

# 23

## Mahalanobis Distance

# 马氏距离

一种和椭圆有关、考虑数据分布的距离度量



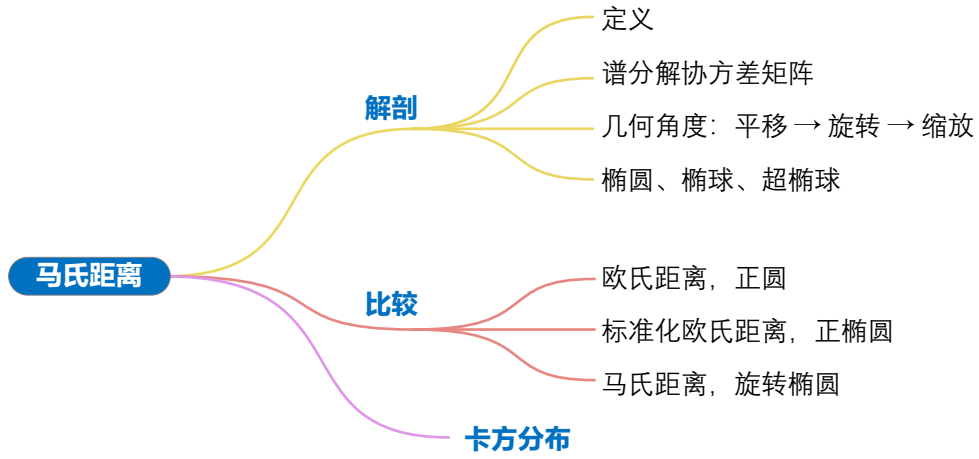
耐心，坚持！今天的苦，就是明天的甜。

*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](mailto:jiang.visualize.ml@gmail.com)

## 23.1 马氏距离：考虑数据分布的距离度量

本书最后三章叫做“椭圆三部曲”，我们将介绍马氏距离、线性回归、主成分分析这三个和椭圆直接有关的话题。

“鸢尾花书”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  $\boldsymbol{\mu}$  的椭圆、椭球或超椭球。

### 平移 → 旋转 → 缩放

对  $\boldsymbol{\Sigma}$  谱分解得到：

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

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

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

将 (3) 代入 (1) 整理得到：

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

其中， $\boldsymbol{\mu}$  完成**中心化** (centralize)， $\mathbf{V}$  矩阵完成**旋转** (rotate)， $\mathbf{A}^{-\frac{1}{2}}$  矩阵完成**缩放** (scale)。整个几何变换过程如图 1 所示。观察上式，大家已经发现马氏距离本身也是个范数。



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、谱分解相关内容，请回顾《矩阵力量》第 13、14 章。

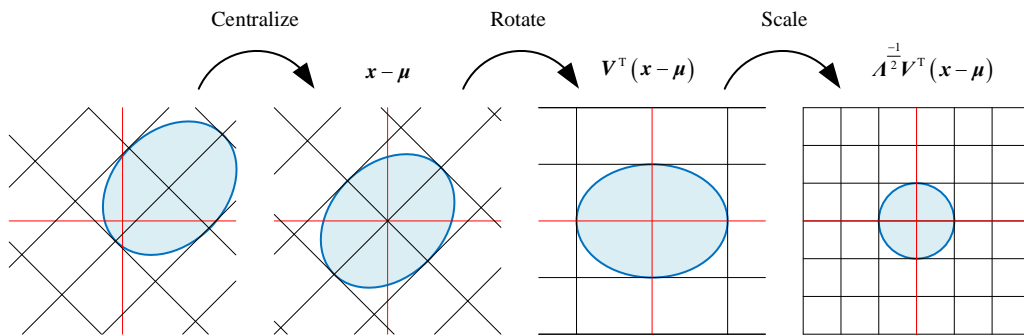


图 1. 几何变换：平移 → 旋转 → 缩放

马氏距离将协方差矩阵  $\Sigma$  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：

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

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。

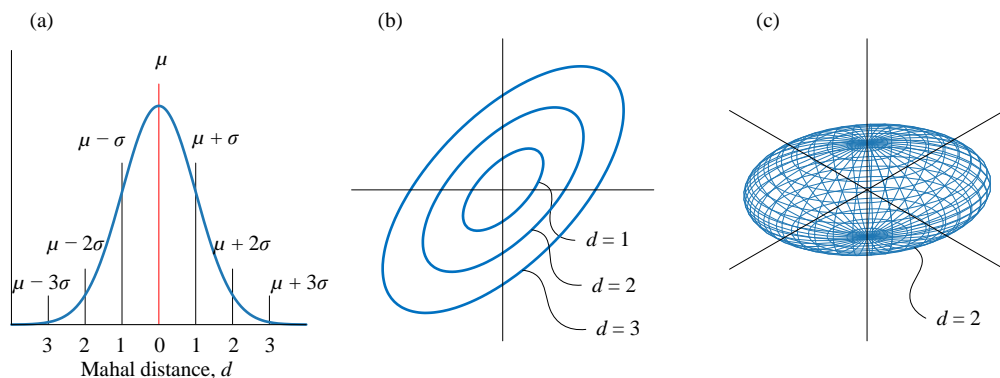


图 2. 马氏距离的几何形态

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：

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

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。

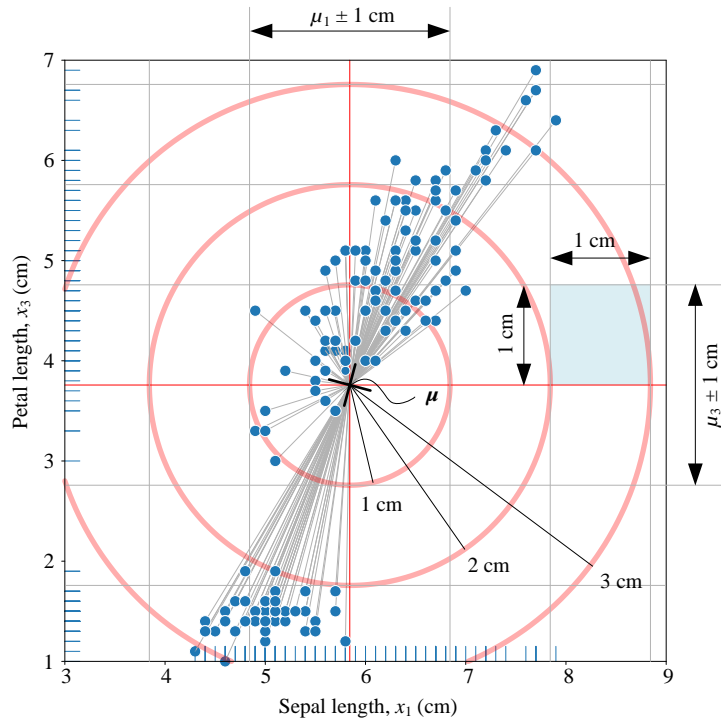


图 3. 花萼长度、花瓣长度平面上的欧氏距离等高线和网格

## 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：

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

其中， $D$  为对角方阵，对角线元素为标准差，运算如下：

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

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  $\sigma_1$ ， $z_2$  的单位是  $\sigma_2$ 。

如图 3 所示， $x_1x_3$  平面上任意一点  $x$  到质心  $\mu$  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  $0.685 \text{ cm}^2$ ，标准差  $\sigma_1$  为  $0.827 \text{ cm}$ 。花瓣长度数据的方差为  $3.116 \text{ cm}^2$ ，标准差  $\sigma_3$  为  $1.765 \text{ cm}$ 。

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  $\sigma_3 = 1.765 \text{ cm}$ 。

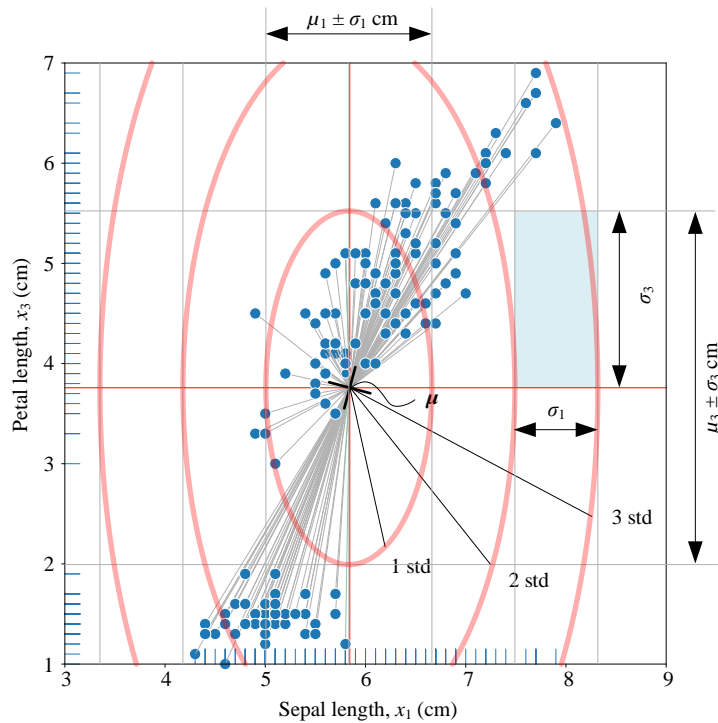


图 4. 花萼长度、花瓣长度平面上的标准化欧氏距离和网格

## 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。

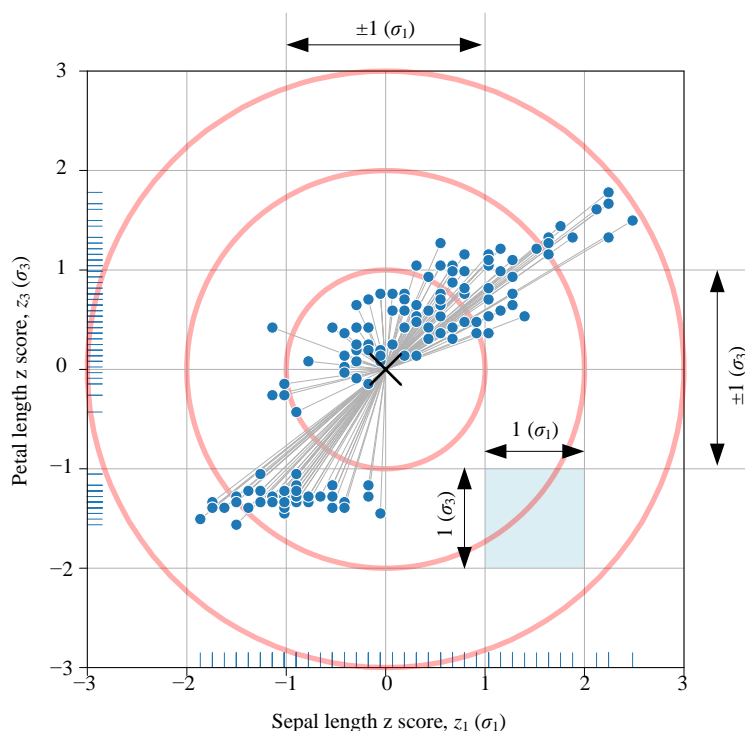


图 5. 花萼长度  $z$  分数、花瓣长度  $z$  分数平面上的标准化欧氏距离

## 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  $\Sigma$  为：

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

协方差  $\Sigma$  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：

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

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。

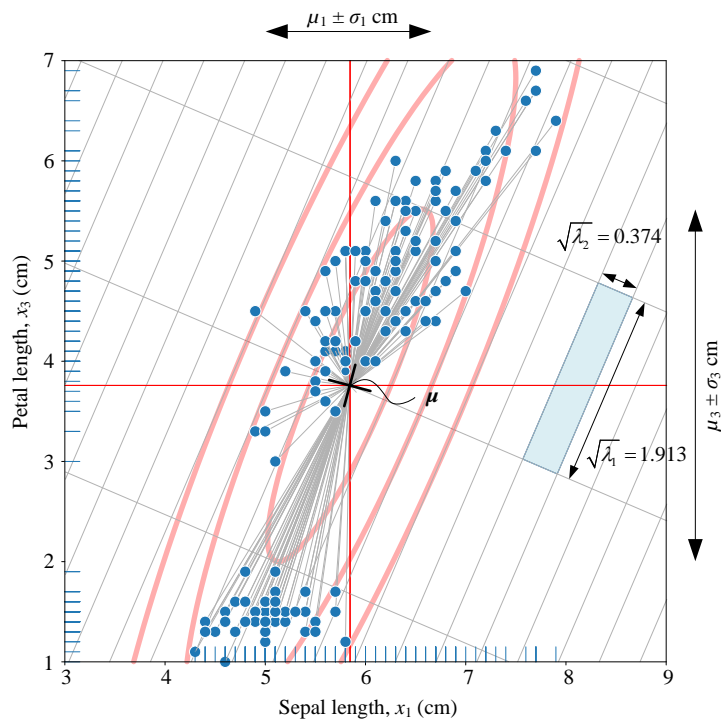


图 6. 花萼长度、花瓣长度平面上的马氏距离等高线和网格

对协方差矩阵特征值分解得到的特征值方阵为：

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \\ & \lambda_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3.661 & \\ & 0.140 \end{bmatrix} \tag{19}$$

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  $\text{cm}^2$ 。

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：

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

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。

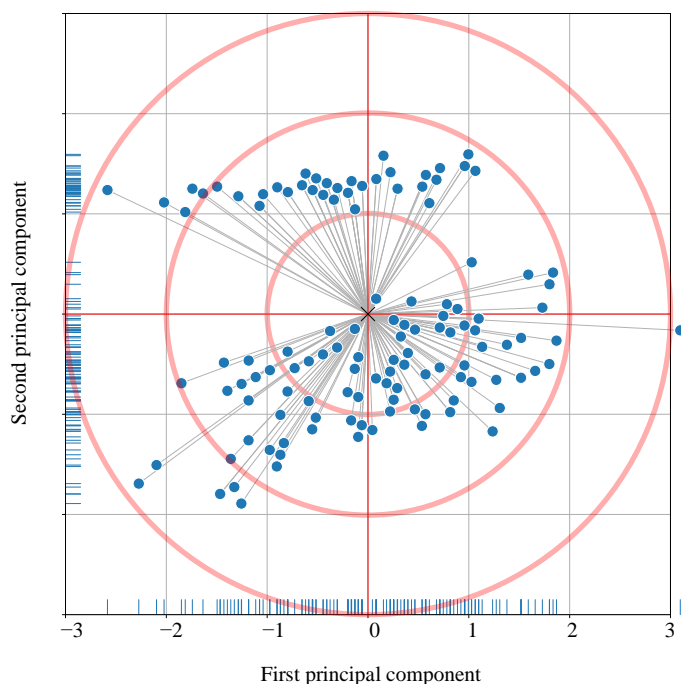


图7. 第一、第二主成分平面上马氏距离等高线和网格



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。

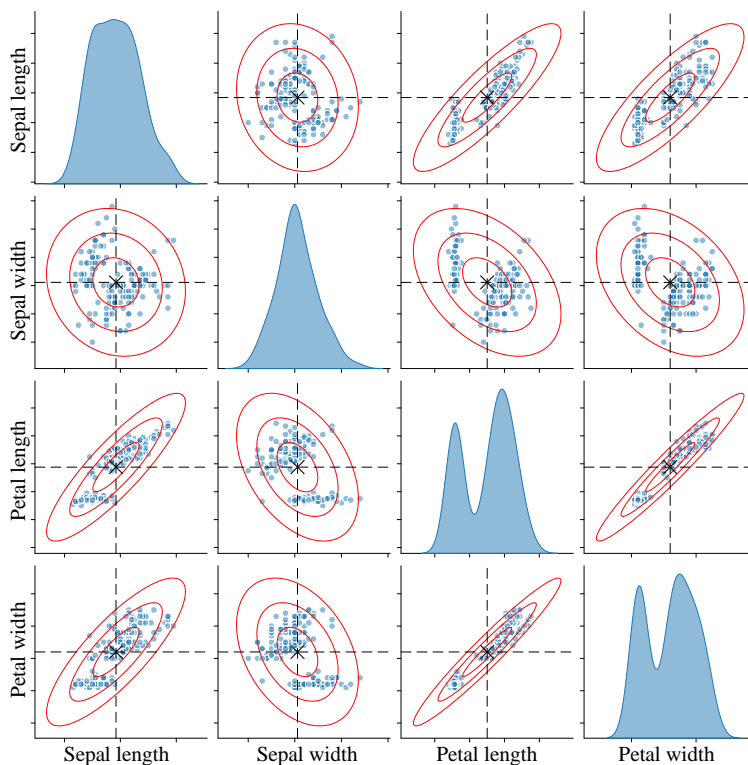


图 8. 成对特征图上绘制马氏距离等高线，不考虑标签

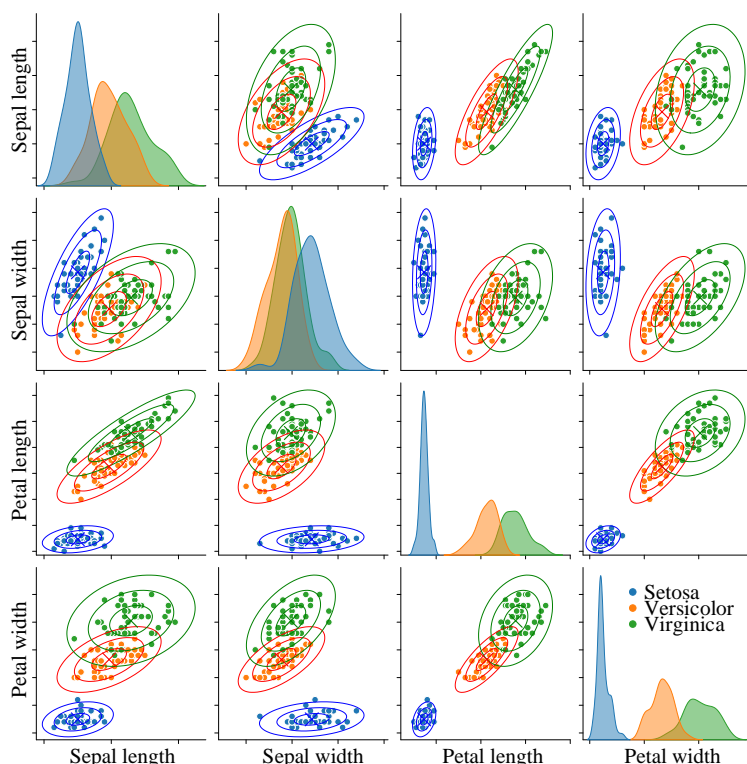


图 9. 成对特征图上绘制马氏距离等高线，考虑标签



Bk5\_Ch23\_02.py 绘制图 8 和图 9。

## 23.5 马氏距离和卡方分布

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 ( $\mu$ ) 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：

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

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](mailto:jiang.visualize.ml@gmail.com)

▲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  $\alpha$  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  $\alpha$  为 `scipy.stats.distributions.chi2.cdf(d^2 = 9, df = 2)`。

这实际上也回答了本书第 10 章的问题，具体如图 10 所示。请大家查表回答这个问题。

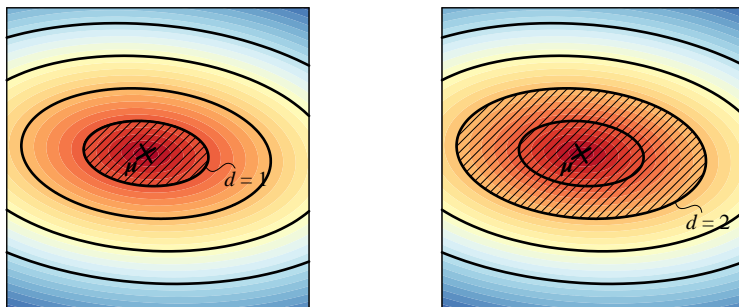


图 10. 求阴影区域对应的概率，来自本书第 10 章

相反，如果给定概率值  $\alpha$  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  $d$ 。

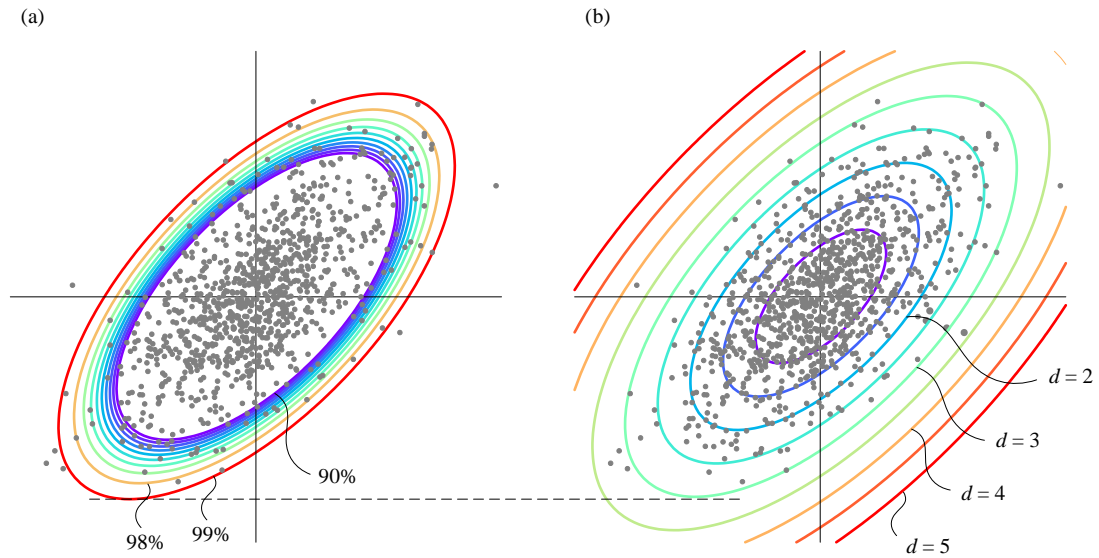
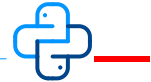
如图 11 (a) 所示，自由度为 2，给定一系列概率值 (0.90 ~ 0.99)，利用卡方分布的百分点函数 PPF，我们便获得一系列马氏距离椭圆。图 11 (b) 对照马氏距离取值为 1 ~ 5。

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。

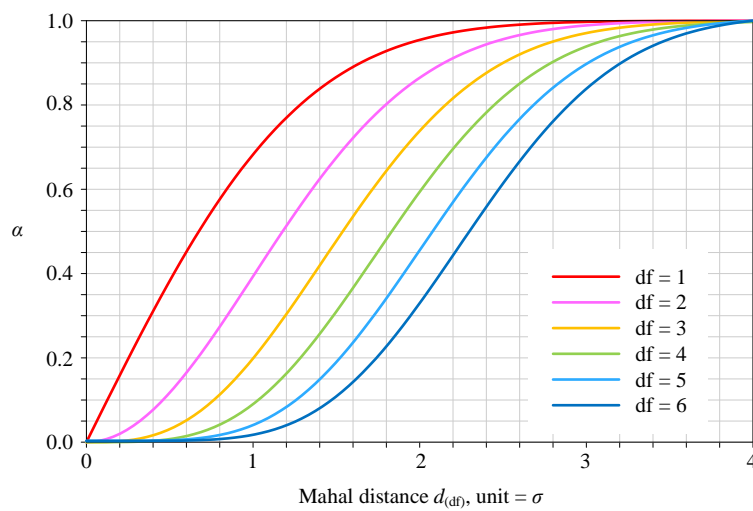


用卡方分布将马氏距离转换为概率时，有些文献错误地将自由度给定为  $D - 1$ ，即特征数  $D$  减 1。下面这篇文章详尽地解释如何正确设定自由度，建议大家参考。

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

图 11 特征数  $D=2$  时，概率值  $\alpha$  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  $\alpha$  三者关系曲线。图 12 马氏距离  $d$ 、自由度  $df$ 、概率值  $\alpha$  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  $\alpha$ 。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  $\alpha$ 、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
Degrees 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  $\alpha$

		Probability $\alpha$ 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  $\alpha$ 、自由度  $df$ ，查表得到马氏距离  $d$



Bk5\_Ch23\_04.py 绘制图 12。



马氏距离是一种基于统计学的距离度量方法，用于衡量两个样本之间的相似度或距离。马氏距离考虑了各个特征之间的相关性，相比于欧氏距离或曼哈顿距离等传统距离度量方法，更适合用于高维数据集。马氏距离被广泛应用于分类、聚类、异常检测等领域，特别是在高维数据集的分析和处理中。由于它考虑了各个特征之间的相关性，因此在某些情况下比传统距离度量方法更为有效和准确。

《统计至简》一册中椭圆无处不在，希望大家日后看到椭圆，就能想到协方差矩阵、多元高斯分布、相关性、旋转、缩放、特征值分解、置信区间、离群值、马氏距离、线性回归、主成分分析等等内容。更能“看到”日月所属、天体运转、星辰大海。