



温州大學
WENZHOU UNIVERSITY

机器学习-NumPy使用总结

黄海广 副教授

2021年06月

01 NumPy概述

02 NumPy数组(ndarray)对象

03 ufunc函数

04 NumPy的函数库

1.NumPy概述

3

01 NumPy概述

02 NumPy数组(ndarray)对象

03 ufunc函数

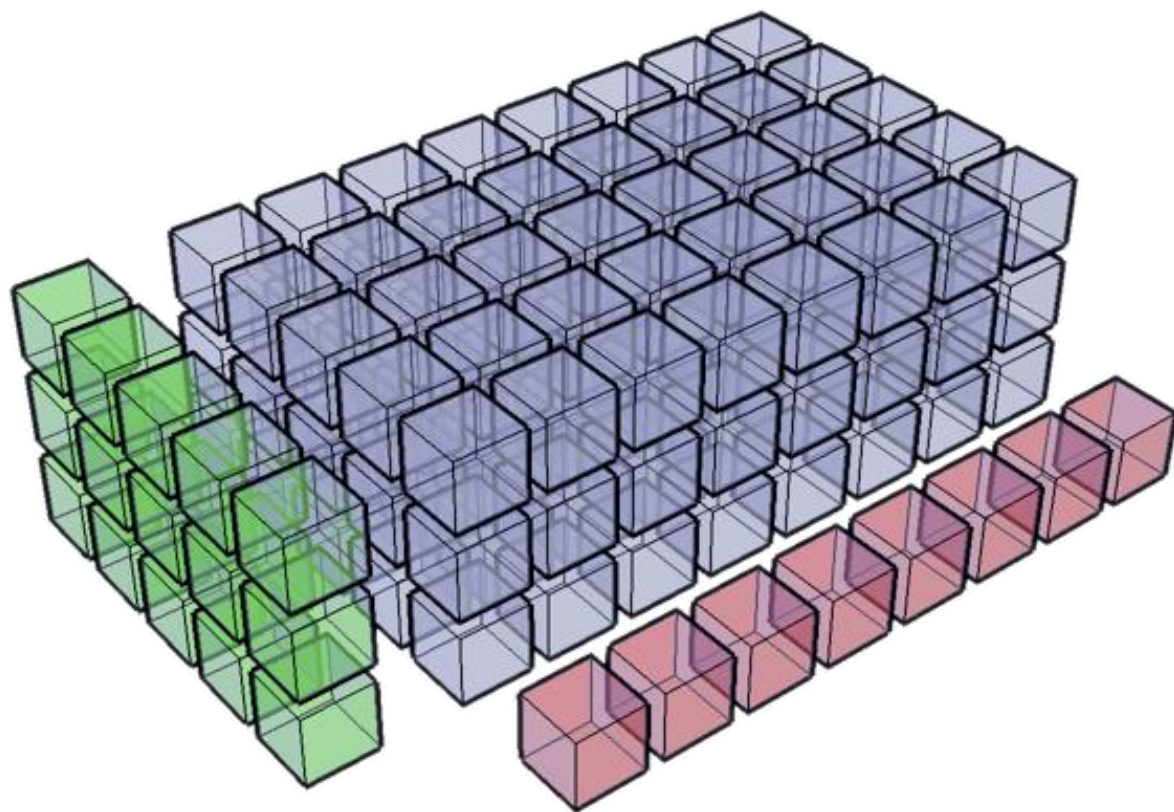
04 NumPy的函数库

NumPy是什么?

4

NumPy(Numeric Python)是Python的一种开源的数值计算扩展库。
它包含很多功能:

- 创建n维数组 (矩阵)
- 对数组进行函数运算
- 数值积分
- 线性代数运算
- 傅里叶变换
- 随机数产生
-



NumPy是什么？

5

NumPy提供了许多高级的数值编程工具，如：矩阵数据类型、矢量处理，以及精密的运算库。专为进行严格的数字处理而产生。多为很多大型金融公司使用，以及核心的科学计算组织如：Lawrence Livermore, NASA 用其处理一些本来使用 C++, Fortran 或 Matlab 等所做的任务。

NumPy是什么？

6

标准的**Python**中用**list**（列表）保存值，可以当做数组使用，但因为列表中的元素可以是任何对象，所以浪费了CPU运算时间和内存。

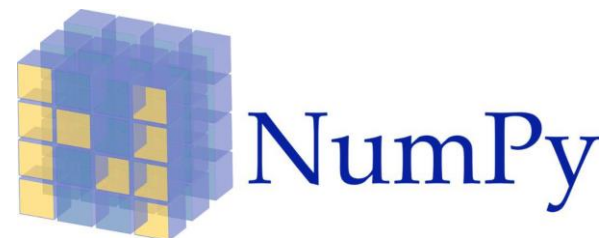
NumPy诞生为了弥补这些缺陷。它提供了两种基本的对象：

ndarray：全称（n-dimensional array object）是储存单一数据类型的多维数组。

ufunc：全称（universal function object）它是一种能够对数组进行处理的函数。

NumPy的官方文档：

<https://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/>



NumPy的安装

7

Anaconda里面已经安装过NumPy。

原生的Python安装：

- 在cmd中输入

```
pip install numpy
```

安装之后，我们用**导入**这个库

```
import numpy as np
```

2.NumPy数组(ndarray)对象

8

01 NumPy概述

02 NumPy数组(ndarray)对象

03 ufunc函数

04 NumPy的函数库

1.1 认识 NumPy 数组对象

9

NumPy 最重要的一个特点是其 N 维数组对象 **ndarray**，它是一系列同类型数据的集合，以 0 下标为开始进行集合中元素的索引。

ndarray 对象是用于存放同类型元素的多维数组。

```
>import numpy as np # 导入NumPy工具包
>data = np.arange(12).reshape(3, 4) # 创建一个3行4列的数组
>data
```

```
array([[ 0,  1,  2,  3],
       [ 4,  5,  6,  7],
       [ 8,  9, 10, 11]])
```

ndarray对维数没有限制。

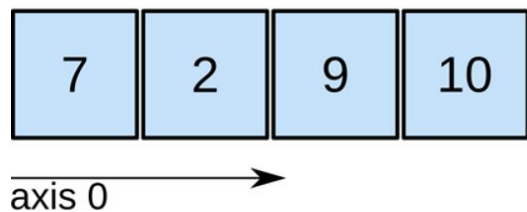
[]从内到外分别为第0轴，第1轴，第2轴，第3轴。

1.1 认识 NumPy 数组对象

10

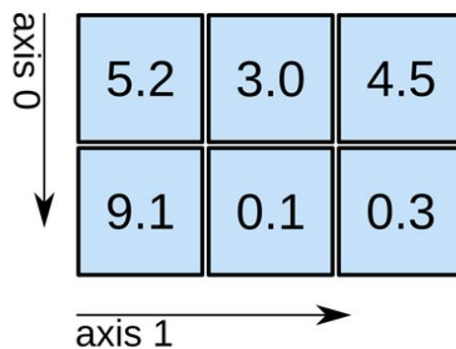
NumPy 数组图示

1D array



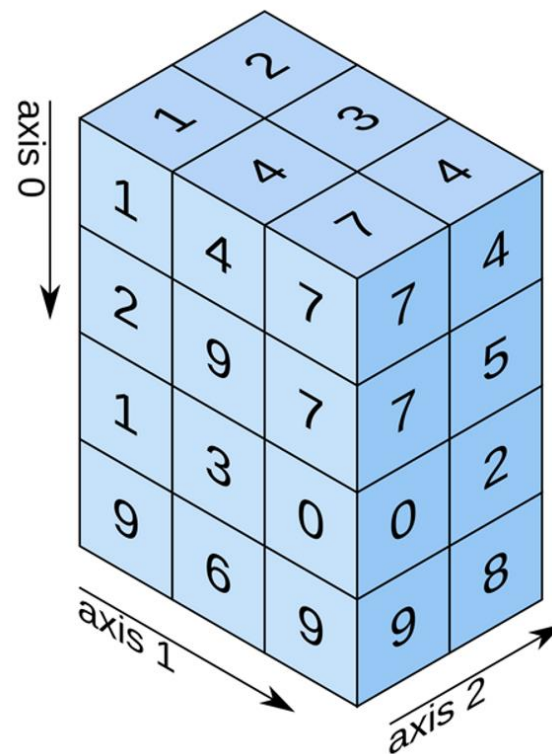
shape(4,)

2D array



shape(3,2)

3D array



shape(4,3,2)

1.1 认识 NumPy 数组对象

11

```
>type(data)
```

```
numpy.ndarray
```

```
>data.ndim # 数组维度的个数, 输出结果2, 表示二维数组
```

```
2
```

```
>data.shape # 数组的维度, 输出结果(3,4),表示3行4列
```

```
(3, 4)
```

```
data.size # 数组元素的个数, 输出结果12, 表示总共有12个元素
```

```
12
```

```
data.dtype # 数组元素的类型, 输出结果dtype('int64'),表示元素类型都是int64
```

```
dtype('int32')
```

1.2 创建 NumPy 数组

12

```
>import numpy as np  
>data1 = np.array([1, 2, 3]) # 创建一个一维数组  
>data1
```

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

```
data2 = np.array([[1, 2, 3], [4, 5, 6]]) # 创建一个二维数组  
data2
```

```
array([[1, 2, 3],  
       [4, 5, 6]])
```

```
np.zeros((3, 4))#创建一个全0数组
```

```
array([[0., 0., 0., 0.],  
       [0., 0., 0., 0.],  
       [0., 0., 0., 0.]])
```

1.2 创建 NumPy 数组

13

```
>np.ones((3, 4))#创建全一数组
```

```
array([[1., 1., 1., 1.],  
       [1., 1., 1., 1.],  
       [1., 1., 1., 1.]])
```

```
>np.empty((5, 2))# 创建全空数组, 其实每个值都是接近于零的数
```

```
array([[ 6.95312756e-310,  2.12199579e-314],  
       [ 2.12199579e-314,  4.94065646e-324],  
       [ 0.00000000e+000, -7.06252554e-311],  
       [ 0.00000000e+000, -8.12021073e-313],  
       [ 1.29923372e-311,  2.07507571e-322]])
```

1.2 创建 NumPy 数组

14

```
>np.arange(1, 20, 5)
```

```
array([ 1,  6, 11, 16])
```

```
>np.array([1, 2, 3, 4], float)
```

```
array([1., 2., 3., 4.])
```

```
>np.ones((2, 3), dtype='float64')
```

```
array([[1., 1., 1.],  
       [1., 1., 1.]])
```

ndarray的创建

15

NumPy提供了**专门用于生成ndarray的函数**，提高创建ndarray的速度。

```
> a = np.arange(0, 1, 0.1)
array([ 0. ,  0.1,  0.2,  0.3,  0.4,  0.5,  0.6,  0.7,  0.8,  0.9])

> b = np.linspace(0, 1, 10)
array([ 0.    ,  0.11111111,  0.22222222,  0.33333333,
  0.44444444,  0.55555556,  0.66666667,  0.77777778,  0.88888889,  1.    ])

> c = np.linspace(0, 1, 10, endpoint=False)
array([ 0. ,  0.1,  0.2,  0.3,  0.4,  0.5,  0.6,  0.7,  0.8,  0.9])

> d = np.logspace(0, 2, 5)
array([  1.,  3.16227766, 10., 31.6227766, 100.] )
```


ndarray的创建

16

<code>np.empty((2,3), np.int)</code>	创建2*3的整形型空矩阵，只分配内存
<code>np.zeros(4, np.int)</code>	创建长度为4，值为全部为0的矩阵
<code>np.full(4, np.pi)</code>	创建长度为4，值为全部为pi的矩阵

还可以自定义函数产生ndarray。

```
> def func(i):  
    return i % 4 + 1  
> np.fromfunction(func, (10,))  
  
array([ 1.,  2.,  3.,  4.,  1.,  2.,  3.,  4.,  1.,  2.]
```

fromfunction第一个参数接收计算函数，第二个参数接收数组的形状。

ndarray的属性

17

ndarray的元素具有相同的元素类型。常用的有int（整型），float（浮点型），complex（复数型）。

```
> a = np.array([1, 2, 3, 4], dtype=float)
array([ 1.,  2.,  3.,  4.]
```

```
> a.dtype
dtype('float64')
```

ndarray的shape属性用来获得它的形状，也可以自己指定

```
> c = np.array([[1, 2, 3, 4], [4, 5, 6, 7], [7, 8, 9, 10]])
> c.shape
(3, 4)
```

```
> a = np.array([1, 2, 3, 4])
> d = a.reshape((2,2))
array([[1, 2],
       [3, 4]])
```

ndarray的切片

18

ndarray的切片和list是一样的。

```
> a = np.arange(10)
> a
array([0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9])

a[5]    a[3:5]    a[:5]    a[:-1]
-----
5       [3, 4]    [0, 1, 2, 3, 4]    [0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8]

a[1:-1:2]    a[::-1]    a[5:1:-2]
-----
[1, 3, 5, 7]    [9, 8, 7, 6, 5, 4, 3, 2, 1, 0]    [5, 3]
```

可以通过切片的对ndarray中的元素进行**更改**。

```
> a[2:4] = 100, 101
> a
array([ 0,  1, 100, 101,  4,  5,  6,  7,  8,  9])
```

ndarray的切片

19

ndarray通过切片产生一个新的数组b，**b和a共享同一块数据存储空间。**

```
> b = a[3:7]
> b[2] = -10
b          a
-----
[101,  4, -10,  6]  [ 0,  1, 100, 101,  4, -10,  6,  7,  8,  9]
```

如果想改变这种情况，我们可以**用列表对数组元素切片。**

```
> b = a[[3, 3, -3, 8]]
> b
array([3, 3, 7, 8])

> b[2] = 100
b          a
-----
[3,  3, 100,  8]  [ 0,  1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9]
```

多维数组

20

NumPy的多维数组和一维数组类似。多维数组有多个轴。
我们前面已经提到从内到外分别是第0轴，第1轴...

```
> a = np.arange(0, 60, 10).reshape(-1, 1) + np.arange(0, 6)
```

```
array([[ 0,  1,  2,  3,  4,  5],  
       [10, 11, 12, 13, 14, 15],  
       [20, 21, 22, 23, 24, 25],  
       [30, 31, 32, 33, 34, 35],  
       [40, 41, 42, 43, 44, 45],  
       [50, 51, 52, 53, 54, 55]])
```

`a[0, 3:5]`

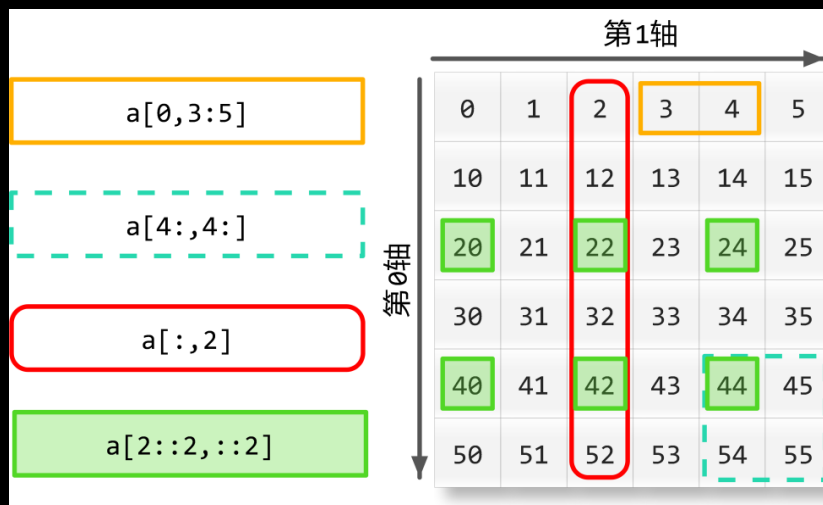
`a[4:, 4:]`

`a[2::2, ::2]`

[3, 4]

[[44, 45],
 [54, 55]]

[[20, 22, 24],
 [40, 42, 44]]



#上面方法对于数组的切片都是共享原数组的储存空间的。

多维数组

21

如果我们想**创立原数组的副本**，我们可以用**整数元组**，**列表**，**整数数组**，**布尔数组**进行切片。

```
>>> a[0,3:5]
array([3,4])
>>> a[4:,4:]
array([[44,45],[54,55]])
>>> a[:,2]
array([2,12,22,32,42,52])
>>> a[2::2,::2]
array([[20,22,24],
       [40,42,44]])
```

0	1	2	3	4	5
10	11	12	13	14	15
20	21	22	23	24	25
30	31	32	33	34	35
40	41	42	43	44	45
50	51	52	53	54	55

```
>>> a[(0,1,2,3,4),(1,2,3,4,5)]
array([1,12,23,34,45])
>>> a[3:,[0,2,5]]
array([[30,32,35],
       [40,42,45],
       [50,52,55]])
>>> mask=np.array([1,0,1,0,0,1],
                   dtype=np.bool)
>>> a[mask,2]
array([2,22,52])
```

0	1	2	3	4	5
10	11	12	13	14	15
20	21	22	23	24	25
30	31	32	33	34	35
40	41	42	43	44	45
50	51	52	53	54	55

第 0 轴

第 1 轴

结构数组

22

C语言中可以通过struct关键字定义结构类型。NumPy中也有类似的结构数组。

```
> persontype = np.dtype({  
    'names':['name', 'age', 'weight'],  
    'formats':['S30','i', 'f']})  
  
> a = np.array([("Zhang", 32, 75.5), ("Wang", 24, 65.2)],  
    dtype=persontype)
```

	name	age	weight
0	zhang	32	75.5
1	wang	24	65.2

我们就创建了一个结构数组，并且可以通过索引得到每一行。

```
> print a[0]  
('Zhang', 32, 75.5)
```


3. ufunc函数

23

01 NumPy概述

02 NumPy数组(ndarray)对象

03 ufunc函数

04 NumPy的函数库

ufunc函数

24

ufunc是**universal function**的简称，它是一种能对**数组每个元素进行运算**的函数。NumPy的许多ufunc函数都是用C语言实现的，因此它们的运算速度非常快。

```
> x = np.linspace(0, 2*np.pi, 10)
> y = np.sin(x)
> y
array([ 0.00000000e+00,  6.42787610e-01,  9.84807753e-01,
        ...,
        -2.44929360e-16])
```

值得注意的是，对于**同等长度**的ndarray，np.sin()比math.sin()快但是对于**单个数值**，math.sin()的速度则更快。

四则运算

25

NumPy提供了许多ufunc函数，它们和相应的运算符运算结果相同。

```
> a = np.arange(0, 4)
> b = np.arange(1, 5)
> np.add(a, b)
array([1, 3, 5, 7])

> a+b
array([1, 3, 5, 7])

> np.subtract(a, b) # 减法
> np.multiply(a, b) # 乘法
> np.divide(a, b) # 如果两个数字都为整数，则为整数除法
> np.power(a, b) # 乘方
```

比较运算和布尔运算

26

使用`==`，`>`对两个数组进行比较，会返回一个**布尔数组**，**每一个元素都是对应元素的比较结果**。

```
> np.array([1, 2, 3]) < np.array([3, 2, 1])  
array([ True, False, False], dtype=bool)
```

布尔运算在NumPy中也有对应的ufunc函数。

表达式	ufunc函数
<code>y=x1==x2</code>	<code>equal(x1,x2[,y])</code>
<code>y=x1!=x2</code>	<code>not_equal(x1,x2[,y])</code>
<code>y=x1<x2</code>	<code>less(x1,x2[,y])</code>
<code>y=x1<=x2</code>	<code>not_equal(x1,x2[,y])</code>
<code>y=x1>x2</code>	<code>greater(x1,x2[,y])</code>
<code>y=x1>=x2</code>	<code>gerater_equal(x1,x2[,y])</code>

自定义ufunc函数

27

NumPy提供的标准ufunc函数可以组合出复合的表达式，但是有些情况下，自己编写的则更为方便。我们可以**把自己编写的函数用frompyfunc()转化成ufunc函数**。

```
> def num_judge(x, a): #对于一个数字如果是3或5的倍数就
    if x%3 == 0:      返回0，否则返回a。
        r = 0
    elif x%5 == 0:
        r = 0
    else:
        r = a
    return r
> x = np.linspace(0, 10, 11)
> y = np.array([num_judge(t, 2) for t in x])#列表生成式
array([0, 2, 2, 0, 2, 0, 0, 2, 2, 0, 0])
```

自定义ufunc函数

28

使用frompyfunc()进行转化，调用格式如下：

```
frompyfunc(func, nin, nout)
```

func: 计算函数

nin: func()输入参数的个数

nout: func()输出参数的个数

```
> numb_judge = np.frompyfunc(num_judge, 2, 1)
```

```
> y = numb_judge(x,2)
```

```
array([0, 2, 2, 0, 2, 0, 0, 2, 2, 0, 0], dtype=object)
```

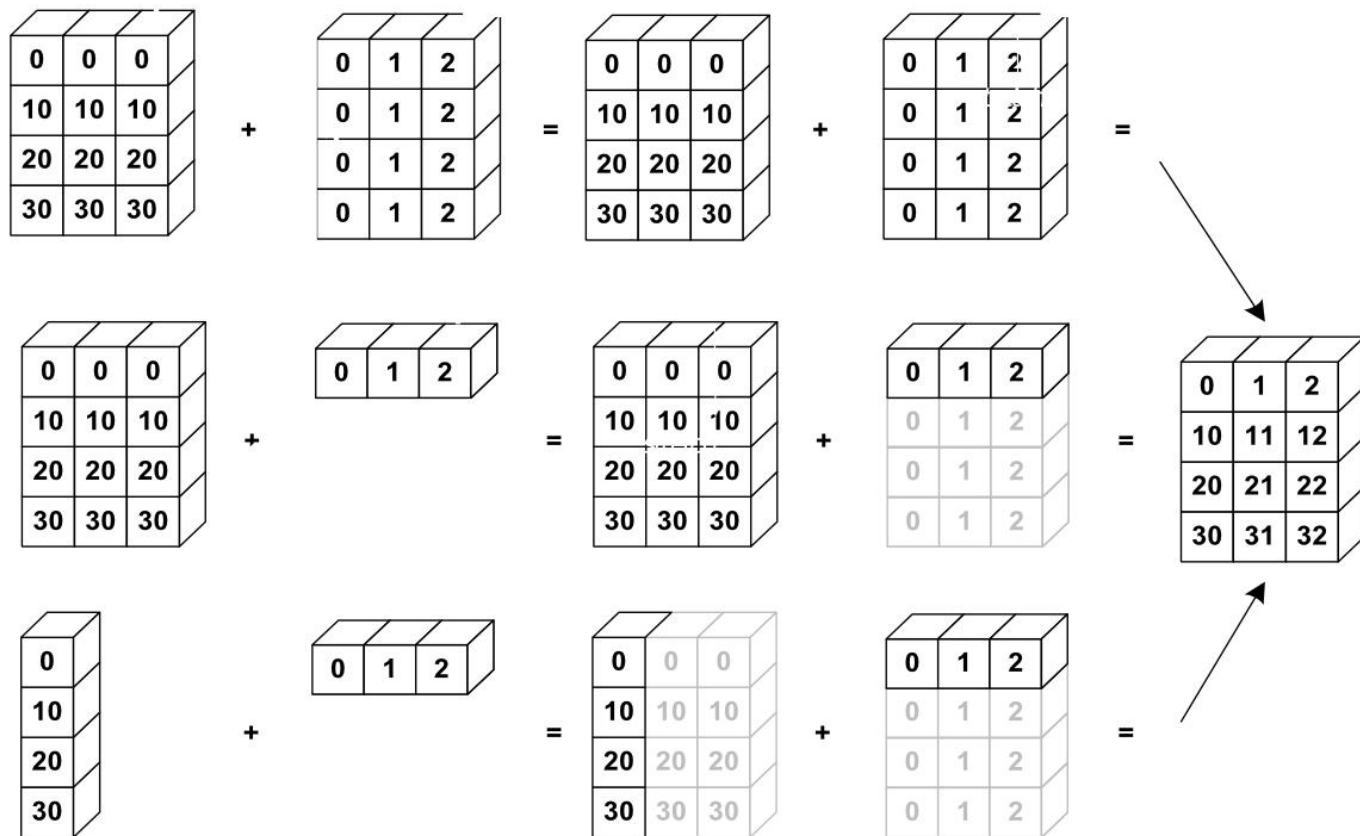
因为最后输出的元素类型是object，所以我们还需要把它转换成整型。

```
y.astype(np.int)
```

广播(broadcasting)

29

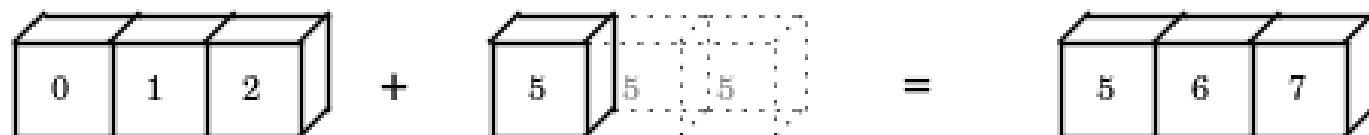
使用ufunc对两个数组进行运算时，ufunc函数会对两个数组的对应元素进行运算。如果数组的形状不相同，就会进行**下广播**处理。
简而言之，就是向**两个数组每一维度上的最大值靠齐**。



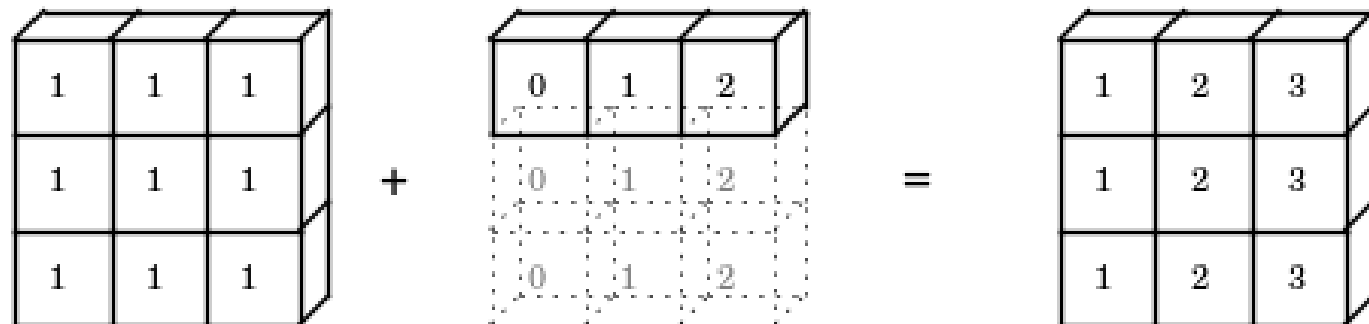
广播(broadcasting)

30

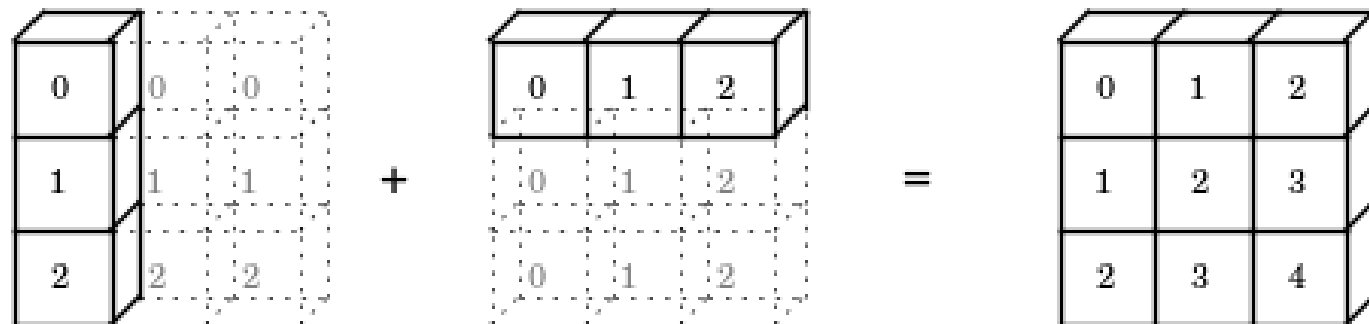
`np.arange(3) + 5`



`np.ones((3, 3)) + np.arange(3)`



`np.arange(3).reshape((3, 1)) + np.arange(3)`



广播(broadcasting)

31

我们看一下具体的例子：

```
> a = np.arange(0, 60, 10).reshape(-1, 1)
> b = np.arange(0, 5)
> c = a+b
```

c	c.shape
-----	-----
[[0, 1, 2, 3, 4],	(6, 5)
[10, 11, 12, 13, 14],	
[20, 21, 22, 23, 24],	
[30, 31, 32, 33, 34],	
[40, 41, 42, 43, 44],	
[50, 51, 52, 53, 54]]	

广播(broadcasting)

32

ogrid用来生成广播运算所用的数组。

```
> x, y = np.ogrid[:5, :5]
x      y
-----
[[0],  [[0, 1, 2, 3, 4]]
 [1],
 [2],
 [3],
 [4]]
```

下面操作和`a.reshape(1,-1)`, `a.reshape(-1,1)`相同。

```
> a = np.arange(4)
a[None, :]  a[:, None]
-----
[[0, 1, 2, 3]] [[0],[1],[2],[3]]
```

4. NumPy的函数库

33

01 NumPy概述

02 NumPy数组(ndarray)对象

03 ufunc函数

04 NumPy的函数库

随机数

34

除了前面介绍的ufunc()函数之外，NumPy还提供了大量对于数组运算的函数。它们能够简化逻辑，提高运算速度。

我们首先看随机数。NumPy产生随机数的模块在**random**里面，其中有**大量的分布**。

```
> from numpy import random as nr
> np.set_printoptions(precision=2) #显示小数点后两位数

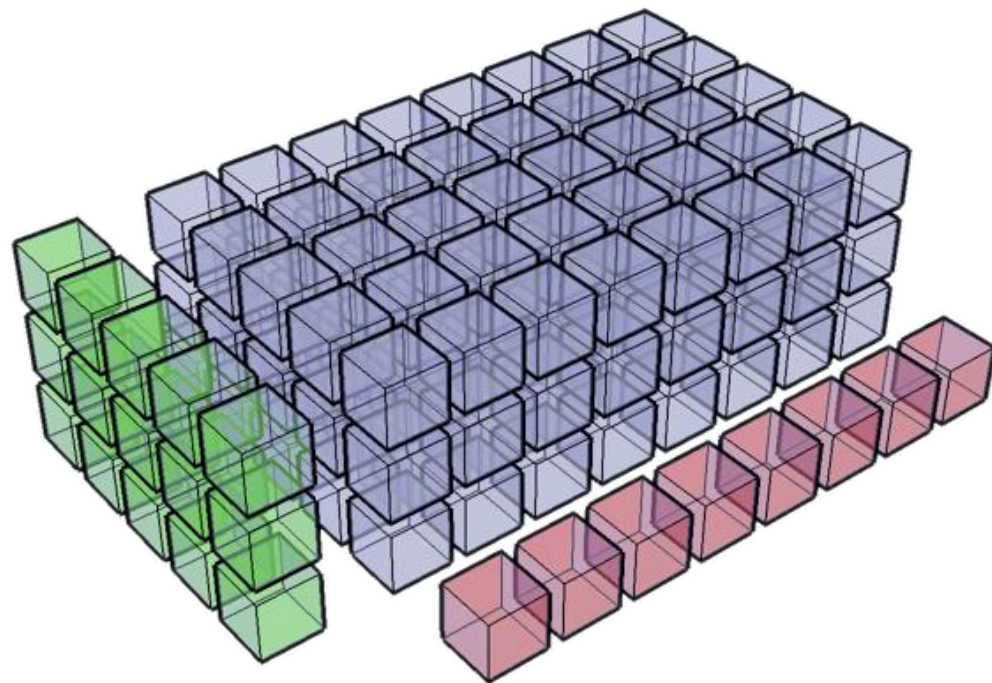
> r1 = nr.rand(4, 3)
[[ 0.87, 0.42, 0.34],
 [ 0.25, 0.87, 0.42],
 [ 0.49, 0.18, 0.44],
 [ 0.53, 0.23, 0.81]]

> r2 = nr.poisson(2.0, (4, 3))
[[3, 1, 5],
 [2, 2, 3],
 [2, 4, 4],
 [2, 2, 3]]
```

随机数

35

rand	0到1之间的随机数	normal	正态分布的随机数
randint	制定范围内的随机整数	uniform	均匀分布
randn	标准正态的随机数	poisson	泊松分布
choice	随机抽取样本	shuffle	随机打乱顺序



求和，平均值，方差

36

NumPy在均值等方面常用的函数如下：

函数名	功能
sum	求和
average	加权平均数
var	方差
mean	期望
std	标准差
product	连乘积

```
> np.random.seed(42)
> a = np.random.randint(0,10,size=(4,5))

> np.sum(a)
96
```


求和，平均值，方差

37

```
a                np.sum(a, axis=1)  np.sum(a, axis=0)
-----
[[6, 3, 7, 4, 6],  [26, 28, 24, 18]  [22, 13, 27, 18, 16]
 [9, 2, 6, 7, 4],
 [3, 7, 7, 2, 5],
 [4, 1, 7, 5, 1]]
```

keepdims可以保持原来数组的维数。

```
np.sum(a,1,keepdims=True)  np.sum(a,0,keepdims=True)
-----
[[26],                      [[22, 13, 27, 18, 16]]
 [28],
 [24],
 [18]]
```

大小与排序

38

NumPy在排序等方面常用的函数如下：

函数名	功能	函数名	功能
min	最小值	max	最大值
ptp	极差	argmin	最小值的下标
minimum	二元最小值	maximum	二元最大值
sort	数组排序	argsort	数组排序下标
percentile	分位数	median	中位数

min,max都有axis,out,keepdims等参数，我们来看其他函数。

```
> a = np.array([1, 3, 5, 7])
> b = np.array([2, 4, 6])
> np.maximum(a[None, :], b[:, None])#maximum返回两组
array([[2, 3, 5, 7],          矩阵广播计算后的
       [4, 4, 5, 7],          结果
       [6, 6, 6, 7]])
```

大小与排序

39

sort()对数组进行排序会改变数组的内容，返回一个新的数组。**axis**的默认值都为-1，即按最终轴进行排序。axis=0对每列上的值进行排序。

```
np.sort(a)      np.sort(a, axis=0)
-----
[[3, 4, 6, 6, 7],  [[3, 1, 6, 2, 1],
 [2, 4, 6, 7, 9],  [4, 2, 7, 4, 4],
 [2, 3, 5, 7, 7],  [6, 3, 7, 5, 5],
 [1, 1, 4, 5, 7]]  [9, 7, 7, 7, 6]]
```

percentile计算处于p%上的值。

```
> r = np.abs(np.random.randn(100000))
> np.percentile(r, [68.3, 95.4, 99.7])
array([ 1.00029686,  1.99473003,  2.9614485 ])
```

统计函数

40

NumPy中常用的统计函数有：**unique()**, **bicount()**, **histogram()**。我们来一个个介绍。首先看**unique()**:

```
> np.random.seed(42)
> a = np.random.randint(0, 8, 10)
> np.unique(a)
a                                np.unique(a)
-----
[6, 3, 4, 6, 2, 7, 4, 4, 6, 1]    [1, 2, 3, 4, 6, 7]
```

unique有两个参数,**return_index=True**同时返回原始数组中的下标,**return_inverse=True**表示原始数据在新数组的下标

```
> x, index = np.unique(a, return_index=True)
x                                index          a[index]
-----
[1, 2, 3, 4, 6, 7]    [9, 4, 1, 2, 0, 5]    [1, 2, 3, 4, 6, 7]
```

统计函数

41

```
> x, rindex = np.unique(a, return_inverse=True)
rindex                x[rindex]
-----
[4, 2, 3, 4, 1, 5, 3, 3, 4, 0]    [6, 3, 4, 6, 2, 7, 4, 4, 6, 1]
```

bincount()对**非负整数数组**中的各个元素出现的次数进行统计，返回数组中的第*i*个元素是整数*i*出现的次数。

```
> a = np.array([6, 3, 4, 6, 2, 7, 4, 4, 6, 1])
> np.bincount(a)
array([0, 1, 1, 1, 3, 0, 3, 1])

> x = np.array([0, 1, 2, 2, 1, 1, 0])
> w = np.array([0.1, 0.3, 0.2, 0.4, 0.5, 0.8, 1.2])
> np.bincount(x, w)
array([ 1.3,  1.6,  0.6])
```

统计函数

42

histogram()对以为数组进行直方图统计，其参数为：

histogram(a, bins=10, range=None, weights=None)

函数返回两个一维数组，**hist**是每个区间的统计结果，

bin_edges返回区间的边界值。

```
> a = np.random.rand(100)
> np.histogram(a, bins=5, range=(0, 1))
(array([28, 18, 17, 19, 18]),
 array([ 0.,  0.2,  0.4,  0.6,  0.8,  1. ]))

> np.histogram(a, bins=[0, 0.4, 0.8, 1.0])
(array([46, 36, 18]), array([ 0.,  0.4,  0.8,  1. ]))
```

操作多维数组

43

多维数组可以进行**连接**，**分段**等多种操作。我们先来看 `vstack()`, `hstack()`, `column_stack()` 函数。

```
> a = np.arange(3)
> b = np.arange(10, 13)

> v = np.vstack((a, b)) # 按第1轴连接数组
> h = np.hstack((a, b)) # 按第0轴连接数组
> c = np.column_stack((a, b)) # 按列连接多个一维数组
```

v	h	c
-----	-----	-----
[[0, 1, 2], [10, 11, 12]]	[0, 1, 2, 10, 11, 12]	[[0, 10], [1, 11], [2, 12]]

操作多维数组

44

split()函数进行分段。

```
> a = np.array([6, 3, 7, 4, 6, 9, 2, 6, 7, 4, 3, 7])
> b = np.array([1, 3, 6, 9, 10])
> np.split(a, idx) # 按元素位置进行分段
[array([6]),
 array([3, 7]),
 array([4, 6, 9]),
 array([2, 6, 7]),
 array([4]),
 array([3, 7])]

> np.split(a, 2) # 按数组个数进行分段
[array([6, 3, 7, 4, 6, 9]),
 array([2, 6, 7, 4, 3, 7])]
```


多项式函数

45

多项式函数是整数的次幂与系数的乘积，如：

$$f(x) = a_n(x^n) + a_{n-1}(x^{n-1}) + \dots + a_1(x) + a_0$$

NumPy中多项式函数可以用**一维数组**表示。a[0]为最高次，a[-1]为常数项。

```
> a = np.array([1.0, 0, -2, 1])
> p = np.poly1d(a)
> print type(p)
<class 'numpy.lib.polynomial.poly1d'>

> p(np.linspace(0, 1, 5))
array([ 1.    ,  0.515625,  0.125  , -0.078125,  0.    ])
```

多项式函数可以进行**四则运算**，其中**运算的列表自动化成多项式函数**。

多项式函数

46

```
> p + [-2, 1]
poly1d([ 1., 0., -4., 2.])

> p * p
poly1d([ 1., 0., -4., 2., 4., -4., 1.])

> p / [1, 1] # 分别为商和余
(poly1d([ 1., -1., -1.]), poly1d([ 2.]))
```

多项式也可以进行**积分和求导**。

```
> p.deriv()
poly1d([ 3., 0., -2.])

> p.integ()
poly1d([ 0.25, 0. , -1. , 1. , 0. ])
```

多项式函数

47

Roots可以求多项式的根。

```
> r = np.roots(p)
> r
array([-1.61803399, 1.        , 0.61803399])
```

polyfit()可以对数据进行多项式拟合。x, y为数据点, deg为多项式最高阶数。

```
> a = np.polyfit(x , y, deg)
```

poly()返回多项式系数构成的数组。

```
> a = np.poly(x )
```

参考文献

48

1. NumPy 官网 <http://www.numpy.org/>
2. NumPy 源代码: <https://github.com/numpy/numpy>

谢谢!

