

좌표변환을 통한 일반최소제곱법과 토탈최소제곱법 비교연구

Comparison between the General Least Squares method and the Total Least Squares method through coordinate transformation

박영무¹⁾, 김병국²⁾

Young-Mu Park, Byung-Guk Kim

¹⁾ 인하대학교 환경토목공학부 지리정보공학

²⁾ 인하대학교 환경토목공학부 지리정보공학 교수

Abstract

Performing adjustments where the observation equations involve more than a single measurement are General Least Squares(GLS) and Total Least Squares(TLS). This paper introduces theory of the GLS and TLS and compared experimentally accuracy and efficiency of those through 2D conformal coordinate transformation and 2D affine coordinate transformation. In conclusion, in case of 2D coordinate transformation, GLS can produce a little more accurate and efficient than TLS. In survey fields, The GLS and TLS can be used cooperatively for adjusting the actual coordinate measurements.

Keyword : General Least Squares, Total Least Squares

1. 서론

측량에서는 미지변수의 최확값(most probable value)을 구하는 기법으로서 최소제곱법(Least squares Method)이 가장 널리 쓰이고 있다. 관측값을 미지변수의 함수로 표현한 관측방정식에는 하나의 방정식에 하나의 관측값만이 사용된다. 즉, 하나의 방정식에 관측값 하나, 관측값의 잔차(residual) 및 무게(weight)가 연계된다. 예를 들어, xy좌표평면에 얻어진 실험자료에 대하여 직선식($y=ax+b$)을 개발한다고 하였을 때 관측된 점1의 좌표(x_1, y_1)를 관측방정식으로 표현하면,

$$W_1(y_1 + v_{y1}) = W_1(ax_1 + b) \quad (1)$$

이 된다. 이 관측방정식에서는 y좌표 관측은 관측값으로, x좌표 관측은 상수값으로 간주하였다.

그러나 실제로는 x, y좌표 모두 관측된 값으로서 서로 다른 잔차와 무게를 가진다. 이렇게 하나의 관측방정식에 2개 이상의 관측값이 포함된 경우에는 일반최소제곱법(General Least Squares method) 또는 토탈최소제곱법(Total Least Squares method)을 이용해야 한다.

본 논문에서는 일반최소제곱법과 토탈최소제곱법에 대한 알고리즘을 각각 기술하고, 알고리즘을 좌표 변환에 적용하였다. 구현한 프로그램을 이용하여 두 방법의 정확성 및 효율성에 대한 비교 실험을 수행하였다.

2. 일반최소제곱법(GLS, General Least Squares Method)과 토탈최소제곱법(TLS, Total Least Squares Method)

2.1 관측방정식에 의한 일반최소제곱법

일반최소제곱법을 설명하기 위하여 xy좌표 평면에 관측된 자료로 직선 $y=ax+b$ 을 개발하는 경우를 예

로 들고자 한다.(참고문헌1) 즉, (1)식에서 x_1 에도 잔차를 도입한 관측방정식은 식(2)과 같다.

$$W_1(y_1 + v_{y_1}) = W_1(a(x_1 + v_{x_1}) + b) \quad (2)$$

식(3)은 v_{x_1}, v_{y_1}, a, b 를 미지변수로 하는 비선형함수이다. 따라서 테일러시리즈의 1차항 근사식을 사용하여 최소제곱법에서 구하고자 하는 미지변수의 증분을 미지항으로 하여 식(4)와 같이 표현할 수 있다.

$$F(x, y) = F(x_0, y_0) + \frac{\partial F}{\partial x} dx + \frac{\partial F}{\partial y} dy + \frac{\partial F}{\partial a} da + \frac{\partial F}{\partial b} db = 0 \quad (3)$$

m개의 점에 대하여 식(3)를 적용하고 매트릭스 형태의 관측방정식으로 표현하면 식(4)과 같다.

$$B \cdot V + J \cdot X = K \quad (4)$$

여기서,

B : 관측값에 관한 관측방정식 편미분값에 초기값을 대입한 계수 매트릭스

X : 구하고자 하는 미지변수의 증분 매트릭스(여기서는 da, db)

J : 미지변수에 관한 관측방정식 편미분값에 초기값을 대입한 계수 매트릭스

V : 관측값의 잔차 매트릭스

K : 관측방정식에 초기값을 대입한 값에 음의 부호를 취한 값 매트릭스

정규방정식의 해는

$$X = (J^T W e J)^{-1} J^T W e K \quad (5)$$

가 된다. 구하여진 X매트릭스의 값을 미지변수 초기값에 더하여 가는 반복법에 의하여, 구하고자 하는 미지변수를 구한다.

2.2 조건방정식에 의한 토탈최소제곱법

일반최소제곱법에서는 관측방정식을 이용하고 선형화하여 미지변수를 구하는 반면, 토탈최소제곱법에서는 조건방정식을 도입하여 미지변수를 구한다. 직선식 개발에서 토탈최소제곱법을 이용한 미지변수의 최확값 계산기법은 다음과 같다.

m개의 점에 대하여 관측방정식을 매트릭스 형태로 표현하면,

$$Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \dots \\ y_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 + v_{x_1} & 1 \\ x_2 + v_{x_2} & 1 \\ x_3 + v_{x_3} & 1 \\ \dots & \dots \\ x_m + v_{x_m} & 1 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} v_{y_1} \\ v_{y_2} \\ v_{y_3} \\ \dots \\ v_{y_m} \end{bmatrix} \quad (6)$$

식을 단순하게 하기 위해 미지변수 b 를 소거한다. 즉 첫 행의 방정식을 다른 관측방정식으로부터 동일하게 빼주면 식(7)와 같다.

$$y' = \begin{bmatrix} y_2 - y_1 \\ y_3 - y_1 \\ y_4 - y_1 \\ \dots \\ y_m - y_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_2 - x_1 \\ x_3 - x_1 \\ x_4 - x_1 \\ \dots \\ x_m - x_1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} v_{x_2} - v_{x_1} \\ v_{x_3} - v_{x_1} \\ v_{x_4} - v_{x_1} \\ \dots \\ v_{x_m} - v_{x_1} \end{bmatrix} * a - \begin{bmatrix} v_{y_2} - v_{y_1} \\ v_{y_3} - v_{y_1} \\ v_{y_4} - v_{y_1} \\ \dots \\ v_{y_m} - v_{y_1} \end{bmatrix} \quad (7)$$

위 식(7)의 매트릭스 형태를 단순하게 표현하면,

$$y' = (x' + v_x')a - v_y' \quad (8)$$

x, y 잔차 제곱의 합이 최소가 되어야 하므로,

$$(v_x')^T (v_x') + (v_y')^T (v_y') = \min \quad (9)$$

라그랑지 승수 λ 를 도입하고 조건식을 고려하여 최소제곱법을 적용한 라그랑지 함수는 식(20)과 같다.

$$L(v'_x, v'_y, \lambda, a) = (v'_x)^T(v'_x) + (v'_y)^T(v'_y) + 2\lambda(y' - x'a - v'_x a + v'_y) \quad (10)$$

라그랑지 함수의 최적값은 다음의 필요조건을 만족해야 한다.

$$\frac{\partial L}{\partial v'_x} = 0, \frac{\partial L}{\partial v'_y} = 0, \frac{\partial L}{\partial \lambda} = 0, \frac{\partial L}{\partial a} = 0 \quad (11)$$

$$a = (x'^T x')^{-1}(x'^T y' + \nu a) = N^{-1}(C + \nu a) \quad (12)$$

$$\left(\nu = \frac{(x a_i - y')^T (x a_i - y')}{(1 + a_i^2)} \right)$$

구하고자 하는 미지수 a는 $N^{-1}C$ 로부터 $N^{-1}\nu a$ 만큼 더한 일반화 된 식이다.

식 27에 미지변수의 초기값을 넣어주고 반복 연산을 하면 해에 수렴한다.

3. GLS, TLS를 이용한 좌표변환

3.1 2D 등각좌표변환

2D 상사 좌표변환(4-인자 좌표변환)은 변환 전후의 모양이 변화지 않는 '등각' 변환의 하나이다. 변환식은 식 13과 같다.

$$\begin{aligned} x &= SX \cos \theta + SY \sin \theta + Tx \\ y &= -SX \sin \theta + SY \cos \theta + Ty \end{aligned} \quad (13)$$

(S=축척변환(Scaling), θ =회전변환(Rotation), Tx, Ty =이동변환(Translation))

식 13을 간단히 표현하면, 식 14와 같다.

$$\begin{aligned} F &= ax - by + c - X = 0 \\ G &= bx + ay + d - Y = 0 \end{aligned} \quad (14)$$

3.1.1 일반최소제곱법

일반최소제곱법은 2D 등각좌표변환에서 변환 후, 변환 전 좌표가 관측치로 오차를 포함하고 있으므로 이를 고려해 주면,

$$\begin{aligned} F &= a(x + v_x) - b(y + v_y) + c - (X + v_X) = 0 \\ G &= b(x + v_x) + a(y + v_y) + d - (Y + v_Y) = 0 \end{aligned} \quad (15)$$

이 식은 관측값과 잔차에 의해 비선형 식이다. 따라서 선형화하여 반복 연산으로 풀 수 있다. 식 15를 테일러시리즈로 전개하여 표현하면, 매트릭스 형태(BV + JX = K)로 식 16과 같다.

$$\begin{vmatrix} a_0 & -b_0 & -1 & 0 \\ b_0 & a_0 & 0 & -1 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} v_x \\ v_y \\ v_X \\ v_Y \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} x & -y & 1 & 0 \\ y & x & 0 & 1 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} da \\ db \\ dc \\ dd \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} X - (a_0 x - b_0 y + c_0) \\ Y - (b_0 x + a_0 y + d_0) \end{vmatrix} \quad (16)$$

위 식의 해는 식 5 에서처럼 구할 수 있다.

3.1.2 토탈최소제곱법

토탈최소제곱법에서 2D conformal 좌표변환은 일반최소제곱법과 마찬가지로 4개의 미지수(축척, 회전 각, x축 이동량, y축 이동량)로 표현한다. 식 15에서 c, d를 소거하여 다시 쓰면,

$$\begin{aligned}
F &= a(x' + v'_x) - b(y' + v'_y) - (X' + v'_X) = 0 \\
G &= b(x' + v'_x) + a(y' + v'_y) - (Y' + v'_Y) = 0 \quad (17)
\end{aligned}$$

라그랑지 승수 λ 를 도입하고 조건식을 고려하여 최소제곱법을 적용한 라그랑지 함수는 식(18)과 같다.

$$\begin{aligned}
L(v'_x, v'_y, v'_X, v'_Y, \lambda_1, \lambda_2, a, b) = & \\
& (v'_x)^T(v'_x) + (v'_y)^T(v'_y) + (v'_X)^T(v'_X) + (v'_Y)^T(v'_Y) \\
& - 2\lambda_1 \{a(x' + v'_x) - b(y' + v'_y) - (X' + v'_X)\} \\
& - 2\lambda_2 \{b(x' + v'_x) + a(y' + v'_y) - (Y' + v'_Y)\}
\end{aligned} \quad (18)$$

라그랑지 함수의 최적값은 다음의 필요조건을 만족해야 한다.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial L}{\partial v'_x} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial v'_y} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial v'_X} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial v'_Y} = 0 \\
\frac{\partial L}{\partial a} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial b} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial \lambda_1} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial \lambda_2} = 0
\end{aligned}$$

함수의 전개는 2.2절과 동일하며 토털최소제곱법을 일반화한 식 12와 일치한다.

3.2 2D 부등각좌표변환

2차원 부등각 변환은 2차원 상사변환에서의 축척인자에서 x, y 방향에 대해 축척인자가 다르다고 가정 한 변환으로서, 비록 모양은 변하지만 변환 전 평행선은 부등각 변환 후에도 평행을 유지한다고 가정한다. 또한, 이 변환에서는 좌표계의 비직교성에 의한 각 a 가 생긴다고 가정한다. 변환식은 식 19와 같다.

$$\begin{aligned}
X &= ax + by + c \\
Y &= dx + ey + f \quad (19)
\end{aligned}$$

$(x, y) =$ 변환 전 좌표, $(X, Y) =$ 변환 후 좌표

$$\begin{aligned}
a &= S_x T_x \cos \theta + S_y T_y \sin(\theta + a), \quad b = S_x \cos \theta, \quad c = S_y \sin(\theta + a) \\
d &= S_y T_y \cos(\theta + a) - S_x T_x \sin \theta, \quad e = -S_x \sin \theta, \quad f = S_y \cos(\theta + a)
\end{aligned}$$

3.2.1 일반최소제곱법

토털최소제곱법에서 2D 부등각좌표변환은 일반최소제곱법과 마찬가지로 6개의 미지수로 표현한다. 좌표값 x, y, X, Y 는 오차를 포함하고 있으므로 식 20과 같이 쓸 수 있다.

$$\begin{aligned}
F &= a(x + v_x) + b(y + v_y) + c - (X + v_X) = 0 \\
G &= d(x + v_x) + e(y + v_y) + f - (Y + v_Y) = 0 \quad (20)
\end{aligned}$$

이 식은 관측값과 잔차에 의해 비선형 식이다. 따라서 선형화하여 식 21를 반복 연산으로 풀 수 있다.

$$\begin{vmatrix} a_0 & b_0 & -1 & 0 \\ d_0 & e_0 & 0 & -1 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} v_x \\ v_y \\ v_X \\ v_Y \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} x & y & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & x & y & 1 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} da \\ db \\ dc \\ dd \\ de \\ df \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} X - (a_0 x - b_0 y + c_0) \\ Y - (d_0 x + e_0 y + f_0) \end{vmatrix} \quad (21)$$

3.2.2 토탈최소제곱법

토탈최소제곱법에서 2D 부등각 좌표변환은 일반최소제곱법과 마찬가지로 6개의 미지수로 표현한다. 식 20에서 c, d를 소거하여 다시 쓰면,

$$\begin{aligned} F &= a(x' + v'_x) + b(y' + v'_y) - (X' + v'_X) = 0 \\ G &= d(x' + v'_x) + e(y' + v'_y) - (Y' + v'_Y) = 0 \end{aligned} \quad (22)$$

라그랑지 승수 λ 를 도입하고 조건식을 고려하여 최소제곱법을 적용한 라그랑지 함수는 식(23)과 같다.

$$\begin{aligned} L(v'_x, v'_y, v'_X, v'_Y, \lambda_1, \lambda_2, a, b, d, e) = & \\ & (v'_x)^T(v'_x) + (v'_y)^T(v'_y) + (v'_X)^T(v'_X) + (v'_Y)^T(v'_Y) \\ & - 2\lambda_1\{a(x' + v'_x) + b(y' + v'_y) - (X' + v'_X)\} \\ & - 2\lambda_2\{d(x' + v'_x) + e(y' + v'_y) - (Y' + v'_Y)\} \end{aligned} \quad (23)$$

라그랑지 함수의 최적값은 다음의 필요조건을 만족해야 한다.

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial v'_x} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial v'_y} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial v'_X} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial v'_Y} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial a} = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial b} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial d} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial e} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial \lambda_1} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial \lambda_2} = 0 \end{aligned}$$

함수의 전개는 2.2절과 동일하며 토탈최소제곱법을 일반화한 식 12와 일치한다.

4. 실험 결과

4.1 2D 등각좌표변환

① 자료 생성

자료생성은 정규분포를 따르고 표준편차를 10로 하는 난수를 발생시켰다. 생성한 자료(7점; 정규분포 ; 표준편차 10)는 표 1과 같으며 이 자료를 이용하여 GLS, TLS 2D affine 변환을 실시하였다.

표 1 좌표 생성 자료(7점)

	X	Y	x	y
1	1049340.744	50037.107	142.927	-6.364
2	1050141.134	49726.039	-24.790	72.608
3	1049347.281	50224.555	124.447	-60.967
4	1050117.195	49278.452	-22.810	145.888
5	1049887.349	49799.841	29.840	32.787
6	1048893.483	49565.871	246.385	87.336
7	1050436.433	50092.969	-95.755	-41.928

② 실험 결과

실험 결과는 표 2와 같으며 RMSE를 보면, 근사하지만 GLS가 TLS보다 0.569정도 작게 나왔으며 반복 연산 횟수는 GLS가 TLS보다 20회 적었다. (초기값 모두 0)

표 2 2D conformal 변환계수 산출 결과(7점)

	GLS	TLS	비교(GLS - TLS)
반복연산횟수	3	3	0
scale	4.570	4.687	-0.117
angle	180°34'44.79"	178°52'18.1"	1°42'26.69"
Tx	1049997.475	1050008.813	-11.337
Ty	49970.128	49965.7472	4.381
RMSE	10.5162	11.0851	-0.569

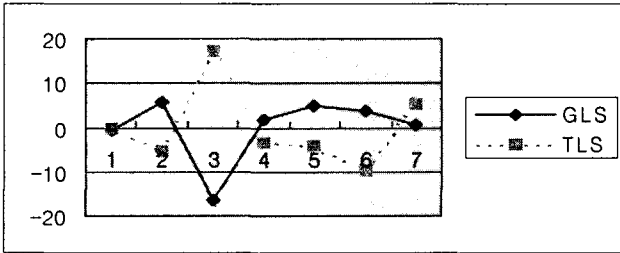


그림 1 2D conformal Vx(7점)

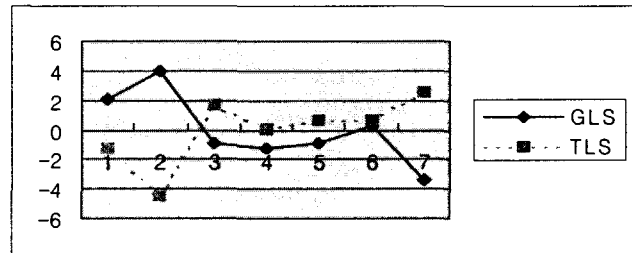


그림 1 2D conformal VY(7점)

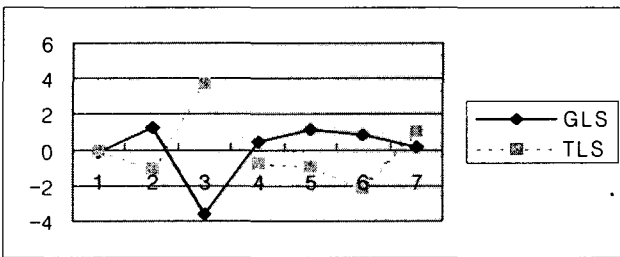


그림 3 2D conformal VX(7점)

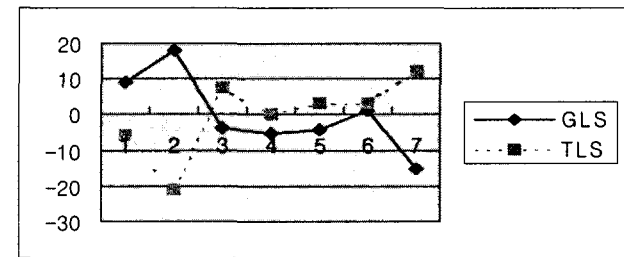


그림 4 2D conformal Vy(7점)

4.2 2D 부등각좌표변환

① 자료 생성

자료생성은 정규분포를 따르고 표준편차를 1로 하는 난수를 발생시켰다. 생성한 자료(7점;정규분포 ; 표준편차 1)는 표 3와 같으며 이 자료를 이용하여 GLS, TLS 2D affine 변환을 실시하였다.

표 3 좌표 생성 자료(7점)

	X	Y	x	y
1	308.5688	-648.2676	12.5245	2.8580
2	386.5017	-523.2341	9.7623	6.0185
3	299.6697	-534.8265	8.8341	3.7948
4	439.9090	-249.5126	0.3089	10.1367
5	389.7266	-338.0715	5.2216	7.7049
6	318.7429	-286.2893	1.2474	5.9355
7	337.5936	-387.5866	4.1851	5.7155

② 실험 결과

실험 결과는 표 4와 같으며 RMSE를 보면, 근사하지만 GLS가 TLS보다 0.014정도 작게 나왔으며 반복 연산 횟수는 GLS가 TLS보다 4회 적었다. (초기값 모두 0)

표 4 2D Affine 변환 산출 결과(7점)

	GLS	TLS	GLS-TLS
반복연산횟수	3	7	-4
scale(X)	27.365	28.922	-1.557
scale(Y)	32.723	37.288	-4.565
angle(θ)	75° 1' 19.84"	70° 41' 11.37"	4° 20' 8.47"
angle(α)	-8° 33' 31.01"	-2° 42' 35.29"	5° 50' 55.72"
Tx	13.581	12.192	1.389
Ty	1.170	-0.808	1.978
RMSE	0.815	0.829	-0.014

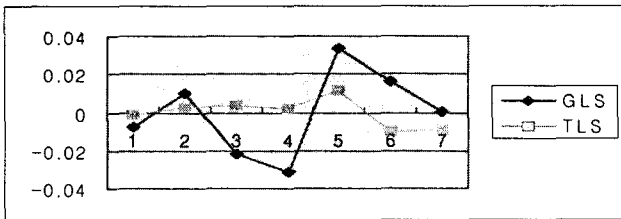


그림 5 2D affine VX(7점)

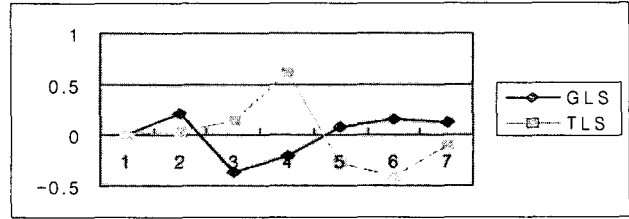


그림 6 2D affine Vy(7점)

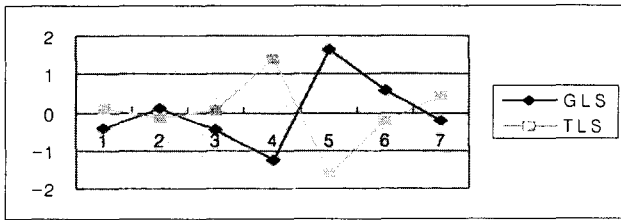


그림 7 2D affine Vx(7점)

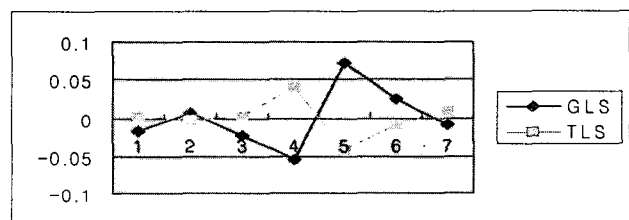


그림 8 2D affine VY(7점)

4.3 초기값에 따른 연산속도

4.3.1 2D 등각좌표변환

2D 등각변환에서 미지변수 a,b,c,d에 초기값을 다르게 주어 GLS, TLS 연산을 수행하였다. 그 결과 초기값 이상이 될수록 TLS의 연산횟수가 GLS보다 많아지는 것을 확인하였다.

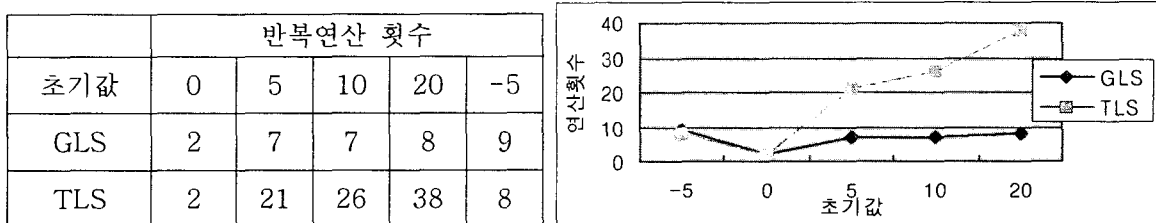


그림 9 초기값에 따른 2D 등각 좌표변환 연산횟수

4.3.2 2D 부등각좌표변환

2D 등각변환에서 미지변수 a,b,c,d,e,f에 초기값을 다르게 주어 GLS, TLS 연산을 수행하였다. 그 결과 초기값 이상이 될수록 TLS의 연산횟수가 GLS에 비해 크게 증가하는 것을 확인하였다.

	반복연산횟수			
초기값	0	10	100	-10
GLS	2	5	8	6
TLS	2	13	38	6

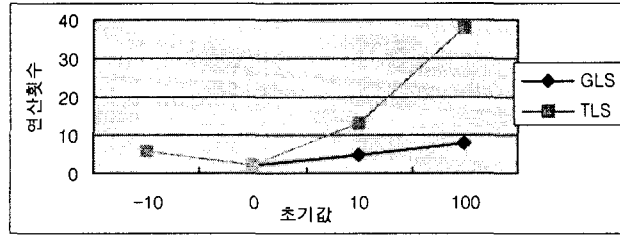


그림 10 초기값에 따른 2D 부등각 좌표변환 연산횟수

6. 결론

본 연구결과 다음과 같은 결론을 얻을 수 있다.

1. x, y, X, Y 관측값을 이용하여 좌표변환을 할 때 잔차가 관측값 모두에 각각 포함되어 있으나 최소제곱법에서는 오직 x, y 값에 잔차만을 고려하여 관측된 X, Y 값의 잔차를 규명할 수 없다. 그러나 GLS와 TLS알고리즘은 하나 이상의 관측값들을 보다 정밀하게 조정하는데 이용될 수 있다.
2. x, y 의 잔차를 모두 고려한 GLS와 TLS의 좌표변환 결과 RMSE는 근소한 차이지만 GLS가 TLS보다 더 작다. 최소제곱법의 관점에서 TLS, GLS 모두 최적의 해를 도출함을 알 수 있다.
3. 반복연산을 통해 해에 수렴하는 과정은 GLS가 TLS보다 빠르게 해에 접근한다. 특히 초기값 이상이 있을 경우 TLS는 GLS보다 더 많은 반복연산을 수행한다.
4. GLS는 TLS보다 빨리 수렴하므로 관측 자료가 많고 초기값의 추정이 어려우며 빠른 처리가 필요한 경우에는 GLS 알고리즘을 이용하는 것이 좋으며 관측 자료가 비교적 적어 초기값 추정이 쉬운 경우와 높은 정확도를 요구하는 경우에는 TLS, GLS를 상호보완적으로 사용하면 유리할 것으로 판단된다.
5. 향후 TLS알고리즘을 좌표변환 뿐 만 아니라 수평망 조정 및 EDM calibration에 적용하여 GLS결과와 비교할 것이다.

참고문헌

- Paul R. Wolf, Charles D. Ghilani, Adjustment Computations, Wiley interscience
 이임평, 최윤수, 권재현, 토털최소제곱법과 최소제곱법의 비교, 한국측량학회 추계학술발표회, pp 15~19
 Burkhard Schaffrin, TLS Theory Seminar 자료집(국립지리원, 2003, 8)
 Sabine van Huffel, Philippe Lemmerling. Total Least Squares and Errors-in-Variables Modeling, Kluwer Academic Publishers