

15

Basic Computations in NumPy

NumPy 常见运算

使用 NumPy 完成算数、代数、统计运算



生活只有两件好事：发现数学和教数学。

Life is good for only two things: discovering mathematics and teaching mathematics.

—— 西梅翁·德尼·泊松 (Siméon Denis Poisson) | 法国数学家 | 1781 ~ 1840



15.1 加减乘除乘幂

在 NumPy 中，基本的加减乘除、乘幂运算如下：

- ▶ 加法：使用 + 运算符或 `numpy.add()` 函数实现。
- ▶ 减法：使用 - 运算符或 `numpy.subtract()` 函数实现。
- ▶ 乘法：使用 * 运算符或 `numpy.multiply()` 函数实现。
- ▶ 除法：使用 / 运算符或 `numpy.divide()` 函数实现。
- ▶ 乘幂：使用 ** 运算符或 `numpy.power()` 函数实现。

下面，我们先聊一聊相同形状的数组之间的加减乘除乘幂运算。



本节配套的 Jupyter Notebook 文件是 Bk1_Ch15_01.ipynb。

一维数组

图 1 所示为两个等长度一维数组之间的加、减、乘、除、乘幂运算。这一组运算都是逐项完成，也就是对应位置完成运算。

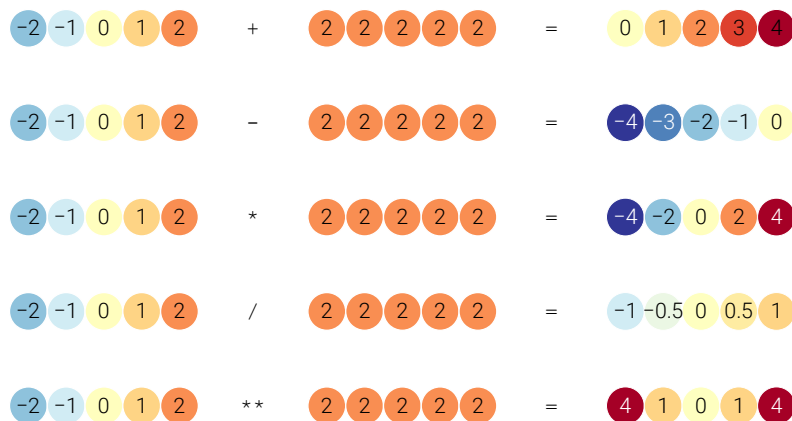


图 1. 一维数组加、减、乘、除、乘幂

二维数组

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 2 所示为二维数组之间的加、减、乘、除、乘幂运算。类似运算也可以用在三维、多维数组上。

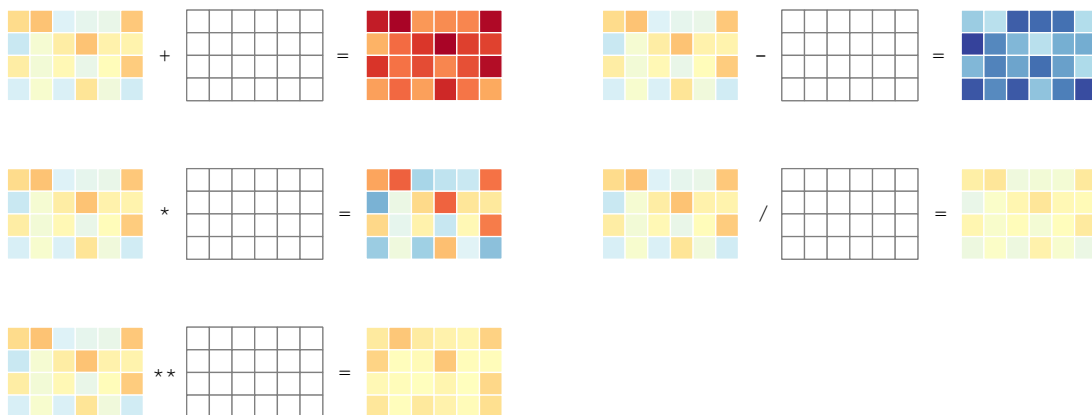


图 2. 二维数组加、减、乘、除、乘幂

15.2 广播原则

简单来说，NumPy 的广播原则 (broadcasting) 指定了不同形状的数组之间的算术运算规则，将形状较小的数组扩展为与形状较大的数组相同，再进行运算，以提高效率。

下面，我们首先以一维数组为例介绍什么是广播原则。

一维数组和标量

图 3 所示一维数组和标量之间完成加、减、乘、除、乘幂运算，大家可以发现图 3 可以替代



图 3. 一维数组和标量加、减、乘、除、乘幂，广播原则

一维数组和列向量

图 4 和图 5 所示为将广播原则用在一维数组和列向量的加法和乘法上。广播过程相当于把一维数组 (5,) 展成 (3, 5) 二维数组，把列向量 (3, 1) 也展成 (3, 5) 二维数组。运算结果也是二维数组。

这两幅图中，大家还会看到，行向量、列向量之间的运算也可以获得同样的结果，请大家在 JupyterLab 中自己完成。

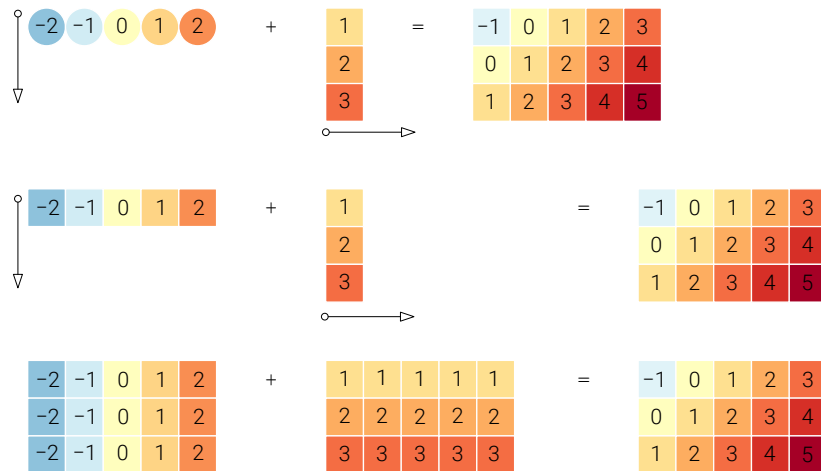


图 4. 一维数组和列向量加法，广播原则

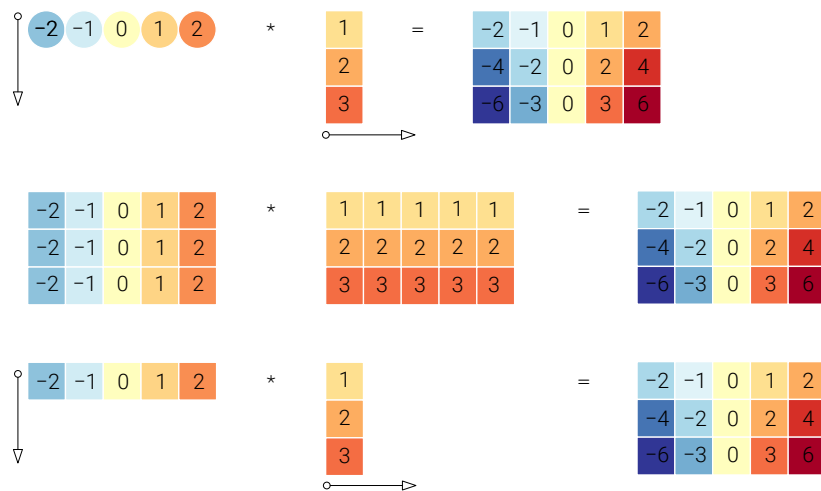


图 5. 一维数组和列向量乘法，广播原则

二维数组和标量

图 6 所示二维数组和标量的运算相当于图 2。

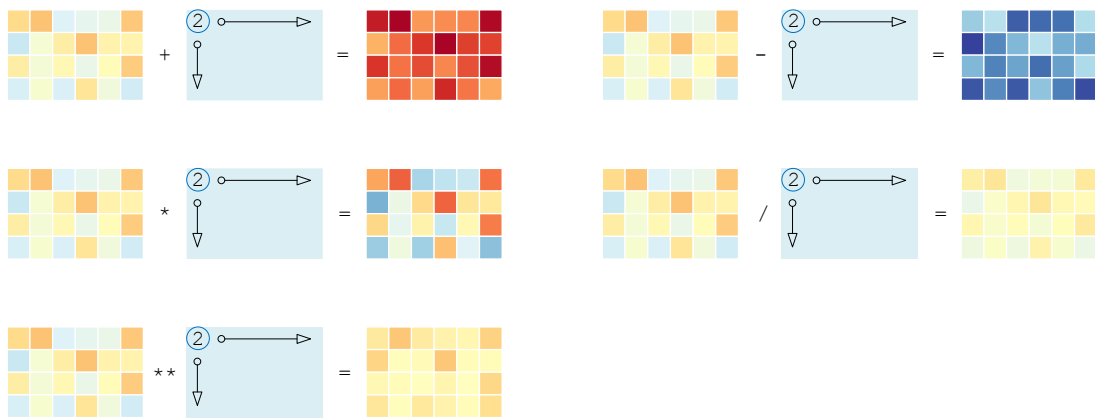


图 6. 二维数组和标量加、减、乘、除、乘幂，广播原则

二维数组和一维数组

图 7 所示为二维数组和一维数组之间的广播原则运算。二维数组的形状为 (4, 6)，一维数组的形状为 (6,)。

图 7 等价于图 8。图 8 中，行向量是二维数组，形状为 (1, 6)。

注意，当前 NumPy 不支持 (4, 6) 和 (4,) 之间的广播运算，会报错。这种情况，要用 (4, 6) 和 (4, 1) 之间的广播原则。

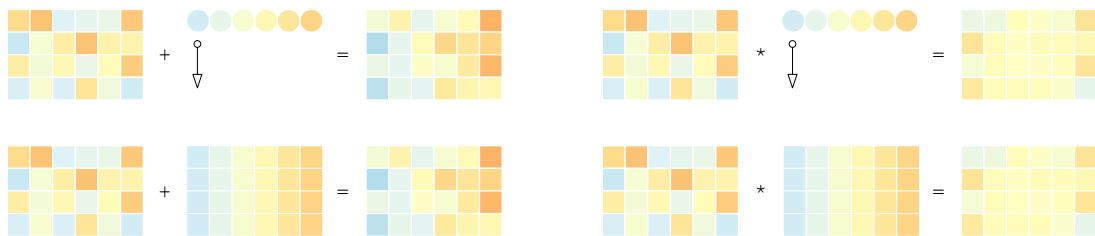


图 7. 二维数组和一维数组加、乘，广播原则

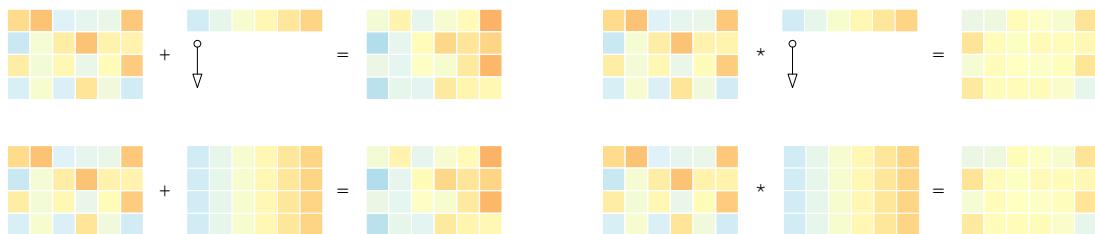


图 8. 二维数组和行向量加、乘，广播原则

二维数组和列向量

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 9 所示为二维数组和列向量之间的广播运算。二维数组的形状为 (4, 6)，列向量形状为 (4, 1)。它们在行数上匹配。

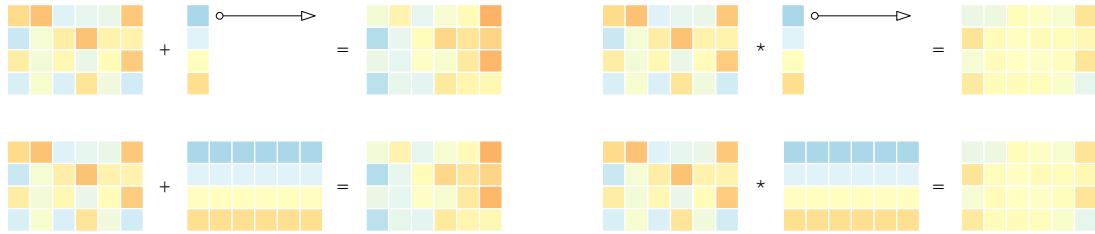


图 9. 二维数组和列向量加、乘，广播原则

15.3 常见函数

NumPy 还提供大量常用函数，如图 10 所示。NumPy 中还给出很多常用常数，比如 `numpy.pi` (圆周率)、`numpy.e` (欧拉数、自然底数)、`numpy.inf` (正无穷)、`numpy.NAN` (非数) 等等。

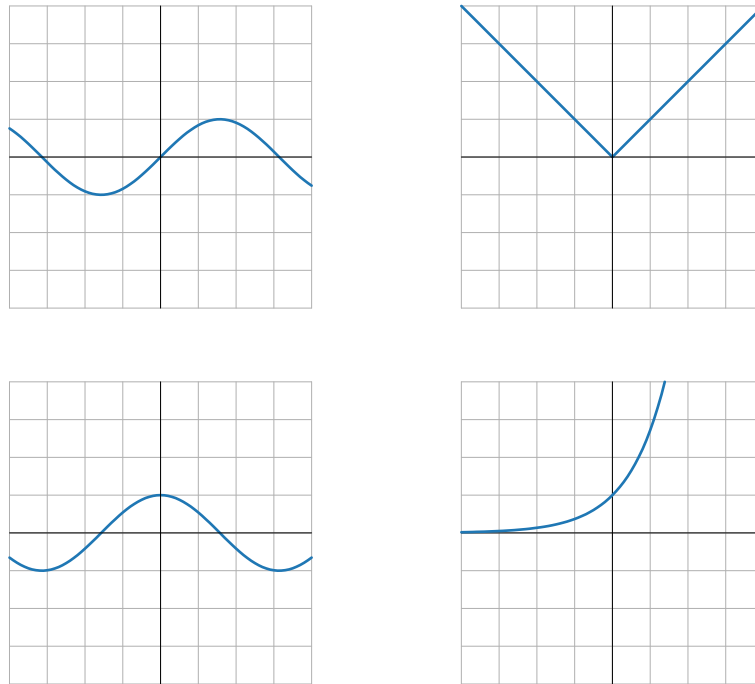


图 10. 四个常用函数

15.4 统计运算

图 11 所示为求最大值的操作。给定二维数组 A ， $A.\max()$ 计算整个数组中最大值。而 $A.\max(\text{axis} = 0)$ 沿行最大值，结果为一维数组。 $A.\max(\text{axis} = 1)$ 沿列最大值，结果同样为一维数组。 $A.\max(\text{axis} = 1, \text{keepdims} = \text{True})$ 的结果为列向量。

此外，计算最小值、求和、均值、方差、标准差等统计运算遵循相同的规则，请大家参考本章 Jupyter Notebook。

注意，计算方差、标准差时，NumPy 默认分母为 n (样本数量)，而不是 $n - 1$ ；为了计算样本方差或标准差，需要设定 $\text{ddof} = 1$ 。

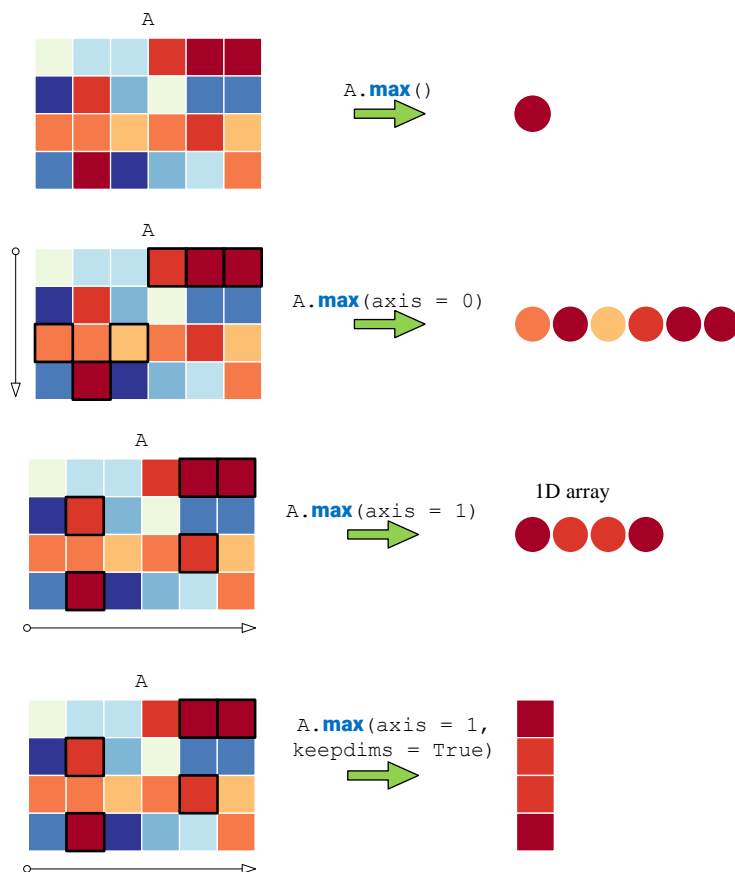


图 11. 沿不同轴求最大值



什么是方差？

方差是统计学中衡量数据分散程度的一种指标，用于衡量一组数据与其平均值之间的偏离程度。方差的计算是将每个数据点与平均值的差的平方求和，并除以数据点的个数 n 减 1，即 $n - 1$ 。方差越大，数据点相对于平均值的离散程度就越高，反之亦然。方差常用于数据分析、建模和实验设计等领域。方差开平方结果为标准差。

NumPy 还提供计算协方差矩阵、相关性系数矩阵的函数。图 12 (a) 所示为鸢尾花数据协方差矩阵，图 12 (b) 为相关性系数矩阵。

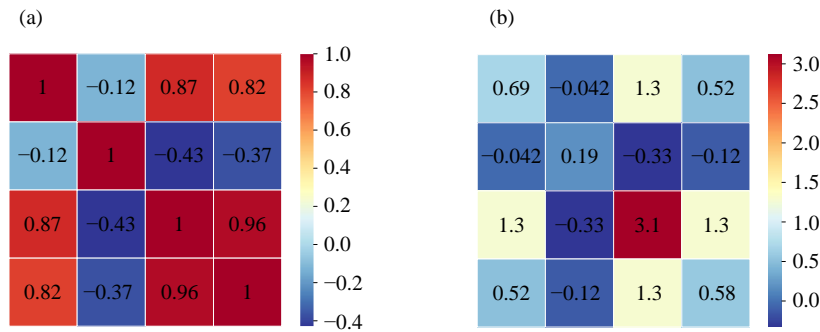


图 12. 鸢尾花数据协方差矩阵、相关性系数矩阵



什么是协方差矩阵?

协方差矩阵是一个方阵，其中的元素代表了数据中各个维度之间的协方差。协方差是用来衡量两个随机变量之间的关系的统计量，它描述的是两个变量的变化趋势是否相似，以及它们之间的相关性强度。协方差矩阵可以用于多变量分析和线性代数中的特征值分解、奇异值分解等计算。在机器学习领域，协方差矩阵常用于数据降维、主成分分析、特征提取等方面。



什么是相关性系数矩阵?

相关性系数矩阵是一个方阵，其中的元素代表了数据中各个维度之间的相关性系数。相关性系数是用来衡量两个变量之间线性关系的程度，它取值范围在-1到1之间，数值越接近于1或-1，说明两个变量之间的线性关系越强；数值越接近于0，说明两个变量之间的线性关系越弱或不存在。相关性系数矩阵可以用于多变量分析、线性回归等领域，通常与协方差矩阵一起使用。在机器学习领域，相关性系数矩阵常用于特征选择和数据可视化等方面。



请大家完成下面 3 道题目，它们的目都是利用 NumPy 计算并可视化公式。

Q1. 给定如下二元高斯函数，参数 $a = 1, b = 2, c = 1$ 。请用 NumPy 和 Matplotlib 线图可视化函数函数图像。

$$f(x) = a \exp\left(-\frac{(x-b)^2}{2c^2}\right)$$

Q2. 给定如下二元高斯函数。请用 NumPy 和 Matplotlib 三维网格面可视化二元函数图像。

$$f(x_1, x_2) = \exp(-x_1^2 - x_2^2)$$

Q3. 下式为二元高斯分布的概率密度函数，请用 NumPy 和 Matplotlib 填充等高线可视化这个二元函数图像。参数具体为 $\mu_X = 0, \mu_Y = 0, \sigma_X = 1, \sigma_Y = 1, \rho_{XY} = 0.6$ 。

$$f(x, y) = \frac{1}{2\pi\sigma_X\sigma_Y\sqrt{1-\rho^2}} \exp\left(-\frac{1}{2(1-\rho^2)}\left[\left(\frac{x-\mu_X}{\sigma_X}\right)^2 - 2\rho\left(\frac{x-\mu_X}{\sigma_X}\right)\left(\frac{y-\mu_Y}{\sigma_Y}\right) + \left(\frac{y-\mu_Y}{\sigma_Y}\right)^2\right]\right)$$

* 题目答案请参考 Bk1_Ch15_02.ipynb。