Korean Society of Surveying, Geodesy, Photogrammetry, and Cartography 2003 / Cheongju / Korea

토털최소제곱법과 최소제곱법의 비교연구
A Comparison Study on Total Least Squares and Least Squares

이임평[1] · 최윤수[2] · 권재현[3]
Lee, Impyeong · Choi, Yunsoo · Kwon, Jay Hyoun

[1] 서울시립대학교 도시과학대학 지적정보공학과 교수(E-mail:iplee@uos.ac.kr)
[2] 서울시립대학교 도시과학대학 지적정보공학과 교수(E-mail:choiys@uos.ac.kr)
[3] 세종대학교 공과대학 지구정보공학과 교수(E-mail:jkwon@sejong.ac.kr)

Abstract

The Total Least Squares (TLS) method is introduced in comparison with the conventional Least Squares (LS) method. The principles and mathematical models for both methods are summarized and the comparison results from their applications to a simple geometric example, fitting a straight line to a set of 2D points are presented. As conceptually reasoned, the results clearly indicate that LS is more susceptible of producing wrong parameters with worse precision rather than TLS. For many applications in surveying, can adjustment computation and parameter estimation based on TLS provide better results.

1. 서 론

측량은 관측을 통해 미지의 양을 정밀하게 추정하는 작업을 수반한다. 여기서 추정된 미지수의 정밀도는 크게 1) 개별적인 관측치의 정밀도, 2) 전체 관측치의 수량, 3) 관측치를 분석하는 통계적인 방법에 따라 결정된다. 추정치의 정밀도를 높이기 위해서 고정밀 센서를 사용하여 관측치의 정밀도를 높이거나 또는 관측 횟수를 늘리는 것은 비용의 증대를 수반한다. 이와 달리, 정교한 수학적 모델을 도출하고 합리적인 오차 모델을 가정하여 구성한 보다 개선된 통계적 분석 방법을 통해 비용의 증대를 크게 유발하지 않고 정밀도를 제고할 수 있다.

현재까지 측량 분야에서 널리 사용되어온 대표적인 통계적 분석 방법은 최소제곱법(Least Squares, LS)에 기반한다. 최소제곱법은 관측치에 필연적으로 포함되는 임의오차의 효과를 최소화함으로써 미지수를 결정하는 방법이다. 곧, 미지수(ξ)를 결정하기 위해 측량을 통해 관측치(y)를 획득하고, 관련된 기하학적 또는 물리적 모델의 분석을 통해 관측치와 미지수의 관계를 설정하는 설계행렬(A)을 유도하여 다음 식(1)과 같은 선형 방정식의 시스템을 수립한다. 일반적으로 이러한 시스템은 부정합(inconsistent)하고 과잉관측(over-determined)되었기 때문에 해가 존재하지 않고, 이에 따라 최소제곱법, 곧 관측치에 포함된 오차의 제곱을 최소화하는 방법을 통해 최적의 미지수를 추정한다.

$$y = A\xi \tag{1}$$

그러나, 다양한 기하학적 모델을 취급하다보면 관측치 뿐만 아니라 설계행렬에도 불가피하게 오차가 포함되는 경우가 많이 발견된다. 이러한 경우에 관측치의 오차만을 고려하는 기존의 LS 방법보다는 관측치와 설계행렬의 오차를 동시에 고려하는 TLS 방법이 합리적이다. 이에 본 논문에서는 이러한 두 가지 방법의 개념적 원리 및 수학적 모델을 소개한 후 간단한 기하학적 문제에 적용하여 두 방법을 비교 분석 하였다.

2. 수학적 모델

식(1)에서 해가 존재하려면 A의 range space상에 y가 존재하여야 하는데 주어진 시스템이 inconsistent인 경우에는 이러한 조건을 만족하지 못한다. 근사적으로 이러한 조건을 만족시키기 위해서는 y 또는 A를 변화시켜야 한다. 개념적으로는 기존의 LS 방법은 A는 고정시킨 후에 y를 최소로 변화시켜 A의 range space에 존재하도록 만들고, 반면에 TLS 방법은 A와 y를 동시에 최소로 변화시켜 변화된 y가 변화된 A의 range space에 존재하도록 만들어 근사적인 해를 구하는 방법이다. TLS 방법에서는 A와 y의 변화량을 주어진 모델로부터 유도한 적절한 가중치를 통해 상대적으로 조절할 수 있다. 예를 들어 TLS 방법에서 A의 변화량에 무한대의 가중치를 주면 A와 y의 가중된 변화량을 최소를 만들려면 결국 y만 변화시켜야 하기 때문에 LS 방법과 동일한 결과가 얻어진다. 결국, LS 방법은 TLS 방법의 하나의 특별한 경우이다. 아래는 각각의 방법의 수학적 모델과 그에 따른 추정치를 요약한 것이다.

2.1 최소제곱법 (LS)

LS 방법은 식(1)에서 관측치의 오차(e)를 포함하여 다음 식(2)처럼 구성한다. 식(3)은 오차의 기대값과 분산를 정의하며, 편의상 오차의 분산공분산 행렬은 단위행렬(I_n)로 정의하였고, σ_0^2는 분산성분를 의미한다. 여기서, y는 n x 1 벡터, ξ는 m x 1 벡터이다.

$$y = A\xi + e \tag{2}$$

$$e \sim (0, \sigma_0^2 I_n) \tag{3}$$

이 모델의 해는 식(2)와 오차의 제곱($e^T e$)이 최소가 되어야 한다는 조건을 통해 구하며, 이 때 미지수와 분산성분에 대한 추정치를 구하면 각각 식(4)와 식(5)와 같다.

$$\hat{\xi} = (A^T A)^{-1} \cdot A^T y \tag{4}$$

$$\widehat{\sigma_0^2} = \frac{(y - A\hat{\xi})^T \cdot (y - A\hat{\xi})}{n - m} \tag{5}$$

2.2 토털최소제곱법 (TLS)

TLS 방법은 식(1)에서 관측치의 오차(e)와 설계행렬의 오차(E)를 포함하여 다음 식(5)처럼 구성한다. 식(7)과 식(8)은 오차에 대한 통계적인 특성을 나타낸다.

$$y = (A - E)\xi + e \tag{6}$$

$$e \sim (0, \sigma_0^2 I_n) \tag{7}$$

$$e_A := vec(E) \sim (0, \sigma_0^2 I_{nm}) \tag{8}$$

이 모델의 해는 식(6)과 오차의 제곱($e^T e + e_A^T e_A$)이 최소가 되어야 한다는 조건을 통해 구하며, 이 때 미지수에 대한 추정치는 반복적 방법을 통해 계산된다. 곧, 기존의 LS 방법을 이용하여 최초의 추정치를 계산한 후 식(9)를 이용하여 이전의 추정치로부터 다음 추정치를 계산하는 과정을 두 추정치의 차이가 미미할 때까지 반복적으로 수행한다(Schaffrin 등, 2003).

$$\hat{\xi}^{(i+1)} = (A^T A)^{-1} \cdot \left[A^T y + \hat{\xi}^{(i)} \cdot \frac{(y - A\hat{\xi}^{(i)})^T \cdot (y - A\hat{\xi}^{(i)})}{1 + (\hat{\xi}^{(i)})^T \cdot \hat{\xi}^{(i)}} \right] \tag{9}$$

또한, 분산성분에 대한 추정치는 최종 추정치로 결정되며 다음 식(10)과 같다.

$$\widehat{\sigma_0^2} = \frac{(y - A\hat{\xi})^T \cdot (y - A\hat{\xi})}{(1 + \widehat{\xi^T \xi}) \cdot (n - m)} \tag{10}$$

3. 적용 및 검토

TLS와 LS의 성능을 실험을 통해 비교하기 위해 각각의 방법을 2차원 평면 상의 점에 직선을 근사하는 단순한 기하학적 문제에 적용하였다. 직선 근사의 문제는 식(11)처럼 공식화된다. 여기서 { (x_i, y_i) | i = 1, 2, ... , n}은 점의 좌표이고, (a, b)는 근사하려는 직선의 절편과 기울기를 나타낸다.

$$y = A\xi \quad \rightarrow \quad \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \tag{11}$$

일반적으로 식(11)은 해가 존재하지 않기 때문에 근사를 위해서 관측치인 점의 좌표에 오차의 존재를 가정한다. 그리하여, 기존의 LS 방법은 x 좌표에는 오차가 없고 오직 y 좌표에만 오차가 있다고 가정한 후 다음 식(12)처럼 설정한다. 평면 측량을 통해 결정한 점의 2차원 좌표에는 방향에 따른 특별한 종속성이 존재하지 않기 때문에 오직 y좌표에만 오차가 있다고 가정하는 것은 합리적이지 못하지만 기존의 LS 방법에는 설계행렬의 오차를 정의할 수 없기 때문에 x 좌표의 오차를 의도적으로 무시하였다.

$$y = A\xi + e \quad \rightarrow \quad \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} e_{y1} \\ e_{y2} \\ \vdots \\ e_{yn} \end{bmatrix} \tag{12}$$

이와 달리 TLS 방법은 식(13)처럼 설정하여 x 와 y 좌표 모두의 오차를 가정한다.

$$y = (A - E)\xi + e \quad \rightarrow \quad \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 - e_{x1} \\ 1 & x_2 - e_{x2} \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n - e_{xn} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} e_{y1} \\ e_{y2} \\ \vdots \\ e_{yn} \end{bmatrix} \tag{13}$$

이처럼 설정된 각각의 모델을 이용하여 LS와 TLS 방법을 직선 근사에 적용하였다. 근사에 사용된 점의 집합은 A와 B 두 종류가 있는데, A는 두 개의 방법으로 근사한 직선의 차이를 명백하게 볼 수 있게 선택한 4개의 점을 포함하며, B는 직선상에서 임의로 선택한 후 임의오차를 추가한 1000개의 점을 포함한다. 각각의 집합에 근사한 결과는 아래에서 실험 A와 실험 B라는 이름으로 소개되고 있다.

3.1 실험 A

실험 A에서 사용한 점의 좌표는 표 1에서 보는 바와 같다. 이러한 점의 집합에 LS와 TLS를 이용한 직선 근사의 결과는 표 2에서 보여진다. TLS로 근사한 직선은 LS로 근사한 직선과 그림 1에서 보이는 것처럼 큰 차이를 보인다. LS와 비교하여 TLS로 추정한 분산성분이 작다는 것은 TLS로 근사한 직선이 주어진 점의 집합에 보다 잘 근사한다는 것을 의미한다. TLS의 계산은 이전 추정치와의 차이가 1e-3이하가 될 때까지 34번 반복하였고 이 과정에서 기울기 추정치가 LS 추정치인 0.4에서 TLS 추정치인 2.719로 수렴하는 것을 그림 2에서 보여준다.

표 1. 직선 근사에 사용된 점의 좌표

	P1	P2	P3	P4
x	1.0	1.5	2.0	3.0
y	1.0	3.0	0.5	2.5

표 2. 직선 근사의 결과

	LS	TLS
절편 추정치	0.40	2.719
기울기 추정치	1.00	-3.347
분산성분 추정치	1.95	0.933

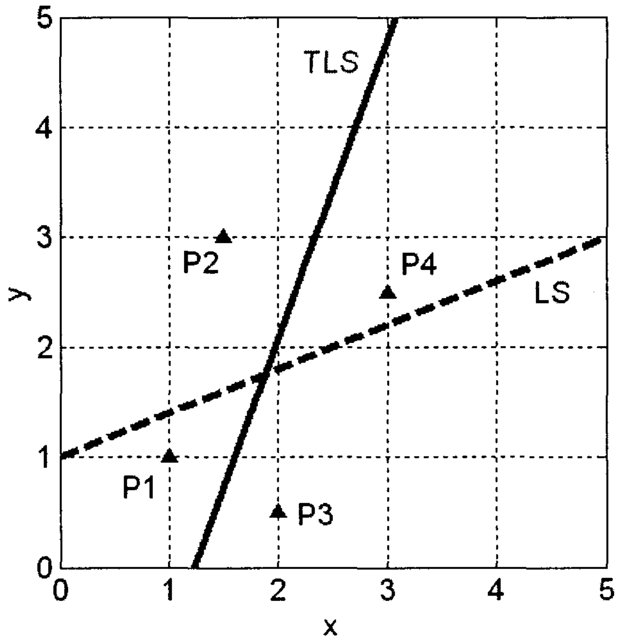

그림 1. 직선 근사의 결과

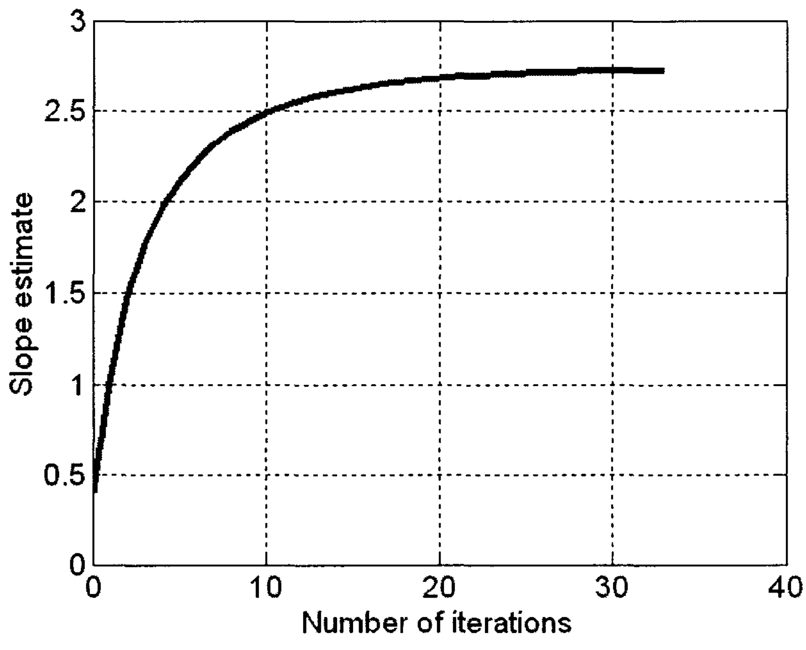

그림 2. 반복 횟수와 기울기의 추정치

3.2 실험 B

기울기가 0.5이고 절편이 1.0인 직선상에서 임의로 선택된 1000개의 점에 분산성분을 10.0으로 가정한 임의오차를 더하여 생성한 점의 집합을 직선 근사에 사용하였다. 그림 3은 실험 B에서 사용한 점을 보여준다.

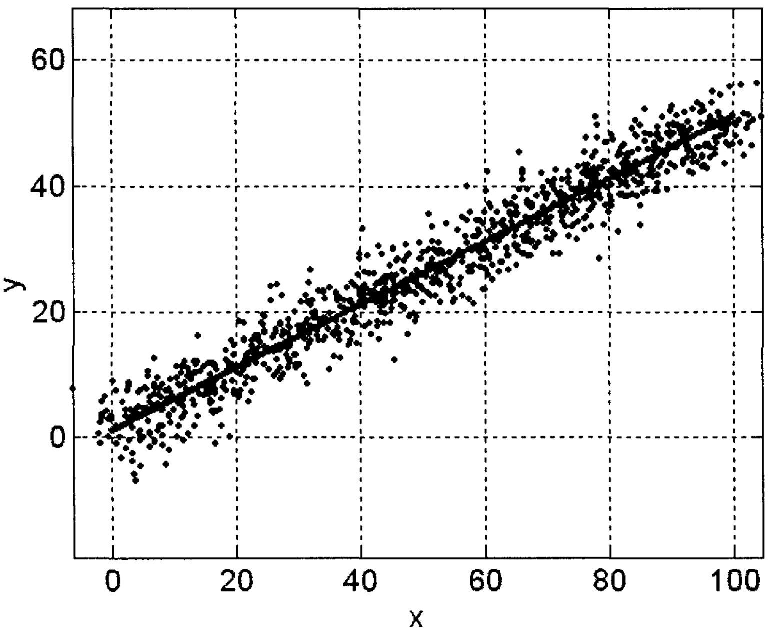

그림 3. 직선 근사에 사용한 점. 임의오차를 더하기 전(적색), 더한 후(청색)

표 3은 직선 근사의 결과를 참값과 함께 보여준다. TLS의 추정치가 모든 항목에서 LS보다 참값에 근사하는 것을 볼 수 있다. TLS의 계산은 이전 추정치와의 차이가 1e-5이하가 될 때까지 3번 정도 반복하였다.

표 3. 직선 근사의 결과

	참값	LS 추정치	TLS 추정치
절편	0.5	0.492	0.498
기울기	1.0	1.387	1.095
분산성분	10.0	12.293	9.874

4. 결 론

본 연구에서는 관측을 통하여 미지수를 추정하는 조정계산에 있어서 관측치 뿐만 아니라 설계행렬에도 오차를 고려하는 것이 보다 합리적인 여러 가지 문제들이 존재하고 이러한 문제를 취급할 때 기존의 LS 방법 보다 TLS 방법으로 보다 정확한 추정치를 획득할 수 있음을 예를 들어 증명하였다. 따라서 좌표 변환, 카메라 보정, 망조정 등 여러 가지 문제에 TLS 방법을 적용한다면 비용의 증대를 크게 유발하지 않고 정밀도를 제고할 수 있다.

참고문헌

Schaffrin, B. and Felus, Y. A. (2003), On Total Least-Squares Adjustment with Constraints, *International Union of Geophysics and Geodesy (IUGG) General Assembly*, Sapporo, Japan.