 \quad (9)$$

【例 3】 (基礎行列の計算) 同一シーンを異なる位置から撮影した 2 画像において、第 1 画像の点  $(x, y)$  が第 2 画像の点  $(x', y')$  に対応しているとき (図 1(c)), 両者は次のエプ極線方程式 (epipolar equation) を満たす [12, 24].

$$\left( \begin{pmatrix} x \\ y \\ 1 \end{pmatrix}, F \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ 1 \end{pmatrix} \right) = 0 \quad (10)$$

ただし、 $F$  はそれぞれの画像を撮影したカメラの相対位置や内部パラメータに依存するランク 2 の行列であり、基礎行列 (fundamental matrix) と呼ばれる [12, 24]. これを画像中の対応点から計算することにより、カメラ位置やシーンの 3 次元形状を計算することができる . このとき、

$$\xi(x, y, x', y') \equiv (xx', xy', x, yx', yy', y, x', y', 1)^\top, \quad (11)$$

$$\theta \equiv (F_{11}, F_{12}, F_{13}, F_{21}, F_{22}, F_{23}, F_{31}, F_{32}, F_{33})^\top \quad (12)$$

と定義すると、式 (10) は次のように書ける .

$$(\xi(x, y, x', y'), \theta) = 0 \quad (13)$$

これらの例では拘束を表す式が一つ (スカラー方程式) の場合であるが、以下の議論は複数の式 (ベクトル方程式) の場合に容易に拡張できる . しかし、式の添字が増えて記述が煩雑になるので、本稿ではスカラー方程式の場合について説明する .

ところで、式 (5), (8), (11) のベクトルの成分として定数 1 が現れている . もし、 $x, y$  や  $x', y'$  が非常に大きい値であると、そのまま計算すると計算機内の有限演算の丸め誤差の影響が現れて精度が低下する . これを防ぐにはあらかじめデータに適切な定数を掛けてスケールを調節して、 $x, y, x', y'$  を  $O(1)$  に正規化する

必要がある [10]. しかし、本稿では理論に集中するために、そのような実際の数値計算上の考慮については触れないことにする .

以上ではデータ  $x_\alpha$  の真値  $\bar{x}_\alpha$  は式 (3) の拘束を厳密に満たすと仮定しているが、実際のコンピュータビジョン応用では画像処理アルゴリズムが完全ではないため、何らかの原因で拘束を満たさないデータが紛れ込むことが多い . そのようなデータをアウトライア (outlier), あるいは外れ値と呼び、その検出と除去は重要な問題である . それに対して、ノイズがなければ拘束を満たすべきデータをインライア (inlier) と呼ぶ . しかし、アウトライアは普通は「拘束を満たさない」という以外には何の仮定もできないので、理論解析が困難である . 実際によく行われるのは、アウトライアが存在しないとしてパラメータ  $\theta$  を計算し、その結果が全データによく合致するか、データの一部から  $\theta$  を計算すると違う結果が得られるか、などを繰り返して検査する投票法 (voting) である . 代表的なのは RANSAC (Random Sampling Consensus) [8] と最小メジアン法 (least median of squares; LMedS) [49] である . またアウトライアに左右されない推定はロバスト推定 (robust estimation) [13] と呼ばれ、拘束から大きく外れるデータの影響を無視する M 推定子 (M-estimator) がよく使われる . いずれにせよ、アウトライア検出はアウトライアがない場合の推定と組み合わせるので、本稿では以下、インライアに対する推定のみを考える .

### 2.3 ノイズのモデル化

ここで言う「ノイズ」とは画像から得た「データの不正確さ」のことであり、物理実験や通信などに現れるような「時間、空間に渡る不規則な揺らぎ」ではないことに注意 . データの抽出には特徴点検出やエッジ検出のような画像処理アルゴリズムを使うので、得られた結果にはある程度の不確定さがある . これをモデル化するために、観測値  $x_\alpha$  はその真値  $\bar{x}_\alpha$  に期待値 0、共分散行列  $V[x_\alpha]$  の確率変数  $\Delta x_\alpha$  が加わったとみなし、これは各  $\alpha$  ごとに独立であるとする . さらに、共分散行列  $V[x_\alpha]$  は定数倍を除いて既知とする . 具体的にはある共通の未知の定数  $\sigma$  があって

$$V[x_\alpha] = \sigma^2 V_0[x_\alpha] \quad (14)$$

の形に書けて、 $V_0[x_\alpha]$  のみが既知であるとする . これは、実際問題として不確定性の絶対的大きさを測定することが困難であるということ、および以下示すように、パラメータ  $\theta$  が  $\sigma$  に無関係に  $V_0[x_\alpha]$  のみから推定できるという事実を反映したものである . 以下、未知の定数  $\sigma$  をノイズレベル (noise level), 既知の行列  $V_0[x_\alpha]$  を正規化共分散行列 (normalized covariance matrix) と呼ぶ .

上記のように  $x_\alpha$  を確率変数とみなせば、それを変換

した  $\xi(x_\alpha)$  (以下, これを  $\xi_\alpha$  と書く) も確率変数である. その共分散行列も  $V[\xi_\alpha] = \sigma^2 V_0[\xi_\alpha]$  の形に書くと, その正規化共分散行列  $V_0[\xi_\alpha]$  は第 1 近似において, 写像  $\xi(x)$  のヤコビ行列  $\partial\xi/\partial x$  を使って次のように評価できる.

$$V_0[\xi_\alpha] = \frac{\partial\xi}{\partial x} \Big|_{x=\bar{x}_\alpha} V_0[x_\alpha] \frac{\partial\xi}{\partial x} \Big|_{x=\bar{x}_\alpha}^\top \quad (15)$$

これは真値  $\bar{x}_\alpha$  を含んでいるので実際の計算では観測値  $x_\alpha$  で近似する. 多くの実験でこの近似は最終結果に影響を及ぼさないことが確認されている. また  $V_0[\xi_\alpha]$  はヤコビ行列による 1 次近似に基づいているが, 2 次以上の項を考慮しても最終結果に影響がないことが確認されている.

なお,  $x_\alpha$  のノイズが正規分布だとしても, それを非線形変換した  $\xi_\alpha$  のノイズはもはや正規分布ではない. しかし, ノイズが小さいときは正規分布に似た分布であると期待される. これを正規分布で近似するとどの程度の差が現れるかが問題となるが, これについては後で述べる.

## 2.4 統計的モデルと統計的推定

本稿で述べる幾何学的推定 (geometric estimation) は確率的, 統計的議論に基づいているが, 通常の統計学の教科書に載っている推定問題 (以下, これを統計的推定 (statistical estimation) と呼ぶ) とはいろいろな点で異なっている. 幾何学的推定に関する多くの誤解はこの相違をよく理解しないことから生じている.

標準的な統計的推定は, 観測データ  $x_1, \dots, x_N$  が未知パラメータ  $\theta$  をもつ確率密度  $p(x|\theta)$  からランダムにサンプルされたとき,  $\theta$  を推定する問題として定式化される. この  $p(x|\theta)$  は統計的モデル (statistical model) と呼ばれ, データ  $x_1, \dots, x_N$  の発生メカニズムを説明するものである. すなわち,  $\theta$  で説明される未知のメカニズムから発生するデータを多数観察して, その発生メカニズムを推定するものである. 当然, 多数のデータを観測すればするほど推定の精度が上がる. そこでデータ数  $N$  を増やしたときの精度の向上の程度の  $N \rightarrow \infty$  に対する漸近解析がよく研究されている. この統計的推定の方法は次のように大別できる.

**最小化原理** 指定した評価関数  $J(x_1, \dots, x_N; \theta)$  を最小にする  $\theta$  を選ぶ. 代表例は最尤推定 (maximum likelihood estimation) であり,

$$J = - \sum_{\alpha=1}^N \log p(x_\alpha|\theta) \quad (16)$$

を最小にする. これはデータの尤度 (likelihood)  $\prod_{\alpha=1}^N p(x_\alpha|\theta)$  を最大化するものであるが, 計算の便宜上, 対数をとって符号を変えた負対数尤度 (negative log-likelihood) を最小化している. さらにパ

ラメータ  $\theta$  の事前確率 (a priori probability)  $p(\theta)$  を導入して

$$J = - \sum_{\alpha=1}^N \log p(x_\alpha|\theta) - \log p(\theta) \quad (17)$$

を最小にするものが事後確率最大化 (maximum a posteriori probability; MAP) である. これはベイズの定理 (Bayes theorem) によって定まる事後確率 (a posteriori probability) を最大にする  $\theta$  を選ぶことに相当する. これもベイズ推定 (Bayesian estimation) の一種であるが, 事後確率を最大にする  $\theta$  そのものではなく, 事後確率分布全体を用いて定義したベイズリスク (Bayes risk) を最小にするのが一般のベイズ推定である.

**推定関数の方法** 次の形の (一般に連立) 方程式を解いて  $\theta$  を定める.

$$g(x_1, \dots, x_N; \theta) = 0 \quad (18)$$

このような方程式を推定方程式 (estimating equation) と呼び [9], 関数  $g$  を推定関数 (estimating function) と呼ぶ. 推定関数  $g$  として

$$g = - \sum_{\alpha=1}^N \nabla_\theta \log p(x_\alpha|\theta) \quad (19)$$

をとれば最尤推定となる ( $\nabla_\theta$  は  $\theta$  に関するベクトル値微分). このように推定関数の方法は最小化原理を拡張したものである. しかし, 推定関数  $g$  は何らかの評価関数の導関数である必要はなく, 解が望ましい性質を持つように調節することができる. 望ましい性質としては不偏性 (unbiasedness), 一致性 (consistency), 有効性 (efficiency) などがある. この意味で, 推定関数の方法は最小化原理よりも柔軟であり, より高精度の解を得る可能性を秘めている.

## 2.5 幾何学的モデルと幾何学的推定

本稿で述べる幾何学的推定が上述の統計的推定と大きく異なるのは, 推論の出発点が単に「データの真値が式 (1) または式 (3) の拘束を満たしている」という仮定のみであることである. これを幾何学的モデル (geometric model) と呼ぶ. これはデータの真値が満たさなければならぬ幾何学的関係を指定しているだけで, 具体的にデータ  $x_\alpha$  の発生メカニズムを説明しているわけではない. このため,  $x_\alpha$  をパラメータ  $\theta$  による直接的な式で表すことは一般にはできない.

統計的推定とのもう一つの相違点は, 統計的推定がある統計的モデル (= 確率密度) から繰り返してサンプルされた多数のデータに基づくのに対して, 幾何学的推定は理想的には幾何学的モデルを満たすとみなす

“一組”のデータ  $\{x_1, \dots, x_N\}$  に基づくことである。当然、ノイズが少ないほど正確な推定ができる。したがって、ノイズレベル  $\sigma$  に着目して、精度の  $\sigma \rightarrow 0$  に対する摂動解析がよく研究されている。コンピュータビジョンにおいては  $N \rightarrow \infty$  に対する漸近解析はそれほど意味がない。それは画像から画像処理によって抽出できるデータ数が非常に限られているからである。通常は抽出したデータごとにその信頼性の指標が与えられていて、幾何学的推定には信頼性指標の高いデータのみを用いる。もし多くのデータを用いようとすると信頼性指標の低いものまで使わなければならないが、それらは誤検出あるいは誤対応である可能性が高い。

幾何学的推定に対しても統計的推定と同様に、二つの方法が考えられる。

**最小化に基づく方法** 指定した評価関数を最小にする  $\theta$  を選ぶ。コンピュータビジョンにおいてはこれが標準とみなされている。

**最小化に基づかない方法** 指定した方程式を解いて  $\theta$  を定める。その方程式は何らかの関数の導関数が 0 という形をしている必要はなく、何らかの評価関数を最大または最小にするものとは限らない。これは最小化に基づく方法より一般的であり、解くべき方程式を解が望ましい性質を持つように調節することができる。この意味で最小化よりも柔軟であり、より高精度の解を得る可能性を秘めている。しかし、このような考え方はコンピュータビジョンにおいてはほとんど知られていない。

## 2.6 KCR 下界

最小化に基づく方法でも最小化に基づかない方法でも、幾何学的推定には精度の理論限界が存在する。これは次のように定式化できる。観測データ  $\xi_\alpha$  の真値  $\bar{\xi}_\alpha$  は未知パラメータ  $\theta$  に対して拘束  $(\bar{\xi}_\alpha, \theta) = 0$  を満たすとする。データ  $\xi_1, \dots, \xi_N$  から何らかの方法で推定した  $\theta$  の値を  $\hat{\theta}$  とすれば、これは  $\{\xi_\alpha\}_{\alpha=1}^N$  の関数であり、 $\hat{\theta}(\{\xi_\alpha\}_{\alpha=1}^N)$  と書ける。この関数を  $\theta$  の推定量 (estimator) と呼ぶ。推定の誤差を  $\Delta\theta$  とするとき、すなわち  $\hat{\theta} = \theta + \Delta\theta$  と書けるとき、推定量  $\hat{\theta}$  の共分散行列を

$$V[\hat{\theta}] = E[\Delta\theta\Delta\theta^\top] \quad (20)$$

と定義する。ただし、 $E[\cdot]$  は確率変数とみなした観測データ  $\{\xi_\alpha\}_{\alpha=1}^N$  に関する期待値である。このとき

- 各  $\xi_\alpha$  はその真値  $\bar{\xi}_\alpha$  に期待値 0、共分散行列  $V[\xi_\alpha] = \sigma^2 V_0[\xi_\alpha]$  の正規分布に従うノイズが各  $\alpha$  に独立に加わっている。
- $\hat{\theta}(\{\xi_\alpha\}_{\alpha=1}^N)$  は不偏推定量 (unbiased estimator) である。すなわち、真値  $\theta$  が何であれ  $E[\hat{\theta}] = \theta$  が成り立つ。

と仮定できれば、次の不等式が成り立つ [5, 18, 19, 23] .

$$V[\hat{\theta}] \succ \frac{\sigma^2}{N} \left( \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N \frac{\bar{\xi}_\alpha \bar{\xi}_\alpha^\top}{(\theta, V_0[\xi_\alpha] \theta)} \right)^{-} \quad (21)$$

ただし、 $A \succ B$  は  $A - B$  が半正値対称行列であることを表す。また  $(\cdot)^{-}$  は一般逆行列を表す。上式の右边を Chernov ら [5] は KCR (Kanatani-Cramer-Rao) 下界 (KCR lower bound) と呼んでいる。式 (21) は単一の拘束  $(\bar{\xi}_\alpha, \theta) = 0$  の場合であるが、拘束が複数ある場合にも自然に拡張される [31, 42, 53] .

## 3 最小化に基づく方法

まず、コンピュータビジョンにおいて広く用いられている最小化に基づく幾何学的推定の方法をまとめる。

### 3.1 最小二乗法

これは、真値  $\bar{\xi}_\alpha$  が  $(\bar{\xi}_\alpha, \theta) = 0$  を満たすことから、ノイズのあるデータ  $\xi_\alpha$  に対して

$$J = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N (\xi_\alpha, \theta)^2 \quad (22)$$

を最小にする  $\theta$  を選ぶものである。 $\theta$  の定数倍の不定性を除くために  $\|\theta\| = 1$  と正規化することは、 $\sum_{\alpha=1}^N (\xi_\alpha, \theta)^2 / \|\theta\|^2$  を最小にすることもとみなせる。式 (22) は次のように書き直せる。

$$\begin{aligned} J &= \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N (\xi_\alpha, \theta)^2 = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N \theta^\top \xi_\alpha \xi_\alpha^\top \theta \\ &= \left( \theta, \underbrace{\frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N \xi_\alpha \xi_\alpha^\top}_{\equiv M} \theta \right) = (\theta, M\theta) \end{aligned} \quad (23)$$

これは行列  $M$  に関する 2 次形式であるから、よく知られているように、これを最小にする単位ベクトル  $\theta$  は  $M$  の最小固有値に対する単位固有ベクトルである [20] .

この方法は二乗和を最小にすることから最小二乗法 (least square) と呼ばれるほか、式 (22) は代数距離 (algebraic distance) とも呼ばれ、それを最小にすることから代数距離最小化 (algebraic distance minimization) とも呼ばれる。これは探索を必要とせず、直接に解が求まることから広く用いられているが、解には大きな統計的偏差 (statistical bias) があることが知られている。例えば【例 2】の楕円当てはめではほとんど常に真の楕円に比べて小さい楕円が当てはまる。このために精密な推定には不向きであり、おおまかな推定、2.2 節で述べたアウトライア除去のための投票、反復手法の出発値の計算などに用いられる。

### 3.2 最尤推定

各データ  $x_\alpha$  のノイズが期待値 0、共分散行列  $V[x_\alpha] = \sigma^2 V_0[x_\alpha]$  の独立な正規分布であるという仮定から、

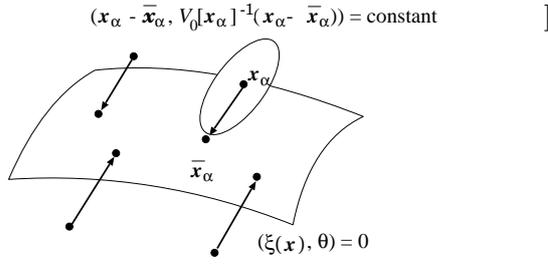


図2  $x$  空間の点  $x_\alpha$  に超曲面  $(\xi(x), \theta) = 0$  を当てはめる。

マハラノビス距離 (Mahalanobis distance) を

$$J = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N (x_\alpha - \bar{x}_\alpha, V_0[x_\alpha]^{-1}(x_\alpha - \bar{x}_\alpha)) \quad (24)$$

と定義すると、尤度は  $Ce^{-NJ/2\sigma^2}$  と書ける ( $C$  は  $\bar{x}_\alpha$  や  $\theta$  に関係しない正規化定数)。ゆえに尤度を最大化する最尤推定 (maximum likelihood estimation) は式 (24) を制約条件

$$(\xi(\bar{x}_\alpha), \theta) = 0 \quad (25)$$

のもとで最小化することと等価である。特にノイズが一樣 (homogeneous) ( $\alpha$  によらない)、かつ等方 (isotropic) (方向に偏りが無い) であれば  $V_0[x_\alpha] = I$  (単位行列) と置くことができるので、式 (24) は

$$J = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N \|x_\alpha - \bar{x}_\alpha\|^2 \quad (26)$$

と書ける。これを式 (25) のもとで最小化することは、コンピュータビジョンの分野では幾何学的距離最小化 (geometric distance minimization)、数値解析の分野では全最小二乗法 (total least square; TLS) と呼ぶことが多い<sup>1</sup>。特に  $\bar{x}_\alpha$  が仮定した 3 次元構造を画像上に投影した位置、 $x_\alpha$  がその実際の観測位置である場合に、式 (26) は再投影誤差 (reprojection error) と呼ばれ、これを式 (25) のもとで最小化することを再投影誤差最小化 (reprojection error minimization) とも呼ばれる。

この最尤推定は幾何学的には、データ空間の  $N$  個のデータ点  $x_\alpha$  に式  $(\xi(x), \theta) = 0$  が定義する超曲面を当てはめると解釈できる (図2)。ただし、各点と超曲面の隔たりを通常のユークリッド距離で測るのではなく、共分散行列の逆行列で重みづけした式 (24) のマハラノビス距離で測っている。

コンピュータビジョンの分野ではこれは最も精度が高い推定法とみなされ、黄金律 (Gold Standard) とも呼ばれている [12]。しかし、これは複雑な非線形最適化

<sup>1</sup> それに対して例えばデータ  $x_\alpha$  が 2 次元位置  $x_\alpha = (x_\alpha, y_\alpha)$  のときに  $x$  座標  $x_\alpha$  にはノイズがないとして、 $(1/N) \sum_{\alpha=1}^N (y_\alpha - \bar{y}_\alpha)^2$  を最小にするなど、データ  $x_\alpha$  の一部の成分のみがノイズを含むとみなす場合が部分最小二乗法 (partial least square; PLS) と呼ばれる。

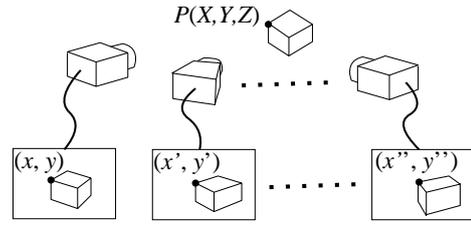


図3 バンドル調整による多画像からの 3 次元復元。

問題であり、直接的に解くのが困難である。その原因は、式 (25) がデータ  $\bar{x}_\alpha$  の陰関数であることにある。式 (25) を  $\bar{x}_\alpha$  について解いて  $\theta$  の式として表せれば、それを式 (24) に代入することによって制約なしの最適化問題となるが、多くの場合 (例えば第 2 節の【例 1】、【例 2】、【例 3】)、式 (25) を  $\bar{x}_\alpha$  について解くことができない。

### 3.3 バンドル調整

式 (24) を式 (25) のもとで最小化する一つの方法は、問題に即して  $x_\alpha$  ごとに何らかの補助変数 (auxiliary variable)  $X_\alpha$  を導入して、 $\bar{x}_\alpha$  を

$$\bar{x}_\alpha = \bar{x}_\alpha(X_\alpha, \theta) \quad (27)$$

の形に表すことである。そして、これを式 (24) に代入した

$$J(\{X_\alpha\}_{\alpha=1}^N, \theta) = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N (x_\alpha - \bar{x}_\alpha(X_\alpha, \theta), V_0[x_\alpha]^{-1}(x_\alpha - \bar{x}_\alpha(X_\alpha, \theta))) \quad (28)$$

を  $\{X_\alpha\}_{\alpha=1}^N, \theta$  の全パラメータ空間を探索して最小化する。

典型的な例は多画像からの 3 次元復元である (図3)。その場合は  $x_\alpha$  はシーン中の第  $\alpha$  点の各画像上の投影位置となり、 $x_\alpha = (x_\alpha, y_\alpha, x'_\alpha, y'_\alpha, \dots, x''_\alpha, y''_\alpha)$  の形をしている。未知数  $\theta$  はすべてのカメラの位置や向きなどの外部パラメータ (extrinsic parameters)、および焦点距離 (focal length) や光軸点 (principal point) などの内部パラメータ (intrinsic parameters) を指定する変数である。補助変数として各点の 3 次元位置  $X_\alpha = (X_\alpha, Y_\alpha, Z_\alpha)$  をとれば、各観測データ  $x_\alpha$  の真値  $\bar{x}_\alpha$  が  $X_\alpha, \theta$  の式  $\bar{x}_\alpha(X_\alpha, \theta)$  として表せる。これは 3 次元位置  $X_\alpha$  を  $\theta$  で指定されるカメラで撮影したときに観測されるはずの画像上の投影位置を表すものである。これと実際の各観測データ  $x_\alpha$  との食い違い、すなわち再投影誤差を  $\{X_\alpha\}_{\alpha=1}^N, \theta$  の全パラメータ空間を探索して最小化する。これはバンドル調整 (bundle adjustment) と呼ばれる [14, 38, 43, 55]、Web 上にツールも提供されている [38]。探索するパラメータ空間の次元は  $3N + (\theta$  の次元) で

あり，観測点数が多いと非常に高次元になる．バンドル調整という名称は写真測量学 (photogrammetry) から来たものであり，視線 (bundle) を画像に合うように調節するという意味である．

バンドル調整の考え方は 3 次元復元に限らない．例えば【例 1】の直線当てはめや【例 2】の楕円当てはめでは，各点の基準点から直線あるいは楕円に沿った弧長 (arc length) を補助変数とすれば，各点の真の位置を直線あるいは楕円のパラメータと弧長によって表すことができる．楕円の場合は弧長の代わりに  $x$  軸から測った偏角 (argument) を用いてもよい．そして，全パラメータ空間を探索する [51]．基礎行列の場合も同様な計算ができる [4]．

パラメータ空間の探索の代表的な方法はガウス・ニュートン (Gauss-Newton) 法と勾配法 (gradient method) を融合したレーベンバーグ・マーカート (Levenberg-Marquardt) 法 [21, 47] である．しかし，探索の初期値の与え方によっては局所解に陥る可能性があり，これを防ぐための大域的探索の手法もいろいろ研究されている [11, 52]．代表的な方法は，局所的に関数  $J$  の下限を与える関数を導入し，探索範囲を区分して，その下限が既に調べた値を上回るような領域を除外し，そうでない領域を再帰的に細分する分枝限定法 (branch and bound) である [11, 15]．これは下限の解析が非常に複雑で，多くの計算時間を要する．

### 3.4 攪乱母数とセミパラメトリックモデル

式 (28) のように補助変数  $X_\alpha$  を導入すると，補助変数  $X_\alpha$  は観測データ  $x_\alpha$  と同じ個数だけあるので，観測データが増えるほど未知数が増加する．2.4 節で述べたように統計的推論では観測データ数  $N$  に関して  $N \rightarrow \infty$  に対する未知数の推定精度の漸近解析が問題にされるが，観測データが増えると同時に未知数も増加するのは解析が変則的になる．このため，このような未知数  $X_\alpha$  は統計学では攪乱母数 (nuisance parameter) と呼ぶ．それに対して， $\theta$  を本当に知りたいパラメータとみなして構造母数 (structural parameter) あるいは注目母数 (parameter of interest) と呼ぶ．このとき，攪乱母数があれば，通常は成り立つ最尤推定の  $N \rightarrow \infty$  の漸近解析が成立しないことが Neyman ら [41] によって指摘され，ネイマン・スコット問題 (Neyman-Scott problem) と呼ばれている．2.5 節で指摘したように，コンピュータビジョンでは  $N \rightarrow \infty$  の漸近解析はあまり意味を持たないが，統計学の多くの分野では推定精度向上のために繰り返しサンプリングを行うので，これは重要な問題である．攪乱母数が存在するときの  $N \rightarrow \infty$  の精度を向上させる一つの方法は  $X_\alpha$  をある確率分布 ( $N$  が増えても変化しないと仮定する) から発生したサンプルとみなして，その分布自体を推定することである．これはセミパラメトリックモデル (semiparametric

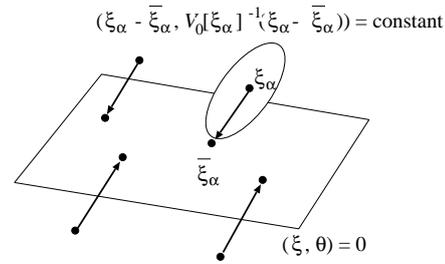


図 4  $\xi$  空間の点  $\xi_\alpha$  に超平面  $(\xi, \theta) = 0$  を当てはめる．

model) と呼ばれている [2, 3]．Okatani ら [44] は 3 次元形状復元に対してこれを試みている．

### 3.5 変換データ空間のノイズの正規近似

バンドル調整に伴う多次元パラメータ空間の探索を避ける方法は，変換データ空間のノイズを正規分布で近似することである．2.3 節で述べたように，元のデータ  $x_\alpha$  のノイズは正規分布であるとしても，非線形変換したデータ  $\xi_\alpha = \xi(x_\alpha)$  のノイズは厳密には正規分布ではない．しかし，ノイズが小さいと正規分布に似た分布であろうから，ほぼ正規分布とみなせるであろう．そうすると計算が容易になる．

具体的には変換データ  $\xi_\alpha$  には期待値  $0$ ，式 (15) から計算した共分散行列  $V[\xi_\alpha] = \sigma^2 V_0[\xi_\alpha]$  の正規分布に従うノイズが加わっているとみなして  $\xi$  空間で最尤推定を行う．すなわち， $\xi$  空間のマハラノビス距離

$$J = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N (\xi_\alpha - \bar{\xi}_\alpha, V_0[\xi_\alpha]^{-1} (\xi_\alpha - \bar{\xi}_\alpha)) \quad (29)$$

を制約条件

$$(\bar{\xi}_\alpha, \theta) = 0 \quad (30)$$

のもとで最小化する．これは幾何学的には  $\xi$  空間の  $N$  個のデータ点  $\xi_\alpha$  に式  $(\xi, \theta) = 0$  が定義する“超平面”を当てはめていると解釈できる (図 4)．ただし，各点と超平面の隔たりを  $\xi$  空間での共分散行列の逆行列で重みづけしたマハラノビス距離で測る．このときは，式 (30) が  $\bar{\xi}_\alpha$  に関して“線形”であるため，ラグランジュ乗数によって制約条件を消去して，式 (29) を次の形に書き直すことができる．

$$J = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N \frac{(\xi_\alpha, \theta)^2}{(\theta, V_0[\xi_\alpha] \theta)} \quad (31)$$

3.4 節の統計学の用語を用いれば，攪乱母数を消去したことに相当する．式 (31) は今日では楕円当てはめを研究した Sampson [50] にちなんで，サンブソン誤差 (Sampson error) と呼ばれている [12]．

### 3.6 サンプソン誤差最小化

式 (31) のサンブソン誤差を最小にする  $\theta$  を計算するいろいろな手法が提案されているが，代表的なものは

Chojnacki ら [7] による FNS 法 (Fundamental Numerical Scheme) である．その手順は次のようになる．

1.  $W_\alpha = 1, \alpha = 1, \dots, N, \theta_0 = \mathbf{0}$  と置く．
2. 次の行列  $M, L$  を計算する．

$$M = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N W_\alpha \xi_\alpha \xi_\alpha^\top, \quad L = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N W_\alpha^2 (\theta_0, \xi_\alpha)^2 V_0[\xi_\alpha] \quad (32)$$

### 3. 固有値問題

$$(M - L)\theta = \lambda\theta \quad (33)$$

を解いて，最小固有値  $\lambda$  に対する単位固有ベクトル  $\theta$  を計算する<sup>2</sup>．

4. 符号を除いて  $\theta \approx \theta_0$  なら  $\theta$  を返して終了する．そうでなければ次のように更新してステップ (2) に戻る．

$$W_\alpha \leftarrow \frac{1}{(\theta, V_0[\xi_\alpha]\theta)}, \quad \theta_0 \leftarrow \theta \quad (34)$$

背景は次の通りである．この反復が収束した時点で式 (32) の行列  $M, L$  は次のようになっている．

$$M = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N \frac{\xi_\alpha \xi_\alpha^\top}{(\theta, V_0[\xi_\alpha]\theta)}, \quad L = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N \frac{(\theta, \xi_\alpha)^2 V_0[\xi_\alpha]}{(\theta, V_0[\xi_\alpha]\theta)^2} \quad (35)$$

式 (31) の Sampson 誤差を  $\theta$  で微分すると，上式の行列  $M, L$  によって

$$\nabla_\theta J = 2(M - L)\theta \quad (36)$$

と書けることが確かめられる．そして上記の反復が収束するなら，式 (33) の固有値  $\lambda$  は 0 でなければならないことが示される．ゆえに上記の手順で得られる  $\theta$  は  $\nabla_\theta J = 0$  の解である．式 (31) を最小化する手法は FNS 法以外に Leedan ら [37] や Matei ら [39] の HEIV 法，Kanatani ら [33] の射影ガウス・ニュートン法があり，いずれも同じ解を計算する．なお， $W_\alpha = 1$  として最初に計算される解（“初期解”と呼ぶ）は明らかに式 (22) を最小にする 3.1 節の最小二乗法に一致している．上の手順は単一の拘束  $(\xi_\alpha, \theta) = 0$  の場合であるが，拘束が複数ある場合にも自然に拡張される [42, 53]．

### 3.7 厳密な最尤推定解の計算

式 (31) の Sampson 誤差は，3.5 節で述べたように，変換したデータ  $\xi_\alpha$  のノイズを正規分布で近似するものであるから，厳密には式 (24) のマハラノビス距離に一

<sup>2</sup>絶対値最小の固有値に対する固有ベクトルを計算してもよすが，単に最小の固有値に対する固有ベクトルを計算するほうが収束が速いことが確かめられている [33]．

致しない．しかし，Sampson 誤差を最小にする解  $\theta$  を利用して，式 (31) を逐次的に補正し，式 (24) のマハラノビス距離に一致させることができる．これによって次のようにして厳密な最尤推定解を計算することができる [34, 36]．

1.  $J_0^* = \infty$  (十分大きい数)， $\hat{x}_\alpha = x_\alpha, \tilde{x}_\alpha = \mathbf{0}, \alpha = 1, \dots, N$  と置く．
2. 正規化共分散行列  $V_0[\hat{\xi}_\alpha]$  を，その計算過程の  $x_\alpha$  を  $\hat{x}_\alpha$  に置き換えて計算する．
3. 次の  $\xi_\alpha^*$  を計算する．

$$\xi_\alpha^* = \xi_\alpha + \left. \frac{\partial \xi}{\partial x} \right|_{x=x_\alpha} \tilde{x}_\alpha \quad (37)$$

4. 次の修正 Sampson 誤差 (modified Sampson error) を最小にする  $\theta$  を計算する．

$$J^* = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N \frac{(\xi_\alpha^*, \theta)^2}{(\theta, V_0[\hat{\xi}_\alpha]\theta)} \quad (38)$$

5.  $\tilde{x}_\alpha, \hat{x}_\alpha$  を次のように更新する．

$$\tilde{x}_\alpha \leftarrow \frac{(\xi_\alpha^*, \theta) V_0[x_\alpha]}{(\theta, V_0[\hat{\xi}_\alpha]\theta)} \left. \frac{\partial \xi}{\partial x} \right|_{x=x_\alpha} \theta, \quad \hat{x}_\alpha \leftarrow x_\alpha - \tilde{x}_\alpha \quad (39)$$

6.  $J^*$  の値を次のように計算する．

$$J^* = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N (\tilde{x}_\alpha, V_0[x_\alpha]\tilde{x}_\alpha) \quad (40)$$

そして  $J^* \approx J_0$  なら  $\theta$  を返して終了する．そうでなければ  $J_0 \leftarrow J^*$  と更新してステップ (2) に戻る．

式 (38) の修正 Sampson 誤差は式 (31) の Sampson 誤差と同じ形をしているから，FNS 法によって最小化することができる．HEIV 法や射影ガウス・ニュートン法を用いてもよい．しかし，実験によると，ほとんどの問題で Sampson 誤差最小化を 4, 5 回繰り返せば収束し，しかも，それによって  $\theta$  の冒頭の有効数字 4, 5 桁は変わらず，末尾の桁が多少変化するだけである [32, 40]．このことから，実際問題では Sampson 誤差最小化は実質的に最尤推定解を計算しているとみなすことができる．

### 3.8 最尤推定解の超精度補正

最尤推定解，あるいは Sampson 誤差最小化の解は非常に精度が高いことが知られているが，詳細な誤差解析によると  $O(\sigma^2)$  の偏差があることが分り，しかもその理論評価ができる [23]．ということは，評価した偏差を差し引けば，最尤推定解の精度をさらに向上させることができる．これは超精度補正 (hyperaccurate correction) と呼ばれ，次のようになる [22, 23, 26]．

1. 最尤推定解  $\theta$  とそれに対する式 (35) の行列  $M$  から二乗ノイズレベル  $\sigma^2$  を次のように推定する．た

だし  $n$  はベクトル  $\theta$  の次元である .

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{(\theta, M\theta)}{1 - (n-1)/N} \quad (41)$$

2. 次のように補正項を計算する .

$$\begin{aligned} \Delta_c \theta = & -\frac{\sigma^2}{N} M_{n-1}^- \sum_{\alpha=1}^N W_\alpha (e_\alpha, \theta) \xi_\alpha \\ & + \frac{\hat{\sigma}^2}{N^2} M_{n-1}^- \sum_{\alpha=1}^N W_\alpha^2 (\xi_\alpha, M_{n-1}^- V_0 [\xi_\alpha] \theta) \xi_\alpha \end{aligned} \quad (42)$$

ただし,  $e_\alpha$  は問題ごとに個別に指定されるベクトルであり,  $M_{n-1}^-$  は  $M$  のランク  $n-1$  の (スペクトル分解において最小固有値を 0 に置き換えた) 一般逆行列である .

3. 最尤推定解  $\theta$  を次のように補正する .

$$\theta \leftarrow \mathcal{N}[\theta - \Delta_c \theta] \quad (43)$$

と補正する . ただし,  $\mathcal{N}[\cdot]$  は単位ベクトルへの正規化作用素である ( $\mathcal{N}[a] \equiv a/\|a\|$ ) .

なお, 文献 [22, 23] では式 (42) の第 1 項が省略されている . ベクトル  $e_\alpha$  は多くの問題では 0 になり, 例えば【例 1】の直線当てはめや【例 3】の基礎行列の計算のほか, 複数の画像を用いる推定問題では通常 0 になる . 0 でない代表例は【例 2】の楕円当てはめであり,  $e_\alpha = (1, 0, 1, 0, 0, 0)^\top$  となるが [26], その影響は無視できる程度に非常に小さい .

上記の超精度補正は式 (3) の形に基づく幾何学的推定に解析であるが, 統計的推定においても 3.4 節で述べた攪乱母数のある問題に対する通常の最尤推定は偏差を生じることが知られ, その解析や偏差の除去が研究されている . Okatani ら [45, 46] はそれに基づいて, 補助変数を導入した式 (27) の形で, 拘束が定義する超曲面の曲率と偏差の関係の解析による偏差の除去や射影スコア (projected score) に基づく偏差の除去を試みている .

コンピュータビジョンの分野では多くの研究者が, 最尤推定 (その特別の場合が再投影誤差最小) が最も高精度であると考えていたので, このように最尤推定解の精度がさらに向上するということは注目すべき事実である . しかし, 上記の超精度補正を施すためには, まず最尤推定解を FNS 法などによって計算しなければならない . このことから新しい問題が提起される . 例えば FNS 法を修正するなどして, 直接に超精度補正された解を計算することはできないであろうか . 本稿では, これが最小化に基づかない方法で実現できることを示す .

## 4 最小化に基づかない方法

### 4.1 重み反復法

古くから用いられた最小化に基づかない方法に次の重み反復法 (iterative reweight) がある .

1.  $W_\alpha = 1, \alpha = 1, \dots, N, \theta_0 = \mathbf{0}$  と置く .
2. 次の行列  $M$  を計算する .

$$M = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N W_\alpha \xi_\alpha \xi_\alpha^\top \quad (44)$$

3. 固有値問題

$$M\theta = \lambda\theta \quad (45)$$

を解いて, 最小固有値  $\lambda$  に対する単位固有ベクトル  $\theta$  を計算する .

4. 符号を除いて  $\theta \approx \theta_0$  なら  $\theta$  を返して終了する . そうでなければ次のように更新してステップ (2) に戻る .

$$W_\alpha \leftarrow \frac{1}{(\theta, V_0 [\xi_\alpha] \theta)}, \quad \theta_0 \leftarrow \theta \quad (46)$$

この方法の動機は次式を最小にする重み付き最小二乗法 (weighted least squares) である .

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N W_\alpha (\xi_\alpha, \theta)^2 &= \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N W_\alpha \theta^\top \xi_\alpha \xi_\alpha^\top \theta \\ &= (\theta, \underbrace{\frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N W_\alpha \xi_\alpha \xi_\alpha^\top}_{\equiv M} \theta) = (\theta, M\theta) \end{aligned} \quad (47)$$

よく知られているように, 上式を最小にする  $\theta$  は行列  $M$  の最小固有値に対する単位固有ベクトルである . 統計学でよく知られているように, 各項の重み  $W_\alpha$  はその項の分散の逆数に比例するようにとるのが最適である [52] .  $(\bar{\xi}_\alpha, \theta) = 0$  であるから  $(\xi_\alpha, \theta) = (\Delta \xi_\alpha, \theta) + \dots$  であり, 分散の主要項は

$$\begin{aligned} E[(\Delta \xi_\alpha, \theta)^2] &= E[\theta^\top \Delta \xi_\alpha \Delta \xi_\alpha^\top \theta] \\ &= (\theta, E[\Delta \xi_\alpha \Delta \xi_\alpha^\top] \theta) = \sigma^2 (\theta, V_0 [\xi_\alpha] \theta) \end{aligned} \quad (48)$$

である . ゆえに

$$W_\alpha = \frac{1}{(\theta, V_0 [\xi_\alpha] \theta)} \quad (49)$$

ととるのが最適であるが,  $\theta$  は未知である . そこで反復を行い, 前回の反復で求めた  $\theta$  から重み  $W_\alpha$  を定め, これを反復する .  $W_\alpha = 1$  とし最初計算される初期解は明らかに式 (22) を最小にする 3.1 節の最小二乗法に一致している .

式 (49) を式 (47) に代入すると式 (31) のサンブソン誤差に一致する . したがって, 式 (46) のように重みを

更新すると、サンプソン誤差が最小化されるように思える。しかし、上記の反復の各ステップでは、式 (31) の分母を前ステップで計算した値から決まる定数とみなして、分子を最小にする  $\theta$  を計算している。その結果、反復が収束した時点では任意の  $\theta'$  に対して

$$\frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N \frac{(\xi_{\alpha}, \theta)^2}{(\theta, V_0[\xi_{\alpha}]\theta)} \leq \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N \frac{(\xi_{\alpha}, \theta')^2}{(\theta', V_0[\xi_{\alpha}]\theta')} \quad (50)$$

となっているが、次式が成り立つとは限らない。

$$\frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N \frac{(\xi_{\alpha}, \theta)^2}{(\theta, V_0[\xi_{\alpha}]\theta)} \leq \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N \frac{(\xi_{\alpha}, \theta')^2}{(\theta', V_0[\xi_{\alpha}]\theta')} \quad (51)$$

すなわち、重み反復法はサンプソン誤差を最小化するものではなく、何かの評価関数を最小にするものではない。この点がこれまで多くの人によって誤解されてきた。

詳しい解析 [23] によると、重み反復法の解  $\theta$  の共分散行列  $V[\theta]$  は  $O(\sigma^4)$  を除いて 2.6 節の KCR 下界に一致することが示される。したがって解の分散をこれ以上改善することはできない。しかし、実験によると [19]、この方法は最小二乗法と同様に、大きな偏差があるために精度が低い。これを改善する方法として次の二つが考えられる。

- 式 (31) のサンプソン誤差を厳密に最小化する。
- 重み反復法の偏差を除去する。

前者が Chojnacki ら [7] の FNS 法や Leedan ら [37] や Matei ら [39] の HEIV 法である。後者が筆者が提案したくりこみ法である。

#### 4.2 くりこみ法

筆者のくりこみ法 (renormalization) は次のように記述できる [16, 17, 19]。

1.  $W_{\alpha} = 1, \alpha = 1, \dots, N, \theta_0 = \mathbf{0}$  と置く。
2. 次の行列  $M, N$  を計算する。

$$M = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N W_{\alpha} \xi_{\alpha} \xi_{\alpha}^{\top}, \quad N = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N W_{\alpha} V_0[\xi_{\alpha}] \quad (52)$$

3. 一般固有値問題

$$M\theta = \lambda N\theta \quad (53)$$

を解いて、絶対値最小の一般固有値  $\lambda$  に対する単位一般固有ベクトル  $\theta$  を計算する。

4. 符号を除いて  $\theta \approx \theta_0$  なら  $\theta$  を返して終了する。そうでなければ次のように更新してステップ (2) に戻る。

$$W_{\alpha} \leftarrow \frac{1}{(\theta, V_0[\xi_{\alpha}]\theta)}, \quad \theta_0 \leftarrow \theta \quad (54)$$

文献 [16, 17, 19] ではステップ (3) を固有値問題に置き換えて解く方法が示されているが、解は同一である。くりこみ法の背景は次の通りである。式 (52) の行列  $M$  を真値  $\bar{\xi}_{\alpha}$  によって定義したものを  $\bar{M}$  とすると、 $(\bar{\xi}_{\alpha}, \theta) = 0$  であるから  $\bar{M}\theta = \mathbf{0}$  である。したがって、 $\bar{M}$  が分かれば、その固有値 0 の単位固有ベクトル  $\theta$  が厳密解である。しかし  $\bar{M}$  はデータの真値によって定義されているので未知である。そこで  $\bar{M}$  を推定する。第 1 近似において  $E[\Delta\xi_{\alpha}] = 0$  であるから  $M$  の期待値は次のようになる。

$$\begin{aligned} E[M] &= E\left[\frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N W_{\alpha} (\bar{\xi}_{\alpha} + \Delta\xi_{\alpha})(\bar{\xi}_{\alpha} + \Delta\xi_{\alpha})^{\top}\right] \\ &= \bar{M} + \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N W_{\alpha} E[\Delta\xi_{\alpha} \Delta\xi_{\alpha}^{\top}] \\ &= \bar{M} + \frac{\sigma^2}{N} \sum_{\alpha=1}^N W_{\alpha} V_0[\xi_{\alpha}] = \bar{M} + \sigma^2 N \quad (55) \end{aligned}$$

ゆえに  $\bar{M} = E[M] - \sigma^2 N \approx M - \sigma^2 N$  である。したがって  $\bar{M}\theta = \mathbf{0}$  の代わりに  $(M - \sigma^2 N)\theta = \mathbf{0}$  すなわち  $M\theta = \sigma^2 N\theta$  を解く。 $\sigma^2$  は小さいと仮定して、絶対値最小の一般固有値とみなす。そして、重み反復法と同様に  $W_{\alpha}$  を式 (49) に近付くように反復更新する。これは何かの評価関数を最小にするものではない。上の手順は単一の拘束  $(\bar{\xi}_{\alpha}, \theta) = 0$  の場合であるが、拘束が複数ある場合にも自然に拡張される [19, 29, 53]。

くりこみ法は当時知られていたどの方法よりも著しく高精度であったため、その発表時に世界中で注目されたが、幾何学的推定は何らかの評価関数を最小にすべきであるという先入観のためか、これが何を最小化するのかという疑問が繰り返して提出され、手法の正当性を疑う者もいた。これに対して、サンプソン誤差を最小化する FNS 法を提案した Chojnacki ら [7] はくりこみ法がサンプソン誤差を近似的に最小化する手法であると解釈すれば正当化されると主張した [6]。しかし、これまで強調したように、幾何学的推定は評価関数の最小化に基づく必要はない。

ところで、 $W_{\alpha} = 1$  とする初期解は

$$\left(\frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N \xi_{\alpha} \xi_{\alpha}^{\top}\right)\theta = \lambda \left(\frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N V_0[\xi_{\alpha}]\right)\theta \quad (56)$$

を解くものであり、これは  $\sum_{\alpha=1}^N (\xi_{\alpha}, \theta)^2$  を  $(\theta, \sum_{\alpha=1}^N V_0[\xi_{\alpha}]\theta) = 1$  のもとに最小化する Taubin 法 [54] にほかならない。Taubin 法は非常に精度が高いことが知られている。くりこみ法は Taubin 法から出発して重み  $W_{\alpha}$  を更新する反復とみなせる。

### 4.3 共分散と偏差の解析

実験によるとくりこみ法は Taubin 法よりも精度が高く、各手法の誤差はおおよそ次の順である。

最小二乗法 > 重み反復法 > Taubin 法  
> くりこみ法 > 最尤推定

詳しい解析 [23] によると、くりこみ法の解  $\theta$  の共分散行列  $V[\theta]$  は  $O(\sigma^4)$  を除いて KCR 下界に一致する。したがって、解の分散をこれ以上改良できない。一方、偏差は非常に小さいが 0 ではない。くりこみ法の手順において、式 (53) の行列  $N$  を単位行列  $I$  に置き換えると式 (45) の重み反復法の手順となる。すなわち式 (52) の行列  $N$  が偏差の減少に寄与している。これに着目すると、偏差が最小になるように  $N$  を選べばさらに精度が改善される可能性がある。そのような行列  $N$  は式 (52) より

$$N = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N W_{\alpha} V_0[\xi_{\alpha}] + \dots \quad (57)$$

となることが予想される。この  $\dots$  の部分を定めるために文献 [23] の方法論を用いて誤差解析を行う。この考え方は代数的解法の精度を高める超精度最小二乗法 (hyperaccurate least squares, HyperLS) [30, 31, 48] を一般化したものであり、Al-Sharadqah ら [1] によって楕円当てはめに適用され、金谷ら [27, 28] によって超精度くりこみ法 (hyper-renormalization) として一般化された。これは次のように行われる。

データ  $x_{\alpha}$  を真値  $\bar{x}_{\alpha}$  とノイズ項  $\Delta x_{\alpha}$  の和として  $x_{\alpha} = \bar{x}_{\alpha} + \Delta x_{\alpha}$  と表し、変換  $\xi_{\alpha} = \xi(x_{\alpha})$  を展開したものを

$$\bar{\xi}_{\alpha} + \Delta_1 \xi_{\alpha} + \Delta_2 \xi_{\alpha} + \dots \quad (58)$$

と書く。ただし、バーで誤差のない値、 $\Delta_k$  は  $O(\sigma^k)$  の誤差項を表す。そして式 (53) の  $M, \theta, \lambda, N$  も同様に展開して次のように表す。

$$\begin{aligned} & (\bar{M} + \Delta_1 M + \Delta_2 M + \dots)(\bar{\theta} + \Delta_1 \theta + \Delta_2 \theta + \dots) \\ &= (\bar{\lambda} + \Delta_1 \lambda + \Delta_2 \lambda + \dots)(\bar{N} + \Delta_1 N + \Delta_2 N + \dots) \\ & (\bar{\theta} + \Delta_1 \theta + \Delta_2 \theta + \dots) \end{aligned} \quad (59)$$

両辺を展開して同じオーダーの誤差項を等値することにより、次の関係を得る [27]。

$$\Delta_1 \theta = -\bar{M}^{-1} \Delta_1 M \bar{\theta}, \quad (60)$$

$$\Delta_2^{\perp} \theta = \bar{M}^{-1} \left( \frac{(\bar{\theta}, T \bar{\theta})}{(\bar{\theta}, \bar{N} \bar{\theta})} \bar{N} \bar{\theta} - T \bar{\theta} \right) \quad (61)$$

ただし  $\bar{M}^{-1}$  は  $\bar{M}$  (解  $\theta$  を固有値 0 の固有ベクトルにもつことから、 $\theta$  の次元を  $n$  とするとランクは  $n-1$ ) の一般逆行列である。また  $\Delta_2^{\perp} \theta$  は 2 次の誤差項の  $\theta$  に

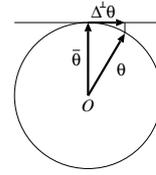


図 5 計算した  $\theta$  の真値  $\bar{\theta}$  からの誤差を  $\bar{\theta}$  に直交する成分  $\Delta^{\perp} \theta$  で評価する。

直交する成分である (1 次の誤差項  $\Delta_1 \theta$  は初めから  $\theta$  に直交している)。これを考えるのは、 $\theta$  は単位ベクトルに正規化されていて伸縮しないので、誤差を  $\theta$  に直交する成分で評価すればよいからである (図 5)。式 (61) 中の  $T$  は次のように定義した行列である。

$$T \equiv \Delta_2 M - \Delta_1 M \bar{M}^{-1} \Delta_1 M \quad (62)$$

まず式 (60) より、 $\theta$  の共分散行列の主要項は次のようになることが確かめられる [23, 56]。

$$V[\theta] \equiv E[\Delta_1 \theta \Delta_1 \theta^{\top}] = \frac{\sigma^2}{N} \bar{M}^{-1} \quad (63)$$

これから次のことが分かる。

- 共分散行列  $V[\theta]$  は  $O(\sigma^2)$  である。
- 右辺は式 (21) の KCR 下界に一致し、理論限界に到達している。
- 式 (63) は行列  $N$  を含んでいない。

このため  $N$  を調節して式 (63) の値を変えることができない。しかし、誤差の RMS (平方平均二乗) 誤差は共分散項と偏差項との和であり、偏差項も  $O(\sigma^2)$  であるから (1 次の偏差項は  $E[\Delta_1 \theta] = 0$  である)、 $N$  を調節して 2 次の偏差項の値を変えることはできる。式 (61) より 2 次の偏差項は次のようになる。

$$E[\Delta_2^{\perp} \theta] = \bar{M}^{-1} \left( \frac{(\bar{\theta}, E[T \bar{\theta}])}{(\bar{\theta}, \bar{N} \bar{\theta})} \bar{N} \bar{\theta} - E[T \bar{\theta}] \right) \quad (64)$$

### 4.4 超精度くりこみ法

式 (64) から次のことが分かる [27]。それは、もしある定数  $c$  に対して

$$E[T \bar{\theta}] = c \bar{N} \bar{\theta} \quad (65)$$

となるように行列  $N$  を定めることができれば

$$E[\Delta_2^{\perp} \theta] = \bar{M}^{-1} \left( \frac{(\bar{\theta}, c \bar{N} \bar{\theta})}{(\bar{\theta}, \bar{N} \bar{\theta})} \bar{N} \bar{\theta} - c \bar{N} \bar{\theta} \right) = 0 \quad (66)$$

となることである。すなわち、2 次の偏差項が完全に 0 になる。そのためには式 (62) から期待値  $E[T \bar{\theta}]$  を評価

する必要がある．詳細な解析 [27] によると，

$$\begin{aligned} \bar{N} = & \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N \bar{W}_\alpha \left( V_0[\xi_\alpha] + 2S[\xi_\alpha e_\alpha^\top] \right) \\ & - \frac{1}{N^2} \sum_{\alpha=1}^N \bar{W}_\alpha^2 \left( (\bar{\xi}_\alpha, \bar{M}^{-1} \bar{\xi}_\alpha) V_0[\xi_\alpha] \right. \\ & \left. + 2S[V_0[\xi_\alpha] \bar{M}^{-1} \bar{\xi}_\alpha \xi_\alpha^\top] \right) \end{aligned} \quad (67)$$

であれば  $E[T\bar{\theta}] = \sigma^2 \bar{N}\bar{\theta}$  と書けることが分かる．ただし， $e_\alpha$  問題ごとに個別に指定されるベクトルであり (式 (42) に現れるものと同じ)， $S[\cdot]$  は対称化作用素である ( $S[A] = (A + A^\top)/2$ )．式 (67) は真値を含んでいるので，計算値で代用する．それによって  $O(\sigma)$  の誤差が生じるが，ノイズの奇数次の項の期待値は 0 になるので式 (66) は  $O(\sigma^4)$  である．

以上より，次の超精度くりこみ法 (hyper-renormalization) の手順を得る．

1.  $W_\alpha = 1, \alpha = 1, \dots, N, \theta_0 = \mathbf{0}$  と置く．
2. 次の行列  $M, N$  を計算する．

$$M = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N W_\alpha \xi_\alpha \xi_\alpha^\top \quad (68)$$

$$\begin{aligned} N = & \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N W_\alpha \left( V_0[\xi_\alpha] + 2S[\xi_\alpha e_\alpha^\top] \right) \\ & - \frac{1}{N^2} \sum_{\alpha=1}^N W_\alpha^2 \left( (\xi_\alpha, M_{n-1}^{-1} \xi_\alpha) V_0[\xi_\alpha] \right. \\ & \left. + 2S[V_0[\xi_\alpha] M_{n-1}^{-1} \xi_\alpha \xi_\alpha^\top] \right) \end{aligned} \quad (69)$$

ただし， $M_{n-1}^{-1}$  は行列  $M$  のランク  $n-1$  の (すなわち最小固有値を 0 に置き換えた) 一般逆行列である ( $n$  は  $\theta$  の次元)．

3. 一般固有値問題

$$M\theta = \lambda N\theta \quad (70)$$

を解いて，絶対値最小の一般固有値  $\lambda$  に対する単位一般固有ベクトル  $\theta$  を計算する．

4. 符号を除いて  $\theta \approx \theta_0$  なら  $\theta$  を返して終了する．そうでなければ次のように更新してステップ (2) に戻る．

$$W_\alpha \leftarrow \frac{1}{(\theta, V_0[\xi_\alpha] \theta)}, \quad \theta_0 \leftarrow \theta \quad (71)$$

これから， $W_\alpha = 1$  とする初期解は，反復なしで計算できる最も高精度な解法として知られる超精度最小二乗法 (hyperaccurate least squares, HyperLS) [30, 31, 48] に一致していることが分かる<sup>3</sup>．したがって，超精度く

<sup>3</sup>式 (69) の  $W_\alpha$  を 1 としたものは文献 [30, 48] の式より項数が少ないが，解は同じである．

表 1 最小化によらない方法のまとめ．

初期解	重み更新	最終解
最小二乗法	→	重み反復法
Taubin 法	→	くりこみ法
超精度最小二乗法	→	超精度くりこみ法

りこみ法は超精度最小二乗法から出発して重み  $W_\alpha$  を更新する反復とみなせる．そして，反復の途中で得られる  $\theta$  はすべて  $O(\sigma^4)$  を除いて偏差が存在しないことが示される．上の手順は単一の拘束  $(\bar{\xi}_\alpha, \theta) = 0$  の場合であるが，拘束が複数ある場合にも自然に拡張される [28]．

#### 4.5 最小化に基づかない方法のまとめ

以上に示した重み反復法，くりこみ法，超精度くりこみ法はどれも何らかの評価関数を最小にするものではなく，本来の動機はどうあれ結局は次の式を満たす解を求めるものである．

$$M\theta = \lambda N\theta \quad (72)$$

反復を用いるのは単に解法の便宜であり，本質ではない．左辺の  $M$  は解  $\theta$  の共分散行列を定め，式 (44)，(52)，(68) のように選ぶと  $O(\sigma^4)$  の誤差項を除いて KCR 下界が満たされる．それに対して右辺の  $N$  は解  $\theta$  の偏差をコントロールするものであり，重み反復法，くりこみ法，超精度くりこみ法ではそれぞれ次のようになる．

$$N = \begin{cases} I & \text{重み反復法} \\ \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N W_\alpha V_0[\xi_\alpha] & \text{くりこみ法} \\ \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N W_\alpha \left( V_0[\xi_\alpha] + 2S[\xi_\alpha e_\alpha^\top] \right) & \\ -\frac{1}{N^2} \sum_{\alpha=1}^N W_\alpha^2 (\dots) & \text{超精度} \\ & \text{くりこみ法} \end{cases} \quad (73)$$

そして， $N$  を最後 (式 (69)) のように選べば  $O(\sigma^4)$  を除いて偏差項が 0 となる．この意味で式 (72) が統計的推定における推定方程式に相当しているとみなせる．そして，これを  $W_\alpha = 1$  から始めて逐次的に重み  $W_\alpha$  を更新しながら一般固有値問題の反復として解けば，それぞれ最小二乗法，Taubin 法 [54]，超精度最小二乗法 [30, 31, 48] を反復的に改良していると解釈できる (表 1)．

くりこみ法の  $N$  は半正値対称行列であり，0 を固有値を持つことが示される．一方，超精度くりこみ法の  $N$  は対称行列であるが正値でも負値でもなく，正と負の固有値を持つ．しかし，式 (72) の一般固有値問題を解く通常のライブラリツールでは  $N$  が正値対称行列と

仮定されている．くりこみ法が文献 [16, 17, 19] で本稿] に示した形ではなく，通常の固有値問題の反復の形に変形されているのは，この問題を避けるためであった．しかし，式 (72) は次のように書き直せる．

$$N\theta = \frac{1}{\lambda} M\theta \quad (74)$$

行列  $M$  はノイズのあるデータに対しては正値対称行列であるから，これは通常のライブラリツールによって解くことができる．もし  $M$  が固有値 0 をもてば，それはデータにノイズがないことを意味するから，その固有値 0 に対する単位固有ベクトルが  $\theta$  の真値である．

文献 [23] の誤差解析によると，最尤推定は  $O(\sigma^2)$  の偏差をもつ．それに対して超精度くりこみ法の偏差は少なくとも  $O(\sigma^4)$  である．一方，共分散行列は最尤推定も超精度くりこみ法も  $O(\sigma^4)$  を除いて KCR 下界に一致している．このことから超精度くりこみ法は最尤推定よりも高精度であり，実験によると各手法の誤差はおおよそ次の順である．

最小二乗法 > 重み反復法 > Taubin 法

> くりこみ法 > 最尤推定 > 超精度くりこみ法

最尤推定を計算してから補正するのではなく，直接的に最尤推定（あるいは再投影誤差最小化）よりも精度が高い計算方法が存在するという事実は注目すべきことである．

## 5 実験例

### 5.1 精度の評価

計算した  $\theta$  と真の値  $\bar{\theta}$  はともに単位ベクトルであることから，その差  $\Delta\theta$  を  $\bar{\theta}$  に垂直な成分

$$\Delta^\perp\theta = P_{\bar{\theta}}\theta, \quad P_{\bar{\theta}} \equiv I - \bar{\theta}\bar{\theta}^\top \quad (75)$$

で測る (図 5)． $P_{\bar{\theta}}$  は  $\bar{\theta}$  に垂直な空間への射影行列である．そして，各  $\sigma$  に対して  $M$  回独立に試行し，次の偏差  $B$  と RMS (平方平均二乗) 誤差  $D$  を評価する．

$$B = \left\| \frac{1}{M} \sum_{a=1}^M \Delta^\perp\theta^{(a)} \right\|, \quad D = \sqrt{\frac{1}{M} \sum_{a=1}^M \|\Delta^\perp\theta^{(a)}\|^2} \quad (76)$$

ただし  $\theta^{(a)}$  は  $a$  回目の試行の解である．式 (21) の KCR 下界から，RMS 誤差  $D$  の下界が次のように評価される ( $\text{tr}$  は行列のトレース)．

$$D \geq \frac{\sigma}{\sqrt{N}} \sqrt{\text{tr} \left( \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N \frac{\bar{\xi}_\alpha \bar{\xi}_\alpha^\top}{(\bar{\theta}, V_0[\xi_\alpha] \bar{\theta})} \right)} \quad (77)$$

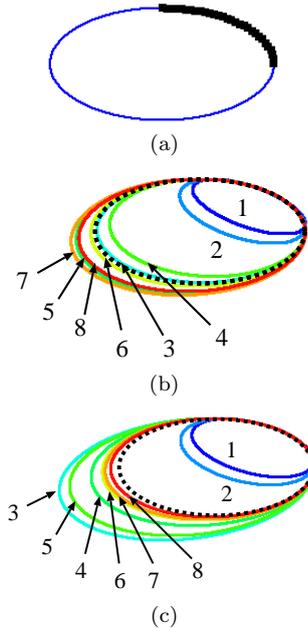


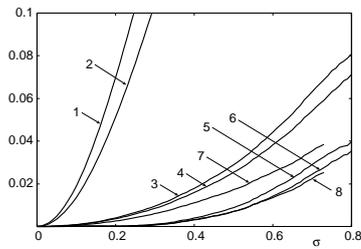
図 6 (a) 楕円上の 30 点．(b), (c)  $\sigma = 0.5$  の場合の当てはめの例．1. 最小二乗法, 2. 重み反復法, 3. Taubin 法, 4. くりこみ法, 5. 超精度最小二乗法, 6. 超精度くりこみ法, 7. 最尤推定, 8. 最尤推定の超精度補正．破線は真の形状．

### 5.2 楕円当てはめ

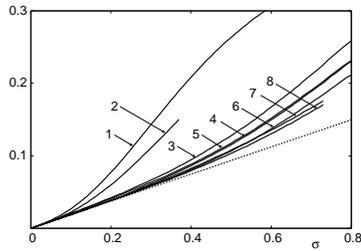
図 6(a) に示す楕円の第 1 象限に等間隔に 30 点をとる．楕円は長軸半径，短軸半径がそれぞれ 100 画素，50 画素と想定している．各点の  $x, y$  座標に平均 0，標準偏差  $\sigma$  画素の正規分布に従う乱数ノイズを独立に加え，これに楕円を次の方法で当てはめる：1) 最小二乗法，2) 重み反復法，3) Taubin 法，4) くりこみ法，5) 超精度最小二乗法，6) 超精度くりこみ法，7) 最尤推定，8) 最尤推定の超精度補正．図 6(b), (c) は  $\sigma = 0.5$  の場合の例である．点線は真の楕円である．重み反復法，くりこみ法，超精度くりこみ法はいずれも 4 回の反復で収束したのに対して，最尤推定を計算する FNS 法は収束に図 6(b) では 9 回，図 6(c) では 8 回の反復を要した．

これを見ると，最小二乗法と重み反復法は偏差が非常に大きく，小さい楕円が当てはまっていることが分かる．図 6(b) では超精度くりこみ法が，図 6(c) では最尤推定の超精度補正が真の楕円に近い楕円を当てはめている．しかし，結果はデータのノイズに依存するので，手法の比較には統計的な方法が必要である．図 7(a), (b) は横軸の各  $\sigma$  に対して 10000 回独立に試行し，式 (76) の偏差  $B$  と RMS 誤差  $D$  をプロットしたものである．図 7(b) 中の点線は式 (77) の KCR 下界である．

図 7 で重み反復法，最尤推定，最尤推定の超精度補正のプロットが途中で途切れているのは，それより大きいノイズでは反復が収束しなかったためである．ただし，収束判定は符号をそろえた解  $\theta$  と前回の解  $\theta_0$  が  $\|\theta - \theta_0\| < 10^{-6}$  であるとし，100 回反復して収束しないとき「収束しない」と判定した．そして 10000 回

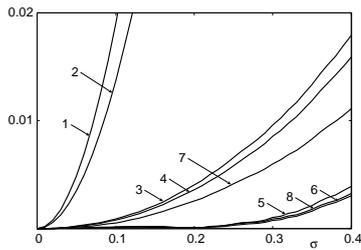


(a)

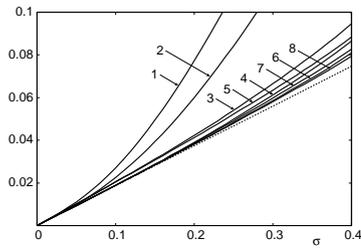


(b)

図 7 図 6(a) のデータに対する当てはめの偏差 (a) と RMS 誤差 (b). 横軸は各点に加えたノイズの標準偏差  $\sigma$ . 1) 最小二乗法, 2) 重み反復法, 3) Taubin 法, 4) くりこみ法, 5) 超精度最小二乗法, 6) 超精度くりこみ法, 7) 最尤推定, 8) 最尤推定の超精度補正. (b) の点線は KCR 下界.



(a)



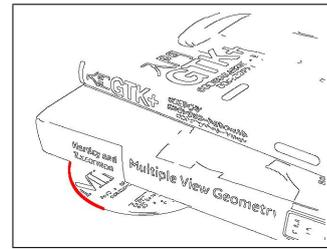
(b)

図 8 (a) 図 7(a) の拡大. (b) 図 7(b) の拡大.

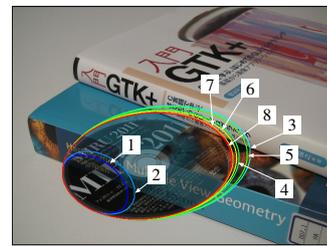
の試行で 1 度でも収束しないとき、実験を打ち切った。図 8 は図 7 の  $\sigma$  が小さい部分の拡大である。

図 7(a) から分かるように、最小二乗法と重み反復法は偏差が非常に大きい。それに比較すると Taubin 法とくりこみ法は偏差が少ない。超精度最小二乗法と超精度くりこみ法はさらに偏差が少なく、最尤推定よりも少ない。重み反復法、くりこみ法、超精度くりこみ法の解の共分散行列の主要項は等しく、KCR の下界に一致するので、RMS 誤差は偏差の与える影響が大きく、図 7(b) に示されるように偏差の減少がそのまま RMS 誤差の減少に結びついている。

超精度くりこみ法は高次の誤差項を除いて偏差が存



(a)



(b)

図 9 (a) 円形物体を含む画像から検出したエッジ画像と、楕円を当てはめたエッジ点 (160 点). (b) 当てはめた楕円を原画像上に重ねて表示したもの. 隠れた部分を半透明で合成している. 1) 最小二乗法, 2) 重み反復法, 3) Taubin 法, 4) くりこみ法, 5) 超精度最小二乗法, 6) 超精度くりこみ法, 7) 最尤推定, 8) 最尤推定の超精度補正.

在しないため、図 7(b) から分かるように従来最も精度が高いとみなされた最尤推定にほぼ等しい精度になっている。さらに詳細に見ると図 8(b) に示されるように  $\sigma$  が小さい範囲では最尤推定を上回る精度である。一方、偏差項を事後的に引き去る最尤推定の超精度補正は図 7(b)、図 8(b) に示すように、わずかであるが他のどの手法よりも RMS 誤差が小さい。図 7(a) から分かるように  $\sigma$  が大きいとき他のどの手法よりも偏差が小さいが、図 8(a) を見ると、 $\sigma$  が小さいときは超精度くりこみ法のほうが偏差が少ない。

以上より、最も高精度な楕円当てはめは最尤推定の超精度補正であり、超精度くりこみ法がほぼそれに匹敵する高精度であることが分かった。ただし、超精度補正のためにはまず最尤推定解を求める必要があるが、それを計算する FNS 法が図 7 から分かるようにノイズが大きいと必ずしも収束しないという問題がある。それに対して超精度くりこみ法はノイズにロバストであり、数回の反復で収束する。これは初期解が超精度最小二乗法であり、図 7、図 8 から分かるように最初から精度の高い解になっているからである。この意味で超精度くりこみ法が実際の計算には最も適しているといえる。

図 9(a) は円形物体を含む画像から検出したエッジ画像であり、赤色で示した 160 個のエッジ点にいろいろな手法で楕円を当てはめた。図 9(b) はそれを原画像上に重ねて表示したものである。分かりやすくするために隠れた部分を半透明で合成している。この例では重

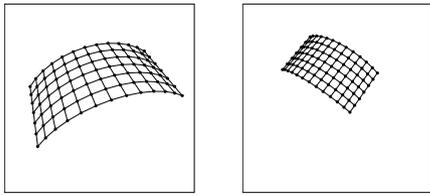


図 10 曲面格子を 2 方向から撮影したシミュレーション画像。

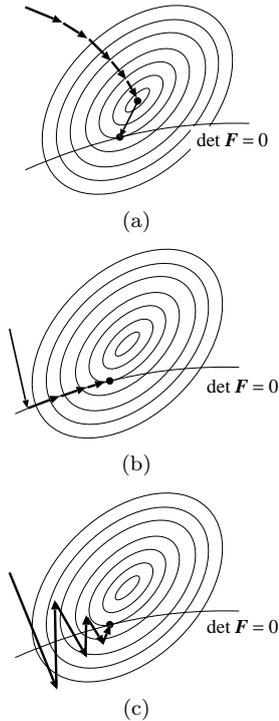


図 11 (a) 事後補正法 . (b) 内部接近法 . (c) 外部接近法 .

み反復法が 4 回の反復で、くりこみ法と超精度くりこみ法が共に 3 回の反復で収束したのに対して、最尤推定を計算する FNS 法は収束に 6 回の反復を要した。この場合もやはり最小二乗法と重み反復法は小さい楕円が当てはまっている。それ以外の手法はどれも真の楕円に近い結果を与えている。この場合は最尤推定の当てはめが最も真の楕円に近い。

### 5.3 基礎行列の計算

図 10 は曲面格子を 2 方向から撮影したシミュレーション画像である。2 画像とも画像サイズ  $600 \times 600$  画素、焦点距離 600 画素を想定している。画像中の各格子点の  $x, y$  座標に平均 0、標準偏差  $\sigma$  画素の正規分布に従う乱数誤差を独立に加えて基礎行列を計算する。基礎行列  $F$  はランクが 2 なので  $\det F = 0$  でなければならない。このランク拘束を考慮する次の方法がある [35]。

1. 事後補正法 (a posteriori correction) : ランク拘束を考慮しないで計算した  $\theta$  をランク拘束を満たす

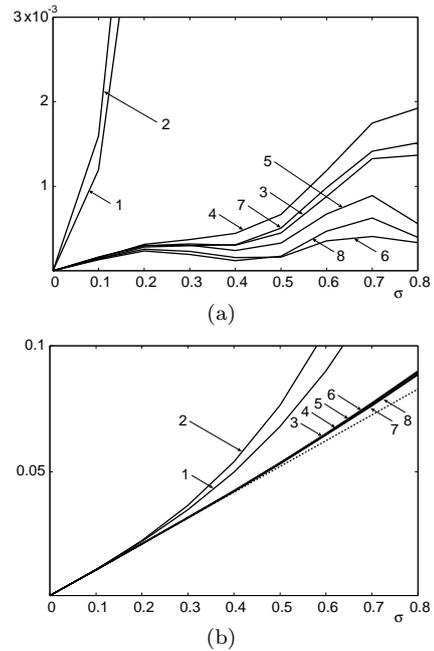


図 12 図 10 のデータに対する 基礎行列の計算の偏差 (a) と RMS 誤差 (b) . 横軸はデータ点に加えた誤差の標準偏差  $\sigma$  . 各  $\sigma$  に対して 10000 回試行 . 番号は 1) 最小二乗法, 2) 重み反復法, 3) Taubin 法, 4) くりこみ法, 5) 超精度最小二乗法, 6) 超精度くりこみ法, 7) 最尤推定, 8) 最尤推定の超精度補正 . (b) の点線は KCR 下界

ように補正する (図 11(a)) .

2. 内部接近法 (internal access) : ランク拘束を満たすように内部パラメータによって  $F$  を表し、その内部パラメータ空間を探索する (図 11(b)) .
3. 外部接近法 (external access) : 収束時にランク拘束を満たすように  $\theta$  空間を探索する (図 11(c)) .

ここでは事後補正法を採用し、ランク拘束を考慮しない計算のさまざまな手法の精度を比較する。

図 12(a), (b) は横軸の各  $\sigma$  に対して 10000 回独立に試行し、式 (76) の偏差  $B$  と RMS 誤差  $D$  をプロットしたものである。図 12(b) の点線は式 (77) の KCR 下界である。図 12(a) から分かるように、最小二乗法と重み反復法は偏差が非常に大きい。楕円当てはめの場合と同様に、重み反復法、くりこみ法、超精度くりこみ法の解の共分散行列の主要項は等しく、KCR の下界に一致するので、RMS 誤差は偏差の与える影響が大きく、図 12(b) に示されるように偏差の増加がそのまま RMS 誤差の増加に結びついている。

図 12(a) に示されるように最尤推定はかなりの偏差があるが、超精度補正によって偏差が大きく減少している。一方、超精度くりこみ法はそれと同じ程度に偏差が小さい。しかし、図 12 に示されるように、最小二乗法と重み反復法以外はどれも KCR の下界に近い精度差を達成しているので、偏差の減少の寄与は非常に小さい。そして、楕円の場合と同様に、わずかではある

が最も精度が高いのは超精度くりこみ法と最尤推定の超精度補正である。

## 6 まとめ

### 6.1 幾何学的推定

幾何学的推定は通常の統計的推定とは異なる。それは、統計的推定がパラメータを含む確率密度（統計的モデル）からデータを繰り返してサンプルして、その発生メカニズムを推定するのに対して、幾何学的推定は、パラメータを含んだ陰関数で表される拘束（幾何学的モデル）を満たす一組のデータからそのパラメータを推定するからである。その推定法は仮定したノイズの統計的性質に依存する。

幾何学的推定は最小化に基づく方法と最小化に基づかない方法とに大別される。後者は統計的推定における推定関数の方法に対応している。いずれの方法でも KCR 下界と呼ばれる精度の理論限界が存在する。

### 6.2 最小化に基づく方法

最小化に基づく代表的な方法は最小二乗法、最尤推定（特別の場合が再投影誤差最小化）、サンプソン誤差最小化である。最小二乗法は固有値問題を解くことによって簡単に計算できるが、解に大きな偏差がある。最尤推定の基本的な解法は補助変数を導入して高次元パラメータ空間を探索することであり、バンドル調整がその典型である。サンプソン誤差最小化は最尤推定の近似解法であり、その代表的な計算法が FNS 法である。そしてサンプソン誤差最小化を反復することによって最尤推定解が計算できるが、その差は小さく、実質的にはサンプソン誤差最小化は最尤推定と等価である。そして、最尤推定の偏差を理論的に評価して差し引く超精度補正を行えば、最尤推定より高い精度が実現できる。

### 6.3 最小化に基づかない方法

最小化に基づかない代表的な方法は重み反復法とくりこみ法である。いずれも解の共分散行列が KCR 下界を達成するように重みを反復更新する。さらにくりこみ法を改良すれば、高次の項を除いて偏差を消去する超精度くりこみ法が導かれる。重み反復法、くりこみ法、超精度くりこみ法はそれぞれ最小二乗法、Taubin 法、超精度最小二乗法の解を反復的に改善するものとみなせる。いずれも一般固有値問題  $M\theta = \lambda N\theta$  に帰着し、これが統計的推定における推定方程式に相当している。 $N$  は必ずしも正値でないが、 $N\theta = (1/\lambda)M\theta$  と変形すればライブラリツールが適用できる。くりこみ法も超精度くりこみ法も、その初期解の Taubin 法と超精度最小二乗法が既に高精度であるため収束が速く、通常は 3, 4 回で収束する。

## 6.4 手法間の比較

数値実験によれば、超精度くりこみ法は従来から最も精度が高いと考えられている最尤推定よりも精度が高い。最も精度が高いのは最尤推定解の偏差を事後的に差し引く超精度補正である。しかし、最尤推定解を求める反復計算はノイズが大きいと収束しないことがある。それに対して超精度くりこみ法はノイズにロバストである。この意味で実際の応用では超精度くりこみ法が最も優れた手法とみなせる。

謝辞 本稿のかかなりの部分は筆者と次の方々（敬称略）との共同研究の成果である：菅谷保之（豊橋技術科学大学情報工学系）、Prasanna Rangarajan（米国南メソジスト大学電気工学科）、Nikolai Chernov（米国アラバマ大学数学科）、Ali Al-Sharadqah（米国ミシシッピ大学数学科）。研究の過程で有益な議論やコメントを頂いた東北大学の岡谷貴之准教授、オーストラリア・アデレード大学の Mike Brooks 教授、Wojciech Chojnacki 博士、ドイツ・ボン大学の Wolfgang Förstner 教授、米国ラトガース大学の Peter Meer 教授、およびウクライナ・キエフ大学の Alexander Kukush 教授に感謝します。本研究の一部は日本学術振興会科学研究費（挑戦的萌芽研究 24650086）の助成によった。

## 参考文献

- [1] A. Al-Sharadqah and N. Chernov, A doubly optimal ellipse fit, *Comp. Stat. Data Anal.*, **56** (2012), to appear.
- [2] S. Amari and M. Kawanabe, Information geometry of estimating functions in semiparametric statistical models, *Bernoulli*, **3** (1997-2), 29–54.
- [3] P. J. Bickel, C. A. J. Klassen, Y. Ritov and J. A. Wellner, *Efficient and Adaptive Estimation for Semiparametric Models*, Johns Hopkins University Press, Baltimore, MD, U.S.A., 1994.
- [4] A. Bartoli and P. and Sturm, Nonlinear estimation of fundamental matrix with minimal parameters, *IEEE Trans. Patt. Anal. Mach. Intell.*, **26**-3 (2004-3), 426–432.
- [5] N. Chernov and C. Lesort, Statistical efficiency of curve fitting algorithms, *Comp. Stat. Data Anal.*, **47**-4 (2004-11), 713–728.
- [6] W. Chojnacki, M. J. Brooks and A. van den Hengel, Rationalising the renormalization method of Kanatani, *J. Math. Imaging Vis.*, **21**-11 (2001-2), 21–38.
- [7] W. Chojnacki, M. J. Brooks, A. van den Hengel, and D. Gawley, On the fitting of surfaces to data with covariances, *IEEE Trans. Patt. Anal. Mach. Intell.*, **22**-11 (2000-11), 1294–1303.
- [8] M. A. Fischler and R. C. Bolles, Random sample consensus: A paradigm for model fitting with applications to image analysis and automated cartography, *Commun. ACM*, **24**-6 (1981-6), 381–395.
- [9] V. P. Godambe (Ed.), *Estimating Functions*, Oxford University Press, New York, U.S.A., 1991.
- [10] R. I. Hartley, In defense of the eight-point algorithm, *IEEE Trans. Patt. Anal. Mach. Intell.*, **19**-6 (1997-6), 580–593.
- [11] R. Hartley and F. Kahl, Optimal algorithms in multiview geometry, *Proc. 8th Asian Conf. Comput. Vision*, November 2007, Tokyo, Japan, Vol. 1, pp. 13–34.
- [12] R. Hartley and A. Zisserman, *Multiple View Geometry in Computer Vision*, 2nd ed., Cambridge University Press, Cambridge, U.K., 2004.
- [13] P. J. Huber, *Robust Statistics*, 2nd ed., Wiley, Hoboken, NJ, U.S.A., 2009.

- [14] 岩元祐輝, 菅谷保之, 金谷健一, 3次元復元のためのバンドル調整の実装とその評価, 情報処理学会研究報告, 2011-CVIM-175-19 (2011-1), 1-8.
- [15] F. Kahl, S. Agarwal, M. K. Chandraker, D. Kriegman, and S. Belongie, Practical global optimization for multiview geometry, *Int. J. Comput. Vis.*, **79**-3 (2008-9), 271-284.
- [16] K. Kanatani, Renormalization for unbiased estimation, *Pro. 4th Int. Conf. Comput. Vis.*, May 1993, Berlin, Germany, pp. 599-606.
- [17] 金谷健一, コンピュータビジョンのためのくりこみ法, 情報処理学会論文誌, **35**-2 (1994-2), 201-209.
- [18] 金谷健一, 当てはめ問題の最適推定と精度の理論限界, 情報処理学会論文誌, **36**-8 (1995-8), 1865-1873.
- [19] K. Kanatani, *Statistical Optimization for Geometric Computation: Theory and Practice*, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 1996; reprinted, Dover, New York, NY, U.S.A., 2005.
- [20] 金谷健一, 「これなら分かる応用数学教室—最小二乗法からウェブレットまで—」, 共立出版, 2003.
- [21] 金谷健一, 「これなら分かる最適化数学—基礎原理から計算手法まで—」, 共立出版, 2005.
- [22] K. Kanatani, Ellipse fitting with hyperaccuracy, *IEICE Trans. Inf. amp Syst.*, **E89-D**-10 (2006-10), 2653-2660.
- [23] K. Kanatani, Statistical optimization for geometric fitting: Theoretical accuracy analysis and high order error analysis, *Int. J. Comput. Vis.*, **80**-2 (2008-11), 167-188.
- [24] 金谷健一, 視覚情報の数理, 広中平祐 (編), 「現代数理科学事典」, 第2版, 丸善, 2009, pp. 1062-1068.
- [25] 金谷健一, 幾何学的推定のための最適化手法: 最小化を越えて, 情報処理学会研究報告, 2012-CVIM-181-23 (2012-3), 1-8.
- [26] 金谷健一, 幾何学的推定のための最尤推定の超精度補正, 情報処理学会研究報告, 2012-CVIM-182-34 (2012-5), 1-8.
- [27] 金谷健一, アリ・アルシャラドカー, ニコライ・チェルノフ, 菅谷保之, 超精度くりこみ法, 情報処理学会研究報告, 2012-CVIM-180-23 (2012-1), 1-8.
- [28] 金谷健一, アリ・アルシャラドカー, ニコライ・チェルノフ, 菅谷保之, 超精度くりこみ法: 複数拘束, 情報処理学会研究報告, 2012-CVIM-181-21 (2012-3), 1-8.
- [29] K. Kanatani, N. Ohta and Y. Kanazawa, Optimal homography computation with a reliability measure, *IEICE Trans. Inf. amp Syst.*, **E83-D**-7 (2000-7), 1369-1374.
- [30] K. Kanatani and P. Rangarajan, Hyper least squares fitting of circles and ellipses, *Comput. Stat. Data Anal.*, **55**-6 (2011-6), 2197-2208.
- [31] K. Kanatani, P. Rangarajan, Y. Sugaya and H. Nitsuma, HyperLS and its applications, *IPSSJ Trans. Comput. Vis. Appl.*, **3** (2011-10), 80-94.
- [32] 金谷健一, 菅谷保之, 高ノイズレベルにおける基礎行列の最尤推定, 情報処理学会研究報告, 2007-CVIM-160-9 (2007-9), 49-56.
- [33] K. Kanatani and Y. Sugaya, Performance evaluation of iterative geometric fitting algorithms, *Comp. Stat. Data Anal.*, **52**-2 (2007-10), 1208-1222.
- [34] 金谷健一, 菅谷保之, 幾何学的当てはめの厳密な最尤推定の統一的計算法, 情報処理学会論文誌: コンピュータビジョンとイメージメディア, **2**-1 (2009-3), 53-62.
- [35] K. Kanatani and Y. Sugaya, Compact fundamental matrix computation, *IPSSJ Tran. Comput. Vis. Appl.*, **2** (2010-3), 59-70.
- [36] K. Kanatani and Y. Sugaya, Unified computation of strict maximum likelihood for geometric fitting, *J. Math. Imaging Vis.*, **38**-1 (2010-9), 1-13.
- [37] Y. Leedan and P. Meer, Heteroscedastic regression in computer vision: Problems with bilinear constraint, *Int. J. Comput. Vis.*, **37**-2 (2000-6), 127-150.
- [38] M. I. A. Lourakis and A. A. Argyros, SBA: A software package for generic sparse bundle adjustment, *ACM Trans. Math. Software*, **36**-1 (2009-3), 2:1-30.
- [39] J. Matei and P. Meer, Estimation of nonlinear errors-in-variables models for computer vision applications, *IEEE Trans. Patt. Anal. Mach. Intell.*, **28**-10 (2006-10), 1537-1552.
- [40] 中川裕介, 金谷健一, 菅谷保之, 高ノイズレベルにおける最尤楕円当てはめ, 情報処理学会研究報告, 2008-CVIM-162-10 (2008-3), 53-60.
- [41] J. Neyman and E. L. Scott, Consistent estimates based on partially consistent observations, *Econometrica*, **16**-1 (1948-1), 1-32.
- [42] 新妻弘崇, 金谷健一, 最適な射影変換の新しい計算アルゴリズム, 情報処理学会研究報告, 2009-CVIM-169-37 (2009-11), 1-8.
- [43] 岡谷貴之, バンドルアジャストメント, 情報処理学会研究報告, 2009-CVIM-167-37 (2009-6), 1-16.
- [44] T. Okatani and K. Deguchi, Toward a statistically optimal method for estimating geometric relations from noisy data: Cases of linear relations, *Proc. IEEE Conf. Computer Vision and Pattern Recognition*, June 2003, Madison, WI, U.S.A., Vol. 1, pp. 432-439.
- [45] T. Okatani and K. Deguchi, On bias correction for geometric parameter estimation in computer vision, *Proc. IEEE Conf. Computer Vision Pattern Recognition*, June 2009, Miami Beach, FL, U.S.A., pp. 959-966.
- [46] T. Okatani and K. Deguchi, Improving accuracy of geometric parameter estimation using projected score method, *Proc. Int. Conf. Computer Vision*, September/October 2009, Kiyoto, Japan, pp. 1733-1740.
- [47] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*, 2nd ed., Cambridge University Press, Cambridge, U.K., 1992.
- [48] P. Rangarajan and K. Kanatani, Improved algebraic methods for circle fitting, *Electronic J. Stat.*, **3** (2009-10), 1075-1082.
- [49] P. J. Rousseeuw and A. M. Leroy, *Robust Regression and Outlier Detection*, Wiley, New York, NY, U.S.A., 1987.
- [50] P. D. Sampson, Fitting conic sections to "very scattered" data: An iterative refinement of the Bookstein algorithm, *Comput. Graphics Image Process.*, **18**-1 (1982-1), 97-108.
- [51] P. Sturm and P. Gargallo, Conic fitting using the geometric distance, *Proc. 8th Asian Conf. Comput. Vision*, November 2007, Tokyo, Japan, Vol. 2, pp.784-795.
- [52] 菅谷保之, 金谷健一, [講座] 画像の三次元理解のための最適化計算 [I]-[IV] 電子情報通信学会会誌, **92**-3, 4, 6, 7 (2009-3, 4, 6, 7), 229-233, 301-306, 463-468, 573-578.
- [53] 菅谷保之, 金谷健一, 基礎行列と射影変換の計算精度の比較最小二乗法から超精度くりこみ法まで, 情報処理学会研究報告, 2012-CVIM-181-22 (2012-3), 1-8.
- [54] G. Taubin, Estimation of planar curves, surfaces, and non-planar space curves defined by implicit equations with applications to edge and range image segmentation, *IEEE Trans. Patt. Anal. Mach. Intell.*, **13**-11 (1991-11), 1115-1138.
- [55] B. Triggs, P. F. McLauchlan, R. I. Hartley, and A. Fitzgibbon, Bundle adjustment—A modern synthesis, in B. Triggs, A. Zisserman, and R. Szeliski, (eds.), *Vision Algorithms: Theory and Practice*, Springer, Berlin, Germany, 2000, pp. 298-375.
- [56] 横田健太, 村田和洋, 菅谷保之, 金谷健一, 楕円当てはめの精度比較: 最小二乗法から超精度くりこみ法まで, 情報処理学会研究報告, 2012-CVIM-180-26 (2012-1), 1-8.