

마할라노비스 距離의 모멘트에 對한

多項式 表現의 簡略化

(A Simplification of Polynomial Representations
for the Moments of the Mahalanobis Distances)

金秀重*, 洪再根*

(Soo Joong Kim and Jae Keun Hong)

要 約

集團內 마할라노비스 距離가 센트럴 카이-제곱 分布를 함은 잘 알려진 事實이다. 本 論文에서는 集團間 마할라노비스 距離가 논-센트럴 카이-제곱 分布를 함을 보이고, 또한 그 모멘트들을 係數들이 簡單한 循環關係를 갖는 多項式으로 簡略化 表現하여, 모멘트를 利用한 認識이나 係數推定等에 利用되기 簡便하게 하였다.

Abstract

It is investigated that Mahalanobis distances are invariant under a proper transformation and interest MDs are distributed as non-central chi-square while it is well known that intraset MDs are distributed as central chi-square. And their moments have been expressed as simple polynomials whose coefficients satisfy straightforward recursive relations.

I. 序 論

統計的으로 패턴(pattern)을 認識할 境遇 마할라노비스 距離(Mahalanobis distance)는 매우 重要한 役割을 하고 있다. 패턴벡터들이 같은 先驗確率(prior probability)을 갖는 正規分布를 하는 境遇, 이것은 最適決定函數^(1, 2)와 잘못 認識될 確率(error probability)^(1, 3)을 나타내기도 한다.

本 論文에서는 正規分布를 하는 패턴벡터들에 적절한 線形變換을 行하여 MD들이 패턴벡터의 次元과 같

은 自由度를 갖는 카이-제곱(chi-square) 分布를 이루고 있음을 보였고, 그 모멘트들을 多項式으로 簡略化 表現하여 利用이 簡便하게 하였다. 또한 係數들의 循環關係도 구하였다.

II. 마할라노비스 距離

集團 ω_1 과 ω_2 에 屬하는 n-次元의 패턴벡터들이 $N(\mathbf{m}_i, \mathbf{C}_i)$ 의 正規分布를 한다면, 그 密度函數는

$$p(\mathbf{x} | \omega_i) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \cdot |\mathbf{C}_i|^{-\frac{1}{2}} \cdot \exp\left[-\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_i)^T \mathbf{C}_i^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_i)\right]$$

이고, 다음과 같이 定義되는

$$r_i(\mathbf{x}, \mathbf{m}_i) = (\mathbf{x} - \mathbf{m}_i)^T \mathbf{C}_i^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_i), \quad \mathbf{x} \in \omega_i$$

MD는 集團內(intraset) MD이며, 이것은 각 패턴벡터들이 集團中心과 이루는 幾何學的 距離 $||\mathbf{x} - \mathbf{m}_i||$ 의, 그 集團의 크기 $|\mathbf{C}_i|$ 에 對한 比를 나타낸다.

*正會員, 慶北大學校 工科大學 電子工學科

(Dept. of Electronics Eng., Kyung Pook National Univ.)

接受日字 : 1983年 6月 10日

集團間(interset) MD는 다음의 式

$$r_i(x, m_i) = (x - m_i)^T C_i^{-1} (x - m_i), \quad x \in \omega_i, i \neq j$$

으로 定義되며, 이것은 集團 ω_i 에 屬하는 各 패턴벡터들이 集團 ω_j 의 中心과 이루는 幾何學的 距離의, ω_i 의 크기에 對한 比를 나타낸다.

주어진 패턴벡터들에 $y = P^T x$ 의 線形變換을 行하여도 變換된 패턴벡터들은 亦是 $N(\mu_i, \hat{C}_i)$ 의 正規分布를 하며, 變換後의 平均벡터 μ_i 와 共分散行列 \hat{C}_i 은 다음 과 같다.^[8]

$$\mu_i = P^T m_i, \quad \hat{C}_i = P^T C_i P$$

變換後의 마할라노비스 距離를 구해보면

$$\begin{aligned} r_i(y, \mu_i) &= (y - \mu_i)^T \hat{C}_i^{-1} (y - \mu_i) \\ &= [P^T (x - m_i)]^T [P^T C_i P]^{-1} [P^T (x - m_i)] \\ &= (x - m_i)^T C_i^{-1} (x - m_i) \\ &= r_i(x, m_i) \end{aligned}$$

이다. 즉 變換後에도 MD는 不變이다. 만일 $(C_1^{-1} C_2)$ $P = P\Lambda$, $\hat{C}_1 = P^T C_1 P = I$ 이면, $\hat{C}_2 = P^T C_2 P = \Lambda$ 이다.

즉 P 가 $C_1^{-1} C_2$ 의 型式行列(modal matrix)이고 各固有벡터의 크기(norm)를 \hat{C}_1 이 單位行列이 되게 하면, \hat{C}_2 은 $C_1^{-1} C_2$ 의 固有值들로 된 對角線行列이 된다.

이와 같은 變換을 行한 後에는 各 패턴벡터들이 $N(\mu_1, I)$ 와 $N(\mu_2, \Lambda)$ 의 正規分布를 하게 되어, 各 成分들間에는 相關關係가 없게 된다. 즉 統計的으로 獨立(statistically independent)이다.

만일 $C_1 = C_2$ 이면 P 는 $C_1 = C_2$ 의 規準化된(normalized) 型式行列이고, 變換後 \hat{C}_1 과 \hat{C}_2 이 모두 單位行列이 되어 문제는 더욱 단순해진다.

III. 集團內 MD와 모멘트

變換後 y 가 $N(\mu_1, I)$ 또는 $N(\mu_2, \Lambda)$ 의 正規分布를 하므로, $(y - \mu_1)$ 는 $N(0, I)$ 또는 $N(0, \Lambda)$ 의 正規分布를 하게 된다. 따라서 다음과 같이 주어지는 集團內 MD.

$$\begin{aligned} r_1(x, m_1) &= (y - \mu_1)^T (y - \mu_1) = \sum_{i=1}^n (y_i - \mu_{1i})^2, \quad y \in \omega_1 \\ r_2(x, m_2) &= (y - \mu_2)^T \Lambda^{-1} (y - \mu_2) \\ &= \sum_{i=1}^n (y_i - \mu_{2i})^2 / \lambda_i, \quad y \in \omega_2 \end{aligned}$$

는 自由度가 n 인 セント럴 카이-제곱(central chi-square) 分布^[5~7]를 하며^[7], 그 密度函數는

$$p[r_1(x, m_1)] = \frac{\Gamma(n-2)/2}{2^{n/2} \Gamma(n/2)} \cdot e^{-r/2}, \quad 0 \leq r < \infty$$

이고, 모멘트 發生函數^[5~7]는

$$M_r(v) = E[e^{vR}] = (1-2v)^{-n/2}$$

이다. 그리고 $r_i(x, m_i)$ 의 k次 모멘트는

$$E[r^k(x, m_i)] = M_r^{(k)}(0)$$

$$= \frac{2^k \Gamma(\frac{n}{2} + k)}{\Gamma(n/2)}$$

이다.^[8] 이것은 패턴벡터의 次元 n 만으로 表現되며, 共分散行列 또는 平均벡터와는 無關하다. 또한 이것은 n 의 k次 多項式이므로 $E[r^k(x, m_i)]$ 를

$$\begin{aligned} E[r^k(x, m_i)] &= 2^k \left(\frac{n}{2} + k - 1\right) \left(\frac{n}{2} + k - 2\right) \cdots \\ &\quad \cdots \left(\frac{n}{2} + 1\right) \cdot \frac{n}{2} \\ &= n(n+2)(n+4)\cdots(n+2k-2) \\ &= \prod_{t=0}^{k-1} a(k, t) \cdot n^t \end{aligned} \quad (1)$$

라 두면 $a(0, 0) = 1$ 이고 $a(k, t)$ 는 定理 1의 간단한 循環關係를 갖는다.

(定理1) $0 \leq t \leq k$ 이면

$$a(k, t) = a(k-1, t-1) + 2(k-1) \cdot a(k-1, t) \quad (2)$$

이고, $t < 0$ 이거나 $t > k$ 이면 $a(k, t) = 0$ 이다.

(證明) 부록 1 참조.

4次까지의 모멘트를 구하면 다음과 같다.

$$E[r(x, m_1)] = n$$

$$E[r^2(x, m_1)] = 2n + n^2$$

$$E[r^3(x, m_1)] = 8n + 6n^2 + n^3$$

$$E[r^4(x, m_1)] = 48n + 44n^2 + 12n^3 + n^4$$

IV. 集團間 MD와 모멘트

變換後 ω_1 에 屬하는 y 는 $N(\mu_1, I)$ 의 正規分布를 하므로 $(y - \mu_1)$ 는 $N(\mu_1 - \mu_2, I)$ 의 正規分布를 한다.

또한 ω_2 에 屬하는 y 는 $N(\mu_2, \Lambda)$ 의 正規分布를 하므로 $(y - \mu_1)$ 은 $N(\mu_2 - \mu_1, \Lambda)$ 의 正規分布를 한다.

따라서 다음과 같이 주어지는 集團間 MD

$$\begin{aligned} r_1(x, m_2) &= (y - \mu_2)^T (y - \mu_1) = \sum_{i=1}^n (y_i - \mu_{2i})^2, \quad y \in \omega_1 \\ r_2(x, m_1) &= (y - \mu_1)^T \Lambda^{-1} (y - \mu_1) \\ &= \sum_{i=1}^n (y_i - \mu_{1i})^2 / \lambda_i, \quad y \in \omega_2 \end{aligned}$$

는 自由度가 n 인 논-센트럴 카이-제곱(non-central chi-square) 分布^[7, 8]를 하며^[8], 그 密度函數는

$$p[r_1(x, m_2)] = e^{-q} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{q^m r^{(2m+n-2)/2} e^{-r/2}}{m! 2^{(2m+n)/2} \Gamma(\frac{2m+n}{2})}, \quad 0 \leq r < \infty$$

이다. 여기서 q 는 非中心 媒介變數(non-centrality parameter)로

$$q_1 = \frac{1}{2} (\mu_1 - \mu_2)^T \hat{C}_1^{-1} (\mu_1 - \mu_2) \quad (3)$$

이고, 모멘트 發生函數^[7, 8]는

$$M_r(v) = e^{-q} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{q^m}{m!} (1-2v)^{-(2m+n)/2}$$

이다. 이로부터 $r_1(x, m_2)$ 의 k次 모멘트를 구하기 위

하여

$$M_r^{(k)}(v) = e^{-q} \sum_{m=0}^{\infty} \left[\frac{q^m}{m!} \left(\sum_{t=0}^k b(k, t) \cdot m^t \right) \cdot (1-2v)^{-\lfloor (2m+n+2k)/2 \rfloor} \right] \quad (4)$$

라 두면 $b(0, 0) = 1$ 이고 $b(k, t)$ 는 定理 2 的 循環關係를 갖는다.

(定理2) $0 \leq t \leq k$ 이면

$$b(k, t) = 2 \cdot b(k-1, t-1) + (n+2k-2) \cdot b(k-1, t) \quad (5)$$

이고, $t < 0$ 이거나 $t > k$ 이면 $b(k, t) = 0$ 이다.

(證明) 부록 2 참조.

위의 式을 利用하여 $r_1(x, m_1)$ 의 모멘트를 구하면

$$E_1 \{ r^k(x, m_1) \} = M_r^{(k)}(0) \\ = e^{-q_1} \sum_{t=0}^k [b(k, t) \cdot \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{m^t}{m!} q_1^m \right)] \quad (6)$$

이다. 좀 더 簡略히 하기 위하여

$$\sum_{m=0}^{\infty} \frac{m^t}{m!} q_1^m = \sum_{h=0}^t c(t, h) \cdot q^h e^{q_1} \quad (7)$$

라 두면 $c(0, 0) = 1$ 이고 $c(t, h)$ 도 亦是 定理 3 的 循環關係를 갖는다.

(定理3) $0 \leq h \leq t$ 이면

$$c(t, h) = c(t-1, h-1) + h \cdot c(t-1, h) \quad (8)$$

이고, $h < 0$ 이거나 $h > t$ 이면 $c(t, h) = 0$ 이다.

(證明) 부록 3 참조.

式(7)을 式(6)에 代入하여

$$E_1 \{ r^k(x, m_1) \} = \sum_{t=h}^k b(k, t) \cdot c(t, h) q_1^h \\ = \sum_{h=0}^k d(k, h) \cdot q_1^h \quad (9)$$

이라 두면 $d(0, 0) = 1$ 이고, $d(k, h)$ 또한 定理 4 的 循環關係를 갖는다.

(定理4) $0 \leq h \leq k$ 이면

$$d(k, h) = 2 \cdot d(k-1, h-1) \\ + (2k+2h+n-2) \cdot d(k-1, h) \quad (10)$$

이다.

(證明) 부록 4 참조.

以上을 整理하면, 集團間 MD의 k 次 모멘트는 式(9)와 같이 q 의 k 次 多項式으로 簡略히 表現되며, q 는 式(3)에 나타낸 바와 같이

$$q_1 = \sum_{i=1}^n (\mu_{1i} - \mu_{2i})^2 / 2, \quad q_2 = \sum_{i=1}^n (\mu_{2i} - \mu_{1i})^2 / 2 \lambda_1$$

이다. 3次까지의 모멘트를 구하면 다음과 같다.

$$E_1 \{ r(x, m_1) \} = n + 2q_1$$

$$E_1 \{ r^2(x, m_1) \} = n(n+2) + 4(n+2)q_1 + 4q_1^2$$

$$E_1 \{ r^3(x, m_1) \} = n(n+2)(n+4) + 6(n+2)(n+4)q_1 \\ + 12(n+4)q_1^2 + 8q_1^3$$

集團 ω_1 에 屬하는 패턴벡터들이 $N(\mu_1, \Lambda)$ 의 正規分布를 하고, 集團 ω_2 에 屬하는 패턴벡터들이 $N(\mu_2, \Lambda)$ 의 正規分布를 하는 境遇, 平行移動시켜 다음과 같아 全體의 中心을 原點에 두고

$$E \{ x_i \} = P_1 E_1 \{ x_i \} + P_2 E_2 \{ x_i \} = 0$$

또한 先驗確率의 比를 다음과 같이 r 이라 두면

$$r = \frac{P_1}{P_2} = \frac{P(\omega_1)}{P(\omega_2)}$$

아래의 關係를 얻을 수 있고, 이것은 Fukunaga^[1] 가 유도한 것과 表現은 다르나 内容은 같다.

$$E \{ x_i^2 \} = r \mu_1^2 + (1+r)^{-1} (r \lambda_1 + 1)$$

$$E \{ x_i^3 \} = r(1-r) \mu_1^3 + 3r(1+r)^{-1} \mu_1 (\lambda_1 - 1)$$

$$E \{ x_i^4 \} = r(1-r+r^2) \mu_1^4 + 6r(1+r)^{-1} \mu_1^2 (\lambda_1 + r) \\ + 3(1+r)^{-1} (r \lambda_1^2 + 1)$$

$$E \{ x_i^5 \} = r \mu_1^5 \mu_2$$

$$E \{ x_i^6 \} = r(1-r) \mu_1^6 \mu_2 + r(1+r)^{-1} \mu_1 (\lambda_1 - 1)$$

여기서 x_i 는 패턴벡터 x 의 i 번째 成分이며, μ_1 와 λ_1 는 ω_1 에 屬하는 x 의 i 번째 平均值와 分散이다.

위의 關係式은, 各 모드의 共分散行列 C_1, C_2 는 알고 있으나 各 先驗確率 P_1, P_2 와 平均벡터 μ_1, μ_2 를 모르는 混合된 모드(mixed mode)인 正規分布 패턴의 媒介變數 推定(parameter estimation)에 利用될 수 있다.

VI. 結論

正規分布를 하는 패턴벡터들을 적절히 線形變換하여, 마할라노비스 距離가 카이-제곱 分布를 함을 알게 되었으며, 이들의 高次 모멘트를 다음과 같이 간단한 多項式으로 表現하였다.

$$E_1 \{ r^k(x, m_1) \} = \sum_{t=0}^k a(k, t) \cdot n^t$$

$$E_1 \{ r^k(x, m_1) \} = \sum_{h=0}^k d(k, h) \cdot q_1^h$$

또한 그 係數들의 循環關係는

$$a(k, t) = a(k-1, t-1) + 2(k-1) \cdot a(k-1, t) \\ d(k, h) = 2d(k-1, h-1)$$

$$+ (2k+2h+n-2) \cdot d(k-1, h)$$

와 같이 表現되었다.

高次 모멘트에 대한 이와 같은 간단한 表現式은 모멘트를 利用한 認識이나 係數推定에 利用되리라 생각된다.

附錄

1. 定理 1 的 證明

(證明) $r_1(x, m_1)$ 의 $(k-1)$ 次 모멘트를 式(1)과 같이 表現하면

V. 應用例

$$E_r[r^{k-1}(x, m_i)] = n(n+2)(n+4)\cdots(n+2k-4) \\ = \sum_{t=0}^{k-1} a(k-1, t) \cdot n^t$$

이므로 k 次 모멘트는

$$E_r[r^k(x, m_i)] = (n+2k-2) \sum_{t=0}^{k-1} a(k-1, t-1) \cdot n^t$$

이다. 이것을 式(1) 과 比較하면

$$\sum_{t=0}^k a(k, t) \cdot n^t = \sum_{t=1}^k a(k-1, t-1) \cdot n^t \\ + 2(k-1) \cdot \sum_{t=0}^{k-1} a(k-1, t) \cdot n^t$$

이나, $t < 0$ 이거나 $t > k$ 이면 $a(k, t) = 0$ 이므로

$$\sum_{t=0}^k a(k, t) \cdot n^t = \sum_{t=0}^k [a(k-1, t-1) \\ + 2(k-1) \cdot a(k-1, t)] \cdot n^t$$

이다. 즉 $a(k, t)$ 는 式(2)의 循環關係를 갖는다.

2. 定理 2 의 證明

(證明) $M_r^{(k-1)}(v)$ 를 式(4) 와 같이 表現하면

$$M_r^{(k-1)}(v) = e^{-q} \sum_{m=0}^{\infty} \left[\frac{q^m}{m!} \left(\sum_{t=0}^{k-1} b(k-1, t) \cdot m^t \right) \cdot (1-2v)^{-\frac{(2m+n+2k-2)}{2}} \right]$$

이고, 이것을 한번 더 微分하면

$$M_r^{(k)}(v) = e^{-q} \sum_{m=0}^{\infty} \left[\frac{q^m}{m!} \left(\sum_{t=0}^{k-1} b(k-1, t) \cdot m^t \right) \cdot (2m+n+2k-2) (1-2v)^{-\frac{(2m+n+2k)}{2}} \right]$$

이다. 이것을 式(4) 와 比較하면

$$\sum_{t=0}^k b(k, t) \cdot m^t = (2m+n+2k-2) \sum_{t=0}^{k-1} b(k-1, t) \cdot m^t \\ - 2 \sum_{t=1}^k b(k-1, t-1) \cdot m^t \\ + (n+2k-2) \cdot \sum_{t=0}^{k-1} b(k-1, t) \cdot m^t$$

이나, $t < 0$ 이거나 $t > k$ 이면 $b(k, t) = 0$ 이므로

$$\sum_{t=0}^k b(k, t) \cdot m^t = \sum_{t=0}^k [2 \cdot b(k-1, t-1) \\ + (n+2k-2) \cdot b(k-1, t)] \cdot m^t$$

이다. 즉 $b(k, t)$ 는 式(5)의 循環關係를 갖는다.

3. 定理 3 的 證明

(證明) 式(7)의 左右邊을 $S_t(q)$ 라 두면

$$S_{t-1}(q) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{m^{t-1}}{m!} q^m = \sum_{h=0}^{t-1} c(t-1, h) \cdot q^h e^q$$

이다. 兩邊을 q 에 대하여 한번 偏微分하면

$$q^{-1} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{m^t}{m!} q^m = \sum_{h=0}^{t-1} c(t-1, h) \cdot (q^h e^q + h \cdot q^{h-1} e^q)$$

$$q^{-1} \sum_{h=0}^t c(t, h) \cdot q^h e^q = \sum_{h=0}^{t-1} c(t-1, h) \cdot q^h e^q \\ + h \sum_{h=0}^{t-1} c(t-1, h) \cdot q^{h-1} e^q$$

$$\sum_{h=0}^t c(t, h) \cdot q^{h-1} = \sum_{h=1}^t c(t-1, h-1) \cdot q^{h-1} \\ + \sum_{h=0}^{t-1} h \cdot c(t-1, h) \cdot q^{h-1}$$

이나, $h < 0$ 이거나 $h > t$ 이면 $c(t, h) = 0$ 이므로

$$\sum_{h=0}^t c(t, h) \cdot q^{h-1} = \sum_{h=0}^t [c(t-1, h-1) + h \cdot c(t-1, h)] \cdot q^{h-1}$$

이다. 즉 $c(t, h)$ 는 式(8)의 循環關係를 갖는다.

4. 定理 4 的 證明

(證明) 式(7)을 式(6)에 代入하여 整理하면

$$E_r[r^k(x, m_i)] = e^{-q} \sum_{t=0}^k [b(k, t) \sum_{h=0}^t c(t, h) \cdot q^h e^q] \\ = \sum_{t=0}^k \sum_{h=0}^t b(k, t) \cdot c(t, h) \cdot q^h \\ = \sum_{h=0}^k \sum_{t=h}^k b(k, t) \cdot c(t, h) \cdot q^h$$

이다. 이것을 式(9)와 比較하고, $b(k, t)$ 와 $c(t, h)$ 的 循環關係를 代入하면

$$d(k, h) = \sum_{t=h}^k b(k, t) \cdot c(t, h) \\ = \sum_{t=h}^k [2 \cdot b(k-1, t-1) \\ + (2k+n-2) \cdot b(k-1, t)] \cdot c(t, h) \\ = 2 \sum_{t=h}^k b(k-1, t-1) \cdot [c(t-1, h-1) \\ + h \cdot c(t-1, h)] \\ + (2k+n-2) \cdot \sum_{t=h}^k b(k-1, t) \cdot c(t, h) \\ = 2 \sum_{t=h-1}^{k-1} b(k-1, t) \cdot c(t, h-1) \\ + 2h \cdot \sum_{t=h-1}^{k-1} b(k-1, t) \cdot c(t, h) \\ + (2k+n-2) \cdot \sum_{t=h}^k b(k-1, t) \cdot c(t, h)$$

이나, $h > t$ 이면 $c(t, h) = 0$ 이고, $t > k$ 이면 $b(k, t) = 0$ 이므로

$$d(k, h) = 2 \cdot d(k-1, t-1) + 2h \sum_{t=h}^{k-1} b(k-1, t) \cdot c(t, h) \\ + (2k+n-2) \sum_{t=h}^{k-1} b(k-1, t) \cdot c(t, h) \\ = 2 \cdot d(k-1, t-1) \\ + (2k+2h+n-2) \cdot d(k-1, h)$$

이다. 즉 $d(k, h)$ 는 式(10)의 循環關係를 갖는다.

參 考 文 獻

- [1] J.T. Tou and R.C. Gonzalez, *Pattern Recognition Principles*, pp.119-127, Addison-Wesley, 1974.
- [2] R.O. Duda and P.E. Hart, *Pattern Classification and Scene Analysis*, pp.22-31, John Wiley and Sons, 1973.
- [3] K. Fukunaga and T.F. Krile, "Calculation of Bayes recognition error for two multi-

- variate gaussian distributions”, *IEEE Trans. Comp.*, vol.C-18, no.3, pp.220-229, 1969.
- [4] W.B. Davenport, Jr., *Probability and Random Processes*. pp.422-428, McGraw-Hill, 1970.
- [5] A. Papoulis, *Probability, Random Variables and Stochastic Processes*. pp.153-158, and pp.250-253, McGraw-Hill, 1965.
- [6] Samuel S. Wilks, *Mathematical Statistics*. pp.183, John Wiley & Sons, 1961.
- [7] S.R. Searle, *Linear Models*. pp.47-51, John Wiley & Sons, 1970.
- [8] F.A. Graybill, *An Introduction to Linear Statistical Models*. pp.74-77, McGraw-Hill, 1961.
- [9] K. Fukunaga and T.E. Flick, “Estimation of the parameters of a gaussian mixture using the method of moments”, *IEEE Trans. on PAMI*, vol. PAMI-5, no.4, pp. 410-416, July 1983.