成為初級資料分析師 I Python 與資料科學應用

NumPy 101: 實踐科學計算的 Python 套件

郭耀仁

大綱

- 為什麼資料分析師需要 NumPy
- NumPy 基礎
- 陣列處理
- 陣列運算
- 延伸閱讀
- 作業

為什麼資料分析師需要 NumPy

隨堂練習: 1公里是 0.62137 英里,將這幾個長跑距離 (公里)轉換為英里

```
In [1]: distances = [1, 1.6, 3, 5, 10, 21.097, 42.195]
In [3]: print(dist_in_mile)
      [0.62137, 0.994192, 1.86411, 3.106849999999997, 6.21369999999999, 13.1090428
      9, 26.21870715]
```

```
In [4]: # list comprehension
    dist_in_mile = [d * 0.62137 for d in distances]
    print(dist_in_mile)
```

[0.62137, 0.994192, 1.86411, 3.106849999999997, 6.2136999999999, 13.1090428 9, 26.21870715]

```
In [5]: # generator
    dist_in_mile = (d * 0.62137 for d in distances)
    print(list(dist_in_mile))
```

[0.62137, 0.994192, 1.86411, 3.106849999999997, 6.2136999999999, 13.1090428 9, 26.21870715]

```
In [6]: # lambda expression + map
dist_in_mile = list(map(lambda d : d * 0.62137, distances))
print(dist_in_mile)
```

[0.62137, 0.994192, 1.86411, 3.106849999999997, 6.2136999999999, 13.1090428 9, 26.21870715]

隨堂練習: 計算 A 與 B 的內積 C $C_{i,j} = \sum_{i} A_{i,k} B_{k,j}$

```
In [9]: print(C)
```

[[8, 5], [26, 17]]

讓內積更 Generalized

Out[11]: [[8, 5], [26, 17]]

```
ValueError
                                          Traceback (most recent call last)
<ipython-input-12-1100e305aa2a> in <module>
      9 ]
     10
---> 11 get mat dot(A, B)
<ipython-input-10-1982f18a70b8> in get mat dot(A, B)
           J = len(B[0])
      5
        if K A != K B:
---> 7
               raise ValueError("shapes ({},{}) and ({},{}) not aligned: {}
(\dim 1) != \{\} (\dim 0)".format(I, KA, KB, J, KA, KB)\}
           C = [[0 for j in range(J)] for i in range(I)]
      8
            for i in range(I):
ValueError: shapes (2,2) and (3,2) not aligned: 2 (dim 1) != 3 (dim 0)
```

在科學計算使用者眼裡

- 以純量(scalar)作為運算單位還是太麻煩
- 哪些程式語言內建了 Vectorization (向量化) 功能?
 - Matlab
 - R
 - Julia
 - ...etc.

NumPy to the Rescue!

如何將這幾個長跑距離(公里)轉換為英里?

如何計算 A 與 B 的內積 C?

[[8 5] [26 17]]

NumPy 基礎

什麼是 NumPy

NumPy is the fundamental package for scientific computing in Python. It is a Python library that provides a multidimensional array object, various derived objects (such as masked arrays and matrices), and an assortment of routines for fast operations on arrays, including mathematical, logical, shape manipulation, sorting, selecting, I/O, discrete Fourier transforms, basic linear algebra, basic statistical operations, random simulation and much more.

NumPy: Numerical Python

創建一種稱為 ndarray 的類別,彌補了原生 list 缺少的向量化運算(vectorization)功能

ndarray 類別與 list 的差異

At the core of the NumPy package, is the ndarray object. This encapsulates n-dimensional arrays of homogeneous data types, with many operations being performed in compiled code for performance.

- 僅能容納相同的資料類型
- 具有 Fancy Indexing 特性

安裝與載入 NumPy

• 安裝

run in bash shell
pip install numpy

載入

run in python console
import numpy as np

如何創建 ndarray

- 使用 np.array() 函數由既有的 list 轉換而成
- 使用多樣式的 NumPy 函數直接創建

使用 np.array() 函數由既有的 list 轉換而成

[1 2 3 4 5]

int64

```
In [15]: import numpy as np
    homogeneous_list = [1, 2, 3, 4, 5]
    print(type(homogeneous_list))
    arr = np.array(homogeneous_list)
    print(type(arr))
    print(arr)
    print(arr.dtype)

<class 'list'>
    <class 'numpy.ndarray'>
```

可以搭配 dtype 參數指定資料型態

• int:可指定8到64位元的整數型態

• float:可指定16到64位元的浮點數型態

● bool: 布林型態

```
In [16]: import numpy as np
    homogeneous_list = [1, 2, 3, 4, 5]
    arr = np.array(homogeneous_list, dtype=int)
    print(arr.dtype)
    arr = np.array(homogeneous_list, dtype=float)
    print(arr.dtype)
```

int64 float64

常見創建陣列錯誤

```
In [17]: #arr = np.array(1, 2, 3, 4) # WRONG
arr = np.array([1, 2, 3, 4]) # RIGHT
```

- np.zeros(shape) 創建指定外觀充滿 0 的數值陣列
- np.ones(shape) 創建指定外觀充滿 1 的數值陣列
- np.full(shape, fill value) 創建指定外觀充滿 fill_value 的數值陣列
- np.arange(start, stop, step) 創建從 start (包含) 間隔 step 至 stop (不包含) 的等差數列,使用方式同內建函數 range()
- np.linspace(start, stop, num) 創建從 start (包含) 至 stop (包含) 的均 与切割為 num 個資料點的數值陣列
- np.random.random(size) 創建指定外觀介於 0,1 之間、並符合均勻分佈的數值 陣列
- np.random.normal(loc, scale, size) 創建指定外觀以 loc 為平均數、 scale 為標準差常態分佈的數值陣列
- np.random.randint(low, high, size) 創建指定外觀於 low (包含) 到 high (不包含) 之間隨機抽樣之正整數的數值陣列

- `np.zeros(shape
- np.ones(shape)
- np.full(shape, fill_value)

```
In [18]: import numpy as np
    print(np.zeros(5, dtype=int))
    print(np.ones((2, 2), dtype=float))
    print(np.full((2, 2), 5566, dtype=int))

[0 0 0 0 0]
```

```
[0 0 0 0 0]
[[1. 1.]
[1. 1.]]
[[5566 5566]
[5566 5566]]
```

- np.arange(start, stop, step) 創建從 start (包含) 間隔 step 至 stop (不包含) 的等差數列,使用方式同內建函數 range()
- np.linspace(start, stop, num) 創建從 start (包含) 至 stop (包含) 的均 与切割為 num 個資料點的數值陣列

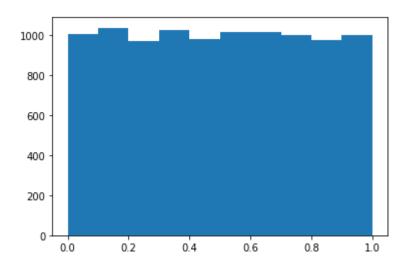
```
In [19]: import numpy as np
    print(np.arange(1, 10, 2))
    print(np.linspace(1, 9, 5, dtype=int))
[1 3 5 7 9]
```

[1 3 5 7 9]

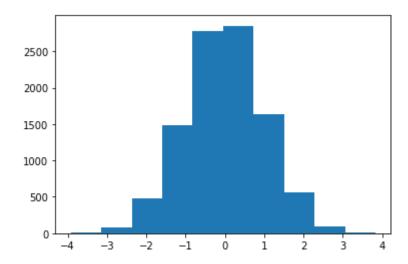
- np.random.random(size)
- np.random.normal(loc, scale, size)
- np.random.randint(low, high, size)

```
In [20]: %matplotlib inline
   import numpy as np
   import matplotlib.pyplot as plt

arr = np.random.random(10000)
   fig = plt.figure()
   ax = plt.axes()
   ax.hist(arr)
   plt.show()
```



```
In [21]: arr = np.random.normal(0, 1, 10000)
    fig = plt.figure()
    ax = plt.axes()
    ax.hist(arr)
    plt.show()
```



```
In [22]: print(np.random.randint(1, 7, size=6))
```

[1 3 4 4 4 5]

陣列處理

ndarray 的屬性

- arr.ndim: 檢視 arr 有幾個維度
- arr.shape: 檢視 arr 的外型
- arr.size: 檢視 arr 的資料筆數,對一維陣列的意涵就像內建函數 len()作用在 list 上一般
- arr.dtype: 檢視 arr 中同質資料的型態

```
In [23]:
          import numpy as np
          zero_d = np.array(5566) # 零維陣列, 純量
one_d = np.array([55, 66, 5566]) # 一維陣列
          two_d = np.ones((3, 3), dtype=int) # 二維陣列
          print("ndim:")
          print(zero d.ndim)
          print(one d.ndim)
          print(two d.ndim)
          print("shape:")
          print(zero d.shape)
          print(one d.shape)
          print(two d.shape)
          print("size:")
          print(zero d.size)
          print(one d.size)
          print(two d.size)
          print("dtype:")
          print(zero d.dtype)
          print(one d.dtype)
          print(two d.dtype)
```

```
ndim:
0
1
2
shape:
()
(3,)
(3,)
(3, 3)
size:
1
3
9
dtype:
int64
int64
```

int64

ndarray 較少被檢視的屬性

- arr.itemsize 檢視 arr 中每一筆資料所使用的位元組(bytes)多寡
- arr.nbytes 檢視 arr 整個物件所使用的位元組(bytes)多寡,一般來說我們期待 arr.nbytes = arr.itemsize x arr.size

ndarray 的索引(indexing)

從ndarray中取出單個資料值的方式與list相同,使用 arr[INDEX] 取值

```
From start to stop: 55 66 56 5566 From stop to start: 5566 66 56 66 55
```

面對二維以上的陣列,ndarray 支援使用 [i,j, ...] 的方式取出位於第 i 列(row)、第 j 欄(column)... 的資料

ndarray 的索引與 list 同樣具有更新的特性,值得注意的是由於同質資料緣故,更新資料會被隱性地轉換型態

```
In [27]: | import numpy as np
        np.random.seed(42)
         arr = np.random.randint(1, 10, size=(3, 4))
        print(arr)
        arr[2, 3] = 5566
        print(arr)
        arr[2, 3] = 55.66
        print(arr)
        arr[2, 3] = False
        print(arr)
        [[7 4 8 5]
         [7 3 7 8]
         [5 4 8 8]]
        [[ 7 4 8 5]
         [ 7 3 7 8]
         [ 5 4 8 5566]]
        [[7 4 8 5]
         [ 7 3 7 8]
         [5 4 8 55]]
        [[7 4 8 5]
         [7 3 7 8]
         [5 4 8 0]]
```

ndarray 的切割(slicing)

與list相同,使用 arr[start:stop:step] 取出陣列的片段

ndarray 特別的索引

- 華麗索引 (Fancy Indexing)
- 布林索引 (Boolean Indexing)

華麗索引 (Fancy Indexing) 指的是以陣列傳入不規則的索引值選取資料值,不用遷就 arr[start:stop:step]的規則

```
In [29]: import numpy as np

np.random.seed(0)
arr = np.random.randint(1, 100, size=(10))
odd_indices = [0, 2, 8]
print(arr)
print(arr[odd_indices])
```

[45 48 65 68 68 10 84 22 37 88] [45 65 37]

布林索引(Boolean Indexing)指的是以外觀相同的陣列傳入布林值,將位置為 True 的資料篩選出來

```
In [30]: import numpy as np

np.random.seed(0)
arr = np.random.randint(1, 100, size=(10))
is_odd = arr % 2 == 1
print(arr)
print(is_odd)
print(arr[is_odd])
```

```
[45 48 65 68 68 10 84 22 37 88]
[True False True False False False False True False]
[45 65 37]
```

重塑外觀

- arr.reshape(m, n, ...) 將數值陣列重塑成運算所需要的外觀
- arr.ravel()將外觀為(m,n,...)的數值陣列調整回一維

```
In [31]: # reshape
import numpy as np

arr = np.arange(1, 10)
print(arr)
print(arr.shape)
print(arr.reshape(3, 3))
print(arr.reshape(3, 3).shape)
[1 2 3 4 5 6 7 8 9]
(9,)
[[1 2 3]
```

[4 5 6] [7 8 9]] (3, 3)

```
In [32]: # reshape conveniently
import numpy as np

arr = np.arange(1, 10)
print(arr.reshape(3, -1))
print(arr.reshape(-1, 3))

[[1 2 3]
   [4 5 6]
   [7 8 9]]
```

[[1 2 3] [4 5 6] [7 8 9]]

(9,)

印出陣列

- 陣列如果太巨大,NumPy 會自動忽略中間的資訊
- 可以利用 np.set printoptions(threshold=) 印出更多內容

```
In [35]: # 還原預設值
#np.set_printoptions(edgeitems=3,infstr='inf',
# linewidth=75, nanstr='nan', precision=8,
# suppress=False, threshold=1000, formatter=None)
```

複製陣列

ndarray 有一個重要的預設特性稱為「不複製」,因此不論在切割或重新宣告的情境中都是 創建陣列的 View,而非複製另一個陣列,這代表著對以 View 型式存在的子陣列(Subarray)更新會改動到原始陣列

若希望實踐陣列的複製,可以運用其.copy()方法

9]]

[1 2 3 4 5 6 7 8 9]

合併陣列

```
• np.concatenate([arr0, arr1, ...], axis)
```

- np.vstack([arr0, arr1, ...])
- np.hstack([arr0, arr1, ...])

```
In [38]: import numpy as np

upper_arr = np.arange(1, 5).reshape(2, 2)
lower_arr = np.arange(5, 9).reshape(2, 2)
print("Merge with np.concatenate():")
print(np.concatenate([upper_arr, lower_arr])) # default axis=0
print("Merge with np.vstack():")
print(np.vstack([upper_arr, lower_arr]))

Merge with np.concatenate():
[[1 2]
[3 4]
[5 6]
```

[7 8]]

[[1 2] [3 4] [5 6] [7 8]]

Merge with np.vstack():

當 axis=1 的時候效果與 np.hstack() 函數相同,是以水平方向進行合併

```
In [39]:
         import numpy as np
         left arr = np.zeros(4, dtype=int).reshape(-1, 1)
         right arr = np.ones(4, dtype=int).reshape(-1, 1)
         print("Merge with np.concatenate():")
         print(np.concatenate([left arr, right arr], axis=1))
         print("Merge with np.hstack():")
         print(np.hstack([left arr, right arr]))
         Merge with np.concatenate():
         [[0 1]
          [0 1]
          [0 1]
          [0 1]]
         Merge with np.hstack():
         [[0 1]
          [0 1]
          [0 1]
          [0 1]]
```

拆分陣列

- np.split()
- np.vsplit()
- np.hsplit()

```
In [40]: import numpy as np
arr = np.arange(11, 21)
arr0, arr1, arr2 = np.split(arr, [2, 5])
print(arr0, arr1, arr2)
```

[11 12] [13 14 15] [16 17 18 19 20]

```
In [41]:
         import numpy as np
         arr = np.arange(24).reshape(6, 4)
         print(arr)
         print("=====")
         arr0, arr1, arr2 = np.vsplit(arr, [1, 3])
         print(arr0)
         print("=====")
         print(arr1)
         print("=====")
         print(arr2)
         [ [ 0 1 2 3 ]
          [4567]
          [ 8 9 10 11]
          [12 13 14 15]
          [16 17 18 19]
          [20 21 22 23]]
         =====
```

[[0 1 2 3]]

[[4 5 6 7] [8 9 10 11]]

[[12 13 14 15] [16 17 18 19] [20 21 22 23]]

=====

=====

```
In [42]:
         import numpy as np
         arr = np.arange(24).reshape(4, 6)
         print(arr)
         print("=====")
         arr0, arr1, arr2 = np.hsplit(arr, [1, 3])
         print(arr0)
         print("=====")
         print(arr1)
         print("=====")
         print(arr2)
         [[ 0 1 2 3 4 5]
          [6 7 8 9 10 11]
          [12 13 14 15 16 17]
          [18 19 20 21 22 23]]
         =====
         [[0]]
         [6]
          [12]
          [18]]
         =====
         [[ 1 2]
          [78]
          [13 14]
          [19 20]]
         =====
         [[ 3 4 5]
```

[9 10 11] [15 16 17] [21 22 23]]

陣列運算

如何透過 NumPy 的通用函數(Universal Functions)與聚合函數(Aggregate Functions)運算數值陣列

較緩慢的迭代運算

• 我們可以使用 %timeit 得知若想以迭代對一百萬筆隨機整數進行「倒數」的運算要 花多少時間

```
In [43]: import numpy as np
long_arr = np.random.randint(1, 101, size=1000000)
%timeit [1/i for i in long_arr]
```

321 ms \pm 12.6 ms per loop (mean \pm std. dev. of 7 runs, 1 loop each)

使用 ndarray 的通用函數運算,就像是利用已經編譯過的程式對固定物件類型計算,效率較高

```
In [44]: long_arr = np.random.randint(1, 101, size=1000000)
%timeit 1 / long_arr
```

2.13 ms \pm 124 μ s per loop (mean \pm std. dev. of 7 runs, 100 loops each)

入門的通用函數與純量的數值運算符相同

- np.add(): 同+運算符
- np.subtract(): 同-運算符
- np.multiply(): 同*運算符
- np.divide(): 同/運算符
- np.power(): 同**運算符
- np.floor_divide(): 同//運算符
- np.mod(): 同%運算符

使用運算符的時候,如果任一邊的長度為1(或為純量外觀),就會產生廣播(Broadcasting)

```
In [45]: import numpy as np

arr = np.array([2, 2, 2, 2, 2])
    powers = np.arange(1, 6)
    print(arr)
    print(powers)
    print(arr**powers)
    print("Broadcasting:")
    print(2 ** powers)
```

```
[2 2 2 2 2]
[1 2 3 4 5]
[2 4 8 16 32]
Broadcasting:
[2 4 8 16 32]
```

比較、布林運算符也都一併適用廣播(Broadcasting)

```
In [46]: import numpy as np
arr = np.arange(9)
print(arr % 2 == 0)
print(arr[arr % 2 == 0])

[ True False True False True False True]
[0 2 4 6 8]
```

隨堂練習:從隨機陣列中挑出偶數

隨堂練習:從隨機陣列中挑出質數

假如希望對數值陣列使用的通用函數是為自己需求量身訂製的,這時可以將函數定義後以 np.vectorize()轉換為一個通用函數

```
In [54]: import numpy as np

def is_prime(x):
    div_cnt = 0
    for i in range(1, x+1):
        if x % i == 0:
            div_cnt += 1
        if div_cnt > 2:
            break
    return div_cnt == 2

is_prime_ufunc = np.vectorize(is_prime)
```

```
In [55]: print(arr)
    print("Whether or not it is a prime:", )
    print(is_prime_ufunc(arr))
    print(arr[is_prime_ufunc(arr)])

[ 9 77 75 40 11 32 69 49 48 99 41 95 45 42 27 88 9 40 77 35 90 59 64 14
    40 32 43 45 60 5 37 73 14 9 30 64 51 17 54 35 87 60 73 8 70 87 16 73
    48 15]
    Whether or not it is a prime:
    [False False False False True False False False False True False
    False False False False False False False False False False False
    False False False False False False False False False False False
    False False True False False False False False False False False False
    False False False False True True True False False False False
    False True False False False True False False False False True
```

False False

[11 41 59 43 5 37 73 17 73 73]

聚合函數

通用與聚合函數最大的差一點就在於輸入與輸出的數值陣列長度,不同於通用函數,聚合函數所輸出的數值陣列多數僅有長度1,或遠小於輸入數值陣列的長度。

注意聚合函數的兩個特性

- 能沿指定維度聚合
- 多數具有可運算遺漏值的相對應函數

能沿指定維度聚合

[11 12 13 14 15]]

[18 21 24 27 30]

[15 40 65]

120

```
In [56]: import numpy as np

mat = np.arange(1, 16).reshape(3, 5)
print(mat)
print(np.sum(mat)) # 1 個輸出
print(np.sum(mat, axis=0)) # 5 個輸出
print(np.sum(mat, axis=1)) # 3 個輸出

[[ 1 2 3 4 5]
[ 6 7 8 9 10]
```

多數具有可運算遺漏值的相對應函數

- np.sum 與 np.nansum
- np.prod 與 np.nanprod
- np.mean 與 np.nanmean
- np.median 與 np.nanmedian
- np.std 與 np.nanstd
- np.var 與 np.nanvar
- np.min 與 np.nanmin
- np.max 與 np.nanmax
- np.argmin 與 np.nanargmin
- np.argmax 與 np.nanargmax

延伸閱讀

NumPy User Guide (https://www.numpy.org/devdocs/user/index.html)



創建一個九九乘法表的陣列

寫作一個可以計算<u>樣本標準差</u> (https://zh.wikipedia.org/wiki/%E6%A8%99%E6%BA%96%E5%B7 %AE)的函數

$$SD = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N} (x_i - \bar{x})^2}$$

```
In [60]:
         arr = np.arange(10)
         hw(arr)
Out[60]: 3.0276503540974917
In [61]: arr = np.arange(1)
         hw(arr)
                                                   Traceback (most recent call last)
         ValueError
         <ipython-input-61-5f30b5046560> in <module>
               1 arr = np.arange(1)
         ---> 2 hw(arr)
         <ipython-input-59-b3445b322417>in hw(x)
               3 \text{ def } hw(x):
                    if x.size == 1:
         ---> 5
                        raise ValueError("The length of array must be larger than 1.")
                 return x.std(ddof=1)
         ValueError: The length of array must be larger than 1.
```