

Direct least square fitting of ellipses の解説 (森下)

A. Fitzgibbon, M. Pilu, and R.B. Fisher, "Direct least square fitting of ellipses", *IEEE trans. Pattern Analysis and Machine Intelligence*, vol. 21, no. 5, pp. 476–480, 1999

2次元平面の点の集合に最も適合する楕円を求める。より一般的に、点の集合に対して円錐（下式）をあてはめる問題を考える。

$$F(\mathbf{x}, \mathbf{a}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{x} = ax^2 + bxy + cy^2 + dx + ey + f = 0$$

$$\mathbf{a} = [a \ b \ c \ d \ e \ f]^T, \ \mathbf{x} = [x^2 \ xy \ y^2 \ x \ y \ 1]^T$$

円錐に条件 $b^2 - 4ac < 0$ を付加すると楕円になる。 T は転置行列をとることを意味する。6次元のベクトルを縦に並べるとスペースを取るので、転置行列で表現している。

点 (x_1, y_1) に対して $\mathbf{x}_1 = [x_1^2 \ x_1 y_1 \ y_1^2 \ x_1 \ y_1 \ 1]^T$ を用意すると、点 (x_1, y_1) が円錐上の点であることは $F(\mathbf{x}_1, \mathbf{a}) = 0$ と表現できる。一方、 (x_1, y_1) が円錐上に存在しない場合、 $F(\mathbf{x}_1, \mathbf{a})^2 > 0$ は円錐からの点の乖離度、すなわち距離を表現している。一般化して、点集合 $\{\mathbf{x}_i = [x_i^2 \ x_i y_i \ y_i^2 \ x_i \ y_i \ 1]^T \mid i = 1, 2, \dots, N\}$ と円錐 $F(\mathbf{x}, \mathbf{a}) = 0$ の距離を

$$\Sigma \{F(\mathbf{x}_i, \mathbf{a})^2 \mid i = 1, 2, \dots, N\} \cdots (1)$$

と定義することは自然である。この距離を最小化するような $\mathbf{a} = [a \ b \ c \ d \ e \ f]^T$ を計算することが主題である。

行列の問題として再定式化する。 $\mathbf{D} = [\mathbf{x}_1 \ \mathbf{x}_2 \ \dots \ \mathbf{x}_N]^T$ と置く。すなわち

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} x_1^2 & x_1 y_1 & y_1^2 & x_1 & y_1 & 1 \\ x_2^2 & x_2 y_2 & y_2^2 & x_2 & y_2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_N^2 & x_N y_N & y_N^2 & x_N & y_N & 1 \end{bmatrix}$$

すると式(1) は

$$\|\mathbf{D}\mathbf{a}\|^2 = \mathbf{a}^T \mathbf{D}^T \mathbf{D} \mathbf{a}$$

したがって2次元平面の点の集合に最も適合する楕円を求める問題を、

$\|\mathbf{D}\mathbf{a}\|^2$ を最小化する $\mathbf{a}$ を計算：円錐が楕円となる条件 $b^2 - 4ac < 0$ のもとと定める。しかしこの条件のもと最適化するのは難しい。そこで、 $F(\mathbf{x}, \mathbf{a}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{x} = 0$ の両辺を0以外の値で定数倍しても円錐を満たす点集合は変化せず、 $\|\mathbf{D}\mathbf{a}\|^2$ を最小化する $\mathbf{a}$ も変化しないことに注目して、楕円となる条件を

$$b^2 - 4ac = -1$$

のように、若干厳しくする。すると嬉しいことに、 $\|\mathbf{D}\mathbf{a}\|^2$ を最小化する $\mathbf{a}$ がただ1つに定まり、しかも容易に計算できることを示す。

$\mathbf{a}$ に課す条件 $b^2 - 4ac = -1$ を行列で表現する。

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{a}^T \mathbf{C} \mathbf{a} = [a \ b \ c \ d \ e \ f] \begin{bmatrix} 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \\ f \end{bmatrix} = 1$$

まとめると

条件 $\mathbf{a}^T \mathbf{C} \mathbf{a} = 1$ のもと $\|\mathbf{D} \mathbf{a}\|^2 = \mathbf{a}^T \mathbf{D}^T \mathbf{D} \mathbf{a}$ を最小化する $\mathbf{a}$ を計算

ラグランジュの未定乗数法で計算する。

$$L(\mathbf{a}, \lambda) = \mathbf{a}^T \mathbf{D}^T \mathbf{D} \mathbf{a} - \lambda(\mathbf{a}^T \mathbf{C} \mathbf{a} - 1) \quad \text{ただし } \lambda \geq 0$$

最小値は以下の条件を満たす（変形の際には $\mathbf{D}^T \mathbf{D}$ が実対称行列であることに注意）。

$$\frac{\partial L(\mathbf{a}, \lambda)}{\partial \mathbf{a}} = \left[\frac{\partial L(\mathbf{a}, \lambda)}{\partial a} \quad \frac{\partial L(\mathbf{a}, \lambda)}{\partial b} \quad \frac{\partial L(\mathbf{a}, \lambda)}{\partial c} \quad \frac{\partial L(\mathbf{a}, \lambda)}{\partial d} \quad \frac{\partial L(\mathbf{a}, \lambda)}{\partial e} \quad \frac{\partial L(\mathbf{a}, \lambda)}{\partial f} \right]^T = 2\mathbf{D}^T \mathbf{D} \mathbf{a} - 2\lambda \mathbf{C} \mathbf{a} = 0$$

$$\frac{\partial L(\mathbf{a}, \lambda)}{\partial \lambda} = \mathbf{a}^T \mathbf{C} \mathbf{a} - 1 = 0$$

いま $\mathbf{S} = \mathbf{D}^T \mathbf{D}$ と置くと、目的の $\mathbf{a}$ は以下の条件を満たす。

$$\mathbf{S} \mathbf{a} = \lambda \mathbf{C} \mathbf{a} \quad \mathbf{a}^T \mathbf{C} \mathbf{a} = 1$$

$\mathbf{a}$ が唯一つであることを示す前に、 $\mathbf{S}$ が半正値実対称行列であること、ある行列 $\mathbf{Q}$ により $\mathbf{S} = \mathbf{Q} \mathbf{Q}^T$ と表現できることを示す。

$\mathbf{S}$ は 6×6 の実対称行列 ($\mathbf{S}^T = (\mathbf{D}^T \mathbf{D})^T = \mathbf{D}^T \mathbf{D}^{TT} = \mathbf{D}^T \mathbf{D} = \mathbf{S}$)。直交行列 $\mathbf{U}$ ($\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^T$) が存在して対角化可能である（普通の線形代数の教科書には載っているはずです）。

$$\mathbf{U}^{-1} \mathbf{S} \mathbf{U} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \alpha_6 \end{bmatrix} \quad \cdots \quad (2)$$

$\|\mathbf{D} \mathbf{a}\|^2 = \mathbf{a}^T \mathbf{D}^T \mathbf{D} \mathbf{a} = \mathbf{a}^T \mathbf{S} \mathbf{a} \geq 0$ である。等式となるのは、 $\mathbf{D}$ を構成する際に使ったすべての点が、楕円(円錐)上に存在し $F(\mathbf{x}_1, \mathbf{a}) = 0$ を満たすことを意味する。しかし現実にはすべての点が楕円にのるわけではなく、 $\mathbf{a}^T \mathbf{S} \mathbf{a} > 0$ となることが多いであろう。 $\mathbf{a}^T \mathbf{S} \mathbf{a} \geq 0$ (または > 0) から、対角成分 α_i が半正値(positive semidefinite, $\alpha_i \geq 0$) もしくは正値(positive definite, $\alpha_i > 0$)であることを示す。 $\mathbf{a}$ を $\mathbf{U}^{-1}$ で変換した $\mathbf{b} (= \mathbf{U}^{-1} \mathbf{a})$ は $\mathbf{b}^T \mathbf{U}^T \mathbf{S} \mathbf{U} \mathbf{b} \geq 0$ を満たす ($\mathbf{a} = \mathbf{U} \mathbf{b}$ なので)。すると

$$\mathbf{b}^T \mathbf{U}^T \mathbf{S} \mathbf{U} \mathbf{b} = \mathbf{b}^T \begin{bmatrix} \alpha_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \alpha_6 \end{bmatrix} \mathbf{b} \geq 0$$

$\mathbf{b} = [1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0]^T$ を代入すれば、 $\alpha_1 \geq 0$ 。同様に $\alpha_i \geq 0$ ($i = 1, 2, \dots, 6$) である。 $\mathbf{a}^T \mathbf{S} \mathbf{a} > 0$ の場合は、 $\alpha_i > 0$ 。

実対称行列が(半) 正値であることの1つの利点は、 $\sqrt{\alpha_i}$ を対角成分に持つ行列を $\mathbf{R}$ とし、 $\mathbf{U} \mathbf{R} \mathbf{U}^{-1}$ を $\mathbf{Q}$ と表現すれば、 $\mathbf{S} = \mathbf{Q} \mathbf{Q}^T$ となることである。すなわち

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \sqrt{\alpha_1} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \sqrt{\alpha_6} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{Q}\mathbf{Q} = (\mathbf{U}\mathbf{R}\mathbf{U}^{-1})(\mathbf{U}\mathbf{R}\mathbf{U}^{-1}) = \mathbf{U}\mathbf{R}^2\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U} \begin{bmatrix} \alpha_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \alpha_6 \end{bmatrix} \mathbf{U}^{-1} = \mathbf{S}$$

最後の変形は (2) より。 $\mathbf{Q}$ は今後の展開で重要な役目がある。まず $\mathbf{Q}$ は逆行列をもち、 $\mathbf{Q}^{-1} = \mathbf{U}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{U}^{-1}$ ($\mathbf{R}^{-1}$ の対角成分は $1/\sqrt{\alpha_i}$) である。また $\mathbf{Q}^{-1}$ は対称行列である。なぜなら $\mathbf{Q}^{-1} = \mathbf{U}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{U}^T$ ゆえ、 $\mathbf{Q}^{-1T} = \mathbf{U}^{TT}\mathbf{R}^{-1T}\mathbf{U}^T = \mathbf{U}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{U}^T = \mathbf{Q}^{-1}$ 。

$\mathbf{S}\mathbf{a} = \lambda\mathbf{C}\mathbf{a}$ $\mathbf{a}^T\mathbf{C}\mathbf{a} = 1$ の $\mathbf{a}$ と $\lambda(>0)$ の解を考察する ($\mathbf{S}$ は正値と仮定し最後に使う)。
 $\mathbf{S}\mathbf{a} = \lambda\mathbf{C}\mathbf{a}$ は一般化固有値問題と呼ばれ、通常の固有値問題 (たとえば $\mathbf{S}\mathbf{a} = \lambda\mathbf{a}$) のように逆行列を求めることで解けるわけではない。 $\mathbf{S} = \mathbf{Q}\mathbf{Q}$ に注目し以下のように変形。

$$\mathbf{S}\mathbf{a} = \lambda\mathbf{C}\mathbf{a}, \quad \mathbf{Q}\mathbf{Q}\mathbf{a} = \lambda\mathbf{C}\mathbf{a}, \quad \mathbf{Q}\mathbf{a} = \lambda\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{a}$$

左辺を $\mathbf{v} = \mathbf{Q}\mathbf{a}$ とおく。 $\mathbf{a} = \mathbf{Q}^{-1}\mathbf{v}$ なので、 $\mathbf{v}$ が得られれば $\mathbf{a}$ も決まる。代入すると $\mathbf{v}$ の式を得る。

$$\mathbf{v} = \lambda\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{v} \quad \text{つまり} \quad (\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{Q}^{-1})\mathbf{v} = (1/\lambda)\mathbf{v}$$

普通の固有値問題となったので、 $1/\lambda > 0$ となる解を求め $\mathbf{a} = \mathbf{Q}^{-1}\mathbf{v}$ とすればよい。このような解は唯1つであることを示す。この際、以下の Sylvester の慣性則 (Sylvester's law of inertia) を利用する (普通の線形代数の教科書には載っているはず)。

「 $\mathbf{Y}$ を実対称行列、 $\mathbf{X}$ を正則行列 (逆行列有り) とすると、 $\mathbf{Y}$ の $\mathbf{X}^T\mathbf{Y}\mathbf{X}$ の正と負の固有値の数は一致する」

$\mathbf{Q}^{-1}$ は正則な対称行列 ($\mathbf{Q}^{-1T} = \mathbf{Q}^{-1}$) なので、 $\mathbf{Q}^{-1T}\mathbf{C}\mathbf{Q}^{-1} (= \mathbf{Q}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{Q}^{-1})$ と $\mathbf{C}$ の正と負の固有値の数は一致する。 $\mathbf{C}$ の正の固有値は1つで、2のみである。

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{C} \begin{bmatrix} t \\ 0 \\ t \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = 2 \begin{bmatrix} t \\ 0 \\ t \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

したがって $(\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{Q}^{-1})\mathbf{v} = (1/\lambda)\mathbf{v}$ で $1/\lambda > 0$ となる $\mathbf{v}$ の解は唯1つである。よって唯1つの解 $\mathbf{a} = \mathbf{Q}^{-1}\mathbf{v}$ が求まる。

最後に $\mathbf{S}\mathbf{a} = \lambda\mathbf{C}\mathbf{a}$ の解を $(\lambda_i, \mathbf{u}_i)$ とする (ただし $\lambda_i > 0$)。この解がそのまま $\mathbf{a}^T\mathbf{C}\mathbf{a} = 1$ を満たすとは限らない。そこでより一般に、 $(\lambda_i, \mu_i \mathbf{u}_i)$ も $\mathbf{S}\mathbf{a} = \lambda\mathbf{C}\mathbf{a}$ を満たすことに注意して、 $\mathbf{a} = \mu_i \mathbf{u}_i$ が $\mathbf{a}^T\mathbf{C}\mathbf{a} = 1$ を満たす条件を考える。

$$(\mu_i \mathbf{u}_i)^T \mathbf{C} (\mu_i \mathbf{u}_i) = \mu_i^2 \mathbf{u}_i^T \mathbf{C} \mathbf{u}_i = 1$$

$$\mu_i = \sqrt{1/\mathbf{u}_i^T \mathbf{C} \mathbf{u}_i}$$

$\mathbf{u}_i^T \mathbf{C} \mathbf{u}_i = \mathbf{u}_i^T \mathbf{S} \mathbf{u}_i / \lambda_i$ 。 $\mathbf{S}$ は正値と仮定したので $\mathbf{u}_i^T \mathbf{S} \mathbf{u}_i > 0$ 。 $\lambda_i > 0$ だから μ_i は値をもつ。