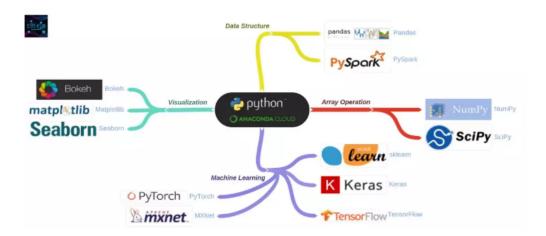
### 盘一盘 Python 系列 2 - NumPy (上)

From: 王圣元 王的机器 3/28



# 0 引言 〈

#### 本文是 Python 系列的第三篇

- ∘ Python 入门篇 (上)
- ∘ Python 入门篇 (下)
- 数组计算之 NumPy (上)
- 。 数组计算之 NumPy (下)
- 。 科学计算之 SciPy
- 。 数据结构之 Pandas
- 基本可视化之 Matplotlib
- 。 统计可视化之 Seaborn
- 。 交互可视化之 Bokeh
- 。 炫酷可视化之 PyEcharts
- 。 机器学习之 Sklearn
- 。 深度学习之 TensorFlow
- 。 深度学习之 Keras
- 。 深度学习之 PyTorch
- 。 深度学习之 MXnet

Numpy 是 Python 专门处理高维数组 (high dimensional array) 的计算的包,每次使用它遇到问题都会它的官网 (www.numpy.org). 去找答案。 在使用 *numpy* 之前,需要引进它,语法如下:

```
1 import numpy
```

这样你就可以用 *numpy* 里面所有的内置方法 (build-in methods) 了,比如求和与均值。

```
1 numpy.sum()
2 numpy.mean()
```

但是每次写 *numpy* 字数有点多,通常我们给 numpy 起个别名 np,用以下语法,这样所有出现 *numpy* 的地方都可以用 np 替代。

```
1 import numpy as np
```

为什么要专门学习数组呢?看下面「*numpy* 数组」和「列表」之间的计算效率对比:两个大小都是 1000000,把每个元素翻倍,运行 10 次用 %time 记时。

```
1  my_arr = np.arange(1000000)
2  my_list = list(range(1000000))

1  %time for _ in range(10): my_arr2 = my_arr * 2

Wall time: 48.9 ms

1  %time for _ in range(10): my_list2 = [x * 2 for x in my_list]

Wall time: 1.33 s
```

我们发现「numpy 数组」效率是「列表」效率的 27 (1.33\*1000/48.9) 倍左右。如果元素全是数值型变量 (numerical variable),那么 numpy 数组明显是个很好的数据结

学习 numpy 还是遵循的 Python 里「万物皆对象」的原则,既然把数组当对象,我们就按着数组的创建、数组的存载、数组的获取、数组的变形、和数组的计算来盘一盘 NumPy,目录如下:



有些读者可能会说,NumPy 都什么好学的,数组都弄不懂的人还能干什么,那我来问你个问题,知道「转置操作」吧,那么下面这个二维数组转置后是什么?

```
1 arr = np.array([[1,2,3],[4,5,6]])
2 arr
```

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

太简单了,是 [[1,4],[2,5],[3,6]],来看看是不是。

```
1 arr.T

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

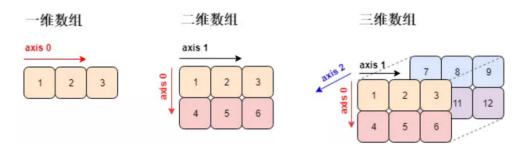
答对了,你牛,再看一道转置的题 😉

等等,现在有三维,转置通常不是转两个维度吗?转三个维度也可以?当然,比如把第 1,2,3 维度转置到第 2,1,3 维度,可以用 transpose 函数。

如果不知道上面答案怎么来的,我觉得你还是有必要看看本帖的。由于篇幅原因, NumPy 系列也分两贴,上贴讲前三节的内容,下帖讲后两节的内容。

# 1.1 初次印象

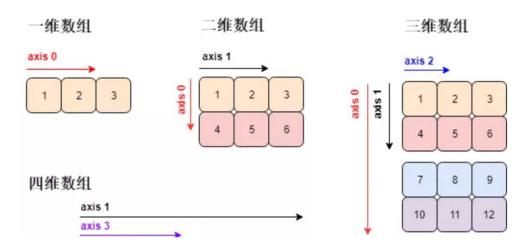
数组(array)是相同类型的元素(element)的集合所组成数据结构(data structure)。numpy 数组中的元素用的最多是「数值型」元素,平时我们说的一维、二维、三维数组长下面这个样子(对应着线、面、体)。四维数组很难被可视化。

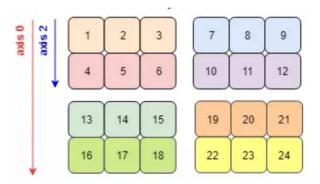


注意一个关键字 axis,中文叫「轴」,一个数组是多少维度就有多少根轴。由于Python 计数都是从 0 开始的,那么

- 第 1 维度 = axis 0
- 第 2 维度 = axis 1
- 第 3 维度 = axis 2

但这些数组只可能在平面上打印出来,那么它们(高于二维的数组)的表现形式稍微有些不同。





分析上图各个数组的在不同维度上的元素:

一维数组: 轴 0 有 3 个元素

• 二维数组: **轴 0** 有 2 个元素, **轴 1** 有 3 个元素

• 三维数组: **轴 0** 有 2 个元素 (2 块), **轴 1** 有 2 个元素, **轴 2** 有 3 个元素

• 四维数组: **轴 0** 有 2 个元素 (2 块), **轴 1** 有 2 个元素 (2 块), **轴 2** 有 2 个元素, **轴 3** 有 3 个元素

# 2.1 创建数组

带着上面这个对轴的认识,接下来我们用代码来创建 numpy 数组,有三种方式:

- 1. 按步就班的 np.array() 用在列表和元组上
- 2. 定隔定点的 np.arange() 和 np.linspace()
- 3. 一步登天的 np.ones(), np.zeros(), np.eye() 和 np.random.random()

### 按步就班法

给了「列表」和「元组」原材料,用 np.array() 包装一下便得到 numpy 数组。

1 1 = [3.5, 5, 2, 8, 4.2] 2 np.array(1)

array([3.5, 5. , 2. , 8. , 4.2])

1 t = (3.5, 5, 2, 8, 4.2)

```
2 np.array(t)
array([3.5, 5. , 2. , 8. , 4.2])
```

注意, numpy 数组的输出都带有 array() 的字样, 里面的元素用「中括号 []」框住。

# 定隔定点法

更常见的两种创建 numpy 数组方法:

定隔的 arange: 固定元素大小间隔定点的 linspace: 固定元素个数

#### 先看 arange 例子:

```
1 print( np.arange(8) )
2 print( np.arange(2,8) )
3 print( np.arange(2,8,2))

[0 1 2 3 4 5 6 7]
[2 3 4 5 6 7]
[2 4 6]
```

函数 arange 的参数为起点,终点,间隔

```
arange(start , stop , step)
```

其中 stop 必须要有, start 和 step 没有的话默认为 1。对着这个规则看看上面各种情况的输出。

注:用函数 print 打印 numpy 数组就没有 array() 的字样了,只用其内容,而且元素之间的「逗号」也没有了。

#### 再看 linspace 的例子:

```
print( np.linspace(2,6,3) )
```

```
2 print( np.linspace(3,8,11) )
[2. 4. 6.]
[3. 3.5 4. 4.5 5. 5.5 6. 6.5 7. 7.5 8. ]
```

函数 linspace 的参数为起点,终点,点数

```
linspace (start, stop, num)
```

其中 start 和 stop 必须要有, num 没有的话默认为 50。对着这个规则看看上面各种情况的输出。

# 一步登天法

NumPy 还提供一次性

- 用 zeros() 创建全是 0 的 n 维数组
- 用 ones() 创建全是 1 的 n 维数组
- 用 random() 创建随机 n 维数组
- 用 eye() 创建对角矩阵 (二维数组)

对于前三种,由于输出是 n 为数组,它们的参数是一个「标量」或「元组类型的形状」,下面三个例子一看就懂了:

```
1 print( np.zeros(5) ) # 标量5代表形状(5,)
2 print( np.ones((2,3)) )
3 print( np.random.random((2,3,4)) )
```

```
[[0. 0. 0. 0. 0.]]

[[1. 1. 1.]]

[1. 1. 1.]]

[[[0.15684866 0.33684519 0.85095027 0.67827412]]

[[0.58041935 0.12639616 0.33509142 0.99561644]]

[[0.59581471 0.92043399 0.56731046 0.76811703]]

[[0.74276133 0.85278489 0.32392871 0.40553182]
```

```
[0.7718898 0.35496469 0.20061144 0.00351225]
[0.49957334 0.48449498 0.62835324 0.29610557]]]
```

对于函数 eye(), 它的参数就是一个标量, 控制矩阵的行数或列数:

此外还可以设定 eye() 里面的参数 k

- 默认设置 k = 0 代表 1 落在对角线上
- k = 1 代表 1 落在对角线右上方
- k = -1 代表 1 落在对角线左下方



还记得 Python 里面「万物皆对象」么? *numpy* 数组也不例外,那么我们来看看数组有什么属性 (attributes) 和方法 (methods)。

一维数组

用按步就班的 np.array() 带列表生成数组 arr

```
1 arr = np.array([3.5, 5, 2, 8, 4.2])
```

现在你应该会用 dir(arr) 来查看数组的属性了吧,看完之后我们对 type, ndim, len(), size, shape, stride, dtype 几个感兴趣,一把梭打印出来看看:

```
print( 'The type is', type(arr) )
print( 'The dimension is', arr.ndim )
print( 'The length of array is', len(arr) )
print( 'The number of elements is', arr.size )
print( 'The shape of array is', arr.shape )
print( 'The stride of array is', arr.strides )
print( 'The type of elements is', arr.dtype )
```

```
The type is <class 'numpy.ndarray')
The dimension is 1
The length of array is 5
The number of elements is 5
The shape of array is (5,)
The stride of array is (8,)
The type of elements is float64
```

根据结果我们来看看上面属性到底是啥:

- type: 数组类型, 当然是 numpy.ndarray
- ndim: 维度个数是 1
- len(): 数组长度为 5 (注意这个说法只对一维数组有意义)
- size: 数组元素个数为 5
- shape: 数组形状,即每个维度的元素个数 (用元组来表示),只有一维,元素个数为 5,写成元组形式是 (5,)
- strides: 跨度,即在某一维度下为了获取到下一个元素需要「跨过」的字节数 (用元组来表示), float64 是 8 个字节数 (bytes),因此跨度为 8
- dtype: 数组元素类型,是双精度浮点(注意和 type 区分)

注意我<mark>黄色高亮</mark>了 strides,这个概念对于解决引言的「转置高维数组」问题很重要。 一图胜千言。



咦,为什么有个 Python View 和 Memory Block 啊?这两个不是一样的么?对一维数组来说,「Python 视图」看它和「内存块」存储它的形式是一样的,但对二维数组甚至高维数组呢?

## 二维数组

还是用按步就班的 np.array() 带二维列表生成二维数组 arr2d

#### 一把梭打印属性出来看看:

```
print( 'The type is', type(arr2d) )
print( 'The dimension is', arr2d.ndim )
print( 'The length of array is', len(arr2d) )
print( 'The number of elements is', arr2d.size )
print( 'The shape of array is', arr2d.shape )
print( 'The stride of array is', arr2d.strides )
print( 'The type of elements is', arr2d.dtype )
```

```
The type is <class 'numpy.ndarray' >
The dimension is 2
The length of array is 2
The number of elements is 6
The shape of array is (2, 3)
The stride of array is (12, 4)
The type of elements is int32
```

#### 同样, 我们来分析一下上面属性:

• type: 数组类型 numpy.ndarray

• ndim: 维度个数是 2

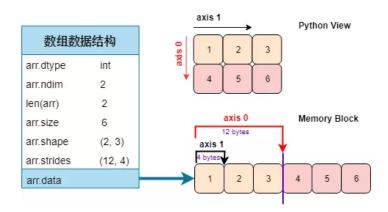
• len(): 数组长度为 2 (严格定义 len 是数组在「轴 0」的元素个数)

size:数组元素个数为6shape:数组形状(2,3)

• strides: 跨度 (12, 4) 看完下图再解释

• dtype: 数组元素类型 int32

对于二维数组,Python 视图」看它和「内存块」存储它的形式是**不一样**的,如下图所示:



在 *numpy* 数组中,**默认的是行主序** (row-major order),意思就是每行的元素在内存块中彼此相邻,而列主序 (column-major order) 就是每列的元素在内存块中彼此相邻。

回顾跨度 (stride) 的定义,<mark>即在某一维度下为了获取到下一个元素需要「跨过」的字节数。注:每一个 int32 元素是 4 个字节数。</mark>对着上图:

- 第一维度 (轴 0): 沿着它获取下一个元素需要跨过 3 个元素,即 12 = 3×4 个字 节
- 第二维度 (轴 1): 沿着它获取下一个元素需要跨过 1 个元素,即 4 = 1×4 个字节

因此该二维数组的跨度为 (12, 4)。

n 维数组

用 np.random.random() 来生成一个多维数组:

```
1 arr4d = np.random.random( (2,2,2,3) )
```

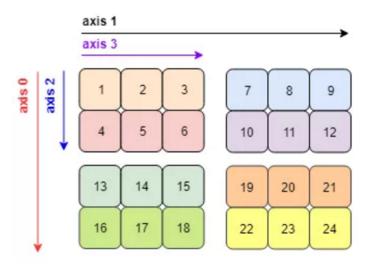
里面具体元素是什么不重要,一把梭 arr4d 的属性比较重要:

```
1 print( 'The type is', type(arr4d) )
2 print( 'The dimension is', arr4d.ndim )
3 print( 'The length of array is', len(arr4d) )
4 print( 'The number of elements is', arr4d.size )
5 print( 'The shape of array is', arr4d.shape )
6 print( 'The stride of array is', arr4d.strides )
7 print( 'The type of elements is', arr4d.dtype )
```

```
The type is <class 'numpy.ndarray')
The dimension is 4
The length of array is 2
The number of elements is 24
The shape of array is (2, 2, 2, 3)
The stride of array is (96, 48, 24, 8)
The type of elements is float64
```

除了 stride, 都好理解, 请根据下图好好想想为什么 stride 是 (96, 48, 24, 8)? [Hint: 一个 float64 的元素占 8 个字节]

### 四维数组



算了还是分析一下吧 (免得掉粉 ❤)。回顾跨度 (stride) 的定义,即在某一维度下为了获取到下一个元素需要「跨过」的字节数。注:每一个 float64 元素是 8 个字节数

- 第一维度 (轴 0): 沿着它获取下一个元素需要跨过 12 个元素,即 96 = 12×8 个字节
- 第二维度 (轴 1): 沿着它获取下一个元素需要跨过 6 个元素,即 48 = 6×8 个字 节
- 第三维度 (轴 2): 沿着它获取下一个元素需要跨过 3 个元素,即 24 = 3×8 个字 节
- 第四维度 (轴 3): 沿着它获取下一个元素需要跨过 1 个元素, 即 8 = 1×8 个字节

因此该四维数组的跨度为 (96, 48, 24, 8)。

留一道思考题, strides 和 shape 有什么关系?

strides = (96, 48, 24, 8) shape = (2, 2, 2, 3)

总不能每个高维数组都用可视化的方法来算 strides 把。



# 2 数组的存载

本节讲数组的「保存」和「加载」,我知道它们没什么技术含量,但是很重要。假设你已经训练完一个深度神经网络,该网络就是用无数参数来表示的。比如权重都是numpy数组,为了下次不用训练而重复使用,将其保存成 .npy 格式或者 .csv 格式是非常重要的。

#### numpy 自身的 .npy 格式

用 np.save 函数将 numpy 数组保存为 .npy 格式, 具体写法如下:

#### np.save( ''文件名",数组 )

```
1 arr_disk = np.arange(8)
2 np.save("arr_disk", arr_disk)
3 arr_disk

ipynb_checkpoints
arr_disk.npy
```

arr\_disk.npy 保存在 Jupyter Notebook 所在的根目录下。要加载它也很简单,用np.load("文件名")即可:

```
1 np.load("arr_disk.npy")

array([0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7])
```

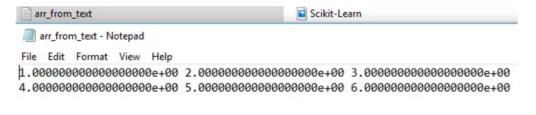
#### 文本 .txt 格式

用 np.savetxt 函数将 numpy 数组保存为 .txt 格式, 具体写法如下:

#### np.save( ''文件名",数组 )

```
1 arr_text = np.array([[1., 2., 3.], [4., 5., 6.]])
2 np.savetxt("arr_from_text.txt", arr_text)
```

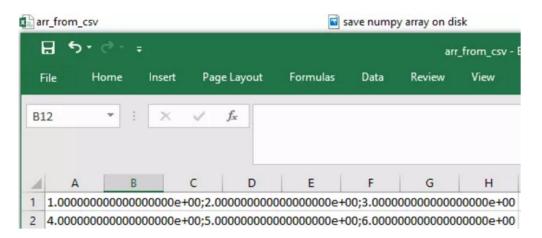
arr\_from\_text.txt 保存在 Jupyter Notebook 所在的根目录下,用 Notepad 打开看里面确实存储着 [[1,2,3], [4,5,6]]。



用 np.loadtxt("文件名") 即可加载该文件

#### 文本 .csv 格式

另外,假设我们已经在  $arr_from_csv$  的 csv 文件里写进去了 [[1,2,3], [4,5,6]],每行 的元素是由「分号;] 来分隔的,展示如下:



用 np.genfromtxt("文件名") 即可加载该文件

```
1 np.genfromtxt("arr_from_csv.csv")
```

```
array([nan, nan])
```

奇怪的是数组里面都是 nan,原因是没有设定好「分隔符;」,那么函数 genfromtxt 读取的两个元素是

- 1;2;3
- 4;5;6

它们当然不是数字拉,Numpy 只能用两个 nan (Not a Number) 来代表上面的四不像了。

带上「分隔符;」再用 np.genfromtxt("文件名", 分隔符) 即可加载该文件



## 3 数组的获取

获取数组是通过索引 (indexing) 和切片 (slicing) 来完成的,

- 切片是获取一段特定位置的元素
- 索引是获取一个特定位置的元素

索引和切片的方式和列表一模一样,参考 **Python 入门篇 (上)** 的 2.3 节。对于一维数组 arr,

- 切片写法是 arr[start: stop: step]
- 索引写法是 arr[index]

因此,切片的操作是可以用索引操作来实现的 (一个一个总能凑成一段),只是没必要罢了。为了简化,我们在本章三节标题里把切片和索引都叫做索引。

索引数组有三种形式,正规索引 (normal indexing)、布尔索引 (boolean indexing)

和花式索引 (fancy indexing)。



虽然切片操作可以由多次索引操作替代,但两者最大的区别在于

- 切片得到的是原数组的一个视图 (view) , 修改切片中的内容会改变原数组
- 。 索引得到的是原数组的一个复制 (copy), 修改索引中的内容不会改变原数组

请看下面一维数组的例子来说明上述两者的不同。

### 一维数组

```
1 arr = np.arange(10)
2 arr
```

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

用 arr[6] 索引第7个元素 (记住 Python 是从 0 开始记录位置的)

```
1 arr[6]
```

把它赋给变量 a,并重新给 a 赋值 1000,但是元数组 arr 第 7 个元素的值还是 6,并没有改成 1000。

```
1 a = arr[6]
2 a = 1000
3 arr
array([0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9])
```

用 arr[5:8] 切片第 6 到 8 元素 (记住 Python 切片包头不包尾)

```
1 arr[5:8]
```

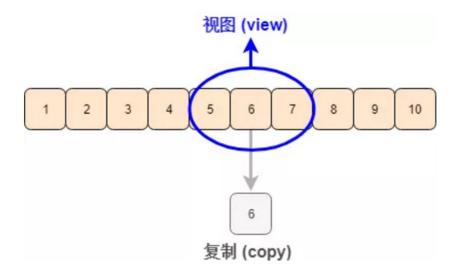
#### array([5, 6, 7])

把它赋给变量 b, 并重新给 b 的第二个元素赋值 12, 再看发现元数组 arr 第 7 个元素的值已经变成 12 了。

```
1 b = arr[5:8]
2 b[1] = 12
3 arr
```

#### array([ 0, 1, 2, 3, 4, 5, 12, 7, 8, 9])

这就证实了切片得到原数组的视图 (view),更改切片数据会更改原数组,而索引得到原数组的复制 (copy), 更改索引数据不会更改原数组。希望用下面一张图可以明晰 view 和 copy 的关系。



了解完一维数组的切片和索引,类比到二维和多维数组上非常简单。

## 二维数组

```
1 arr2d = np.array([[1, 2, 3], [4, 5, 6], [7, 8, 9]])
2 arr2d
```

#### 索引

情况一: 用 arr2d[2] 来索引第三行, 更严格的说法是索引「轴 0」上的第三个元素。

```
1 arr2d[2]
```

```
array([7, 8, 9])
```

情况二:用 arr2d[0][2]来索引第一行第三列

```
1 arr2d[0][2]
```

3

索引二维数组打了两个中括号好麻烦,索引五维数组不是要打了五个中括号?还有一个简易方法,用 arr2d[0, 2] 也可以索引第一行第三列

```
1 arr2d[0,2]
```

3

#### 切片

情况一: 用 arr2d[:2] 切片前两行, 更严格的说法是索引「轴 0」上的前两个元素。

```
1 arr2d[:2]
```

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

情况二: 用 arr2d[:, [0,2]] 切片第一列和第三列



布尔索引,就是用一个由布尔 (boolean) 类型值组成的数组来选择元素的方法。

假设我们有阿里巴巴 (BABA), 脸书 (FB) 和京东 (JD) 的

- 股票代码 code 数组
- 股票价格 price 数组:每行记录一天**开盘,最高**和**收盘**价格。

```
[165, 170, 167],
[ 22, 23, 20],
[155, 161, 157]])
```

假设我们想找出 BABA 对应的股价,首先找到 code 里面是 'BABA' 对应的索引 (布尔索引),即一个值为 True 和 False 的布尔数组。

```
1 code == 'BABA'

array([ True, False, False, True, False, False])
```

用该索引可以获取 BABA 的股价:

用该索引还可以获取 BABA 的最高和收盘价格:

再试试获取 JD 和 FB 的股价:

虽然下面操作没有实际意义, 试试把股价小于 25 的清零。

```
1 price[ price < 25 ] = 0
2 price</pre>
```

注:这种布尔索引的操作在 Pandas 更常用也更方便,看完 pandas 那帖后就可以 忽略这一节了。



花式索引是获取数组中想要的特定元素的有效方法。考虑下面数组:

假设你想按特定顺序来获取第 5, 4 和 7 行时, 用 arr[ [4,3,6] ]

假设你想按特定顺序来获取倒数第 4, 3 和 6 行时 (即正数第 4, 5 和 2 行), 用 arr[[-4,-3,-6]]

```
1 arr[ [-4,-3,-6] ]
array([[16, 17, 18, 19],
```

此外,你还能更灵活的设定「行」和「列」中不同的索引,如下

```
1 arr[ [1,5,7,2], [0,3,1,2] ]
array([ 4, 23, 29, 10])
```

检查一下,上行代码获取的分别是第二行第一列、第六行第四列、第八行第二列、第三行第三列的元素,它们确实是 4, 23, 29 和 10。如果不用花式索引,就要写下面繁琐但等价的代码:

最后, 我们可以把交换列, 把原先的 [0,1,2,3] 的列换成 [0,3,1,2]。



本帖讨论了 NumPy 的前三节,数组**创建**、数组**存载**和数组**获取**。同样把 *numpy* 数组 当成一个对象,要学习它,无非就是学习怎么

• 创建它:按步就班法、定隔定点法、一步登天法

• 存载它: 保存成 .npy, .txt 和 .csv 格式, 下次加载即用

• 获取它: 一段用切片, 一个用索引; 有正规法、布尔法、花式法

等等,你好像还没教什么 numpy 数组硬核的东西呢,下帖讨论 NumPy 的后两节就教怎么

• 变形它: 重塑和打平, 合并和分裂, 元素重复和数组重复

• 计算它: 元素层面计算, 线性代数计算, 广播机制计算

#### 回到引言的「数组转置」问题:

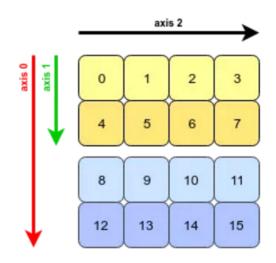
```
1 arr = np.arange(16).reshape((2, 2, 4))
2 arr
```

将**第 1, 2, 3 维度**转置到**第 2, 1, 3 维度**, 即将轴 0, 1, 2 转置到轴 1, 0, 2。

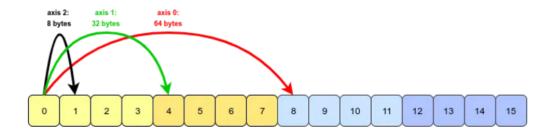
#### 解答:

数组转置的本质: 交换每个轴 (axis) 的形状 (shape) 和跨度 (stride)。

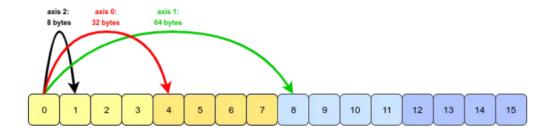
四幅图解决问题:



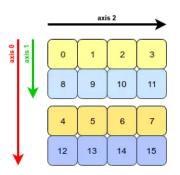
内存块的样子



轴 0 和轴 1 互换



转置结果



#### 用代码验证一下:

欧了! 下篇讨论 NumPy 系列的「数组的变性」和「数组的计算」。Stay Tuned!

