Введение в машинное обучение

Библиотека языка Питон NumPy

Дьяконов А.Г.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова (Москва, Россия)

NumPy – пакет для языка программирования Python

- N-мерные массивы
- функции линейной алгебры, преобразования Фурье, псевдослучайные генераторы
- средства для интеграции C/C++ и Fortran

По сути, копия MatLab

Для начала работы:

import numpy as np

Для графики:

%matplotlib inline
import matplotlib.pyplot as plt

Векторы

```
a = np.array([0, 1, 2, 3])
b = np.array(range(4))
c = np.arange(4)

а, b, c

(array([0, 1, 2, 3]),
    array([0, 1, 2, 3]),
    array([0, 1, 2, 3]))
```

Зачем нужен пакет

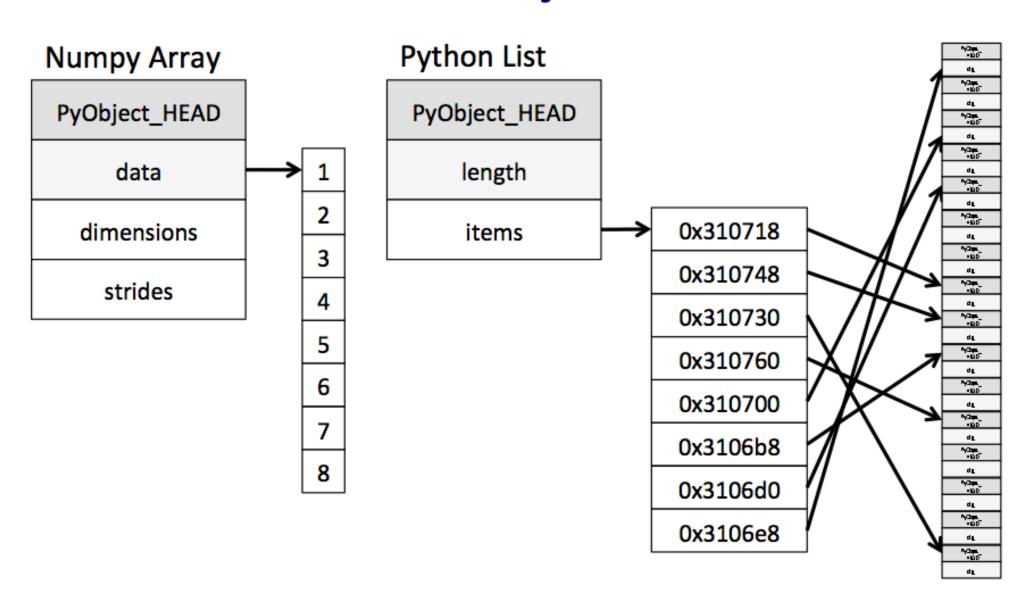
```
%timeit z = [x ** 2 for x in range(1000)]

206 µs ± 1.98 µs per loop

%timeit z = np.arange(1000) ** 2

2.97 µs ± 31.7 ns per loop
```

Типы в Python



https://jakevdp.github.io/PythonDataScienceHandbook/02.01-understanding-data-types.html

Создание векторов

```
np.full(5, 3.14) # из одного элемента
[3.14 3.14 3.14 3.14 3.14]
np.arange(1, 10, 3) # от, до, шаг
[1 4 7]
np.linspace(0, 1, 5) \# от, до, сколько
[0. 0.25 0.5 0.75 1. ]
np.ones(3) # из единиц
[1. 1. 1.]
np.ones(3, dtype=int) # из единиц
[1 \ 1 \ 1]
np.zeros(3) # из нулей
np.empty(4) # просто выделить память
[0.77132064 0.02075195 0.63364823 0.74880388]
```

Создание векторов

```
np.random.seed(10) # фиксируем сид
np.random.rand(4)
[0.77132064 0.02075195 0.63364823 0.74880388]
np.random.randn(4)
[-1.54540029 -0.00838385 0.62133597 -0.72008556]
np.random.randint(0, 5, 10)
[0 2 0 4 3 0 4 3 0 3]
np.random.choice([2, 3, 4], 5, replace=True)
[3 2 2 4 3]
np.tile([1, 2], 3) # повторить
[1 \ 2 \ 1 \ 2 \ 1 \ 2]
np.choose([0,1,0,1,1], [[1,1,1,1,1], [2,2,2,2,2]]) # откуда брать
[1 \ 2 \ 1 \ 2 \ 2]
```

Динамическая типизация

```
x = np.array([1, 2])
print (x.dtype)
int.64
x = x + 0.0 \# x += 0.0  конкретно
здесь не сработает
print (x.dtype)
float.64
x = x + 2j
print (x.dtype)
complex128
x = x > 0
print (x.dtype)
bool
```

Тип можно указывать при создании массива.

Разные типы – разная потребляемая память

Типы

```
x = np.array([-0.6, 0.4, 1.4, 1.5, 1.6])
print (np.round(x))
[-1. 0. 1. 2. 2.]
print (x.astype(int))
[0 \ 0 \ 1 \ 1 \ 1]
print (np.round(x))
[-1. 0. 1. 2. 2.]
print (np.round(x).astype(int))
[-1 \ 0 \ 1 \ 2 \ 2]
  uint8 8 bits
                                     float16 16 bits
uint16 16 bits
                                      float32 32 bits
uint32 32 bits
                              float64 64 bits (same as float)
uint64 64 bits float96 96 bits, platform-dependent (same as np.longdouble)
                   float128 128 bits, platform-dependent (same as np.longdouble)
```

Индексация как для списков

```
x = np.arange(10)
x[0]
x[:2]
[0 1]
x[-2:]
[8 9]
x[::-2]
[9 7 5 3 1]
x[1:8:3])
[1 4 7]
x = np.arange(10)
x[1:8:3] = -1
X
\begin{bmatrix} 0 & -1 & 2 & 3 & -1 & 5 & 6 & -1 & 8 & 9 \end{bmatrix}
```

C 0 (как в C, Matlab и Fortran – с 1)

Индексировать можно и при присваивании.

Тонкие моменты

Присваивание никогда не меняет тип

```
x = np.arange(5, dtype='int')
x[1] = 3.14 # округление
x
array([0, 3, 2, 3, 4])
```

Общая память

не происходит копирования!

```
x = np.ones(3)
x2 = x[1:] # надо .copy()
x2[0] = 0
x
array([1., 0., 1.])
```

При выделении подматрицы – она не копируется!

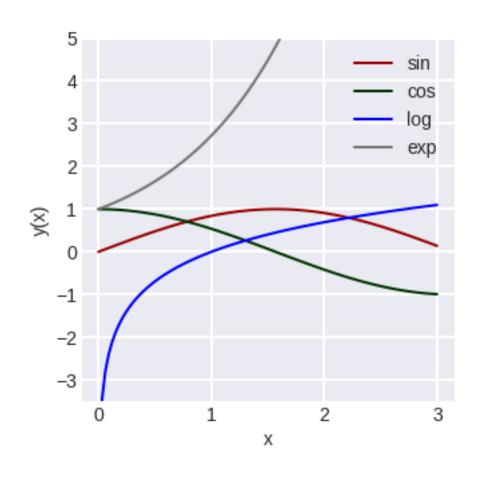
```
np.may_share_memory(x, y)
True
```

Операции – поэлементные

```
x = np.array([1, 2, 3])
y = np.array([2, 1, 0])
                              x + 1
                              [2 3 4]
x + y
[3 3 3]
                              2 ** X
                              [2 4 8]
x - y
[-1 \quad 1 \quad 3]
                              np.sin(x)
                              [0.84147098 0.90929743 0.14112001]
x * y
[2 2 0]
                              np.exp(x)
                              [ 2.71828183  7.3890561  20.08553692]
x / y
[0.5 2. inf]
x ** y
                              np.log(x).round(2)
                              [0. 0.69 1.1]
[1 \ 2 \ 1]
```

Пример использования векторов – графики

```
x = np.linspace(0, 3, 100)
plt.figure(figsize=(5, 5))
plt.plot(x, np.sin(x), lw=2,
c='#990000', label='sin')
plt.plot(x, np.cos(x), lw=2,
c='#003300', label='cos')
plt.plot(x, np.log(x), lw=2,
c='#0000FF', label='log')
plt.plot(x, np.exp(x), lw=2,
c='#777777', label='exp')
plt.ylim([-3.5, 5])
plt.grid(lw=2)
plt.legend()
plt.xlabel('x')
plt.ylabel('y(x)')
plt.show()
```



Логические массивы (маски)

```
x = np.round(np.random.rand(6), 2)
[ 0.44 0.03 0.55 0.44 0.42 0.33]
y = np.round(np.random.rand(6), 2)
[ 0.2  0.62  0.3  0.27  0.62  0.53]
x[y > 0.5]
[ 0.03 0.42 0.33]
xi = x > 0.5
[False False True False False]
yi = y > 0.5
[False True False False True True]
xi | yi
[False True True False True]
xi & yi
[False False False False False]
~xi
```

round – округление

индексация логическим вектором

Дизъюнкция, конъюнкция и отрицание.

Можно использовать logical_or, np.logical_and

[True True False True True]

Логические массивы (маски)

```
xi.any()
True
xi.all()
False
yi.nonzero()
array([1, 4, 5])
x = np.array([0.1, 0.5, 0.2, 0.6])
x[x<0.3] = 0.3
array([ 0.3, 0.5, 0.3, 0.6])
# другой способ
np.maximum (x, 0.3)
array([ 0.3, 0.5, 0.3, 0.6])
```

any – хотя бы один эл-т True all – все элементы True

> nonzero – индексы ненулевых эл-ов

Замена элементов

Сравнения

```
x = np.array([1, 3, 2])
y = np.array([2, 1, 2])
print (x > y)
[False True False]
print (x == y)
[False False True]
print (np.array_equal(x, y))
False
print (np.array_equal(x, x))
True
```

Разные максимумы

```
x = np.array([0.1, 0.5, 0.2, 0.6])
y = np.array([0.2, 0.4, 0.3, 0.1])
x.min(), x.max()
0.1 0.6
np.min(x), np.max(x)
0.1 0.6
np.minimum(x, y)
[ 0.1 0.4 0.2 0.1]
np.maximum(x, y)
[ 0.2 0.5 0.3 0.6]
np.argmax(x)
3
```

minimum, maximum –
поэлементные минимум и
максимум
argmax, argmin – индекс
максимального /
минимального эл-та

Кумулятивные функции

```
x = np.array([2, 1, 2, 0, 0, 4])
x.sum(), np.sum(x)
(9, 9)
x.cumsum()
[2 3 5 5 5 9]
x.prod(), np.prod(x)
(0, 0)
x.cumprod()
[2 2 4 0 0 0]
np.unique(x)
[0 \ 1 \ 2 \ 4]
u, i = np.unique(x,
return counts=True)
[0 \ 1 \ 2 \ 4] \ [2 \ 1 \ 2 \ 1]
```

cumsum - кумулятивная сумма,

cumprod – кумулятивное произведение (можно делать по отдельным размерностям в матрице)

unique – уникальные элементы (устранение повторов)

Опреации с «нанами»

```
x = np.array([2, 1, 2, np.nan, np.nan, 4])
np.nansum(x)
9.0
np.nanprod(x)
16.0
```

Сортировка

```
x = np.random.randint(0, 6, 10)
[0 1 3 1 3 5 3 5 2 2]

np.sort(x)
[0 1 1 2 2 3 3 3 5 5]

np.argsort(x)
[0 1 3 8 9 2 4 6 5 7]

np.partition(x, 3) # <3 слева, >3 справа
[0 1 1 2 2 5 3 5 3 5]
```

Матрицы

```
b = np.array([[0, 1, 2], [3, 4, 5]])
                0 1 2
              0 0 1 2
              1 3 4 5
# такая же матрица!
a = np.arange(6).reshape(2, 3)
b.shape, b.ndim, len(b), a.shape,
a.ndim, len(a)
((2, 3), 2, 2, (2, 3), 2, 2)
x = np.arange(6).reshape(2, 3)
x.T.ravel()
array([0, 3, 1, 4, 2, 5])
```

Создание матрицы

reshape – изменение размеров (можно какую-нибудь размерность пометить –1)

T – транспозиция ravel – векторизация (flattening)

Матрицы

```
np.eye(3)
  [[1. 0. 0.]
  [ 0. 1. 0.]
  [ 0. 0. 1.]]
```

Диагонализация бывает двух видов: матрица \rightarrow вектор, вектор \rightarrow матрица

Матрицы

```
np.triu(np.ones((5, 5)))
 [ [ 1. 1. 1. 1. ]
 [ 0. 1. 1. 1. 1.]
 [ 0. 0. 1. 1. 1.]
 [ 0. 0. 0. 1. 1.]
 [ 0. 0. 0. 0. 1.]]
np.tril(np.ones((5, 5)), k=-2)
[ 0 .
      0. 0. 0. 0.1
 [ 0. 0. 0. 0.
                0.1
 [1. 0. 0. 0. 0.]
 [1. 1. 0. 0. 0.]
 [ 1. 1. 1. 0. 0.]]
np.triu(np.ones((5, 5)).T, k=1)
[ [ 0. 1. 1. 1. 1. ]
 [ 0. 0. 1. 1.
                1.]
 [ 0. 0. 0. 1. 1.]
 [ 0. 0. 0. 0. 1.]
 [ 0. 0. 0. 0. 0.11
```

Транспозиция – просто способ просмотра

Индексация

```
x = np.arange(12).reshape(3, 4)
[[0 1 2 3]
 [ 4 5 6 7]
  8 9 10 11]]
x[2, 3]
11
x[:, 0]
[0 4 8]
x[1, :]
[4 5 6 7]
x[-2:, -2:]
[[67]
[10 11]]
x[::2, ::2]
[[0 2]
 [ 8 10]]
```

Изменение размеров матрицы

Разные размеры матриц

```
x = np.arange(3)
y = np.arange(3)[:, np.newaxis]
z = np.arange(3)[np.newaxis,:]
print (x.shape, y.shape, z.shape)
(3,) (3, 1) (1, 3)
x + x, x + y, x + z
(array([0, 2, 4]),
 array([[0, 1, 2],
        [1, 2, 3],
        [2, 3, 4]]),
 array([[0, 2, 4]]))
```

Разные максимумы

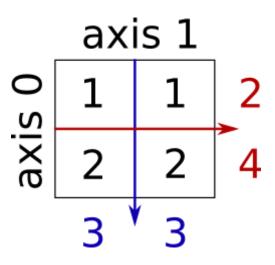
```
x = np.array([[1, 4], [3, 5]])
x.min()
x.min(axis=0)
[1 \ 4]
x.min(axis=1)
[1 3]
x.min(axis=0, keepdims=True)
[1 4]
x.min(axis=1, keepdims=True)
 \lceil \lceil 1 \rceil
 [3]]
```

Аналогично с функциями тах, sum (сумма), prod (произведение), mean (среднее), median (медиана), std (стандартное отклонение), argmax, argmin.

Можно выполнять по отдельным размерностям, сохраняя размерность матрицы.

Функции имеют направление

```
x = np.arange(12).reshape(3, 4)
  4 5 6 7]
  8 9 10 11]]
np.max(x)
11
np.max(x, axis=0)
[8 9 10 11]
np.max(x, axis=1)
[ 3 7 11]
np.maximum(x, 5)
 [[5 5 5 5]
  5 5 6 7]
  8 9 10 11]]
```



http://www.scipylectures.org/intro/numpy/operations.html

Операции над матрицами аналогично операциям над векторами

```
np.ones((2, 2)) + np.eye(2)
[[2. 1.]
 [ 1. 2.]]
np.ones((2, 2)) ** 2
[ [ 1. 1.]
 [ 1. 1.]]
np.ones((2, 2)) * np.ones((2, 2))
[ [ 1. 1. ]
 [ 1. 1.]]
np.dot(np.ones((2, 2)), np.ones((2, 2)))
 [[ 2. 2.]
 [ 2. 2.]]
```

Операция * – поэлементное умножение, чтобы сделать матричное, используйте dot.

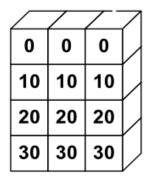
Broadcasting – операции с матрицами разных размеров

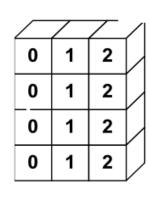
```
np.ones((3, 3)) + np.arange(3)
array([[ 1., 2., 3.],
       [ 1., 2., 3.],
       [ 1., 2., 3.11)
x = np.ones((3, 3))
x[0] = 0
X
array([[ 0., 0., 0.],
       [ 1., 1., 1.],
       [1., 1., 1.]
x = np.array([1, 5, 0, 2])
np.abs(x - x[:,np.newaxis])
array([[0, 4, 1, 1],
       [4, 0, 5, 3],
       [1, 5, 0, 2],
       [1, 3, 2, 0]]
```

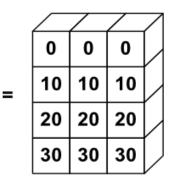
Ещё мы встречали np.newaxis

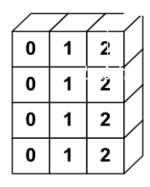
Матрица попарных расстояний

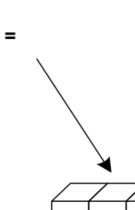
Broadcasting



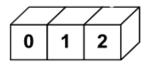








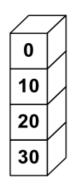
0	0	0	И
10	10	10	И
20	20	20	
30	30	30	

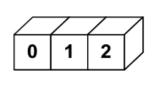


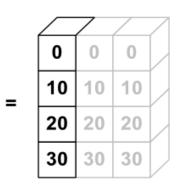
	$ \angle $	$\overline{}$		/
	0	0	0	
_	10	10	10	
	20	20	20	
	30	30	30	

			\overline{A}
0	1	2	И
0	1	2	
0	1	2	
0	1	2	

_			$\overline{}$	7
C)	1	2	
1	0	11	12	
2	0	21	22	
3	0	31	32	







		$\overline{}$	-
0	1	2	
0	1	2	
0	1	2	
0	1	2	



Конкатенация

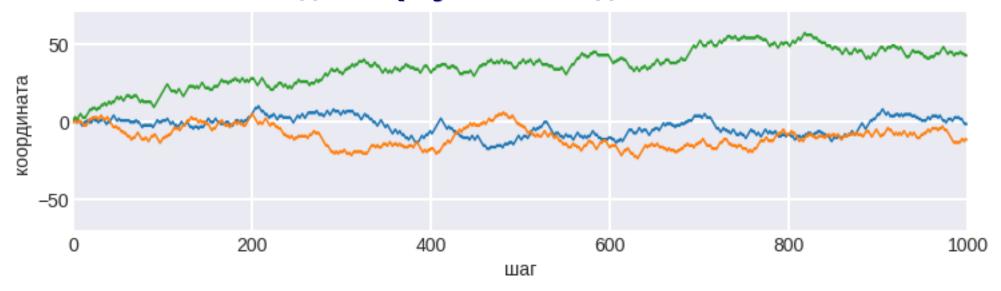
```
x = np.array([[1,2], [3,4]])
np.concatenate([x, x+1])
array([[1, 2],
       [3, 4],
       [2, 3],
       [4, 5]])
np.concatenate([x, x+1], axis=1)
array([[1, 2, 2, 3],
       [3, 4, 4, 5]])
np.vstack([x, x + 1])
array([[1, 2],
       [3, 4],
       [2, 3],
       [4, 5]])
np.hstack([x, x + 1])
array([[1, 2, 2, 3],
       [3, 4, 4, 5]]
```

Расщепление

```
x = np.arange(10).reshape(2, 5)
a, b, c = np.hsplit(x, [1, 4])
# есть split, vsplit
print (a)
[0]]
 [5]
print (b)
[[1 2 3]
 [6 7 8]]
print (c)
 [[4]
 [9]]
```

Многомерные матрицы

Модель броуновского движения



```
def random_walk(n=1000, p=0.5):
    x = 2*(np.random.rand(n) < p) - 1
    return (x.cumsum())

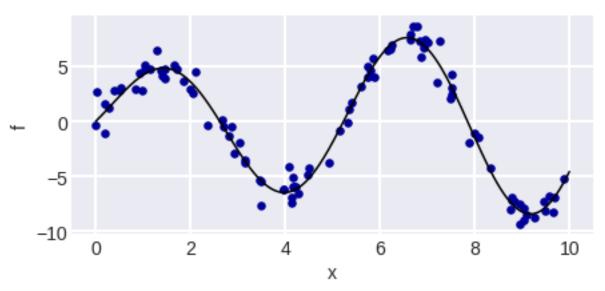
plt.figure(figsize=(12, 3))
plt.plot(random_walk())
plt.plot(random_walk())
plt.plot(random_walk())
plt.plot(random_walk())
plt.xlim([0, 1000])
plt.xlim([-70, 70])
plt.xlabel('шат')
plt.ylabel('координата')
plt.grid(lw=2)</pre>
```

SciPy

- модуль для научных вычислений

scipy.cluster	Vector quantization / Kmeans	
scipy.constants	Physical and mathematical constants	
scipy.fftpack	Fourier transform	
scipy.integrate	Integration routines	
scipy.interpolate	Interpolation	
scipy.io	Data input and output	
scipy.linalg	Linear algebra routines	
scipy.ndimage	n-dimensional image package	
scipy.odr	Orthogonal distance regression	
scipy.optimize	Optimization	
scipy.signal	Signal processing	
scipy.sparse	Sparse matrices	
scipy.spatial	Spatial data structures and algorithms	
scipy.special	Any special mathematical functions	
scipy.stats	Statistics	

Пример: интерполяция



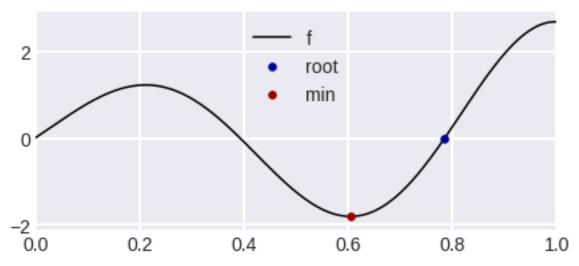
from scipy import optimize

```
xx = np.linspace(0, 10, num=1001)
np.random.seed(1)
x = 10 * np.random.rand(100)
y = 3.5 * np.sin(1.2 * x) * np.log1p(1.3 + x) + np.random.normal(size=100)

def f(x, a, b, c):
    return a * np.sin(b * x) * np.log1p(c + x)

params, params_covariance = optimize.curve_fit(f, x, y, p0=[1, 1, 1])
print(params)
```

Пример: корни и минимум



```
from scipy import optimize
```

```
def f(x):
    return (np.sin(8 * x) * np.exp(x))

x = np.linspace(0, 1, 1001)
y = f(x)

root = optimize.root(f, x0=0.8)
minf = optimize.minimize(f, x0=0.8, bounds=((0.2, 1), ))
```

Как выводится графика

```
plt.figure(figsize=(7, 3))
plt.plot(x, y, c='black', label='f', zorder=1)
plt.scatter([root.x], [f(root.x)], 30, label='root', zorder=2,
color='#000099')
plt.scatter([minf.x], [f(minf.x)], 30, label='min', zorder=2,
color='#990000')
plt.legend()
plt.xlim([0, 1])
plt.grid(lw=2)
```

Эффективное программирование¶

1) векторизация (Vectorizing for loops)

```
x = np.zeros(1000000)
%%time
for i in range(1000000):
    x[i] += 1
CPU times: user 368 ms
%%time
x += 1
CPU times: user 20 ms
```

Можно делать векторизованные версии функции

```
def f(x):
    if x > 0.5:
        x += 1
    else:
        x -= 1
    return (x)

f_v = np.vectorize(f)

%%time
x = f_v(x)
CPU times: user 188 ms
```

Можно проще и быстрее;)

Эффективное программирование¶

- 2) использовать Broadcasting
 - 3) встроенные операции

```
a = np.zeros(1000000)
%timeit global a; a = 0*a

1.75 ms ± 178 μs per loop (mean ± std. dev. of 7 runs, 100 loops each)
%timeit global a; a *= 0

242 μs ± 112 μs per loop (mean ± std. dev. of 7 runs, 1000 loops each)
```

4) не копировать без необходимости

по умолчанию питон экономит память

Эффективное программирование¶

5) обращение к близким объектам быстрее (кэширование)

```
A = np.zeros((4000, 4000))
%timeit A.sum(axis=1)
5.52 ms ± 67.2 μs per loop (mean ± std. dev. of 7 runs, 100 loops each)
%timeit A.sum(axis=0)
8.45 ms ± 43.8 μs per loop (mean ± std. dev. of 7 runs, 100 loops each)
```

6) используйте скомпилированный код

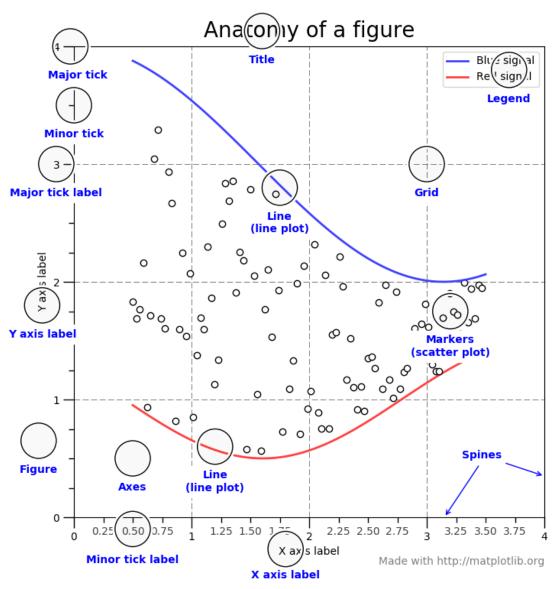
например, Cython

The NumPy array: a structure for efficient numerical computation

https://hal.inria.fr/inria-00564007/en

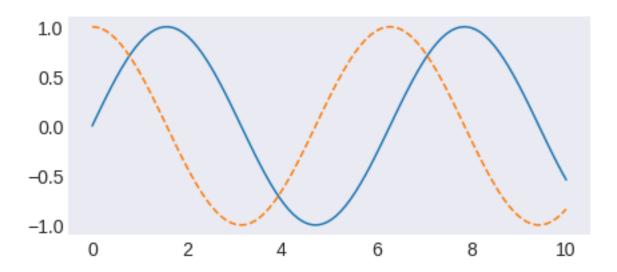
- Разреженные матрицы
- Индексация по элементам

Графика Matplotlib



https://matplotlib.org/examples/showcase/anatomy.html

Простой график

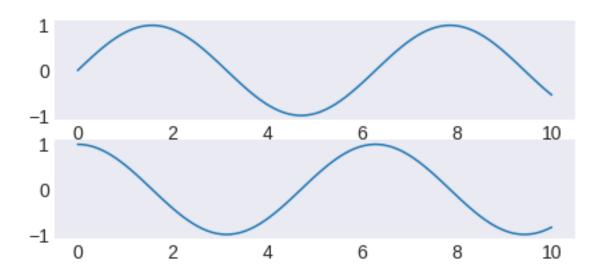


```
import numpy as np
x = np.linspace(0, 10, 100)

fig = plt.figure(figsize=(7, 3))
plt.plot(x, np.sin(x), '-')
plt.plot(x, np.cos(x), '--');
plt.show() # если в юпитере один график, то можно не писать

fig.savefig('my_figure.png') # сохранение
```

Несколько графиков



```
# несколько графиков - первый способ

plt.figure(figsize=(7, 3)) # create a plot figure

plt.subplot(2, 1, 1) # (строк, столбцов, текущий)

plt.plot(x, np.sin(x))

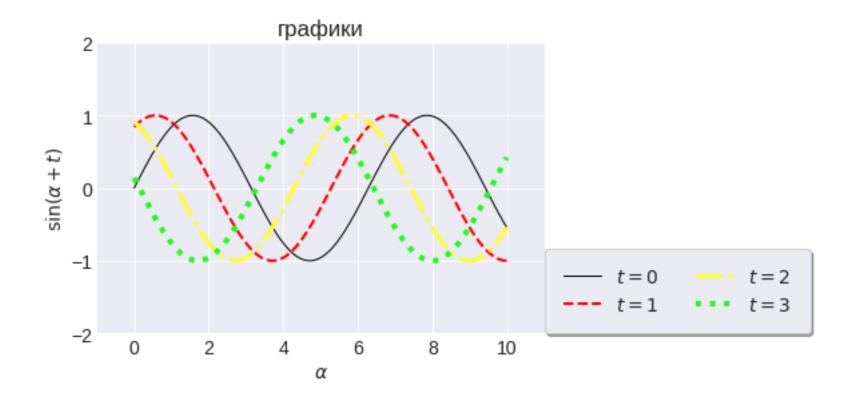
plt.subplot(2, 1, 2)

plt.plot(x, np.cos(x));
```

Несколько графиков



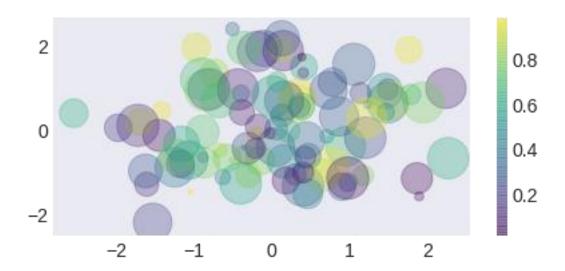
Сложный график



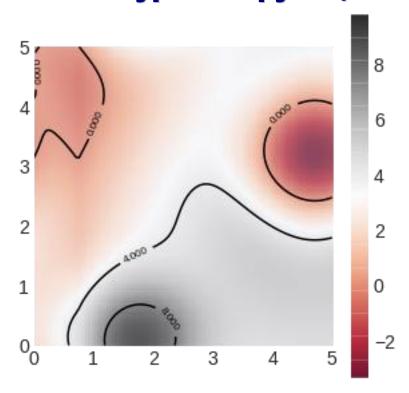
Сложный график

```
fig = plt.figure()
ax = plt.axes()
x = np.linspace(0, 10, 1000)
ax.plot(x, np.sin(x), c='black', linestyle='-',
        lw=1, label='$t=0$');
ax.plot(x, np.sin(x + 1), c='r', linestyle='--',
        lw=2, label='$t=1$');
ax.plot(x, np.sin(x + 2), c='#FFFF33', linestyle='-.',
        lw=3, label='$t=2$');
ax.plot(x, np.sin(x + 3), c=(0.1, 1.0, 0.1), linestyle=':',
        lw=4, label='$t=3$');
plt.xlim([-1, 11])
plt.ylim([-2, 2])
plt.xlabel(r'$\alpha$')
plt.ylabel(r'$\sin(\alpha + t)$');
plt.title('графики');
plt.legend(loc=(1, 0), frameon=True, ncol=2,
           fancybox=True, framealpha=1, shadow=True, borderpad=1)
plt.grid()
```

Диаграмма рассеивания



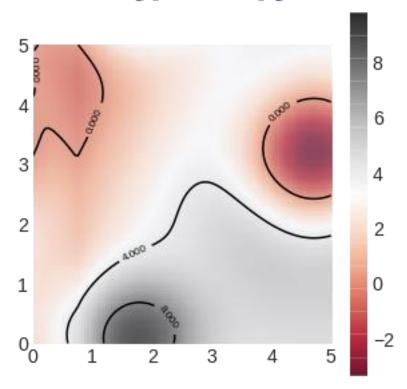
Линии уровня функции



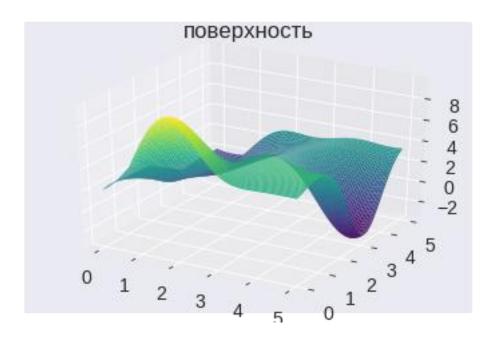
```
def f(x, y):
    z = (np.sin(x) + np.cos(y)) ** 3 + np.abs(np.cos(x) - x) + (np.sin(y))
    return z

x = np.linspace(0, 5, 100)
y = np.linspace(0, 5, 100)
X, Y = np.meshgrid(x, y)
Z = f(X, Y)
```

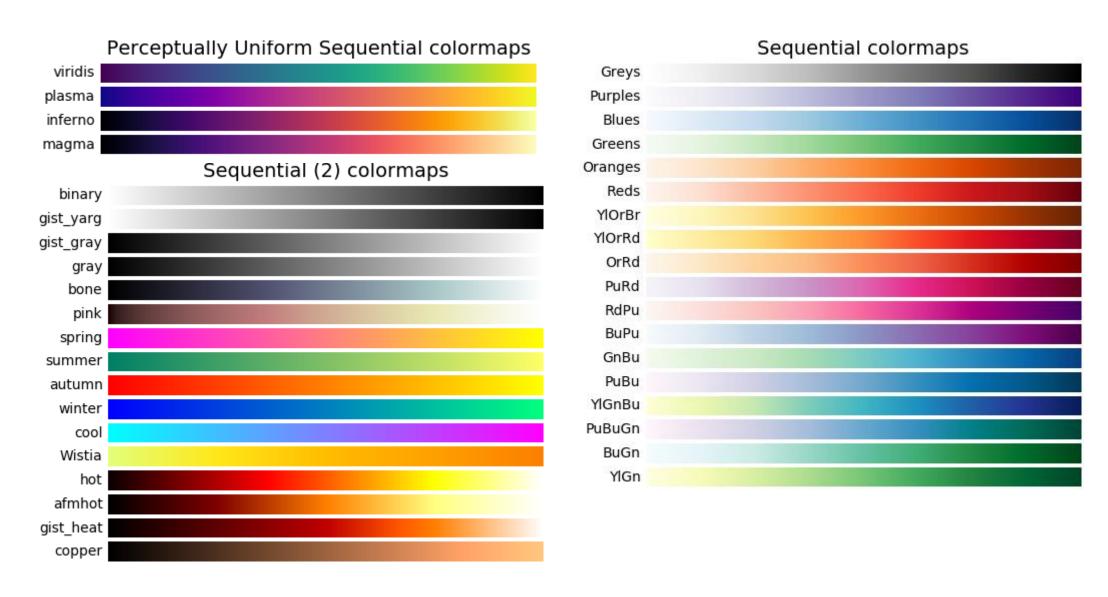
Линии уровня функции



Поверхность

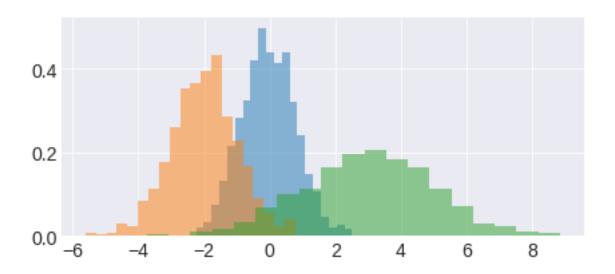


CMAP



https://matplotlib.org/examples/color/colormaps_reference.html

Плотность распределения

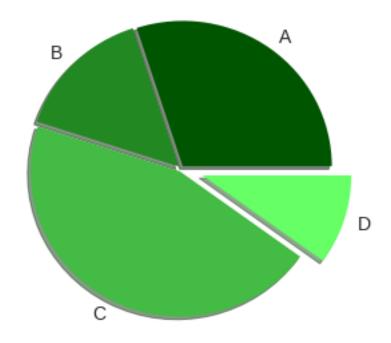


```
x1 = np.random.normal(0, 0.8, 1000)
x2 = np.random.normal(-2, 1, 1000)
x3 = np.random.normal(3, 2, 1000)

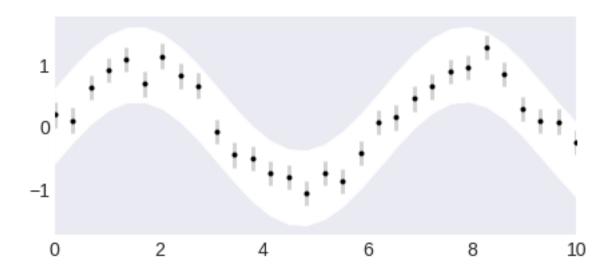
kwargs = dict(bins=20, histtype='stepfilled', alpha=0.5, normed=True)

plt.figure(figsize=(7, 3))
plt.hist(x1, **kwargs)
plt.hist(x2, **kwargs)
plt.hist(x3, **kwargs);
plt.qrid()
```

Пирог



Заливка и ошибки



```
x = np.linspace(0, 10, 30)
dy = 0.2
y = np.random.normal(np.sin(x), dy)
y1 = np.sin(x) + 3*dy
y2 = np.sin(x) - 3*dy

plt.figure(figsize=(7, 3))
plt.fill_between(x, y1, y2, color='white')
plt.errorbar(x, y, dy, fmt='.k', ecolor='lightgray', elinewidth=3)
plt.xlim([0, 10])
```

Литература

• Scipy Lecture Notes

Хороший курс – пройти

http://www.scipy-lectures.org/index.html

• Официальный сайт

http://www.numpy.org/

https://docs.scipy.org/doc/

• Хорошие репозитории

https://github.com/jrjohansson

• Быстрый курс

https://github.com/rpmuller/PythonCrashCoursehttps://github.com/ipython-books/minibook-2nd-code

• П. Шабанов «Научная графика в Питон»

https://github.com/whitehorn/Scientific_graphics_in_python