

18

Einstein Summation in NumPy

NumPy 爱因斯坦求和约定

简化线性代数和张量计算



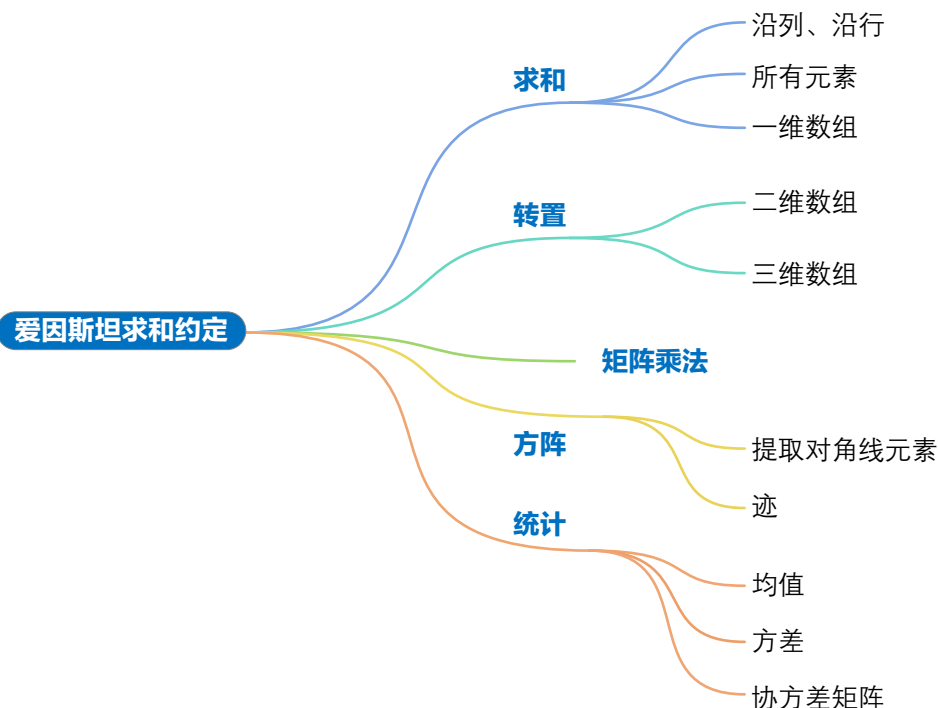
我不能教任何人任何东西。我只能让他们思考。

I cannot teach anybody anything. I can only make them think.

—— 苏格拉底 (Socrates) | 古希腊哲学家 | 470 ~ 399 BC



- ◀ `numpy.average()` 计算平均值
- ◀ `numpy.cov()` 计算协方差矩阵
- ◀ `numpy.diag()` 以一维数组的形式返回方阵的对角线元素, 或将一维数组转换成对角阵
- ◀ `numpy.einsum()` 爱因斯坦求和约定
- ◀ `numpy.stack()` 将矩阵叠加
- ◀ `numpy.sum()` 求和



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

18.1 什么是爱因斯坦求和约定？

NumPy 中还有一个非常强大的函数 `numpy.einsum()`，它完成的是**爱因斯坦求和约定** (Einstein summation convention 或 Einstein notation)。

爱因斯坦求和约定，由阿尔伯特·爱因斯坦于 1916 年提出，是一种数学表示法，用于简化线性代数和张量计算中的表达式。

使用 `numpy.einsum()` 完成绝大部分有关线性代数运算时，大家记住一个要点——输入中重复的索引代表元素相乘，输出中消去的索引意味着相加。

举个例子，矩阵 A 和 B 相乘用 `numpy.einsum()` 函数可以写成：

```
C = numpy.einsum('ij,jk->ik', A, B)
```

如图 1 所示，“->”之前分别为矩阵 A 和 B 的索引，它们用逗号隔开。矩阵 A 行索引为 i ，列索引为 j 。矩阵 B 行索引为 j ，列索引为 k 。 j 为重复索引，因此在这个方向上元素相乘。

“->”之后为输出结果的索引。输出结果索引为 ik ，消去 j ，因此在 j 索引方向上存在相乘再求和的运算。

➡ 注意，当然根据爱因斯坦求和运算的具体定义（本章不展开讨论），我们也会遇到输入中存在不重复索引，但是这些索引在输出中也消去的情况。本章配套代码会给出几个例子。

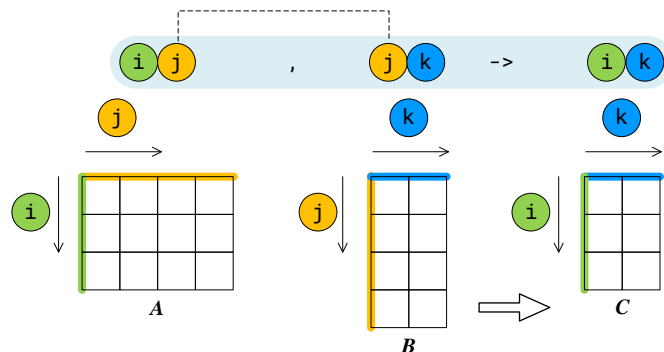


图 1. 利用爱因斯坦求和约定计算矩阵乘法

表 1 总结如何使用 `numpy.einsum()` 完成常见线性代数运算。下面我们选取其中重要的运算配合鸢尾花数据展开讲解。

为了方便大家理解，我们在本章中不会介绍爱因斯坦求和约定的具体数学表达，而是通过图解和 Python 实例方式让大家理解这个数学工具。

大家如果之前没有学过线性代数，这一章可以跳过不读；用到的时候再回来参考。

表 1. 使用 `numpy.einsum()` 完成常见线性代数运算

运算	使用 <code>numpy.einsum()</code> 完成运算
向量 a 所有元素求和（结果为标量）	<code>numpy.einsum('ij->', a)</code> <code>numpy.einsum('i->', a_1D)</code>
等行数列向量 a 和 b 的逐项积	<code>numpy.einsum('ij,ij->ij', a, b)</code> <code>numpy.einsum('i,i->i', a_1D, b_1D)</code>
等行数列向量 a 和 b 的向量内积（结果为标量）	<code>numpy.einsum('ij,ij->', a, b)</code> <code>numpy.einsum('i,i->', a_1D, b_1D)</code>
向量 a 和自身的张量积	<code>numpy.einsum('ij,ji->ij', a, a)</code> <code>numpy.einsum('i,j->ij', a_1D, a_1D)</code>
向量 a 和 b 的张量积	<code>numpy.einsum('ij,ji->ij', a, b)</code> <code>numpy.einsum('i,j->ij', a_1D, b_1D)</code>
矩阵 A 的转置	<code>numpy.einsum('ji', A)</code> <code>numpy.einsum('ij->ji', A)</code>
矩阵 A 所有元素求和（结果为标量）	<code>numpy.einsum('ij->', A)</code>
矩阵 A 对每一列元素求和	<code>numpy.einsum('ij->j', A)</code>
矩阵 A 对每一行元素求和	<code>numpy.einsum('ij->i', A)</code>
提取方阵 A 的对角元素（结果为向量）	<code>numpy.einsum('ii->i', A)</code>
计算方阵 A 的迹 $\text{trace}(A)$ （结果为标量）	<code>numpy.einsum('ii->', A)</code>
计算矩阵 A 和 B 乘积	<code>numpy.einsum('ij,jk->ik', A, B)</code>
乘积 AB 结果所有元素求和（结果为标量）	<code>numpy.einsum('ij,jk->', A, B)</code>
矩阵 A 和 B 相乘后再转置，即 $(AB)^T$	<code>numpy.einsum('ij,jk->ki', A, B)</code>
形状相同矩阵 A 和 B 逐项积	<code>numpy.einsum('ij,ij->ij', A, B)</code>



本节配套的 Jupyter Notebook 文件是 Bk1_Ch18_01.ipynb，请大家一边阅读本章一边实践。

18.2 二维数组求和

本节介绍二维数组求和。代码 1 ^a 导入鸢尾花数据矩阵；^b 提取四个特征样本数据，保存在 X ，结果二维数组；^c 提取标签数据。

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

每一列求和

代码 1^d 中 `np.einsum('ij->j', X)` 的含义是对输入数组 `X` 进行一个特定的操作，其中 `'ij->j'` 是一个描述操作的字符串。下面，让我们来分解这个字符串。

如图 2 所示，`'ij'` 表示输入数组 `X` 的维度索引。`'i'` 和 `'j'` 是分别表示二维数组的行和列。

`'->j'` 表示输出的维度索引。在这里，`'->'` 表示输出；`'j'` 是输出数组的维度索引，表示最终结果的维度。也就是说，`'i'` 这个索引被压缩、折叠。

所以，`np.einsum('ij->j', X)` 的操作是将输入二维数组 `X` 沿着 `'i'` 维度求和，然后返回一维数组，其维度只有 `'j'`。

总结来说，图 2 执行了列求和操作，将二维数组的每一列相加。相当于 `np.sum(X, axis = 0)`。

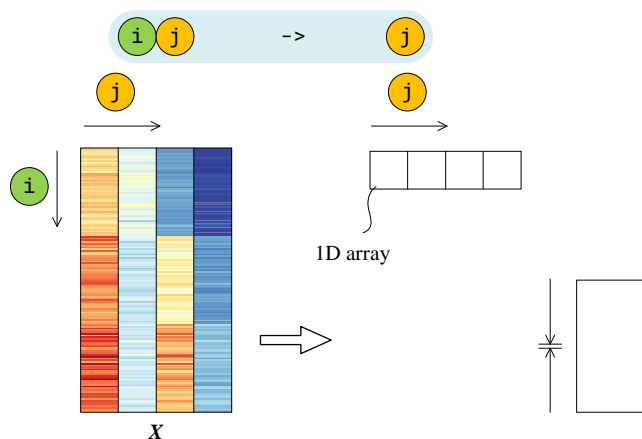


图 2. 利用爱因斯坦求和约定计算每一列求和

每一行求和

类似地，代码 1^e 将输入二维数组 `X` 沿着 `'j'` 维度求和，然后返回一维数组，其维度只有 `'i'`。也就是说，这行代码完成了行求和操作，将二维数组的每一行相加。

如图 3 所示，`'ij'` 表示输入数组 `X` 的维度索引。`'i'` 和 `'j'` 是两个维度索引。`'->i'` 表示输出的维度索引。相当于 `np.sum(X, axis = 1)`

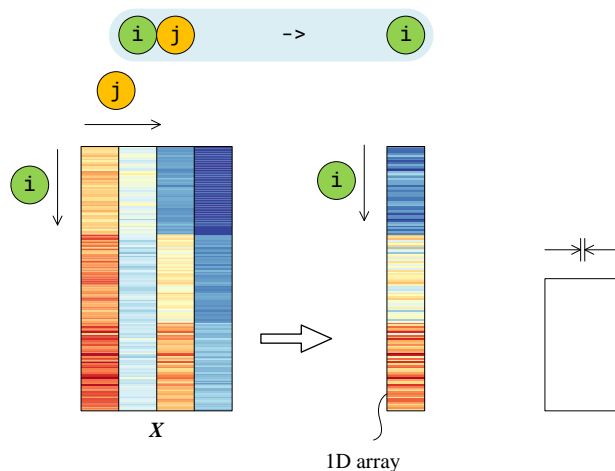


图 3. 利用爱因斯坦求和约定计算每一行求和

所有元素求和

代码 1 中 `np.einsum('ij->', X)` 的操作是对整个输入二维数组 `X` 进行汇总求和。

具体操作是将矩阵中的所有元素相加，最终返回一个标量值，表示所有元素的总和。相当于 `np.sum(X, axis=(0,1))`。

如图 4 所示，'i' 和 'j' 这两个维度索引都被折叠。

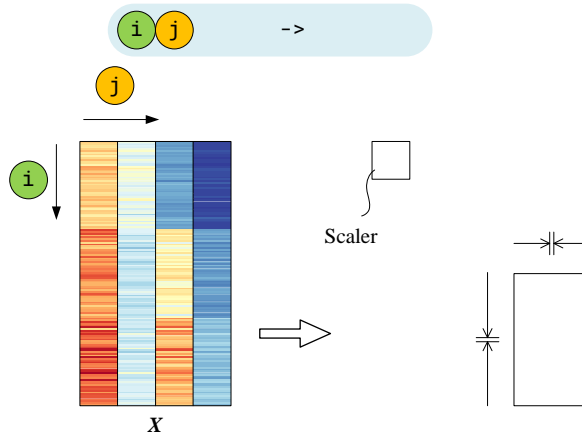


图 4. 利用爱因斯坦求和约定计算矩阵所有元素之和

```

# 导入包
import numpy as np
from sklearn.datasets import load_iris

# 从sklearn导入鸢尾花数据
a iris = load_iris()

b X = iris.data
c y = iris.target

# 每一列求和
d np.einsum('ij->j', X)
# np.sum(X, axis = 0)

# 每一行求和
e np.einsum('ij->i', X)
# np.sum(X, axis = 1)

# 矩阵所有元素求和
f np.einsum('ij->', X)
# np.sum(X, axis = (0,1))

```

代码 1. 爱因斯坦求和约定代码，求和； Bk1_Ch18_01.ipynb

18.3 转置

本节介绍如何用爱因斯坦求和约定完成二维、三维数组转置。

二维数组

如图 5 所示，对于二维数组，用爱因斯坦求和约定完成转置很容易。我们只需要调换维度索引，请大家参考代码 2 中 **a**。

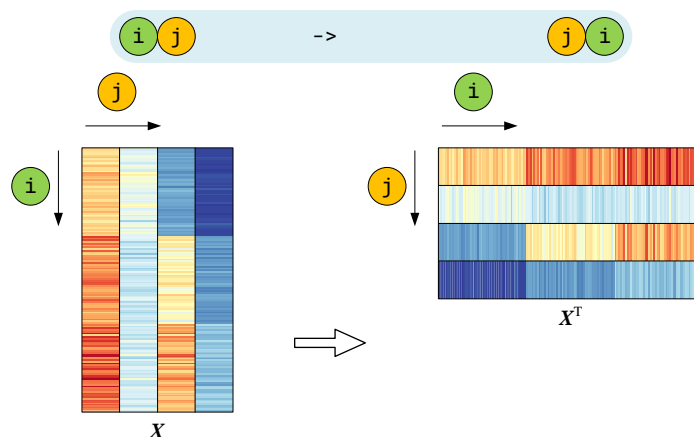


图 5. 利用爱因斯坦求和约定计算二维数组转置

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

三维数组

对于三维数组，我们也可以在指定轴上完成转置。如图 6 所示，对于这个三维数组，我们保持 i 不变，通过调换 j 和 k 维度索引，完成这两个方向的转置。

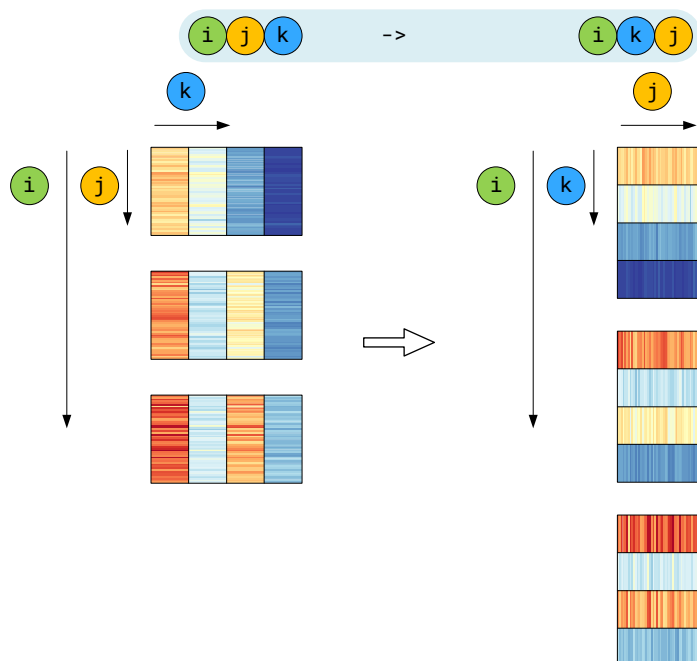


图 6. 利用爱因斯坦求和约定计算三维数组转置

代码 2 中 **b** 首先利用 `np.stack()` 创建了一个三维数组。 `X[y == 0]` 利用布尔切片提取 y 为 0 位置对应的 X 中元素，即鸢尾花数据中标签为 `setosa` 的样本数据。


c 利用 `numpy.einsum()` 完成三维数组转置， i 索引维度保持不变， j 和 k 调换。

这一句下面还给出如何用 `numpy.transpose()` 完成相同的转置运算，这句被注释掉。

```
# 二维数组转置
a np.einsum('ij->ji', X)
# X.T
# np.transpose(X)

# 三维数组
b X3D = np.stack([X[y == 0],
                  X[y == 1],
                  X[y == 2]], axis=0)

# 三维数组转置
c X3D_T = np.einsum('ijk->ikj', X3D)
# np.transpose(X3D, (0, 2, 1))
```

代码 2. 爱因斯坦求和约定代码，转置；使用时请配合前文代码；  Bk1_Ch18_01.ipynb

18.4 矩阵乘法

本节用三个例子介绍如何用爱因斯坦求和约定完成矩阵乘法运算。

格拉姆矩阵

如图 7 所示，在计算格拉姆矩阵 G 时，我们指定第一个矩阵 X 的维度索引为 i 、 j ，第二个 X 维度索引为 i 、 k 。利用爱因斯坦求和约定，维度索引 i 被折叠。

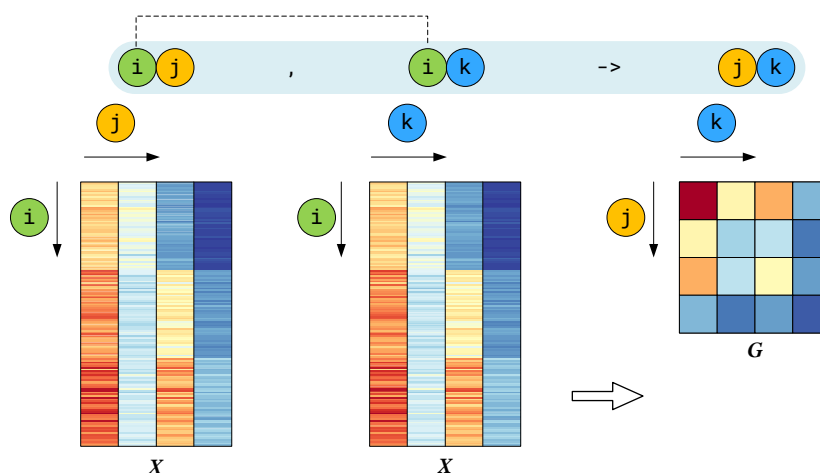


图 7. 利用爱因斯坦求和约定计算格拉姆矩阵 G

图 8 总结了在格拉姆矩阵中如何计算对角线元素和非对角线元素。

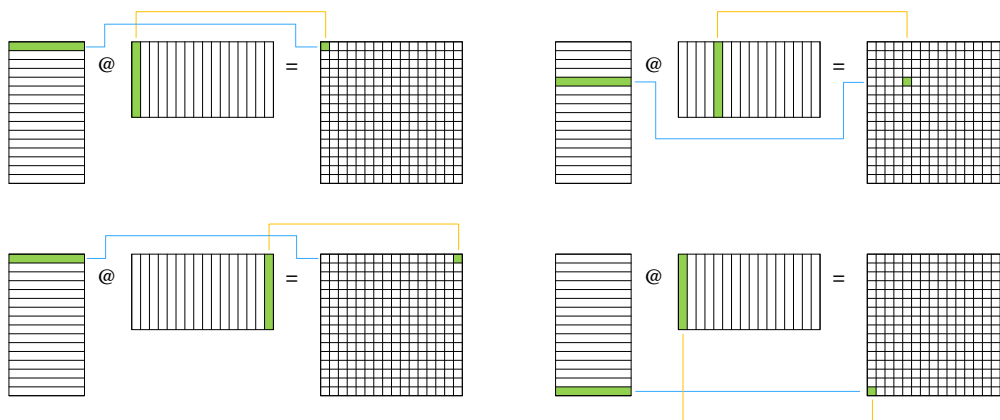


图 8. 格拉姆矩阵对角线元素和非对角线元素

类似地，如图 9 所示，在计算格拉姆矩阵 H 时，我们指定第一个矩阵 X 的维度索引为 i 、 j ，第二个 X 维度索引为 k 、 j 。利用爱因斯坦求和约定，维度索引 j 被折叠。

请大家自行分析代码 3 中 **a** 和 **b** 两句。

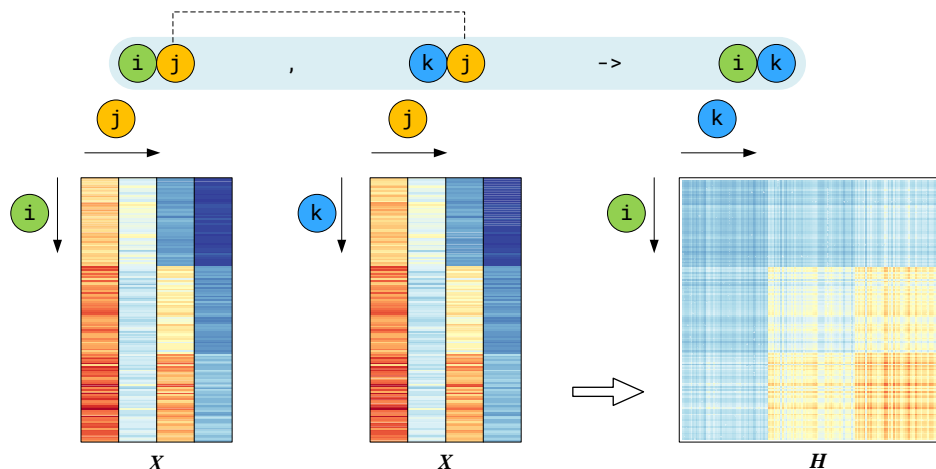


图 9. 利用爱因斯坦求和约定计算格拉姆矩阵 H

分类矩阵乘法

如图 10 所示，我们还可以用爱因斯坦求和约定完成更为复杂的矩阵乘法。在计算格拉姆矩阵时，我们考虑不同鸢尾花类别。也就是说，每一类鸢尾花标签对应一个样本数据切片的格拉姆矩阵。

请大家自行分析代码 3 中 **c**。

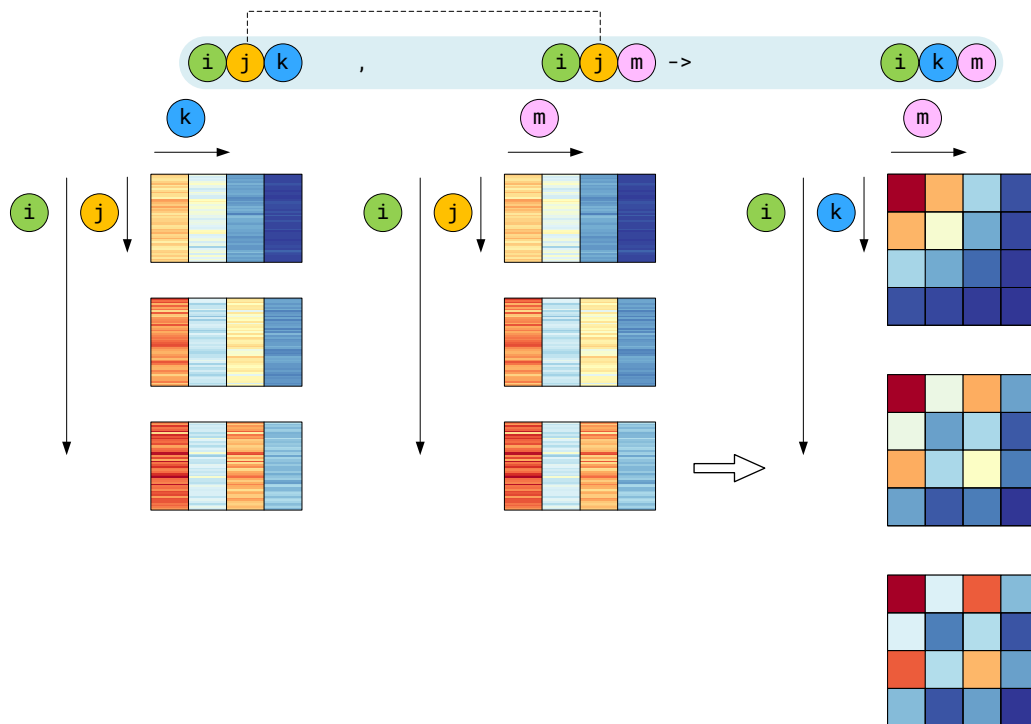



图 10. 利用爱因斯坦求和约定计算格拉姆矩阵，考虑不同鸢尾花类别

? 请大家思考如何用爱因斯坦求和约定完成多个矩阵连乘。

```
# 计算矩阵乘法 X @ X.T
a np.einsum('ij,kj->ik', X, X)
# np.einsum('ij,jk->ik', X, X.T)
# X @ X.T

# 计算矩阵乘法 X.T @ X
b G = np.einsum('ij,ik->jk', X, X)
# np.einsum('ij,jk->ik', X.T, X)
# X.T @ X

# 三维矩阵乘法
c G_3D = np.einsum('ijk,ijm->ikm', X3D, X3D)
# np.einsum('mij,mjk->mik', X3D.T, X3D)
```

代码 3. 爱因斯坦求和约定代码，矩阵乘法；使用时请配合前文代码；  Bk1_Ch18_01.ipynb

18.5 一维数组

有了本章之前的内容做铺垫，用爱因斯坦求和约定完成一维数组相关操作就很容易理解了。图 11 所示为利用 `numpy.einsum()` 完成一维数组求和。

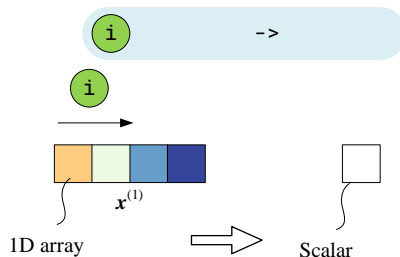
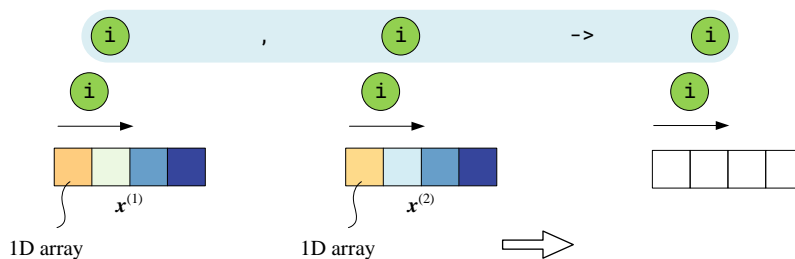


图 11. 利用爱因斯坦求和约定计算一维数组求和

图 12 所示为利用 `numpy.einsum()` 计算一维数逐项积。



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

图 12. 利用爱因斯坦求和约定计算一维数组向量逐项积

图 13 所示为利用 `numpy.einsum()` 计算一维数向量内积，即标量积。

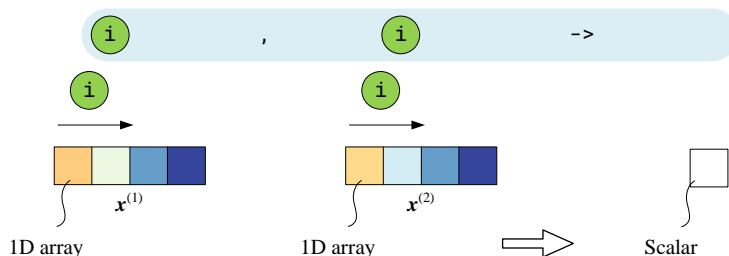


图 13. 利用爱因斯坦求和约定计算一维数向量内积（标量积）

图 14 所示为利用 `numpy.einsum()` 计算一维数向量外积，即张量积。

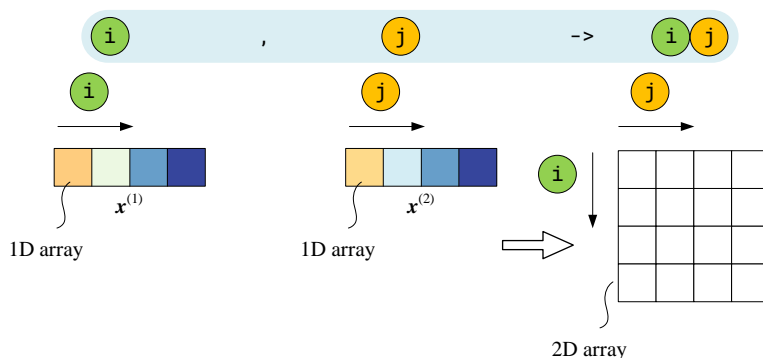


图 14. 利用爱因斯坦求和约定计算一维数组向量外积（张量积）

请大家自行分析代码 4。


```
# 提取两个行向量
a_1D = X[0]
b_1D = X[1]

# 一维向量求和
a np.einsum('i->', a_1D)

# 一维向量逐项积
b np.einsum('i,i->i', a_1D, b_1D)

# 一维向量内积
c np.einsum('i,i->', a_1D, b_1D)

# 一维向量外积
d np.einsum('i,j->ij', a_1D, b_1D)
```

代码 4. 爱因斯坦求和约定代码，一维数组；使用时请配合前文代码；  Bk1_Ch18_01.ipynb

18.6 方阵

本节介绍两个和方阵有关的爱因斯坦求和约定操作。图 15 所示为利用 `numpy.einsum()` 提取方阵对角元素。

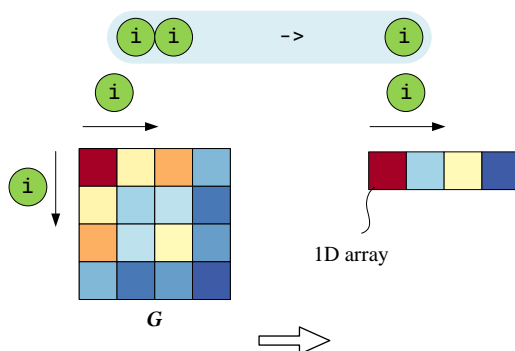


图 15. 利用爱因斯坦求和约定提取对角元素

图 16 所示为利用 `numpy.einsum()` 计算方阵迹。本书前文提过，迹是指方阵主对角线上元素的总和。再次注意，迹只对方阵有定义。

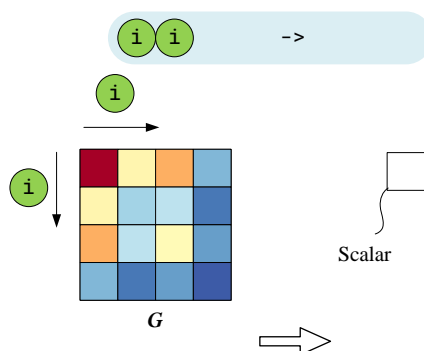


图 16. 利用爱因斯坦求和约定计算方阵迹

请大家自行分析代码 5。

```

a np.einsum('ii->i', G)
# np.diag(G)

b np.einsum('ii->', G)
# np.trace(G)

```


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

代码 5. 爱因斯坦求和约定代码，方阵；使用时请配合前文代码；  Bk1_Ch18_01.ipynb

18.7 统计运算

爱因斯坦求和约定也可以用来完成统计运算，比如均值（图 17）、方差（图 18）、协方差（图 19）。

图 18 中 X_c 代表中心化矩阵，即数据的每一列减去其均值。

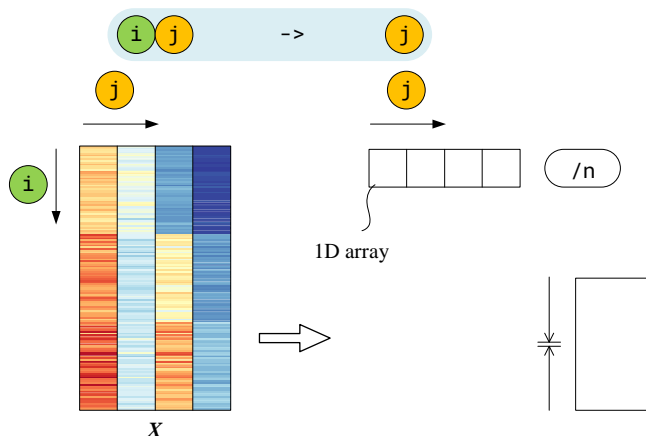


图 17. 利用爱因斯坦求和约定计算每一列均值

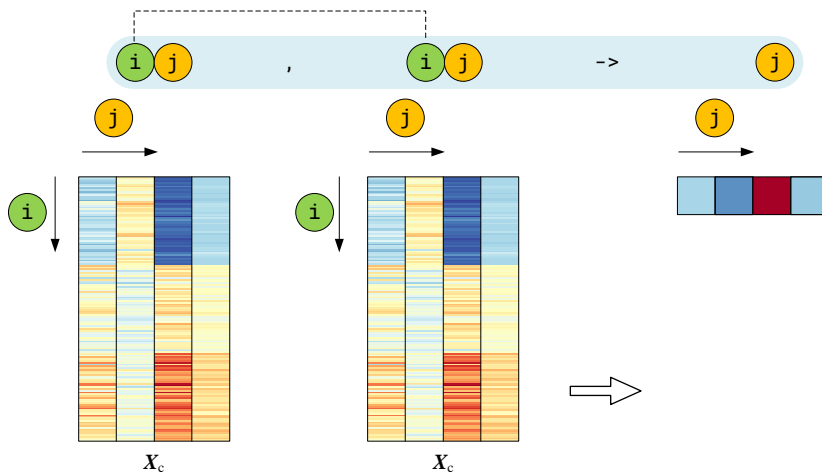


图 18. 利用爱因斯坦求和约定计算方差

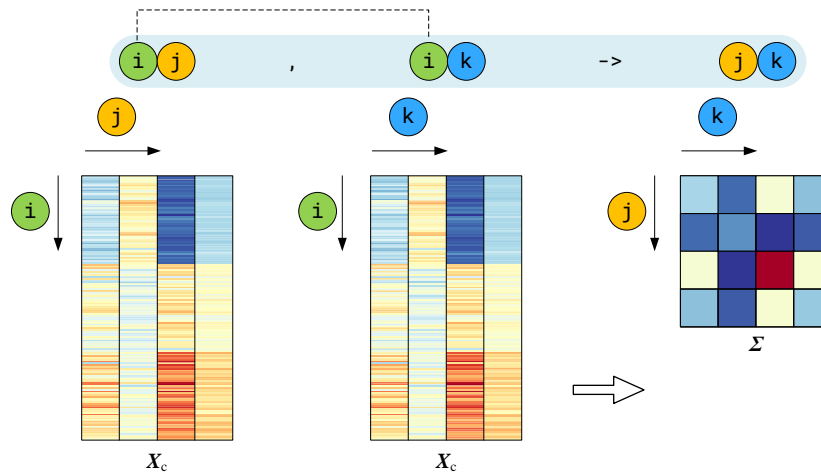



图 19. 利用爱因斯坦求和约定计算协方差矩阵

请大家自行分析代码 6。

```
# 计算列均值，质心
n = X.shape[0] # 样本数量
a mean_X = np.einsum('ij->j', X) / n
# np.mean(X, axis = 0)

# 计算方差
X_c = X - mean_X # 中心化数据
b variance = np.einsum('ij,ij->j', X_c, X_c) / (n - 1)
# np.var(X, axis = 0, ddof = 1)

# 计算协方差矩阵
c cov_matrix = np.einsum('ij,ik->jk', X_c, X_c) / (n - 1)
# np.cov(X.T, ddof = 1)
```

代码 6. 爱因斯坦求和约定代码，统计运算；  Bk1_Ch18_01.ipynb



请大家完成如下题目。

Q1. 唯一题目就是请大家在 JupyterLab 中自己复刻一遍本章所有爱因斯坦求和约定运算。

* 题目很基础，本书不给答案。

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

本章介绍了爱因斯坦求和约定，这个运算法则可以极大简化很多线性代数运算。这一章一方面介绍了这种全新的运算，另一方面我们还借此机会回顾了常见线性代数、概率统计运算。

下一章开始，我们正式进入“数据”板块，学习有关 Pandas 库的各种操作。