10 Distance Measures 距离度量

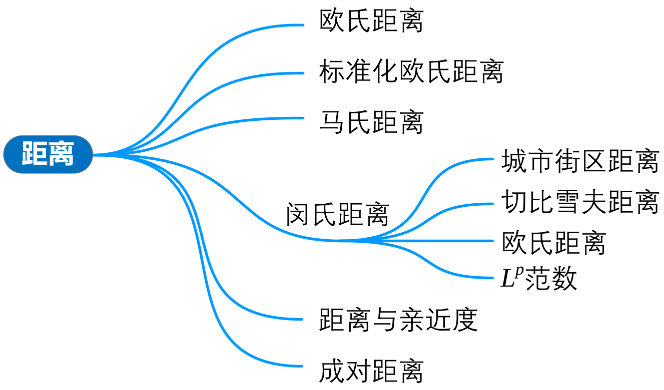
距离不仅仅是两点之间的直线线段

当一匹马需要赶超马群时，它才能超越自己。

A horse never runs so fast as when he has other horses to catch up and outpace.

—— 奥维德 (Ovid) | 古罗马诗人 | 43 BC ~ 17/18 AD

- `scipy.spatial.distance.chebyshev()` 计算切比雪夫距离
- `scipy.spatial.distance.cityblock()` 计算城市街区距离
- `scipy.spatial.distance.euclidean()` 计算欧氏距离
- `scipy.spatial.distance.mahalanobis()` 计算马氏距离
- `scipy.spatial.distance.minkowski()` 计算闵氏距离
- `scipy.spatial.distance.seuclidean()` 计算标准化欧氏距离
- `seaborn.scatterplot()` 绘制散点图
- `sklearn.datasets.load_iris()` 加载鸢尾花数据集
- `sklearn.metrics.pairwise.euclidean_distances()` 计算成对欧氏距离矩阵
- `sklearn.metrics.pairwise_distances()` 计算成对距离矩阵
- `metrics.pairwise.linear_kernel()` 计算线性核成对亲近度矩阵
- `metrics.pairwise.manhattan_distances()` 计算成对城市街区距离矩阵
- `metrics.pairwise.paired_cosine_distances(X,Q)` 计算 X 和 Q 样本数据矩阵成对余弦距离矩阵
- `metrics.pairwise.paired_euclidean_distances(X,Q)` 计算 X 和 Q 样本数据矩阵成对欧氏距离矩阵
- `metrics.pairwise.paired_manhattan_distances(X,Q)` 计算 X 和 Q 样本数据矩阵成对城市街区距离矩阵
- `metrics.pairwise.polynomial_kernel()` 计算多项式核成对亲近度矩阵
- `metrics.pairwise.rbf_kernel()` 计算 RBF 核成对亲近度矩阵
- `metrics.pairwise.sigmoid_kernel()` 计算 sigmoid 核成对亲近度矩阵


距离
欧氏距离
标准化欧氏距离
马氏距离
闵氏距离
城市街区距离
切比雪夫距离
欧氏距离
L^p范数
距离与亲近度
成对距离

10.1 各种距离度量

在讲解 k-NN 分类算法时，默认距离度量为欧几里得距离，实际应用中还有大量其他距离可供选择。

大家对距离这个概念应该非常熟悉，我们从《数学要素》第 7 章"开始就不断丰富"距离"的内涵。我们在《矩阵力量》第 3 章专门介绍了基于 L^p 范数的几种距离度量，在《统计至简》第 15 章专门讲解了马氏距离。

本章后续专门总结并探讨常用的几个距离度量。

- ◀ **欧氏距离** (Euclidean distance)
- ◀ **标准化欧氏距离** (standardized Euclidean distance)
- ◀ **马氏距离** (Mahalanobis distance, Mahal distance)
- ◀ **城市街区距离** (city block distance)
- ◀ **切比雪夫距离** (Chebyshev distance)
- ◀ **闵氏距离** (Minkowski distance)
- ◀ **余弦距离** (cosine distance)
- ◀ **相关性距离** (correlation distance)

本章最后探讨距离和亲近度的关系。

10.2 欧氏距离：最常见的距离

欧几里得距离，也称**欧氏距离** (Euclidean distance)。欧氏距离是机器学习中常用的一种距离度量方法，适用于处理连续特征的数据。其特点是简单易懂、计算效率高，但容易受到数据维度、特征尺度、特征量纲影响。

任意样本数据点 $\boldsymbol{x}$ 和查询点 $\boldsymbol{q}$ 欧氏距离定义如下：

$$d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q}) = \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}\| = \sqrt{(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q})} \tag{1}$$

其中，$\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{q}$ 为列向量。欧氏距离本质上就是 $\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}$ 的 L^2 范数。从几何视角来看，二维欧氏距离可以看做同心正圆，三维欧氏距离可以视作同心正球体，等等。

当特征数为 D 时，上式展开可以得到：

$$d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q}) = \sqrt{(x_1-q_1)^2+(x_2-q_2)^2+\dots+(x_D-q_D)^2} \tag{2}$$

特别地，当特征数量 $D=2$ 时，$\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{q}$ 两点欧氏距离定义为：

$$d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q})=\sqrt{(x_1-q_1)^2+(x_2-q_2)^2} \tag{3}$$

举个例子

如果查询点 $\boldsymbol{q}$ 有两个特征，并位于原点，即：

$$\boldsymbol{q}=\begin{bmatrix}0\\0\end{bmatrix} \tag{4}$$

如图 1 所示，三个样本点 $\boldsymbol{x}^{(1)}$、$\boldsymbol{x}^{(2)}$和 $\boldsymbol{x}^{(3)}$的位置如下：

$$\boldsymbol{x}^{(1)}=\begin{bmatrix}-5 & 0\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{x}^{(3)}=\begin{bmatrix}4 & 3\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{x}^{(3)}=\begin{bmatrix}3 & -4\end{bmatrix} \tag{5}$$

根据 (1) 可以计算得到三个样本点 $\boldsymbol{x}^{(1)}$、$\boldsymbol{x}^{(2)}$和 $\boldsymbol{x}^{(3)}$ 距离查询点 $\boldsymbol{q}$ 之间欧氏距离均为 5：

$$\begin{cases}
d_1=\sqrt{\left(\begin{bmatrix}0 & 0\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}-5 & 0\end{bmatrix}\right)\left(\begin{bmatrix}0 & 0\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}-5 & 0\end{bmatrix}\right)^{\mathrm{T}}}=\sqrt{\begin{bmatrix}5 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}5 & 0\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}}=\sqrt{25+0}=5\\
d_2=\sqrt{\left(\begin{bmatrix}0 & 0\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}4 & 3\end{bmatrix}\right)\left(\begin{bmatrix}0 & 0\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}4 & 3\end{bmatrix}\right)^{\mathrm{T}}}=\sqrt{\begin{bmatrix}-4 & -3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-4 & -3\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}}=\sqrt{16+9}=5\\
d_3=\sqrt{\left(\begin{bmatrix}0 & 0\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}3 & -4\end{bmatrix}\right)\left(\begin{bmatrix}0 & 0\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}3 & -4\end{bmatrix}\right)^{\mathrm{T}}}=\sqrt{\begin{bmatrix}-3 & 4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-3 & 4\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}}=\sqrt{9+16}=5
\end{cases} \tag{6}$$

⚠ 注意，行向量和列向量的转置关系，本章后续不再区分行、列向量。

如图 1 所示，当 d 取定值时，上式相当于以 (q_1, q_2) 为圆心的正圆。

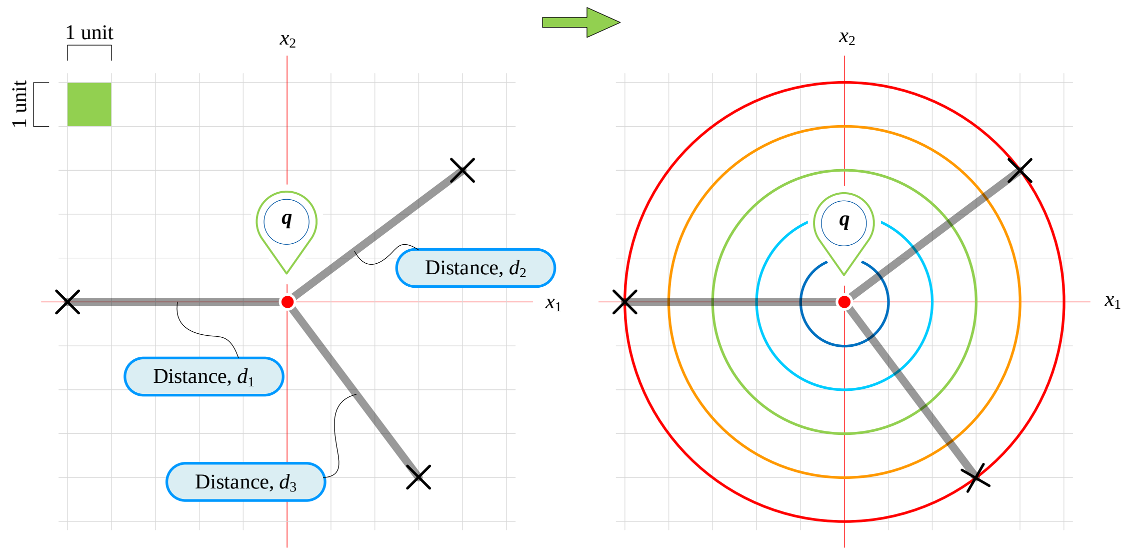


图 1. 2 特征 (D = 2) 欧几里得距离

代码 Bk6_Ch10_01.ipynb 计算两点欧氏距离。`scipy.spatial.distance.euclidean()` 为计算欧氏距离的函数。

成对距离

如图 1 所示，三个样本点 $\boldsymbol{x}^{(1)}$、$\boldsymbol{x}^{(2)}$和 $\boldsymbol{x}^{(3)}$ 之间也存在两两距离，我们管它们叫做**成对距离** (pairwise distance)。图 2 所示为平面上 12 个点的成对距离。成对距离结果一般以矩阵方式呈现。

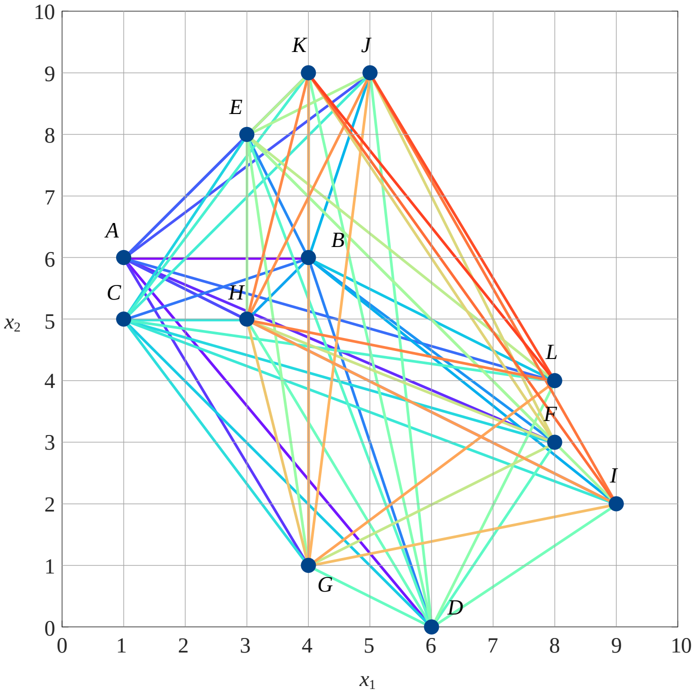


图 2. 平面上 12 个点，成对距离，来自鸢尾花书《数学要素》

代码 Bk6_Ch10_02.ipynb 计算图 1 中三个样本点之间的成对欧氏距离。本章最后一节将专门介绍成对距离。

10.3 标准化欧氏距离：考虑标准差

标准化欧氏距离 (standardized Euclidean distance) 是一种将欧氏距离进行归一化处理的方法，适用于处理特征间尺度差异较大的数据。其特点是能够消除不同特征之间的度量单位和尺度差异，从而减少距离计算结果偏差。优点是比欧氏距离更具有鲁棒性和稳定性，缺点是对于一些特征较为稀疏的数据，可能存在一些计算上的困难。

定义

标准化欧氏距离定义如下。

$$d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q})=\sqrt{(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q})} \tag{7}$$

其中，$\boldsymbol{D}$ 为对角方阵，对角线元素为标准差，运算如下：

$$\boldsymbol{D}=\operatorname{diag}\left(\operatorname{diag}(\boldsymbol{\Sigma})\right)^{\frac{1}{2}}=\operatorname{diag}\left(\operatorname{diag}\begin{bmatrix}\sigma_1^2 & \rho_{1,2}\sigma_1\sigma_2 & \cdots & \rho_{1,D}\sigma_1\sigma_D\\ \rho_{1,2}\sigma_1\sigma_2 & \sigma_2^2 & \cdots & \rho_{2,D}\sigma_2\sigma_D\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \rho_{1,D}\sigma_1\sigma_D & \rho_{2,D}\sigma_2\sigma_D & \cdots & \sigma_D^2\end{bmatrix}\right)^{\frac{1}{2}}=\begin{bmatrix}\sigma_1 & & & \\ & \sigma_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sigma_D\end{bmatrix} \tag{8}$$

回忆《矩阵力量》介绍过有关 diag() 函数的说明。如果 $\boldsymbol{A}$ 为方阵，diag($\boldsymbol{A}$) 函数提取对角线元素，结果为向量；如果 $\boldsymbol{a}$ 为向量，diag($\boldsymbol{a}$) 函数将向量 $\boldsymbol{a}$ 展开成对角方阵，方阵对角线元素为 $\boldsymbol{a}$ 向量元素。NumPy 中完成这一计算的函数为 `numpy.diag()`。

将 (8) 带入 (7) 得到：

$$\begin{aligned}d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q})&=\sqrt{\begin{bmatrix}x_1-q_1 & x_2-q_2 & \cdots & x_D-q_D\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\sigma_1^2 & & & \\ & \sigma_2^2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sigma_D^2\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}x_1-q_1 & x_2-q_2 & \cdots & x_D-q_D\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}}\\ &=\sqrt{\frac{(x_1-q_1)^2}{\sigma_1^2}+\frac{(x_2-q_2)^2}{\sigma_2^2}+\ldots+\frac{(x_D-q_D)^2}{\sigma_D^2}}=\sqrt{\sum_{j=1}^{D}\left(\frac{x_j-q_j}{\sigma_j}\right)^2}\end{aligned} \tag{9}$$

(9) 可以记做：

$$d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q})=\sqrt{z_1^2+z_2^2+\ldots+z_D^2}=\sqrt{\sum_{j=1}^{D}z_j^2} \tag{10}$$

其中，z_j 为：

$$z_j=\frac{x_j-q_j}{\sigma_j} \tag{11}$$

上式类似 Z 分数。

《统计至简》第 9 章专门介绍 Z 分数，请大家回顾。

正椭圆

对于 $D=2$，两特征的情况，标准化欧氏距离平方可以写成：

$$d^2=\frac{(x_1-q_1)^2}{\sigma_1^2}+\frac{(x_2-q_2)^2}{\sigma_2^2} \tag{12}$$

可以发现，上式代表的形状是以 (q_1, q_2) 为中心的正椭圆。观察 (12)，可以发现，标准化欧氏距离引入数据每个特征标准差，但是没有考虑特征之间的相关性。图 3 中，网格的坐标已经转化为“标准差”，而标准欧氏距离等距线为正椭圆。

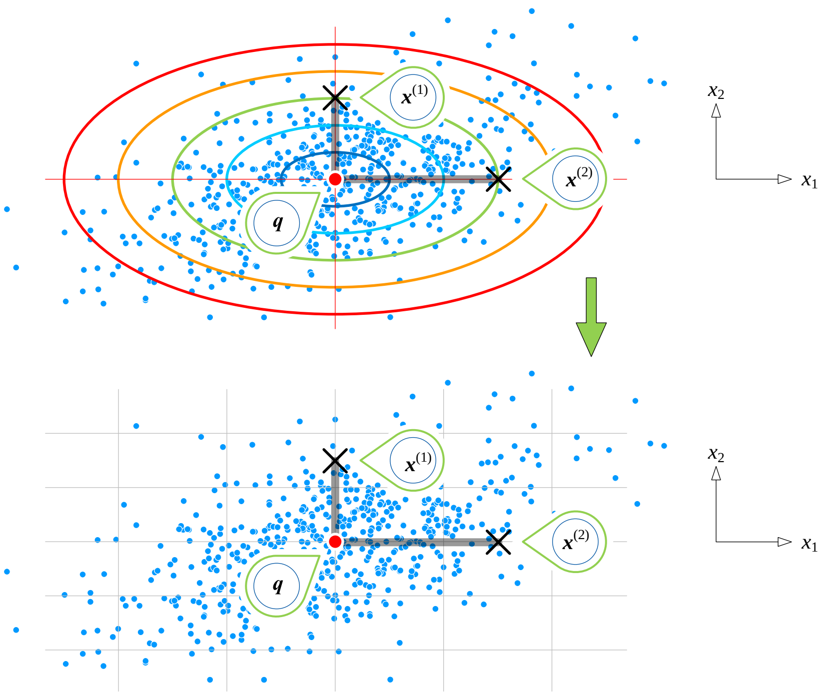


图 3. 2 特征 (D = 2) 标准化欧氏距离

几何变换视角

如图 4 所示，从几何变换角度，标准化欧氏距离相当于对 $\boldsymbol{X}$ 数据每个维度，首先**中心化** (centralize)，然后利用标准差进行**缩放** (scale)；但是，标准化欧氏距离没有旋转操作，也就是没有正交化。

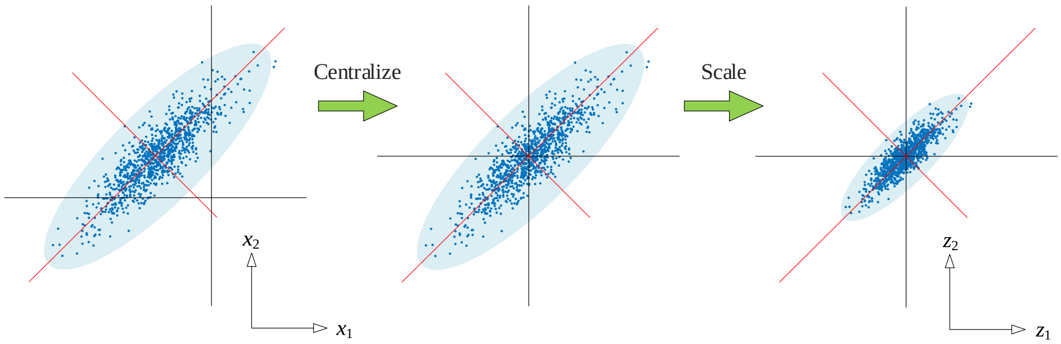


图 4. 标准化欧氏距离运算过程

计算标准化欧氏距离的函数为 `scipy.spatial.distance.seuclidean()`。代码 Bk6_Ch10_03.ipynb 计算本节标准化欧氏距离。

10.4 马氏距离：考虑标准差和相关性

本系列丛书《矩阵力量》和《统计至简》从不同角度讲过马氏距离，本节稍作回忆。

马氏距离，**马哈距离** (Mahalanobis distance, Mahal distance)，全称马哈拉诺比斯距离，是机器学习中常用的一种距离度量方法，适用于处理高维数据和特征之间存在相关性的情况。其特点是考虑到特征之间的相关性，从而在计算距离时可以更好地描述数据之间的相似程度。优点是能够提高模型的准确性，缺点是对于样本数较少的情况下容易过拟合，计算量较大，同时对数据的分布形式存在假设前提 (多元正态分布)。

马氏距离定义如下：

$$d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q})=\sqrt{(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q})} \tag{13}$$

其中，$\boldsymbol{\Sigma}$ 为协方差矩阵，$\boldsymbol{q}$ 一般是样本数据的质心。

注意，马氏距离的单位是“标准差”。比如，马氏距离计算结果为 3，应该称作 3 个标准差。

特征值分解：缩放 → 旋转 → 平移

$\boldsymbol{\Sigma}$ 谱分解得到：

$$\boldsymbol{\Sigma}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \tag{14}$$

其中，$\boldsymbol{V}$ 为正交矩阵。

$\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ 的特征值分解可以写成：

$$\boldsymbol{\Sigma}^{-1}=\left(\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right)^{-1}=\left(\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right)^{-1}\boldsymbol{\Lambda}^{-1}\boldsymbol{V}^{-1}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^{-1}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \tag{15}$$

将 (15) 代入 (13) 得到：

$$d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\mu})=\left\|\underbrace{\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{-1}{2}}}_{\text{Scale}}\underbrace{\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}}_{\text{Rotate}}\underbrace{\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}\right)}_{\text{Centralize}}\right\| \tag{16}$$

其中，$\boldsymbol{\mu}$ 列向量完成**中心化** (centralize)，$\boldsymbol{V}$ 矩阵完成**旋转** (rotate)，$\boldsymbol{\Lambda}$ 矩阵完成**缩放** (scale)。

旋转椭圆

如图 5 所示，当 $D = 2$ 时，马氏距离的等距线为旋转椭圆。

大家如果对这部分内容感到陌生，请回顾《矩阵力量》第 20 章、《统计至简》第 23 章。

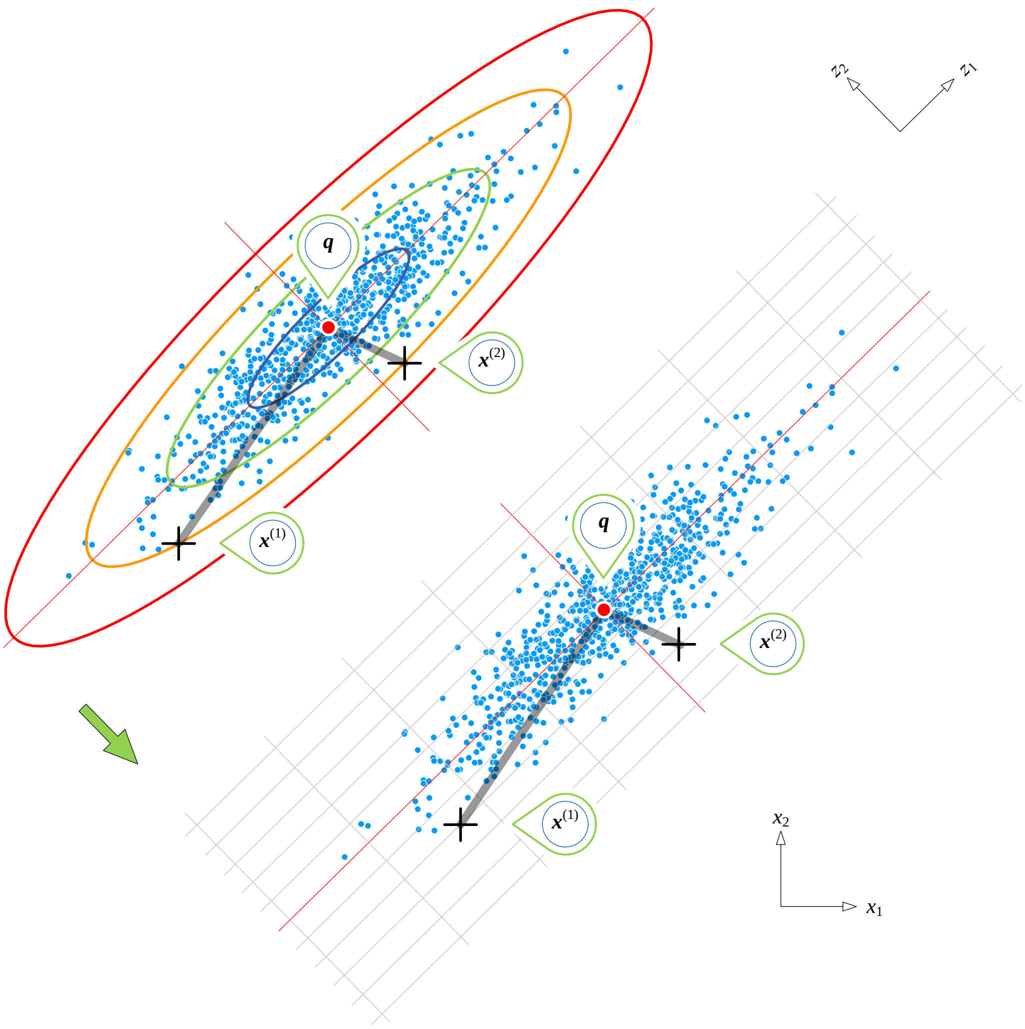


图 5. 2 特征 (D = 2) 马氏距离

代码 Bk6_Ch10_04.ipynb 计算图 5 两个点的马氏距离。

举例

下面，我们用具体数字举例讲解如何计算马氏距离。

给定质心 $\boldsymbol{\mu} = [0, 0]^{\mathrm{T}}$。两个样本点的坐标分别为。

$$\boldsymbol{x}^{(1)} = \begin{bmatrix} -3.5 & -4 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}, \quad \boldsymbol{x}^{(2)} = \begin{bmatrix} 2.75 & -1.5 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{17}$$

计算得到 $\boldsymbol{x}^{(1)}$和 $\boldsymbol{x}^{(2)}$距离 $\boldsymbol{\mu}$ 之间欧氏距离 (L^2 范数) 分别为 5.32 和 3.13。

假设方差协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 取值如下。

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \tag{18}$$

观察如上矩阵，可以发现 x_1 和 x_2 特征各自的方差均为 2，两者协方差为 1；计算得到 x_1 和 x_2 特征相关性为 0.5。根据 $\boldsymbol{\Sigma}$ 计算 $\boldsymbol{x}^{(1)}$和 $\boldsymbol{x}^{(2)}$距离 $\boldsymbol{\mu}$ 之间马氏距离为。

$$\begin{aligned} d_1 &= \sqrt{\left(\begin{bmatrix}-3.5 & -4\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}0 & 0\end{bmatrix}\right)\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}^{-1}\left(\begin{bmatrix}-3.5 & -4\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}0 & 0\end{bmatrix}\right)^{\mathrm{T}}} \\ &= \sqrt{\begin{bmatrix}-3.5 & -4\end{bmatrix} \cdot \frac{1}{3} \cdot \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix}-3.5 & -4\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}} = 3.08 \\ d_2 &= \sqrt{\left(\begin{bmatrix}2.75 & -1.5\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}0 & 0\end{bmatrix}\right)\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}^{-1}\left(\begin{bmatrix}2.75 & -1.5\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}0 & 0\end{bmatrix}\right)^{\mathrm{T}}} \\ &= \sqrt{\begin{bmatrix}2.75 & -1.5\end{bmatrix} \cdot \frac{1}{3} \cdot \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix}2.75 & -1.5\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}} = 3.05 \end{aligned} \tag{19}$$

可以发现，$\boldsymbol{x}^{(1)}$和 $\boldsymbol{x}^{(2)}$ 和 $\boldsymbol{\mu}$ 之间马氏距离非常接近。

10.5 城市街区距离：L^1范数

城市街区距离 (city block distance)，也称**曼哈顿距离** (Manhattan distance)，和欧氏距离本质上都是 L^p 范数。请大家注意区别两者等高线。

城市街区距离具体定义如下：

$$d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{q}) = \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{q}\|_1 = \sum_{j=1}^{D} |x_j - q_j| \tag{20}$$

其中，j 代表特征序号。

城市街区距离就是我们在《矩阵力量》第 3 章中介绍的 L^1 范数。

将 (20) 展开得到下式：

$$d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{q}) = |x_1 - q_1| + |x_2 - q_2| + \ldots + |x_D - q_D| \tag{21}$$

特别地，当 $D = 2$ 时，城市街区距离为：

$$d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{q}) = |x_1 - q_1| + |x_2 - q_2| \tag{22}$$

旋转正方形

如图 6 所示，城市街区距离的等距线为旋转正方形。图中，$\boldsymbol{x}^{(1)}$、$\boldsymbol{x}^{(2)}$和 $\boldsymbol{x}^{(3)}$ 和 $\boldsymbol{q}$ 欧氏距离均为 5，但是城市街区距离分别为 5、7 和 7。

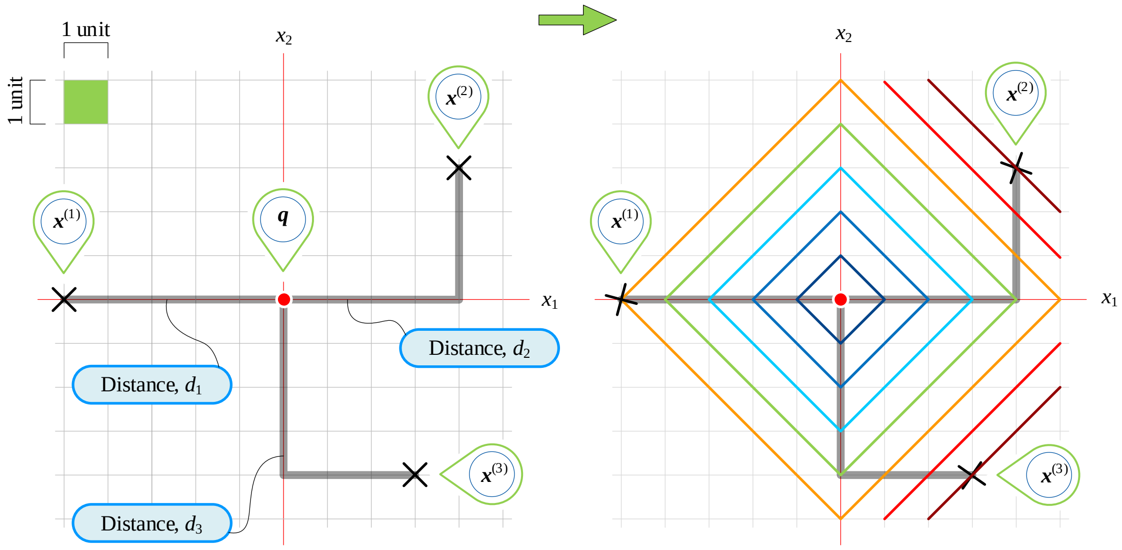


图 6. 2 特征 ($D = 2$) 城市街区距离

代码 Bk6_Ch10_05.ipynb 给出两种方法计算得到图 6 所示城市街区距离。

10.6 切比雪夫距离：L^{∞}范数

切比雪夫距离 (Chebyshev distance)，具体如下：

$$d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q}) = \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}\|_{\infty} = \max_{j}\left\{|x_j - q_j|\right\} \tag{23}$$

切比雪夫距离就是我们在《矩阵力量》第 3 章中介绍的 L^{∞}范数。

将 (23) 展开得到下式：

$$d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q}) = \max\left\{|x_1 - q_1|,\ \ |x_2 - q_2|,\ \ \dots,\ \ |x_D - q_D|\right\} \tag{24}$$

特别地，当 $D = 2$ 时，切比雪夫距离为：

$$d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q}) = \max\left\{|x_1 - q_1|,\ \ |x_2 - q_2|\right\} \tag{25}$$

正方形

如图 7 所示，切比雪夫距离等距线为正方形。前文提到，$\boldsymbol{x}^{(1)}$、$\boldsymbol{x}^{(2)}$和 $\boldsymbol{x}^{(3)}$ 和 $\boldsymbol{q}$ 欧氏距离相同，但是切比雪夫距离分别为 5、4 和 4。

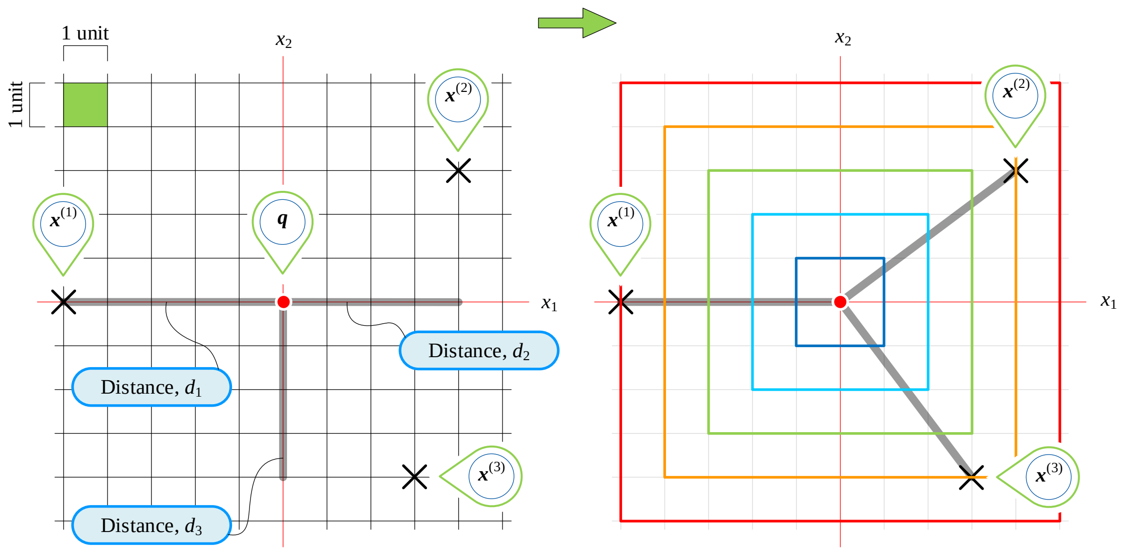


图 7. 2 特征 (D = 2) 切比雪夫距离

代码 Bk6_Ch10_06.ipynb 计算图 7 所示切比雪夫距离。

10.7 闵氏距离：L^p 范数

闵氏距离 (Minkowski distance) 类似 L^p 范数，对应定义如下：

$$d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q}) = \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}\|_p = \left(\sum_{j=1}^{D} |x_j - q_j|^p\right)^{1/p} \tag{26}$$

注意，$p \geqslant 1$ 时上式才叫向量范数。

计算闵氏距离的函数为 `scipy.spatial.distance.minkowski()`。

图 8 所示为 p 取不同值时，闵氏距离等距线图。特别地，p = 1 时，闵氏距离为城市街区距离；p = 2 时，闵氏距离为欧氏距离；$p \to \infty$ 时，闵氏距离为切比雪夫距离。

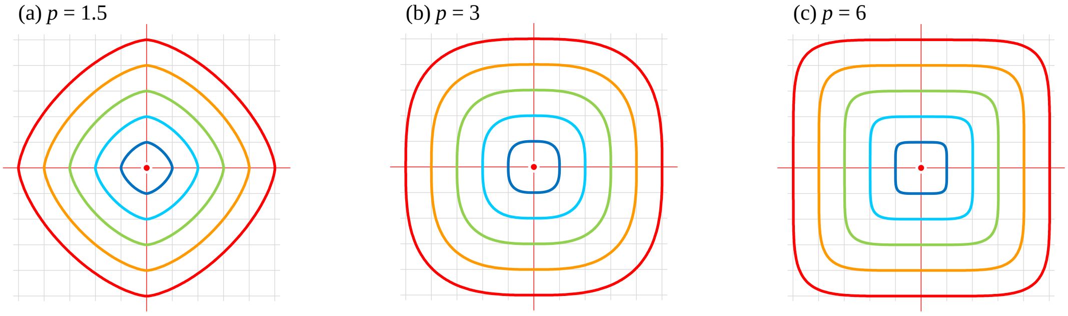


图 8. 闵氏距离 (D = 2)，p 取不同值

10.8 距离与亲近

本节介绍和距离相反的度量——**亲近度** (affinity)。两个样本数据距离越远，两者亲近度越低；而当它们距离越近，亲近度则越高。亲近度，也称**相似度** (similarity)。

余弦相似度

《矩阵力量》第 2 章讲过，**余弦相似度** (cosine similarity) 用向量夹角的余弦值度量样本数据的相似性。$\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{q}$ 两个向量的余弦相似度具体定义如下：

$$k(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q})=\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q}}{\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{q}\|}=\frac{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{q}}{\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{q}\|} \tag{27}$$

如图 9 所示，如果两个向量方向相同，则夹角 θ 余弦值 $\cos(\theta)$ 为 1；如果，两个向量方向完全相反，夹角 θ 余弦值 $\cos(\theta)$ 为 −1。因此余弦相似度取值范围在 [−1, +1] 之间。

⚠ 注意，余弦相似度和向量模无关，仅仅与两个向量夹角有关。

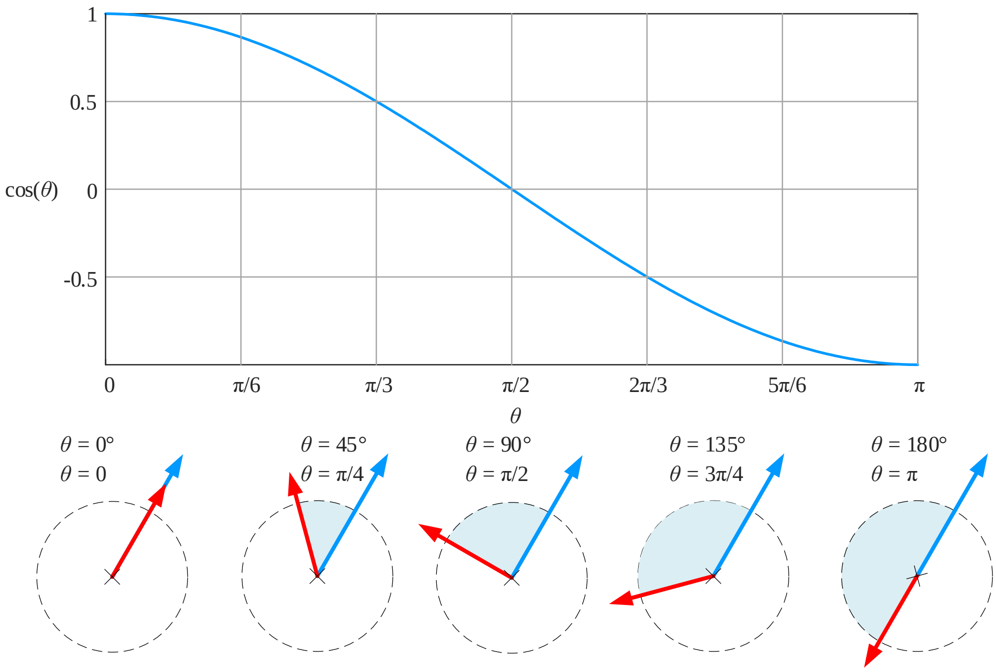


图 9. 余弦相似度

举个例子

给定如下两个向量具体值：

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} 8 & 2 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}, \quad \boldsymbol{q} = \begin{bmatrix} 7 & 9 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{28}$$

将 (28) 代入 (27) 得到：

$$k(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q}) = \frac{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{q}}{\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{q}\|} = \frac{8\times 7 + 2\times 9}{\sqrt{8^2+2^2}\times\sqrt{7^2+9^2}} = \frac{74}{\sqrt{68}\times\sqrt{130}} = 0.7871 \tag{29}$$

代码 Bk6_Ch10_07.ipynb 得到和 (29) 一致结果。

余弦距离

余弦距离 (cosine distance) 的定义如下：

$$d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q}) = 1 - k(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q}) = 1 - \frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q}}{\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{q}\|} = 1 - \frac{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{q}}{\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{q}\|} \tag{30}$$

余弦相似度的取值范围 [−1, +1] 之间，因此余弦距离的取值范围为 [0, 2]。

Bk6_Ch10_08.ipynb 计算 (28) 中两个向量的余弦距离，结果为 0.2129。也可以采用 `scipy.spatial.distance.pdist(X, 'cosine')` 函数计算余弦距离。

相关系数相似度

相关系数相似度 (correlation similarity) 定义如下：

$$k(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q}) = \frac{(\boldsymbol{x}-\bar{x})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q}-\bar{q})}{\|\boldsymbol{x}-\bar{x}\|\|\boldsymbol{q}-\bar{q}\|} = \frac{(\boldsymbol{x}-\bar{x})\cdot(\boldsymbol{q}-\bar{q})}{\|\boldsymbol{x}-\bar{x}\|\|\boldsymbol{q}-\bar{q}\|} \tag{31}$$

其中，$\bar{x}$ 为列向量 $\boldsymbol{x}$ 元素均值；$\bar{q}$ 为列向量 $\boldsymbol{q}$ 元素均值。

观察 (31)，发现相关系数相似度类似余弦相似度；稍有不同的是，相关系数相似度需要“中心化”向量。

还是以 (28) 为例，计算 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{q}$ 两个向量的相关系数相似度。将 (28) 代入 (31) 可以得到：

$$\begin{aligned} k(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q}) &= \frac{\left(\begin{bmatrix}8 & 2\end{bmatrix}^{\mathrm{T}} - \frac{8+2}{2}\right)\cdot\left(\begin{bmatrix}7 & 9\end{bmatrix}^{\mathrm{T}} - \frac{7+9}{2}\right)}{\|\boldsymbol{x}-\bar{\boldsymbol{x}}\|\|\boldsymbol{q}-\bar{\boldsymbol{q}}\|} \\ &= \frac{\begin{bmatrix}3 & -3\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}\cdot\begin{bmatrix}-1 & 1\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}}{\left\|\begin{bmatrix}3 & -3\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}\right\|\left\|\begin{bmatrix}-1 & 1\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}\right\|} = \frac{-6}{6} = -1 \end{aligned} \tag{32}$$

代码 Bk6_Ch10_09.ipynb 计算得到两个向量的相关系数距离为 2。也可以采用 `scipy.spatial.distance.pdist(X, 'correlation')` 函数计算相关系数距离。

核函数亲近度

不考虑常数项，**线性核** (linear kernel) 亲近度定义如下：

$$\kappa(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q}) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q} = \boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{q} \tag{33}$$

对比 (27) 和 (33)，(27) 分母上 $\|\boldsymbol{x}\|$ 和 $\|\boldsymbol{q}\|$ 分别对 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{q}$ 归一化。

`sklearn.metrics.pairwise.linear_kernel` 为 scikit-learn 工具箱中计算线性核亲近度函数。

将 (28) 代入 (33)，得到线性核亲近度为：

$$\kappa(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q}) = 8\times 7 + 2\times 9 = 74 \tag{34}$$

多项式核 (polynomial kernel) 亲近度定义如下：

$$\kappa(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q}) = \left(\gamma \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q} + r\right)^{d} = \left(\gamma \boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{q} + r\right)^{d} \tag{35}$$

其中，d 为多项式核次数，γ 为系数，r 为常数。

多项式核亲近度函数为 `sklearn.metrics.pairwise.polynomial_kernel`。

Sigmoid 核 (sigmoid kernel) 亲近度定义如下：

$$\kappa(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q}) = \tanh\left(\gamma \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q} + r\right) = \tanh\left(\gamma \boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{q} + r\right) \tag{36}$$

Sigmoid 核亲近度函数为 `sklearn.metrics.pairwise.sigmoid_kernel`。

最常见的莫过于，**高斯核** (Gaussian kernel) 亲近度，即**径向基核函数** (radial basis function kernel, RBF kernel)：

$$\kappa(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q}) = \exp\left(-\gamma \left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}\right\|^{2}\right) \tag{37}$$

(37) 中 $\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}\right\|^{2}$ 为欧氏距离的平方，(37) 也可以写作：

$$\kappa(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q}) = \exp\left(-\gamma d^{2}\right) \tag{38}$$

其中，d 为欧氏距离 $\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}\right\|$。高斯核亲近度取值范围为 (0, 1]；距离值越小，亲近度越高。高斯核亲近度函数为 `sklearn.metrics.pairwise.rbf_kernel`。

图 10 所示为，γ 取不同值时，高斯核亲近度随着欧氏距离 d 变化。聚类算法经常采用高斯核亲近度。

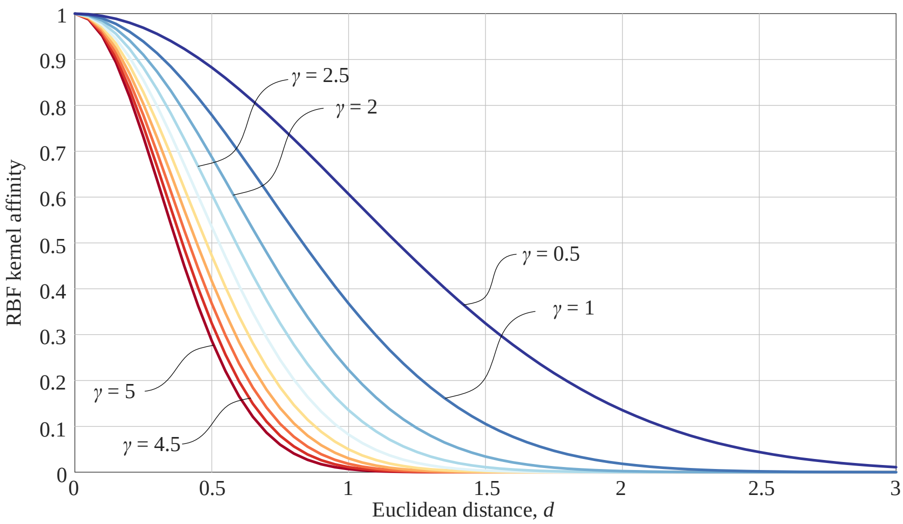


图 10. 高斯核亲近度随欧氏距离变化

从“距离 → 亲近度”转换角度来看，多元高斯分布分子中高斯函数完成的就是马氏距离 d 到概率密度 (亲近度) 的转化：

$$f_{\chi}(\boldsymbol{x})=\frac{\exp\left(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})\right)}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}|\boldsymbol{\Sigma}|^{\frac{1}{2}}}=\frac{\exp\left(-\frac{1}{2}d^{2}\right)}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}|\boldsymbol{\Sigma}|^{\frac{1}{2}}} \tag{39}$$

拉普拉斯核 (Laplacian kernel) 亲近度，定义如下：

$$\kappa(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q})=\exp\left(-\gamma\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}\|_{1}\right) \tag{40}$$

其中，$\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}\|_1$ 为城市街区距离。

图 11 所示为，γ 取不同值时，拉普拉斯核亲近度随着城市街区距离 d 变化。拉普拉斯核亲近度对应函数为 `sklearn.metrics.pairwise.laplacian_kernel`。

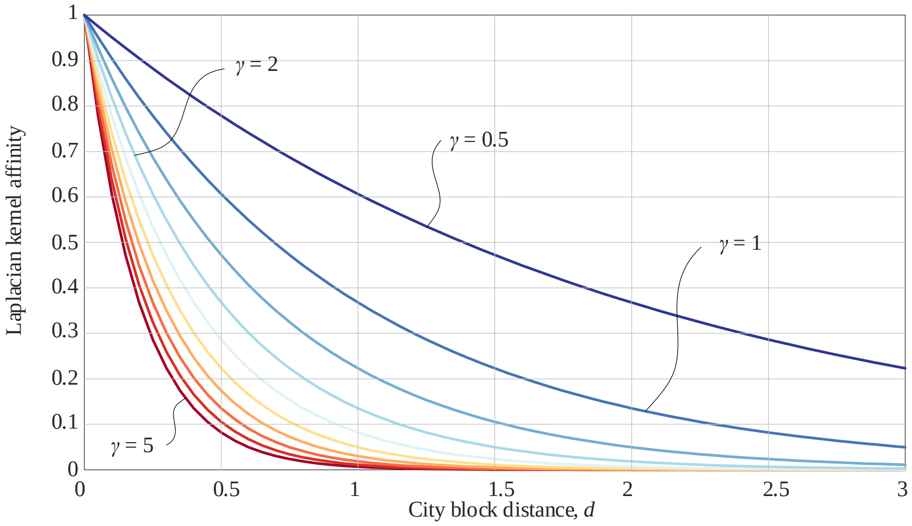


图 11. 拉普拉斯核亲近度随距离变化

10.9 成对距离、成对亲近度

《矩阵力量》反复强调，样本数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 每一列代表一个特征，而每一行代表一个样本数据点，比如：

$$\boldsymbol{X}_{n\times D}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}^{(1)}\\ \boldsymbol{x}^{(2)}\\ \vdots\\ \boldsymbol{x}^{(n)}\end{bmatrix} \tag{41}$$

本书中，$\boldsymbol{x}^{(i)}$ 有些时候被当做是列向量，此时 $\boldsymbol{X}$ 为：

$$\boldsymbol{X}_{n\times D}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}^{(1)\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{x}^{(2)\mathrm{T}}\\ \vdots\\ \boldsymbol{x}^{(n)\mathrm{T}}\end{bmatrix} \tag{42}$$

$\boldsymbol{X}$ 样本点之间距离构成的**成对距离矩阵** (pairwise distance matrix) 形式如下：

$$\boldsymbol{D}_{n\times n}=\begin{bmatrix} 0 & d_{1,2} & d_{1,3} & \cdots & d_{1,n} \\ d_{2,1} & 0 & d_{2,3} & \cdots & d_{2,n} \\ d_{3,1} & d_{3,2} & 0 & \cdots & d_{3,n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{n,1} & d_{n,2} & d_{n,3} & \cdots & 0 \end{bmatrix} \tag{43}$$

每个样本数据点和自身的距离为 0，因此 (43) 主对角线为 0。很显然矩阵 $\boldsymbol{D}$ 为对称矩阵，即 $d_{i,j}$ 和 $d_{j,i}$ 相等。

图 12 给定 12 个样本数据点坐标点。

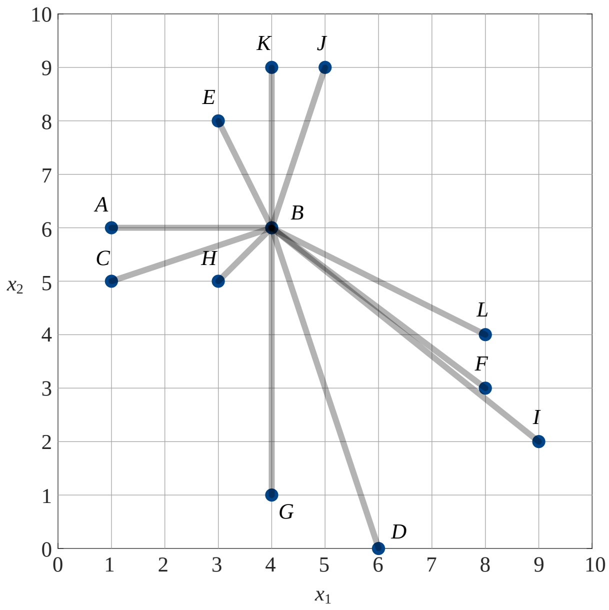


图 12. 样本数据散点图和成对距离

利用 sklearn.metrics.pairwise.euclidean_distances，我们可以计算图 12 数据点的成对欧氏距离矩阵。图 13 所示为欧氏距离矩阵数据构造的热图。

实际上，我们关心的成对距离个数为：

$$C_n^2=\frac{n(n-1)}{2} \tag{44}$$

也就是说，(43) 中不含对角线的下三角矩阵包含的信息足够使用。

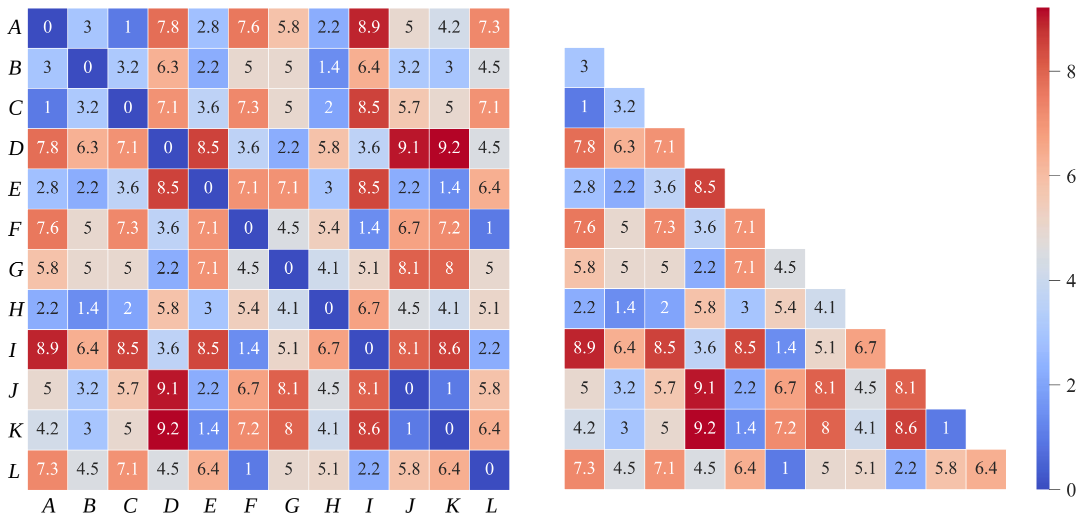


图 13. 样本数据成对距离矩阵热图

表 1 总结计算成对距离、亲近度矩阵常用函数。

表 1. 计算成对距离/亲近度矩阵常见函数

函数	描述
`metrics.pairwise.cosine_similarity()`	计算余弦相似度成对矩阵
`metrics.pairwise.cosine_distances()`	计算成对相似性距离矩阵
`metrics.pairwise.euclidean_distances()`	计算成对欧氏距离矩阵
`metrics.pairwise.laplacian_kernel()`	计算拉普拉斯核成对亲近度矩阵
`metrics.pairwise.linear_kernel()`	计算线性核成对亲近度矩阵
`metrics.pairwise.manhattan_distances()`	计算成对城市街区距离矩阵
`metrics.pairwise.polynomial_kernel()`	计算多项式核成对亲近度矩阵
`metrics.pairwise.rbf_kernel()`	计算 RBF 核成对亲近度矩阵
`metrics.pairwise.sigmoid_kernel()`	计算 sigmoid 核成对亲近度矩阵
`metrics.pairwise.paired_euclidean_distances(X,Q)`	计算 X 和 Q 样本数据矩阵成对欧氏距离矩阵
`metrics.pairwise.paired_manhattan_distances(X,Q)`	计算 X 和 Q 样本数据矩阵成对城市街区距离矩阵
`metrics.pairwise.paired_cosine_distances(X,Q)`	计算 X 和 Q 样本数据矩阵成对余弦距离矩阵

代码 Bk6_Ch10_10.ipynb 可以绘制图 12、图 13。

树形图

图 13 数据矩阵是很多机器学习算法的起点；看似杂乱无章的图 13，实际上隐含很多重要信息。下面介绍**树形图** (dendrogram)，让大家领略成对距离/亲近度矩阵的力量。

下载 12 只股票历史股价，初值归一走势如图 14 所示。计算日对数回报率，然后估算相关系数矩阵，如图 15 热图所示。相关系数相当于亲近度，相关系数越高，说明股票涨跌趋势越相似。利用树形图，我们可以清楚看到各种股票之间的关联。

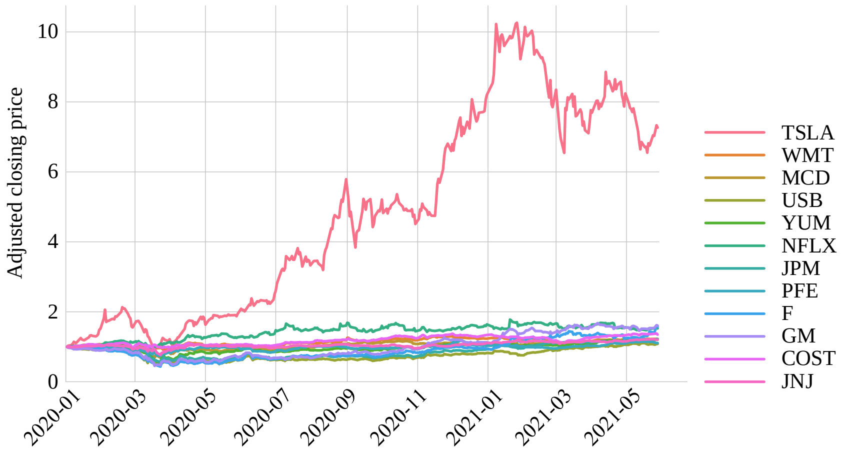


图 14. 12 只股票股价水平，初始股价归一化

PFE 和 JNJ 同属医疗，WMT 和 COST 同属零售，F 和 GM 同属汽车，USB 和 JPM 同属金融，MCD 和 YUM 同属餐饮；因此，它们之间相关性高并不足为奇。但是，本应该离汽车更近的 TSLA，却展现出和 NFLX 更高的相似性。

图 16 给出的树形图，直观地表达样本数据之间的距离/亲密度关系。树形图纵坐标高度表达不同数据之间的距离。

USB 和 JPM 之间相关性系数最高，因此 USB 和 JPM 距离最近，所以在树形图中首先将这两个节点相连，形成一个新的节点。然后，MCD 和 YUM 形成一个节点，F 和 GM 形成一个节点 …依据这种方式，树形自下而上不断聚拢。有关树形图的原理，本书将在层次聚类一章中讲解。

图 16 树形图将股票按照相似度重新排列顺序。图 16 热图发生有意思的变化，热图中出现一个个色彩相近“方块”。每一个“方块”实际上代表着一类相似的数据点。因此，树形图很好揭示股票之间的相似性关系，这便是**聚类** (clustering) 算法的一种思路。

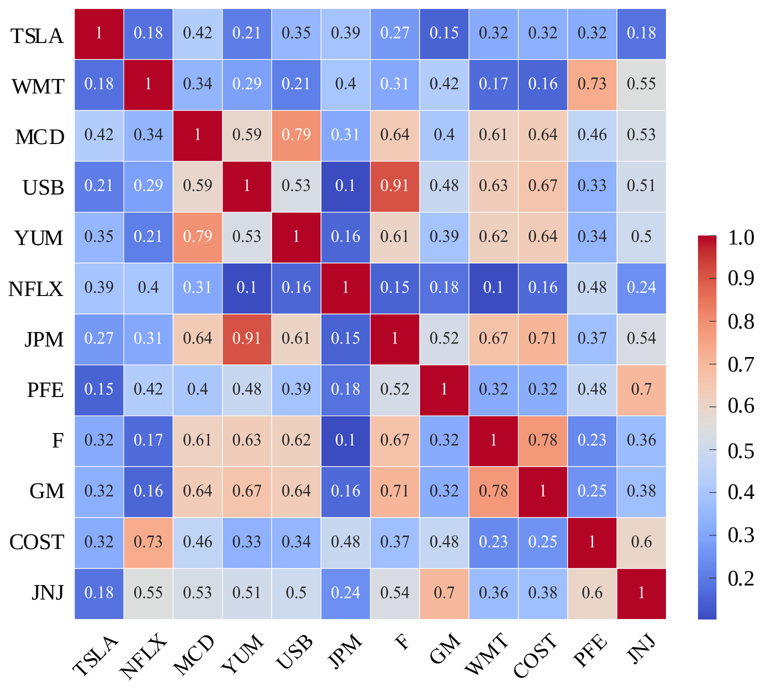


图 15. 12 只股票相关性热图

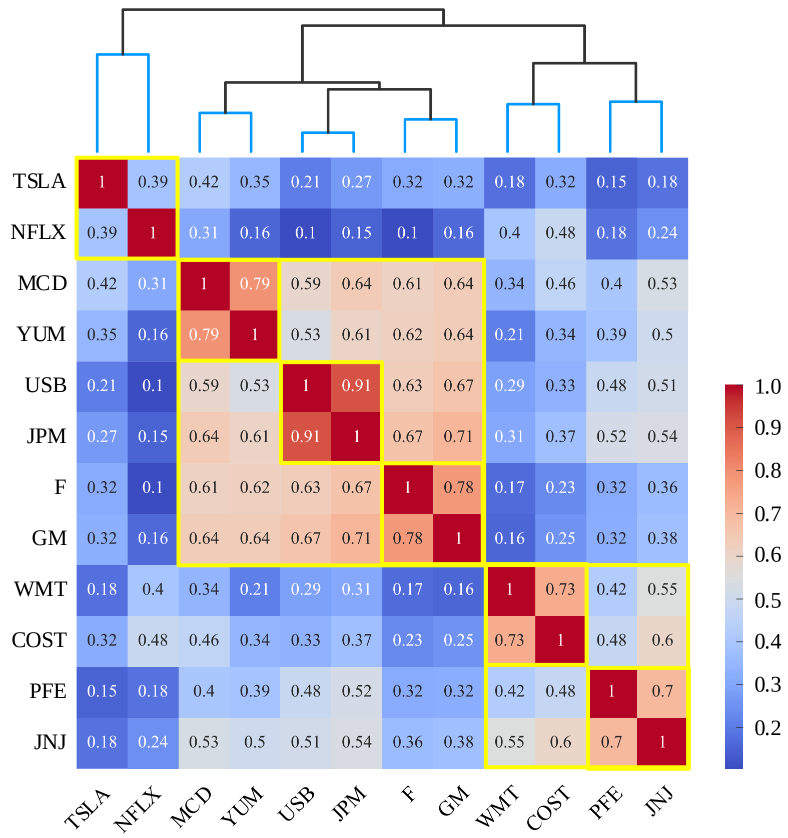


图 16. 根据树形图重组相关性热图

代码 Bk6_Ch10_11.ipynb 绘制图 14、图 15 和图 16。

在机器学习中，距离度量是衡量样本之间相似性或差异性的重要指标。在选择距离度量时，需要根据具体问题的性质和数据分布的特点来权衡各种度量的优劣，选择最适合任务的距离度量。

欧氏距离直观且易于理解，计算简单，但是没有考虑特征尺度，也没有考虑数据分布。标准化欧氏距离调整了尺度和单位差异。马氏距离考虑了数据的协方差结构，但是运算成本相对较高。欧氏距离、城市街区距离、切比雪夫距离都是特殊的闵氏距离。