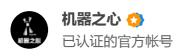


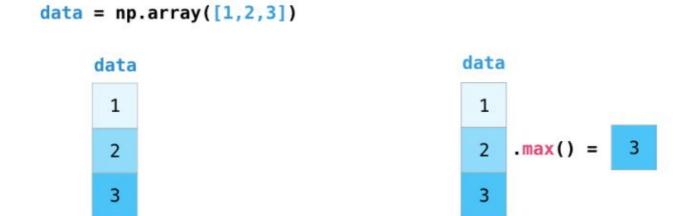
# 图解NumPy, 这是理解数组最形象的一份教程了



362 人赞同了该文章

本文用可视化的方式介绍了 NumPy 的功能和使用示例。

选自Jay Alammar Blog,作者: Jay Alammar,机器之心编译,参与:高璇、路。



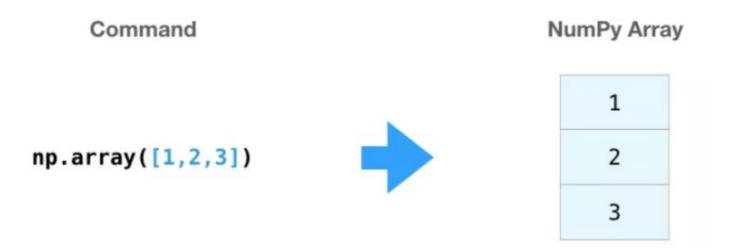
NumPy 软件包是 Python 生态系统中数据分析、机器学习和科学计算的主力军。它极大地简化了向量和矩阵的操作处理。Python 的一些主要软件包(如 scikit-learn、SciPy、pandas 和 tensorflow)都以 NumPy 作为其架构的基础部分。除了能对数值数据进行切片(slice)和切块(dice)之外,使用 NumPy 还能为处理和调试上述库中的高级实例带来极大便利。

本文将介绍使用 NumPy 的一些主要方法,以及在将数据送入机器学习模型之前,它如何表示不同类型的数据(表格、图像、文本等)。

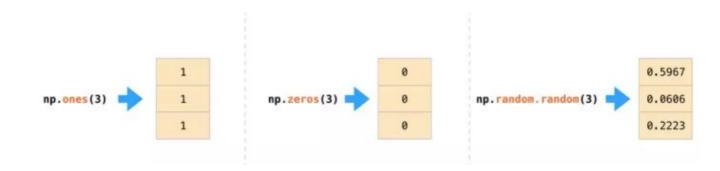
import numpy as np

# 创建数组

我们可以通过传递一个 python 列表并使用 np.array ( ) 来创建 NumPy 数组 ( 极大可能是多维数组 ) 。在本例中,python 创建的数组如下图右所示:



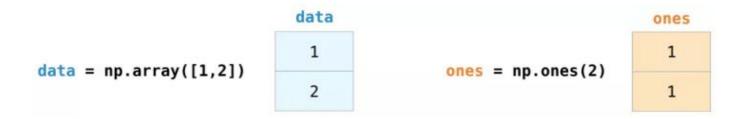
通常我们希望 NumPy 能初始化数组的值,为此 NumPy 提供了 ones()、zeros()和 random.random()等方法。我们只需传递希望 NumPy 生成的元素数量即可:



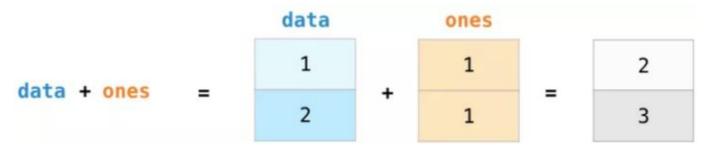
一旦创建了数组,我们就可以尽情对它们进行操作。

# 数组运算

让我们创建两个 NumPy 数组来展示数组运算功能。我们将下图两个数组称为 data 和 ones:

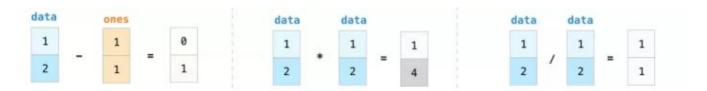


将它们按位置相加(即每行对应相加),直接输入 data + ones 即可:



当我开始学习这些工具时,我发现这样的抽象让我不必在循环中编写类似计算。此类抽象可以使我在更高层面上思考问题。

# 除了「加」,我们还可以进行如下操作:

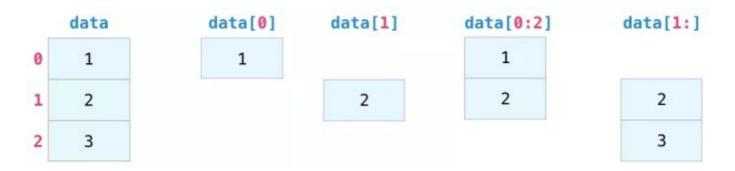


通常情况下,我们希望数组和单个数字之间也可以进行运算操作(即向量和标量之间的运算)。比如说,我们的数组表示以英里为单位的距离,我们希望将其单位转换为干米。只需输入 data \* 1.6 即可:

看到 NumPy 是如何理解这个运算的了吗?这个概念叫做广播机制(broadcasting),它非常有用。

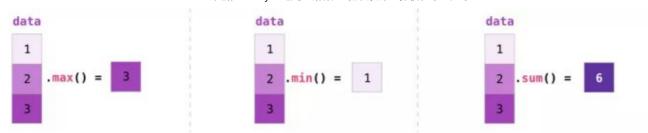
# 索引

我们可以我们像对 python 列表进行切片一样,对 NumPy 数组进行任意的索引和切片:



# 聚合

NumPy 还提供聚合功能:



除了 min、max 和 sum 之外,你还可以使用 mean 得到平均值,使用 prod 得到所有元素的乘积,使用 std 得到标准差等等。

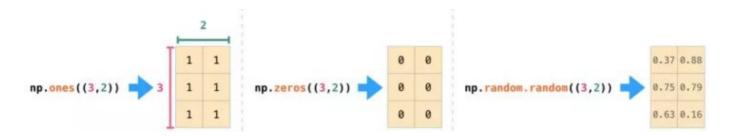
# 更多维度

上述的例子都在一个维度上处理向量。NumPy 之美的关键在于,它能够将上述所有方法应用到任意数量的维度。

# 创建矩阵

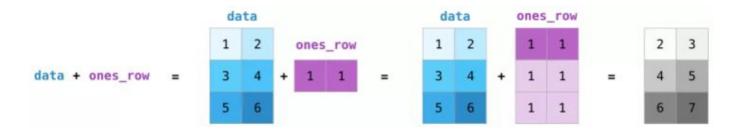
我们可以传递下列形状的 python 列表,使 NumPy 创建一个矩阵来表示它:

我们也可以使用上面提到的方法 (ones()、zeros()和 random.random()), 只要写入一个描述我们创建的矩阵维数的元组即可:



#### 矩阵运算

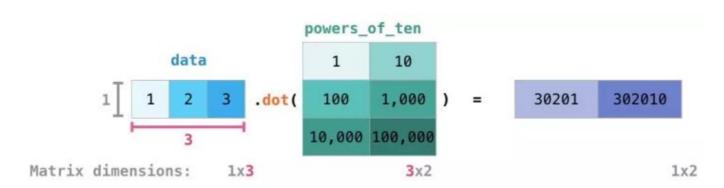
如果两个矩阵大小相同,我们可以使用算术运算符(+-\*/)对矩阵进行加和乘。NumPy 将它们视为 position-wise 运算:



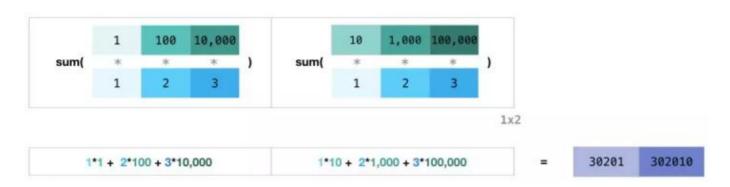
我们也可以对不同大小的两个矩阵执行此类算术运算,但前提是某一个维度为 1 (如矩阵只有一列或一行),在这种情况下,NumPy使用广播规则执行算术运算:

#### 点乘

算术运算和矩阵运算的一个关键区别是矩阵乘法使用点乘。NumPy 为每个矩阵赋予 dot() 方法,我们可以用它与其他矩阵执行点乘操作:

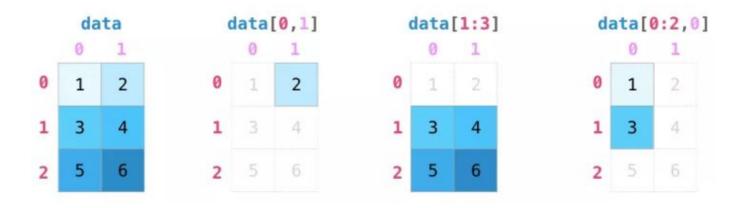


我在上图的右下角添加了矩阵维数,来强调这两个矩阵的临近边必须有相同的维数。你可以把上述 运算视为:



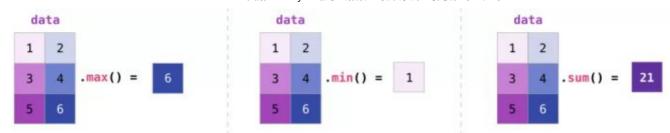
# 矩阵索引

当我们处理矩阵时,索引和切片操作变得更加有用:

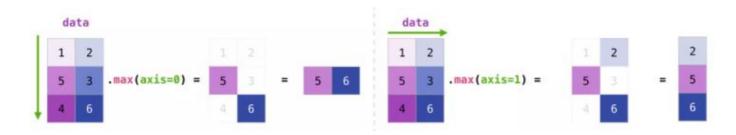


#### 矩阵聚合

我们可以像聚合向量一样聚合矩阵:

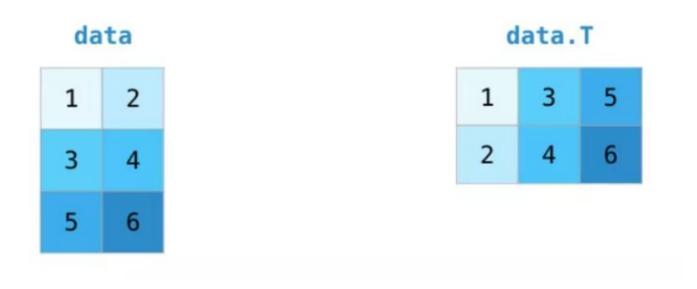


我们不仅可以聚合矩阵中的所有值,还可以使用 axis 参数执行跨行或跨列聚合:

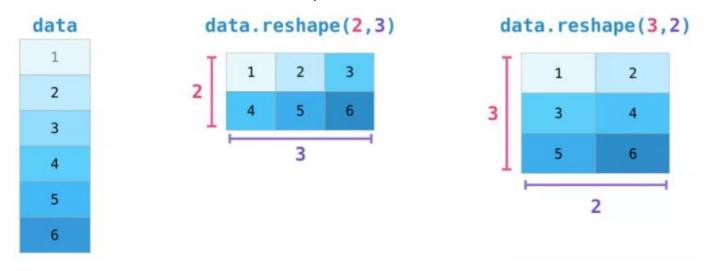


#### 转置和重塑

处理矩阵时的一个常见需求是旋转矩阵。当需要对两个矩阵执行点乘运算并对齐它们共享的维度时,通常需要进行转置。NumPy 数组有一个方便的方法 T 来求得矩阵转置:

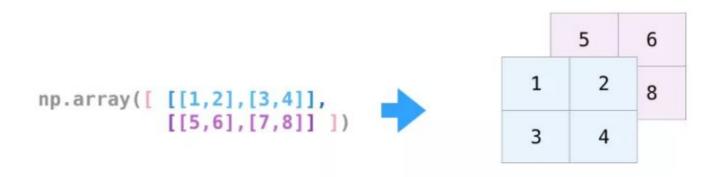


在更高级的实例中,你可能需要变换特定矩阵的维度。在机器学习应用中,经常会这样:某个模型对输入形状的要求与你的数据集不同。在这些情况下,NumPy 的 reshape() 方法就可以发挥作用了。只需将矩阵所需的新维度赋值给它即可。可以为维度赋值-1,NumPy 可以根据你的矩阵推断出正确的维度:

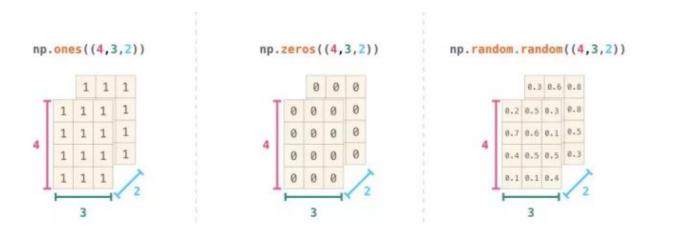


# 再多维度

NumPy 可以在任意维度实现上述提到的所有内容。其中心数据结构被叫作 ndarray ( N 维数组 ) 不是没道理的。



在很多情况下,处理一个新的维度只需在 NumPy 函数的参数中添加一个逗号:



# 实际用法

以下是 NumPy 可实现的有用功能的实例演示。

# 公式

实现可用于矩阵和向量的数学公式是 NumPy 的关键用例。这就是 NumPy 是 python 社区宠儿的原因。例如均方差公式,它是监督机器学习模型处理回归问题的核心:

$$MeanSquareError = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (Y_prediction_i - Y_i)^2$$

在 NumPy 中实现该公式很容易:

这样做的好处在于, NumPy 并不关心 predictions 和 labels 包含一个值还是一千个值(只要它们大小相同)。我们可以通过一个示例依次执行上面代码行中的四个操作:

预测和标签向量都包含三个值,也就是说 n 的值为 3。减法后,得到的值如下:

然后将向量平方得到:

现在对这些值求和:

$$error = (1/3) * 5$$

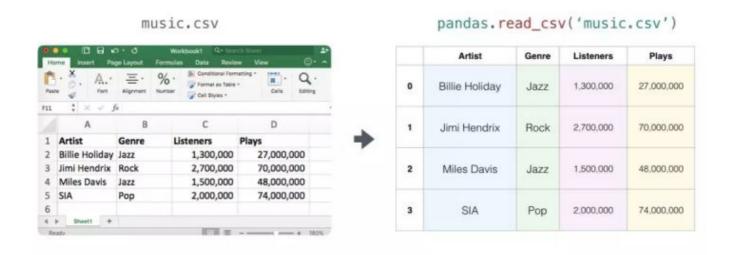
得到的结果即为该预测的误差值和模型质量评分。

# 数据表示

考虑所有需要处理和构建模型所需的数据类型(电子表格、图像、音频等),其中很多都适合在 n 维数组中表示:

#### 表格和电子表格

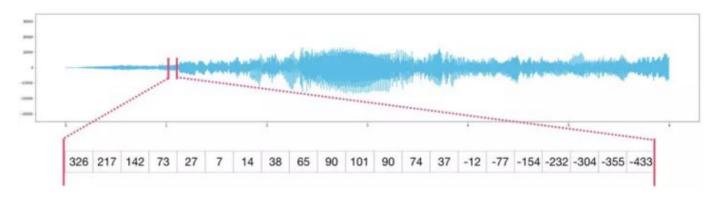
电子表格或值表是二维矩阵。电子表格中的每个工作表都可以是它自己的变量。python 中最流行的抽象是 pandas 数据帧,它实际上使用了 NumPy 并在其之上构建。



#### 音频和时间序列

音频文件是样本的一维数组。每个样本都是一个数字,代表音频信号的一小部分。CD 质量的音频 每秒包含 44,100 个样本,每个样本是-65535 到 65536 之间的整数。这意味着如果你有一个 10 秒的 CD 质量 WAVE 文件,你可以将它加载到长度为 10 \* 44,100 = 441,000 的 NumPy 数组中。如果想要提取音频的第一秒,只需将文件加载到 audio 的 NumPy 数组中,然后获取 audio[:44100]。

# 以下是一段音频文件:



时间序列数据也是如此(如股票价格随时间变化)。

# 图像

图像是尺寸(高度 x 宽度)的像素矩阵。

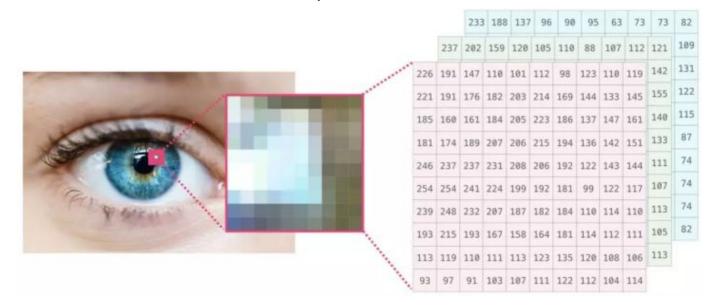
如果图像是黑白(即灰度)的,则每个像素都可以用单个数字表示(通常在0(黑色)和255(白色)之间)。想要裁剪图像左上角10x10的像素吗?在NumPy写入

即可。

# 下图是一个图像文件的片段:



如果图像是彩色的,则每个像素由三个数字表示——红色、绿色和蓝色。在这种情况下,我们需要一个三维数组(因为每个单元格只能包含一个数字)。因此彩色图像由尺寸为(高 x 宽 x3)的 ndarray 表示:



# 语言

如果我们处理文本,情况就不同了。文本的数字表示需要一个构建词汇表的步骤(模型知道的唯一字清单)和嵌入步骤。让我们看看用数字表示以下文字的步骤:

模型需要先查看大量文本,再用数字表示这位诗人的话语。我们可以让它处理一个小数据集,并用它来构建一个词汇表(71,290 个单词):

# Model Vocabulary

#	
0	the
1	of
2	and
***	***
71,289	dolophine

这个句子可以被分成一个 token 数组(基于通用规则的单词或单词的一部分):

have the bards who preceded me left any theme unsung	have	the	bards	who	preceded	me	left	any	theme	unsung
--	------	-----	-------	-----	----------	----	------	-----	-------	--------

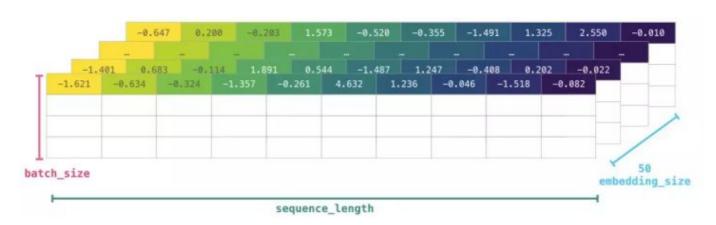
# 然后我们用词汇表中的 ID 替换每个单词:

38	0	29104	56	7027	745	225	104	2211	66609
50		20204	50	7027	, ,,,	223	10.4	2211	00003

这些 ID 仍然没有为模型提供太多信息价值。因此,在将这一组单词输入到模型之前,我们需要用嵌入替换 token/单词(在本例中为 50 维 word2vec 嵌入):

	have	the	bards	who	preceded	me	left	any	theme	unsung
0	-1.621	-0.634	-0.324	-1.357	-0.261	4.632	1.236	-0.046	-1.518	-0.082
1	-1.401	0.683	-0.114	1.891	0.544	-1.487	1.247	-0.408	0.202	-0.022
			***							***
49	-0.647	0.200	-0.203	1.573	-0.520	-0.355	-1.491	1.325	2.550	-0.010

可以看到,该 NumPy 数组的维度为 [embedding\_dimension x sequence\_length]。出于性能原因,深度学习模型倾向于保留批大小的第一维(因为如果并行训练多个示例,模型训练速度会加快)。在这种情况下,reshape() 变得非常有用。如像 BERT 这样的模型期望的输入形式是: [batch\_size , sequence\_length , embedding\_size]。



现在这是 numeric volume 形式,模型可以处理并执行相应操作。其他行虽然留空,但是它们会被填充其他示例以供模型训练(或预测)。



# 原文链接: jalammar.github.io/visu

发布于 2019-07-12



#### 文章被以下专栏收录



#### 机器之心

提供专业的前沿科技信息

进入专栏