

23

Mahalanobis Distance

马氏距离

一种考虑数据分布的距离度量



耐心，坚持；今天的苦，就是明天的甜。

Be patient and tough; someday this pain will be useful to you.

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



- ◀ `numpy.linalg.eig()` 特征值分解
- ◀ `scipy.stats.distributions.chi2.cdf()` 卡方分布的 CDF
- ◀ `scipy.stats.distributions.chi2.ppf()` 卡方分布的百分点函数 PPF
- ◀ `seaborn.pairplot()` 成对散点图
- ◀ `seaborn.scatterplot()` 绘制散点图
- ◀ `sklearn.covariance.EmpiricalCovariance()` 估算协方差的对象，可以用来计算马氏距离



本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

23.1 马氏距离：考虑数据分布的距离度量

本系列丛书的读者对马氏距离应该完全不陌生，本章将系统地讲解马氏距离及其应用。

定义

马氏距离 (Mahalanobis distance, Mahal distance)，也称**马哈距离**，具体定义如下：

$$d = \sqrt{(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})} \quad (1)$$

其中， $\boldsymbol{\Sigma}$ 为样本数据 \mathbf{X} 方差协方差矩阵， $\boldsymbol{\mu}$ 为 \mathbf{X} 的质心。注意，马氏距离的单位为标准差。

从几何来讲， d 为定值时，(1) 为质心位于 $\boldsymbol{\mu}$ 的超椭圆 (hyper-ellipse)。

平移 → 旋转 → 缩放

对 $\boldsymbol{\Sigma}$ 特征值分解得到：

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{V} \mathbf{\Lambda} \mathbf{V}^T \quad (2)$$

利用 (2) 获得 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ 的特征值分解：

$$\boldsymbol{\Sigma}^{-1} = \mathbf{V} \mathbf{\Lambda}^{-1} \mathbf{V}^T \quad (3)$$

将 (3) 代入 (1) 整理得到：

$$d = \left\| \begin{matrix} \mathbf{\Lambda}^{-\frac{1}{2}} & \mathbf{V}^T \\ \text{Scale} & \text{Rotate} \\ \text{Centralize} & \end{matrix} \begin{pmatrix} \mathbf{x} - \boldsymbol{\mu} \end{pmatrix} \right\| \quad (4)$$

其中， $\boldsymbol{\mu}$ 完成**中心化** (centralize)， \mathbf{V} 矩阵完成**旋转** (rotate)， $\mathbf{\Lambda}^{-\frac{1}{2}}$ 矩阵完成**缩放** (scale)。整个几何变换过程如图 1 所示。对这部分内容感到陌生的读者，请参考本书第 11 章。大家如果忘记特征值分解相关内容，请回顾《矩阵力量》第 13、14 章。

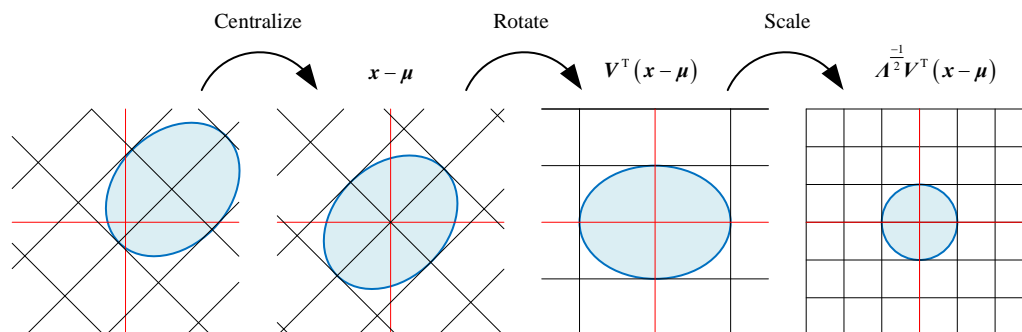


图 1. 几何变换：平移 → 旋转 → 缩放

马氏距离将协方差矩阵 Σ 纳入距离度量计算。马氏距离相当于对欧氏距离的一种修正，马氏距离完成数据正交化 (orthogonalization)，解决特征之间相关性问题。同时，马氏距离内含标准化 (standardization)，解决了特征之间尺度和单位不一致问题。

单特征

特别地，当特征数 $D = 1$ 时：

$$\mathbf{x} = [x], \quad \boldsymbol{\mu} = [\mu], \quad \boldsymbol{\Sigma} = [\sigma^2] \quad (5)$$

代入 (1) 得到：

$$d = \sqrt{(x - \mu) \frac{1}{\sigma^2} (x - \mu)} = \left| \frac{x - \mu}{\sigma} \right| \quad (6)$$

大家是不是觉得眼前一亮，这正是 z 分数的绝对值， d 的单位正是标准差。如图 2 (a) 所示，比如 $d = 3$ ，意味着马氏距离为“3 个标准差”。

当特征数 $D = 2$ 时，如图 2 (b) 所示，马氏距离的几何形态是同心椭圆。当特征数 $D = 3$ 时，如图 2 (c) 所示，马氏距离的几何形态是同心椭球。

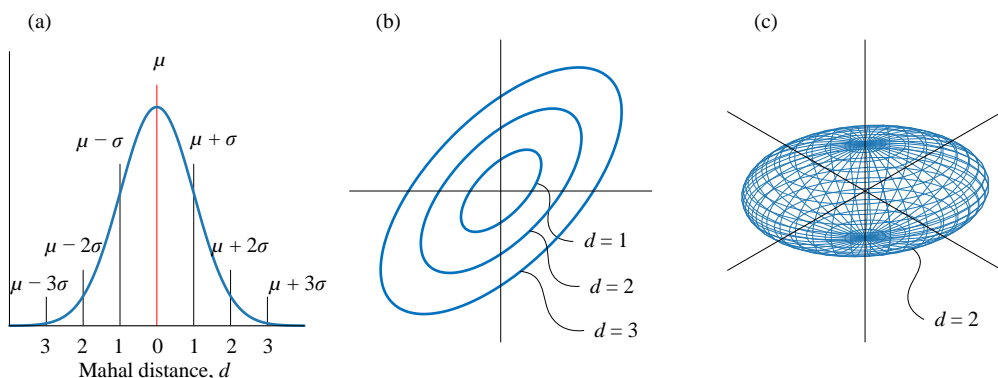


图 2. 马氏距离的几何形态

本章后文先比较三种常见距离：1) 欧氏距离；2) 标准化欧氏距离；3) 欧氏距离。

23.2 欧氏距离：最基本的距离

欧几里得距离 (Euclidean distance)，也称欧氏距离，是最“自然”的距离，是多维空间中两个点之间的绝对距离度量。

欧氏距离

\mathbf{x} 和质心 $\boldsymbol{\mu}$ 的欧氏距离定义为：

$$d = \sqrt{(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})} = \|\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}\| \quad (7)$$

欧氏距离本质上是 L^2 范数。

以鸢尾花花萼长度和花瓣长度两个特征数据为例，数据质心所在位置为：

$$\boldsymbol{\mu} = \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5.843 \\ 3.758 \end{bmatrix} \quad (8)$$

注意，上式的两个特征单位为厘米。

如图 3 所示，平面上任意一点 \mathbf{x} 到质心 $\boldsymbol{\mu}$ 的欧氏距离的解析式为：

$$\begin{aligned} d &= \sqrt{(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})} = \sqrt{\begin{bmatrix} x_1 \\ x_3 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 5.843 \\ 3.758 \end{bmatrix}}^T \left(\begin{bmatrix} x_1 \\ x_3 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 5.843 \\ 3.758 \end{bmatrix} \right) \\ &= \sqrt{(x_1 - 5.843)^2 + (x_3 - 3.758)^2} \end{aligned} \quad (9)$$

图 3 所示的三个同心圆距离质心 $\boldsymbol{\mu}$ 距离为 1 cm、2 cm、3 cm。此外，请大家注意图 4 中的网格，这个网格每个格子“方方正正”，边长都是 1 cm。

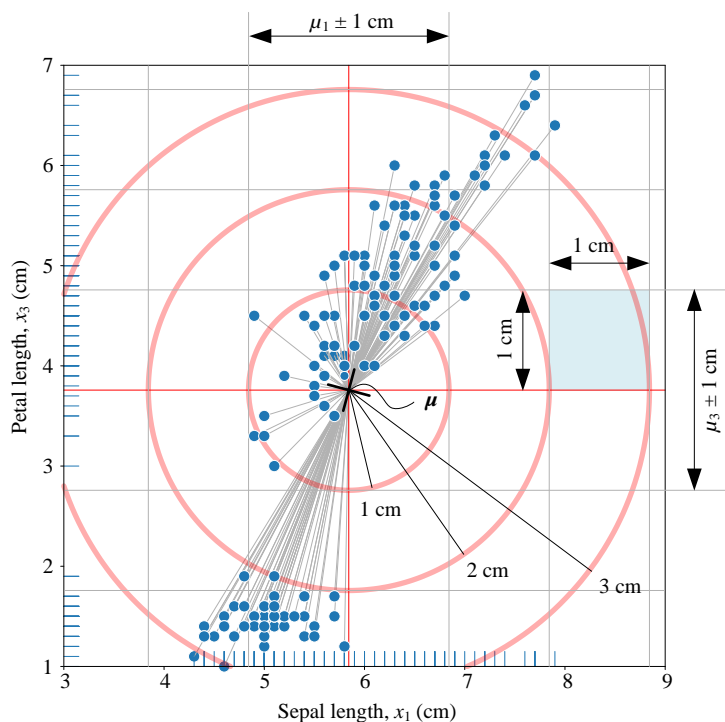


图 3. 花萼长度、花瓣长度平面上的欧氏距离等高线和网格

23.3 标准化欧氏距离：两个视角

第一视角：正椭圆

标准化欧氏距离 (standardized Euclidean distance) 定义如下：

$$d = \sqrt{(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \mathbf{D}^{-1} \mathbf{D}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})} \quad (10)$$

其中， \mathbf{D} 为对角方阵，对角线元素为标准差，运算如下：

$$\mathbf{D} = \text{diag}(\text{diag}(\boldsymbol{\Sigma}))^{\frac{1}{2}} = \begin{bmatrix} \sigma_1 & & \\ & \sigma_2 & \\ & & \ddots \\ & & & \sigma_D \end{bmatrix} \quad (11)$$

特别地，当 $D = 2$ 时，标准化欧氏距离为：

$$d = \sqrt{\frac{(x_1 - \mu_1)^2}{\sigma_1^2} + \frac{(x_2 - \mu_2)^2}{\sigma_2^2}} = \sqrt{z_1^2 + z_2^2} \quad (12)$$

其中， z_1 和 z_2 是两个特征的 z 分数。可以说， z_1 的单位是 σ_1 ， z_2 的单位是 σ_2 。

如图 3 所示， x_1x_3 平面上任意一点 \mathbf{x} 到质心 $\boldsymbol{\mu}$ 的标准化欧氏距离为：

$$d = \sqrt{\frac{(x_1 - 5.843)^2}{0.685} + \frac{(x_3 - 3.758)^2}{3.116}} \quad (13)$$

上式中，鸢尾花花萼长度数据的方差为 0.685 cm^2 ，标准差 σ_1 为 0.827 cm 。花瓣长度数据的方差为 3.116 cm^2 ，标准差 σ_3 为 1.765 cm 。

图 4 所示为在花萼长度、花瓣长度平面上标准化欧氏距离为 1、2、3 的三个正椭圆。1、2、3 的单位可以理解为标准差。

大家注意图 4 中网格，网格的格子为矩形。矩形的宽度为 $\sigma_1 = 0.827 \text{ cm}$ ，矩形的长度为 $\sigma_3 = 1.765 \text{ cm}$ 。

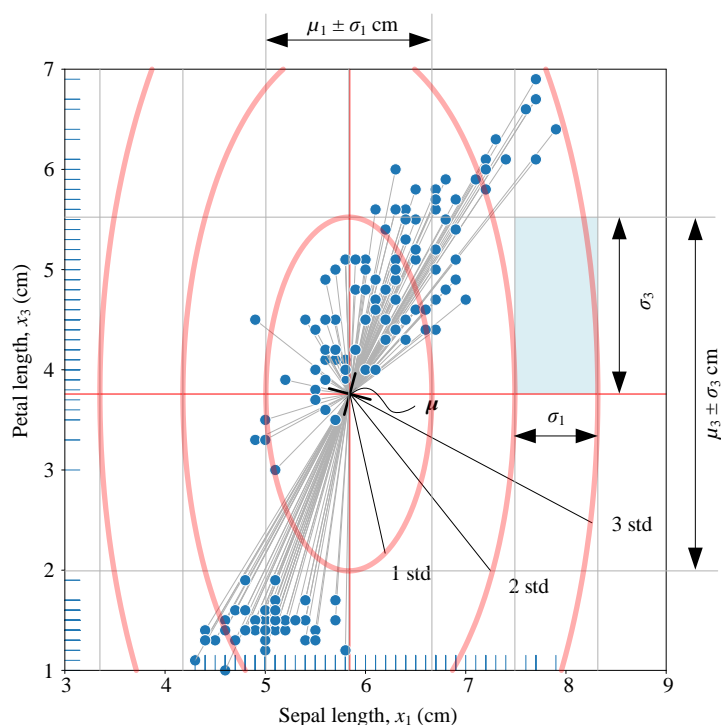


图 4. 花萼长度、花瓣长度平面上的标准化欧氏距离和网格

第二视角：正圆

先计算花萼长度、花瓣长度的 z 分数 z_1 、 z_3 ：

$$z_1 = \frac{x_1 - 5.843}{0.827}, \quad z_3 = \frac{x_3 - 3.758}{1.765} \quad (14)$$

几何视角，上式经过了中心化、缩放两步。

然后再计算标准化欧氏距离：

$$d = \sqrt{z_1^2 + z_3^2} \quad (15)$$

图 5 所示花萼长度 z 分数、花瓣长度 z 分数平面上的标准化欧氏距离等高线。不难发现，在这个平面上，等高线为正圆，圆心位于原点。

图 5 中网格为正方形，这是因为数据已经标准化。

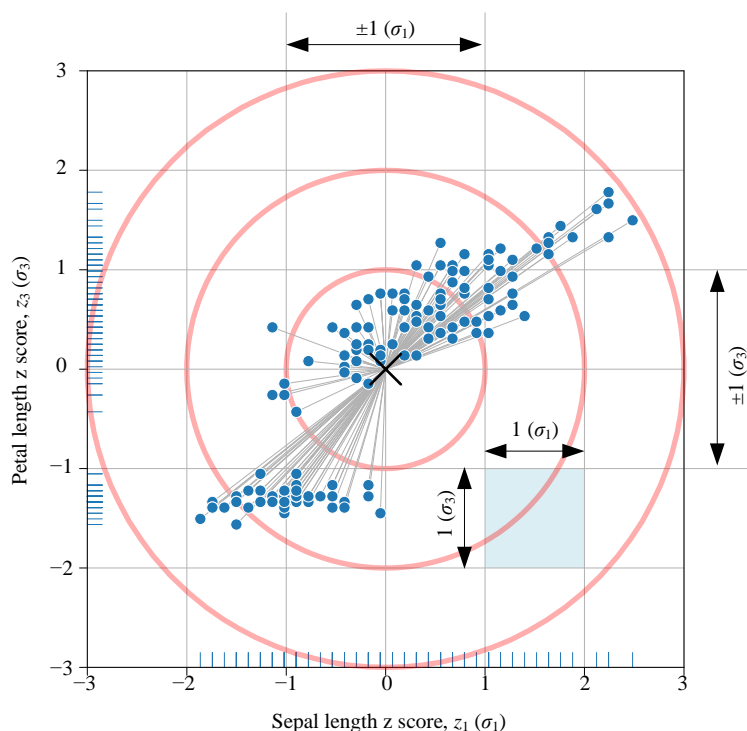


图 5. 花萼长度 z 分数、花瓣长度 z 分数平面上的标准化欧氏距离

23.4 马氏距离：两个视角

旋转椭圆

鸢尾花花萼长度、花瓣长度协方差矩阵 Σ 为：

$$\Sigma = \begin{bmatrix} 0.685 & 1.274 \\ 1.274 & 3.116 \end{bmatrix} \quad (16)$$

协方差 Σ 的逆为：

$$\Sigma^{-1} = \begin{bmatrix} 6.075 & -2.484 \\ -2.484 & 1.336 \end{bmatrix} \quad (17)$$

代入 (1)，得到马氏距离的解析式：

$$\begin{aligned} d &= \sqrt{(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \begin{bmatrix} 6.075 & -2.484 \\ -2.484 & 1.336 \end{bmatrix} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})} \\ &= \sqrt{\left(\begin{bmatrix} x_1 \\ x_3 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 5.843 \\ 3.758 \end{bmatrix} \right)^T \begin{bmatrix} 6.075 & -2.484 \\ -2.484 & 1.336 \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} x_1 \\ x_3 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 5.843 \\ 3.758 \end{bmatrix} \right)} \\ &= \sqrt{6.08x_1^2 - 4.97x_1x_3 + 1.34x_3^2 - 52.32x_1 + 18.99x_3 + 117.21} \end{aligned} \quad (18)$$

图 6 中三个椭圆分别代表马氏距离为 1、2、3。这个旋转椭圆的长轴就是第 25 章要介绍的第一主成分 (first principal component) 方向，而旋转椭圆的短轴就是第二主成分 (second principal component) 方向。

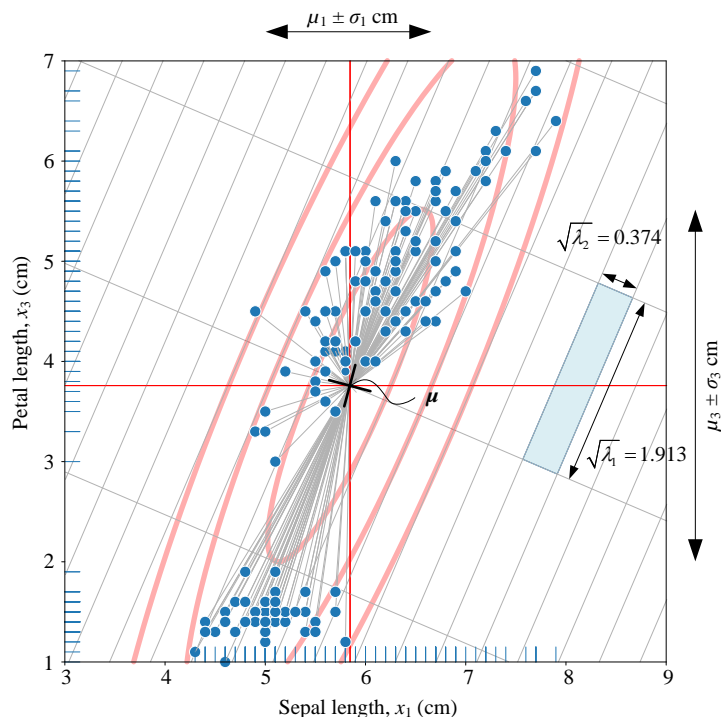


图 6. 花萼长度、花瓣长度平面上的马氏距离等高线和网格

对协方差矩阵特征值分解得到的特征值方阵为：

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \\ & \lambda_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3.661 & \\ & 0.140 \end{bmatrix} \quad (19)$$

两个特征值实际上就是数据投影在第一、第二主成分方向上的结果的方差，也叫主成分方差。上式的单位也都是平方厘米 cm^2 。

而这两个特征值的平方根就是主成分标准差：

$$\sqrt{\lambda_1} = 1.913 \text{ cm}, \quad \sqrt{\lambda_2} = 0.374 \text{ cm} \quad (20)$$

它俩分别是旋转椭圆的半长轴、半短轴长度。

如图 6 所示，图中的网格就是度量马氏距离的坐标系。网格矩形倾斜角度和主成分方向相同。矩形的长度为 $\sqrt{\lambda_1}$ ，宽度为 $\sqrt{\lambda_2}$ 。

第二视角：正圆

令：

$$\mathbf{z} = \underset{\text{Scale}}{\mathbf{A}^{-1/2}} \underset{\text{Rotate}}{\mathbf{V}^T} \underset{\text{Centralize}}{\left(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu} \right)} \quad (21)$$

将上式代入 (1)，得到马氏距离为 \mathbf{z} 的 L^2 范数：

$$d = \sqrt{\mathbf{z}^T \mathbf{z}} = \|\mathbf{z}\| \quad (22)$$

如图 7 所示，在第一、第二主成分平面上，马氏距离为正圆。

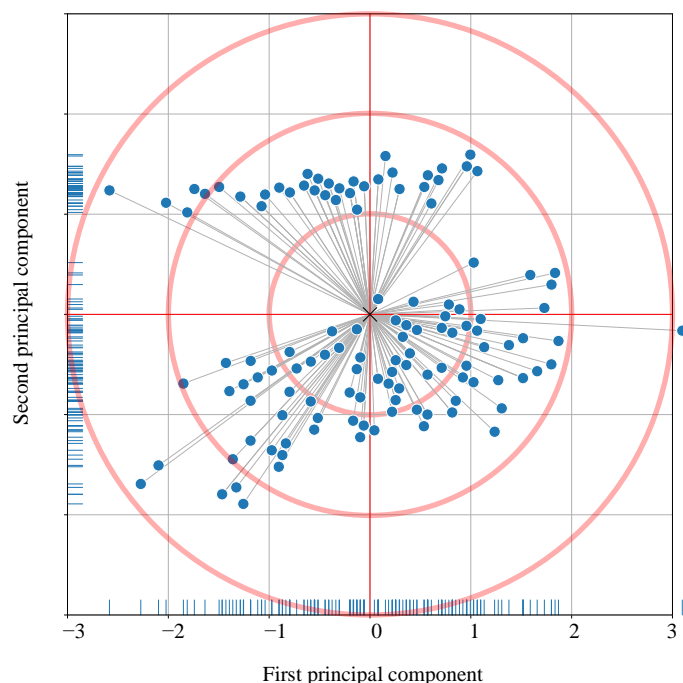


图 7. 第一、第二主成分平面上马氏距离等高线和网格



Bk5_Ch23_01.py 绘制图 3、图 4、图 6。

成对特征图

马氏距离椭圆也可以画在成对特征图上。图 8 和图 9 分别展示考虑不考虑标签和考虑标签的马氏距离椭圆。这些图像可以帮助我们分析理解数据，比如解读相关性、发现离群值等。《数据有道》一册将专门讲解如何发现离群值。

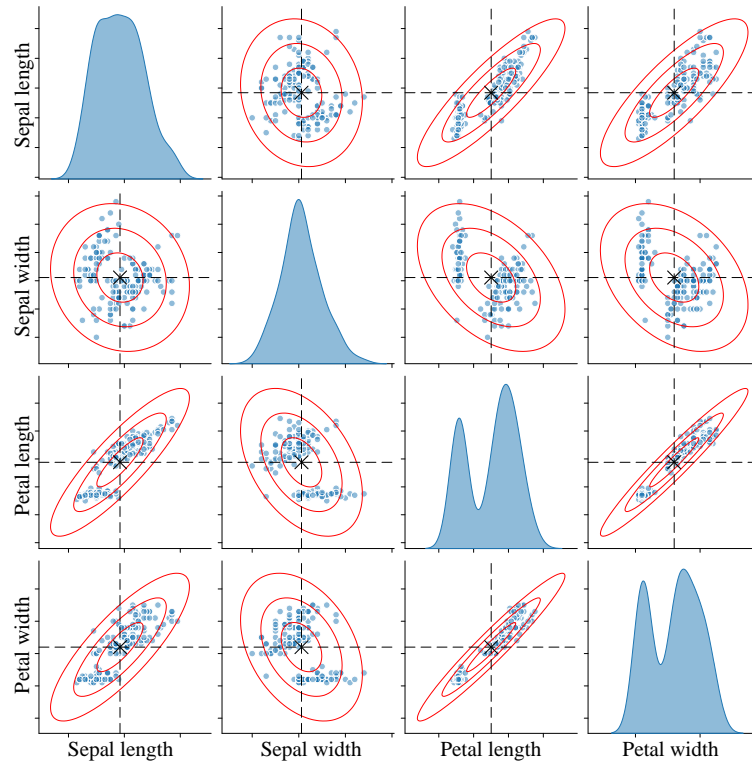


图 8. 成对特征图上绘制马氏距离等高线，不考虑标签

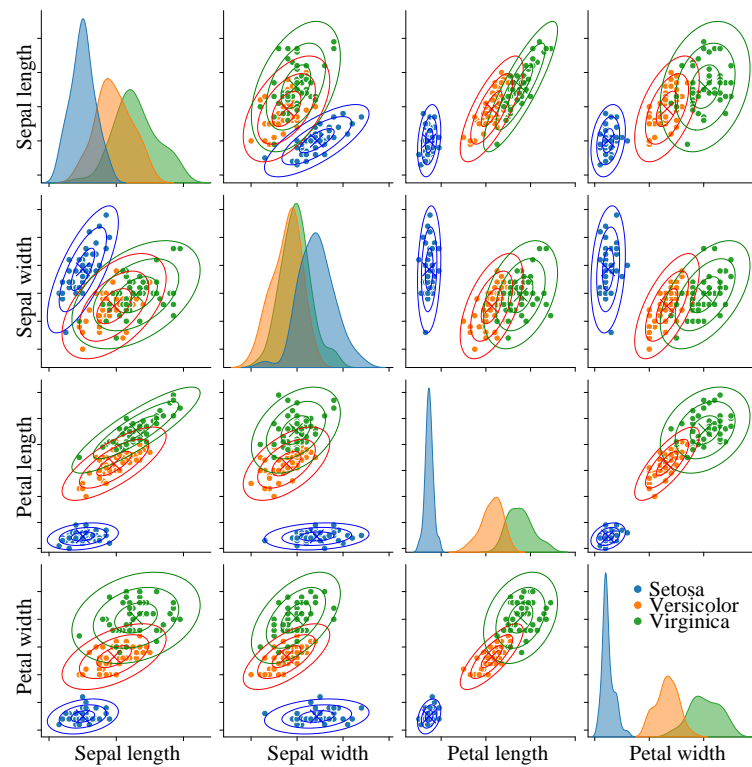


图 9. 成对特征图上绘制马氏距离等高线，考虑标签



Bk5_Ch23_02.py 绘制图 8 和图 9。

23.5 马氏距离和“68-95-99.7 法则”

本书第 9 章介绍过一元高斯分布的“68-95-99.7 法则”。这个法则具体是指，如果数据近似服从一元高斯分布 $N(\mu, \sigma)$ ，则约 68.3%、95.4% 和 99.7% 的数据分布在距均值 (μ) 1 个 ($\mu \pm \sigma$)、2 个 ($\mu \pm 2\sigma$) 和 3 个 ($\mu \pm 3\sigma$) 正负标准差范围之内。

而 68.3%、95.4% 和 99.7% 这三个数实际上卡方分布直接相关。当 $D = 1$ 时， X_1 服从正态分布 $N(\mu_1, \sigma_1)$ ，经过标准化得到的随机变量 Z_1 则服从标准正态分布：

$$Z_1 = \frac{X_1 - \mu_1}{\sigma_1} \sim N(0, 1) \quad (23)$$

也就是说， Z_1 的平方服从自由度为 1 的卡方分布：

$$Z_1^2 \sim \chi^2_{(df=1)} \quad (24)$$

注意，实际上 Z_1 的平方再开方，即 Z_1 的绝对值就是马氏距离。

$D = 2$ 时，马氏距离平方 d^2 服从 $df = 2$ 的卡方分布：

$$d^2 \sim \chi^2_{(df=2)} \quad (25)$$

D 维马氏距离的平方则服从自由度为 D 的卡方分布：

$$d^2 = (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \sim \chi^2_{(df=D)} \quad (26)$$

也就是说，距离为 d 的马氏距离超椭圆围成的几何图形内部的概率 α 可以用卡方分布 CDF 查表获得。比如，Scipy 中卡方分布的对象为 `scipy.stats.distributions.chi2`，计算 $D = 2$ ，马氏距离 $d = 3$ 条件下，马氏距离椭圆围成的图形的概率 α 为 `scipy.stats.distributions.chi2.cdf(d^2 = 9, df = 2)`。这也实际上回答了本书第 10 章的问题，具体如图 10 所示。请大家查表回答这个问题。

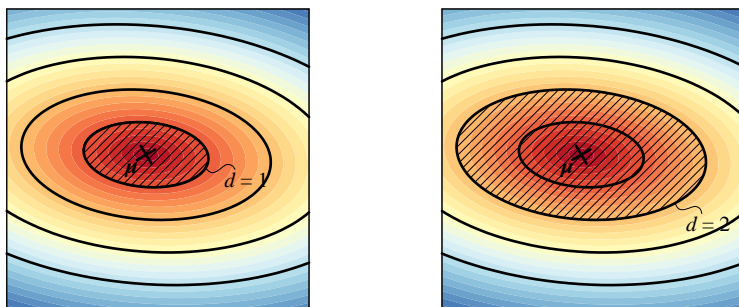


图 10. 求阴影区域对应的概率，来自本书第 10 章

相反，如果给定概率值 α 和自由度，可以用卡方分布的百分点函数 PPF，即 CDF 的逆函数 (inverse CDF)，反求马氏距离的平方 d^2 。这个值开方就是马氏距离 d 。

比如，给定概率值 0.9，自由度为 2，利用 `scipy.stats.distributions.chi2.ppf(0.9, df=2)` 可以求得马氏距离的平方值 d^2 ，开方就是马氏距离 d 。

如图 11 (a) 所示，自由度为 2，给定一系列概率值 (0.90 ~ 0.99)，利用卡方分布的百分点函数 PPF，我们便获得一系列马氏距离椭圆。图 11 (b) 对照马氏距离取值为 1 ~ 5。

这些椭圆中，马氏距离 3 几乎对应 99% 这个概率值。也就是说，如果二元随机数近似服从二元高斯分布，约有 99% 的随机数落在马氏距离为 3 的椭圆内。

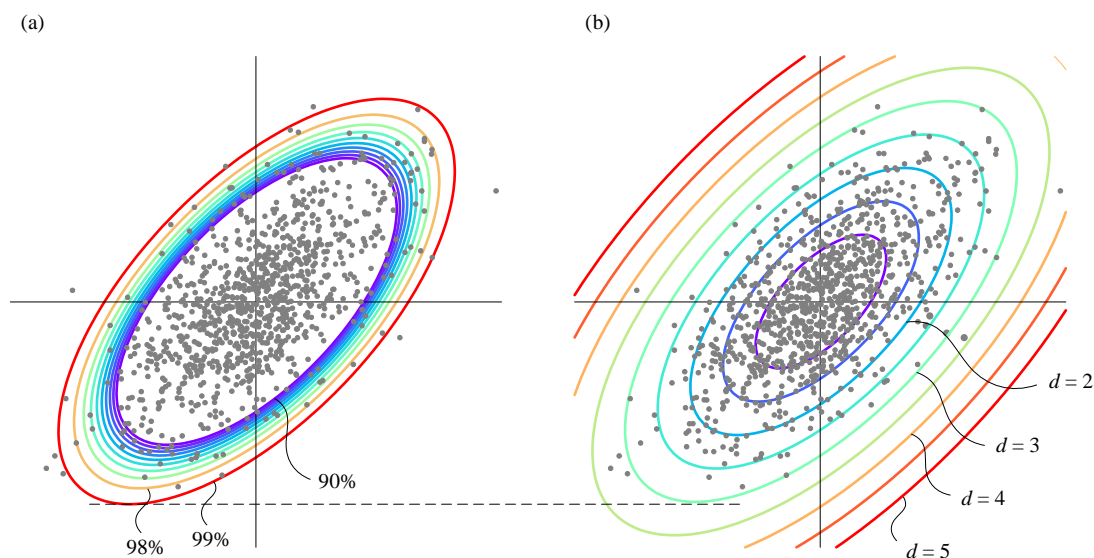
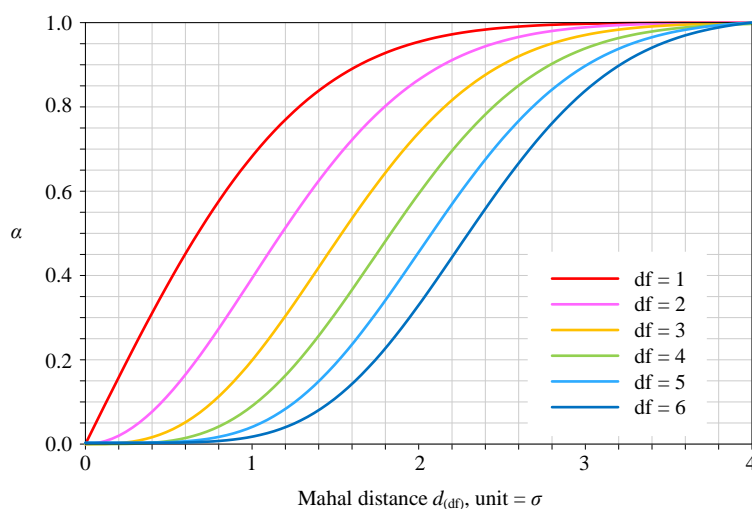


图 11 特征数 $D=2$ 时，概率值 α 和马氏距离椭圆位置



Bk5_Ch23_03.py 绘制图 11。

图 12 所示为马氏距离 d 、自由度 df 、概率值 α 三者关系曲线。

图 12 马氏距离 d 、自由度 df 、概率值 α 三者关系

为了方便查表，大家可以参考图 13 和图 14。图 13 中，给定马氏距离 d 、自由度 df ，查表得到 α 。这张表中，我们可以看到一元高斯分布的 68-95-99.7 法则。

而自由度 $df = 2$ 时，这个法则变为马氏距离为 1、2、3 的椭圆对应 39%、86%、98.9%，我们也可以管它叫 39-86-98.9 法则。

图 14 中，给定概率值 α 、自由度 df ，查表得到马氏距离 d 。

		Mahal distance, d												
		1	1.25	1.5	1.75	2	2.25	2.5	2.75	3	3.25	3.5	3.75	4
Degree of freedom, df	1	0.6827	0.7887	0.8664	0.9199	0.9545	0.9756	0.9876	0.9940	0.9973	0.9988	0.9995	0.9998	0.9999
	2	0.3935	0.5422	0.6753	0.7837	0.8647	0.9204	0.9561	0.9772	0.9889	0.9949	0.9978	0.9991	0.9997
	3	0.1987	0.3321	0.4778	0.6179	0.7385	0.8327	0.8999	0.9440	0.9707	0.9857	0.9934	0.9972	0.9989
	4	0.0902	0.1845	0.3101	0.4526	0.5940	0.7191	0.8188	0.8910	0.9389	0.9681	0.9844	0.9929	0.9970
	5	0.0374	0.0943	0.1864	0.3096	0.4506	0.5917	0.7174	0.8179	0.8909	0.9392	0.9685	0.9848	0.9932
	6	0.0144	0.0448	0.1047	0.1990	0.3233	0.4642	0.6042	0.7281	0.8264	0.8971	0.9434	0.9711	0.9862

图 13. 给定马氏距离 d 、自由度 df ，查表得到概率值 α

		Probability α that the random value will fall inside the ellipsoid												
		0.9	0.91	0.92	0.93	0.94	0.95	0.96	0.97	0.98	0.99	0.993	0.996	0.999
Degree of freedom, df	1	1.6449	1.6954	1.7507	1.8119	1.8808	1.9600	2.0537	2.1701	2.3263	2.5758	2.6968	2.8782	3.2905
	2	2.1460	2.1945	2.2475	2.3062	2.3721	2.4477	2.5373	2.6482	2.7971	3.0349	3.1502	3.3231	3.7169
	3	2.5003	2.5478	2.5997	2.6571	2.7216	2.7955	2.8829	2.9912	3.1365	3.3682	3.4806	3.6492	4.0331
	4	2.7892	2.8361	2.8873	2.9439	3.0074	3.0802	3.1663	3.2729	3.4158	3.6437	3.7542	3.9199	4.2973
	5	3.0391	3.0856	3.1363	3.1923	3.2552	3.3272	3.4124	3.5178	3.6590	3.8841	3.9932	4.1568	4.5293
	6	3.2626	3.3088	3.3591	3.4147	3.4770	3.5485	3.6329	3.7373	3.8773	4.1002	4.2083	4.3702	4.7390

图 14. 给定概率值 α 、自由度 df ，查表得到马氏距离 d



Bk5_Ch23_04.py 绘制图 12。



用卡方分布将马氏距离转换为概率时，有些文献错误地将自由度给定为 $D - 1$ ，即特征数 D 减 1。下面这篇文章详尽地解释如何正确使用马氏距离，建议大家参考。

<https://peerj.com/articles/6678/>