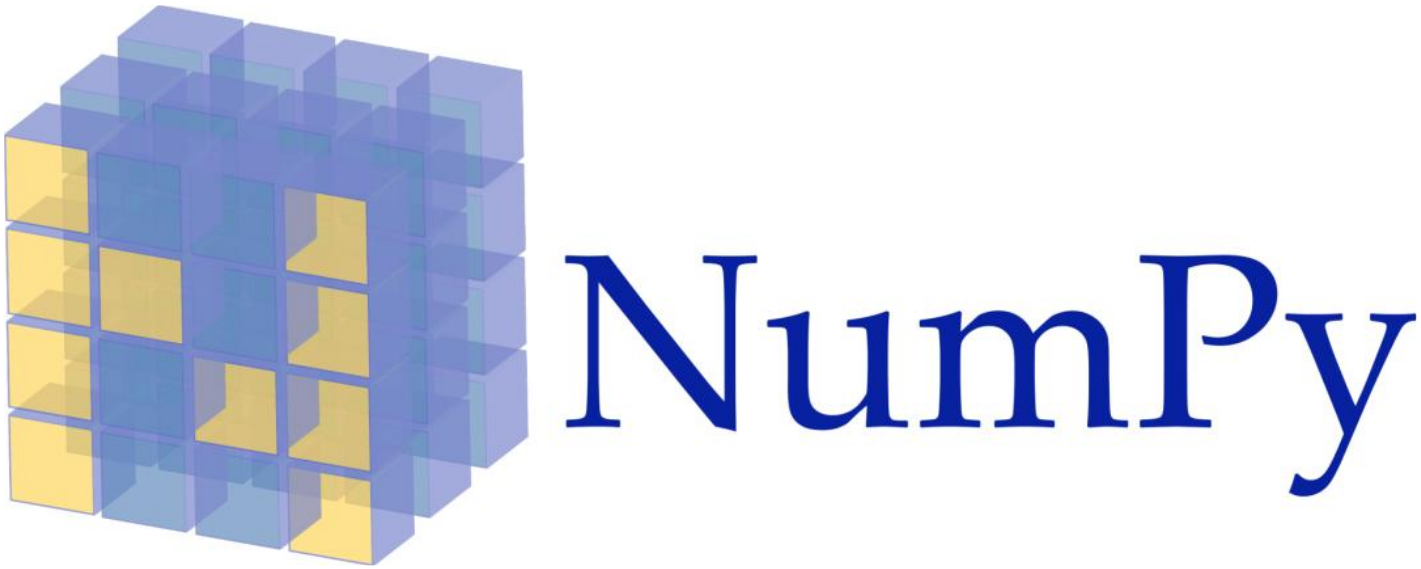
看图学NumPy：掌握n维数组基础知识点，看这一篇就够了

澎湃 THE PAPER 湃客：量子位QbitAI 2021-01-05 22:29

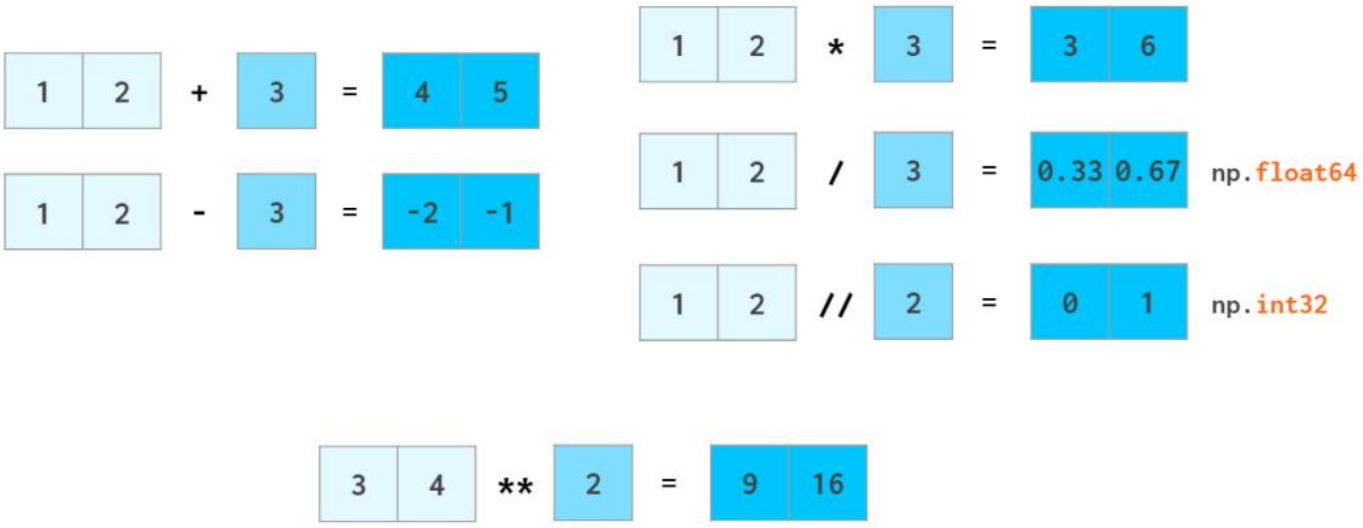
晓查 编译整理

量子位 报道 | 公众号 QbitAI

NumPy是Python的最重要的扩展程序库之一，也是入门机器学习编程的必备工具。然而对初学者来说，NumPy的大量运算方法非常难记。



最近，国外有位程序员讲NumPy的基本运算以图解的方式写下来，让学习过程变得轻松有趣。在Reddit机器学习社区发布不到半天就收获了500+赞。



下面就让我们跟随他的教程一起来学习吧！

教程内容分为向量 （一维数组）、矩阵 （二维数组）、三维与更高维数组3个部分。

Numpy数组与Python列表

在介绍正式内容之前，先让我们先来了解一下Numpy数组与Python列表的区别。

乍一看， NumPy数组类似于Python列表。它们都可以用作容器，具有获取（getting）和设置（setting）元素以及插入和移除元素的功能。

两者有很多相似之处，以下是二者在运算时的一个示例：

```
In [3]: a = [1, 2, 3]
        [q*2 for q in a]
Out[3]: [2, 4, 6]
```

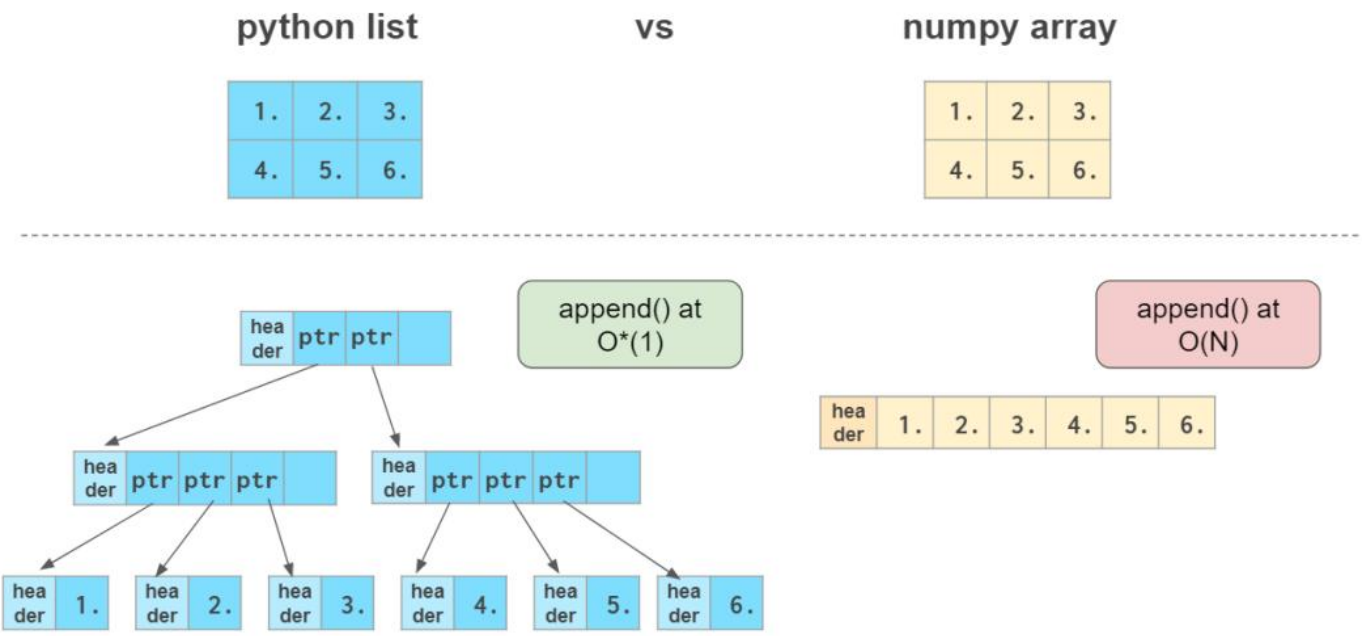
```
In [4]: a = np.array([1, 2, 3])
        a * 2
Out[4]: array([2, 4, 6])
```

```
In [1]: a = [1, 2, 3]
        b = [4, 5, 6]
        [q+r for q, r in zip(a, b)]
Out[1]: [5, 7, 9]
```

```
In [2]: a = np.array([1, 2, 3])
        b = np.array([4, 5, 6])
        a + b
Out[2]: array([5, 7, 9])
```

和Python列表相比，Numpy数组具有以下特点：

更紧凑，尤其是在一维以上的维度；向量化操作时比Python列表快，但在末尾添加元素比Python列表慢。



△在末尾添加元素时，Python列表复杂度为O(1)，NumPy复杂度为O(N)

向量运算

向量初始化

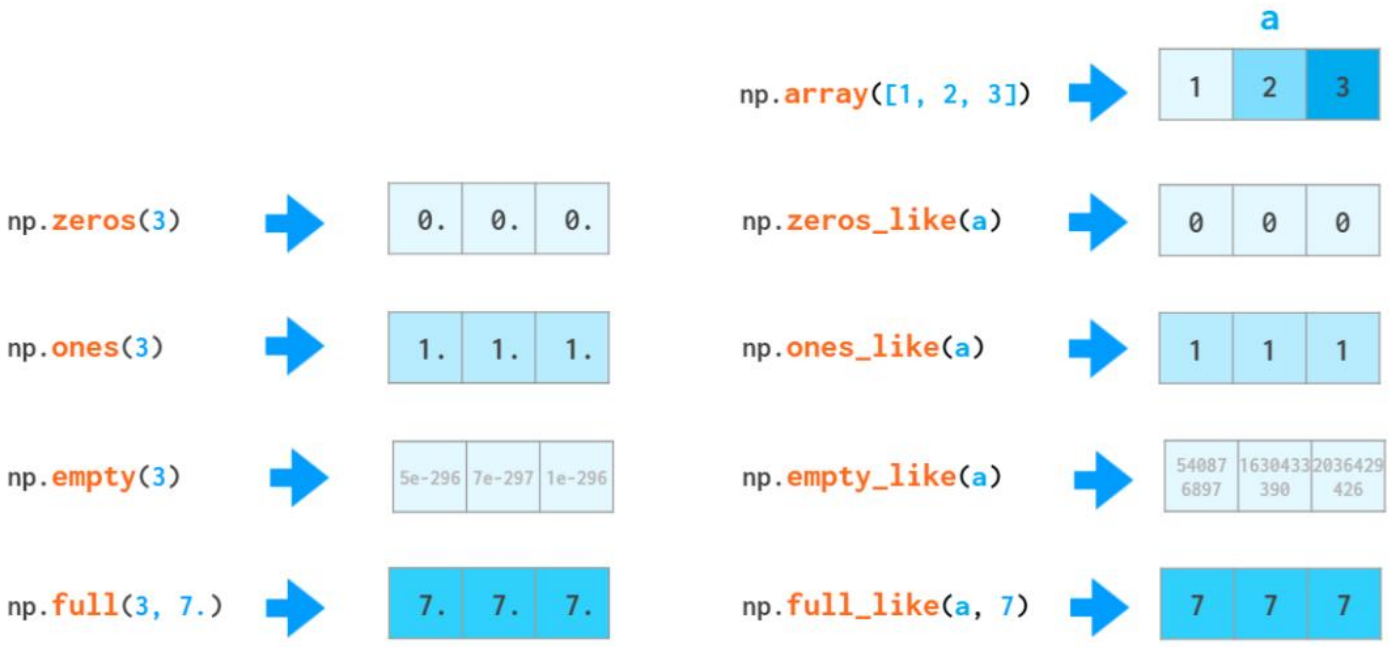
创建NumPy数组的一种方法是从Python列表直接转换，数组元素的类型与列表元素类型相同。

NumPy数组无法像Python列表那样加长，因为在数组末尾没有保留空间。

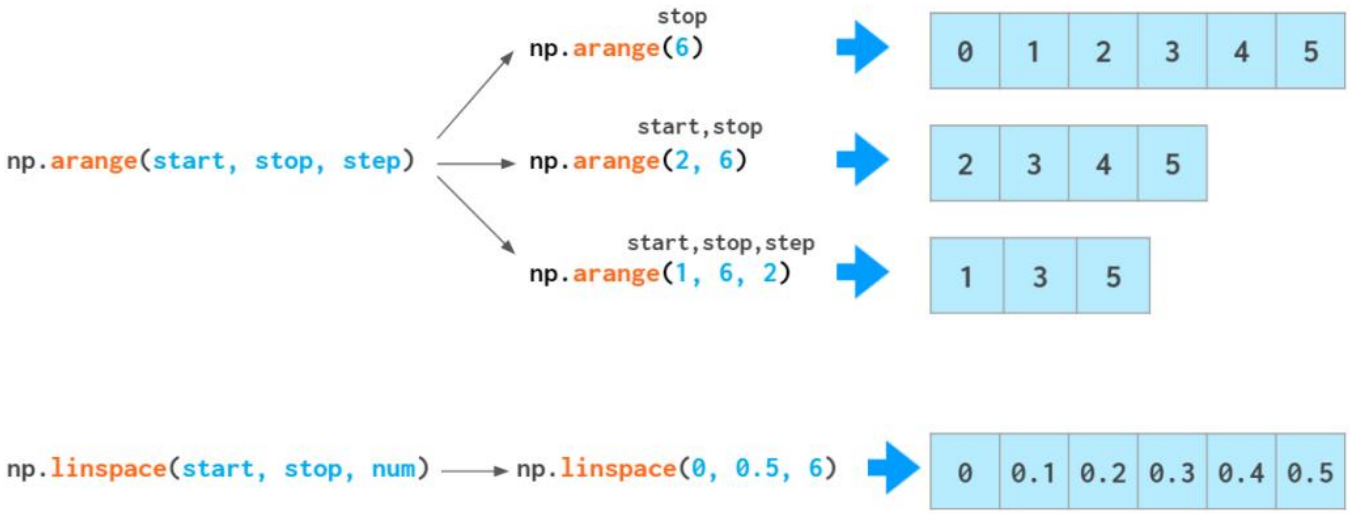
因此，常见的做法是定义一个Python列表，对它进行操作，然后再转换为NumPy数组，或者用np.zeros和np.empty初始化数组，预分配必要的空间：

有时我们需要创建一个空数组，大小和元素类型与现有数组相同：

实际上，所有用常量填充创建的数组的函数都有一个_like对应项，来创建相同类型的常数数组：



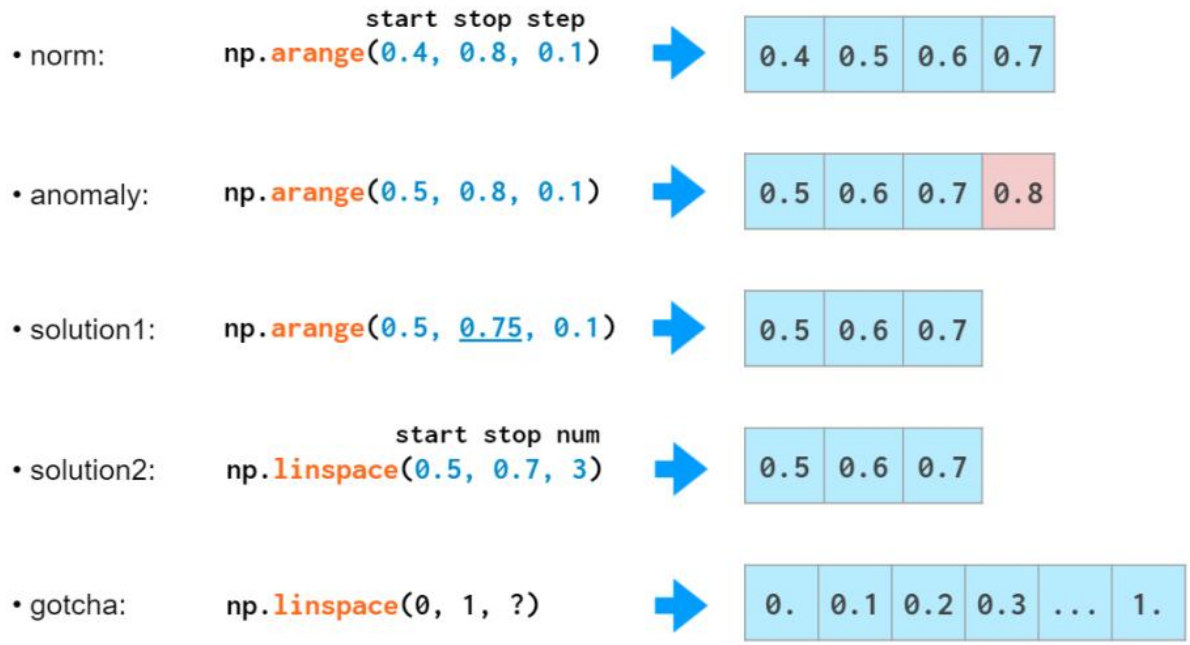
在NumPy中，可以用arange或者linspace来初始化单调序列数组：



如果需要类似[0., 1., 2.]的浮点数组，可以更改arange输出的类型：arange(3).astype(float)。

但是有更好的方法：arange函数对数据类型敏感，如果将整数作为参数，生成整数数组；如果输入浮点数（例如arange(3.)），则生成浮点数组。

但是arange在处理浮点数方面并不是特别擅长：

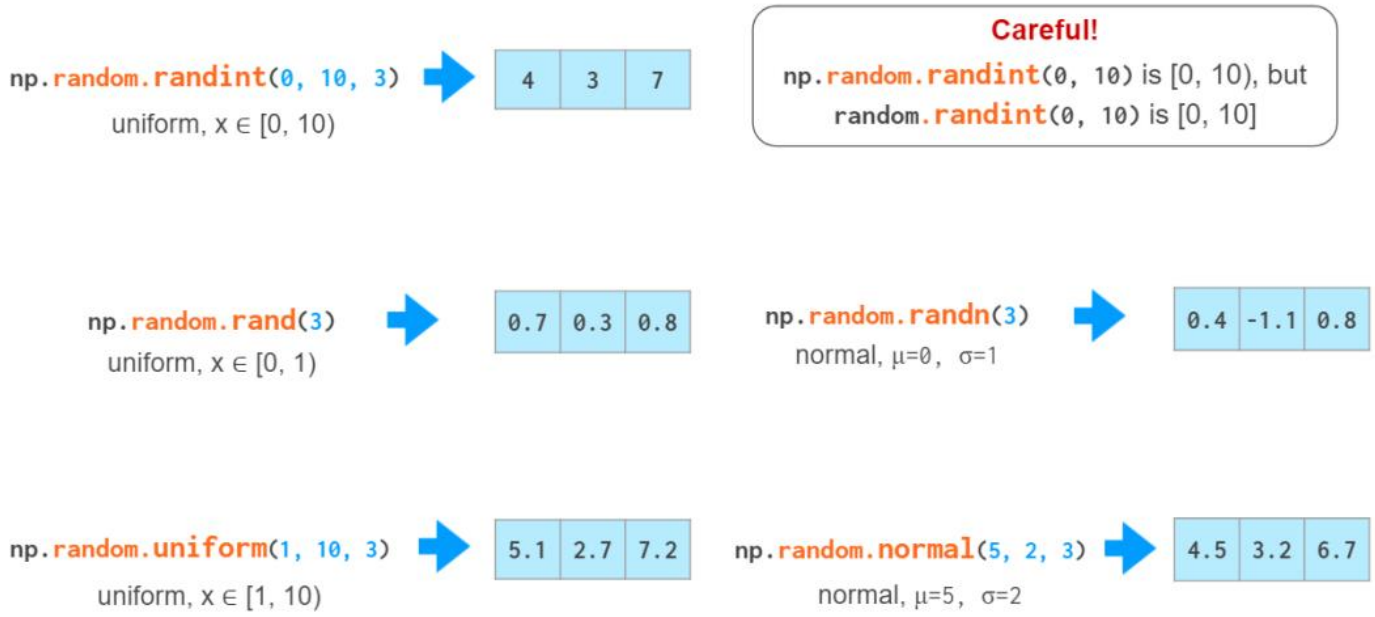


这是因为0.1对于我们来说是一个有限的十进制数，但对计算机而言却不是。在二进制下，0.1是一个无穷小数，必须在某处截断。

这就是为什么将小数部分加到步骤arange通常是一个不太好的方法：我们可能会遇到一个bug，导致数组的元素个数不是我们想要的数，这会降低代码的可读性和可维护性。

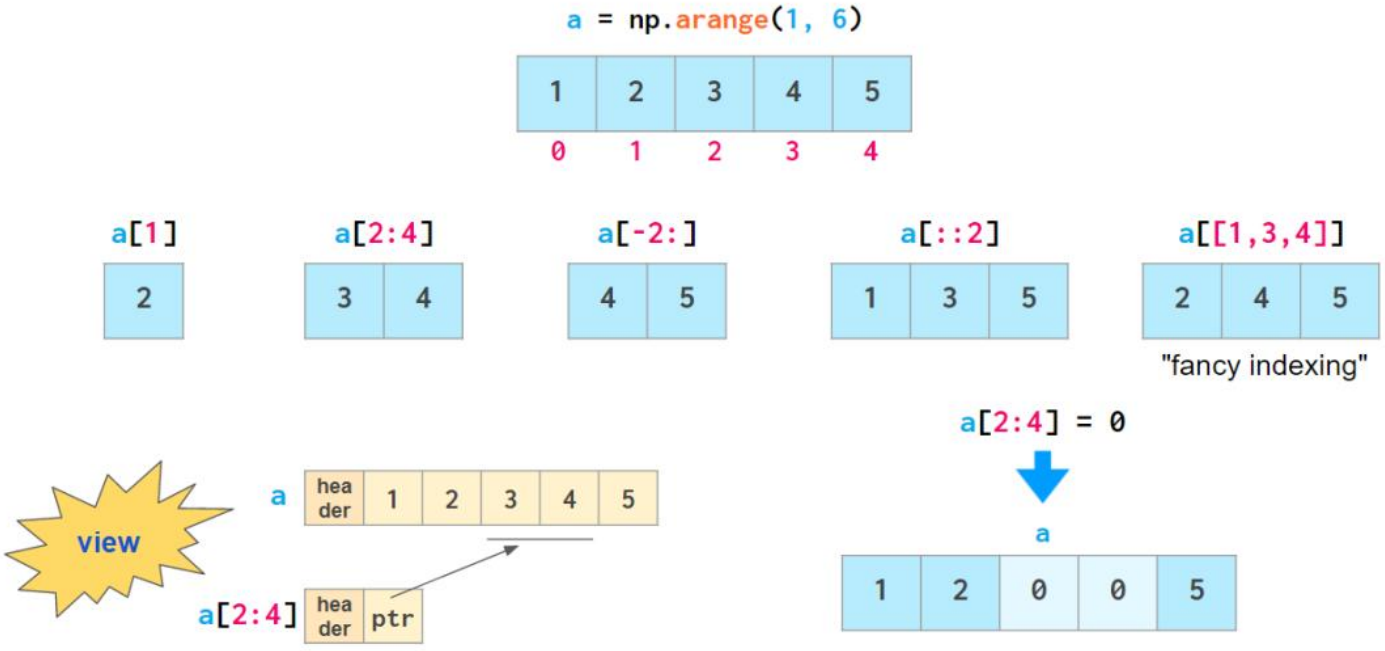
这时候，linspace会派上用场。它不受舍入错误的影响，并始终生成要求的元素数。

出于测试目的，通常需要生成随机数组，NumPy提供随机整数、均匀分布、正态分布等几种随机数形式：



向量索引

一旦将数据存储在数组中，NumPy便会提供简单的方法将其取出：



上面展示了各式各样的索引，例如取出某个特定区间，从右往左索引、只取出奇数位等等。

但它们都是所谓的view，也就是不存储原始数据。并且如果原始数组在被索引后进行更改，则不会反映原始数组的改变。

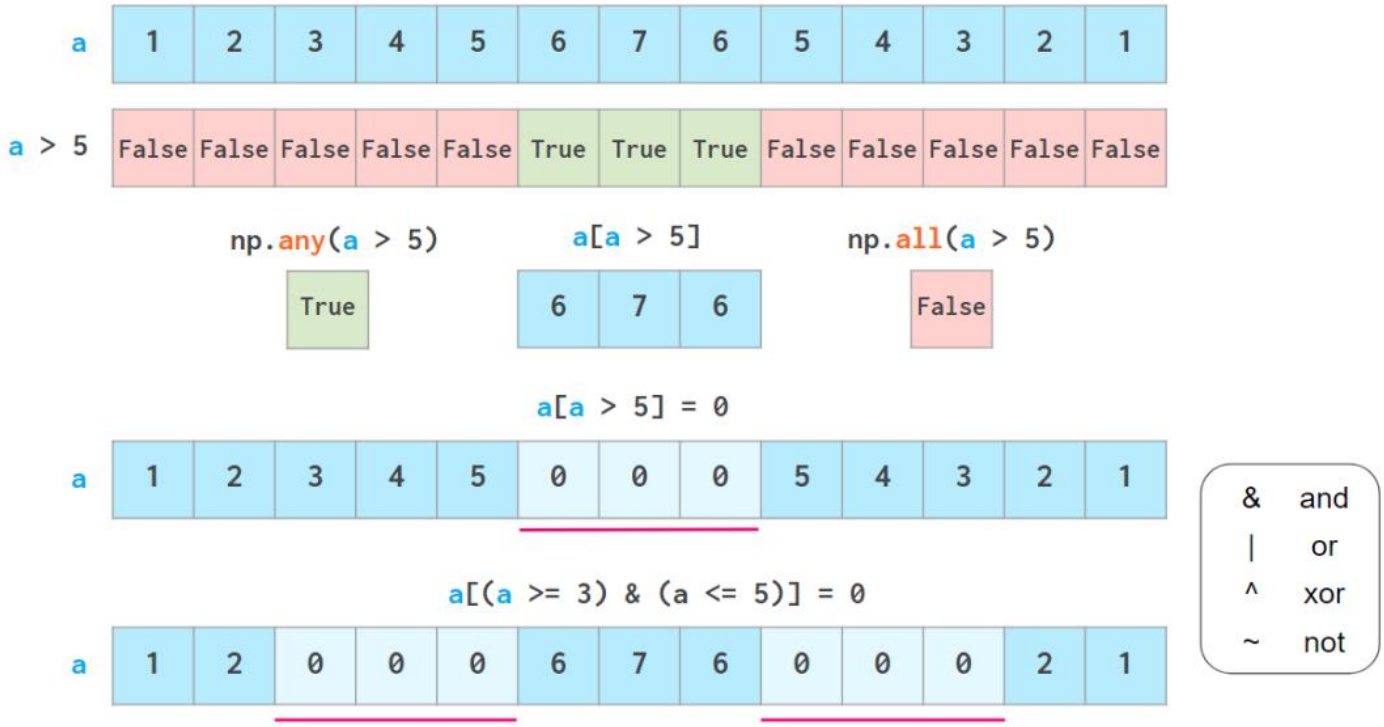
这些索引方法允许分配修改原始数组的内容，因此需要特别注意：只有下面最后一种方法才是复制数组，如果用其他方法都可能破坏原始数据：

python list vs numpy array

```
a = [1, 2, 3]
b = a         # no copy
c = a[:]      # copy
d = a.copy() # copy
```

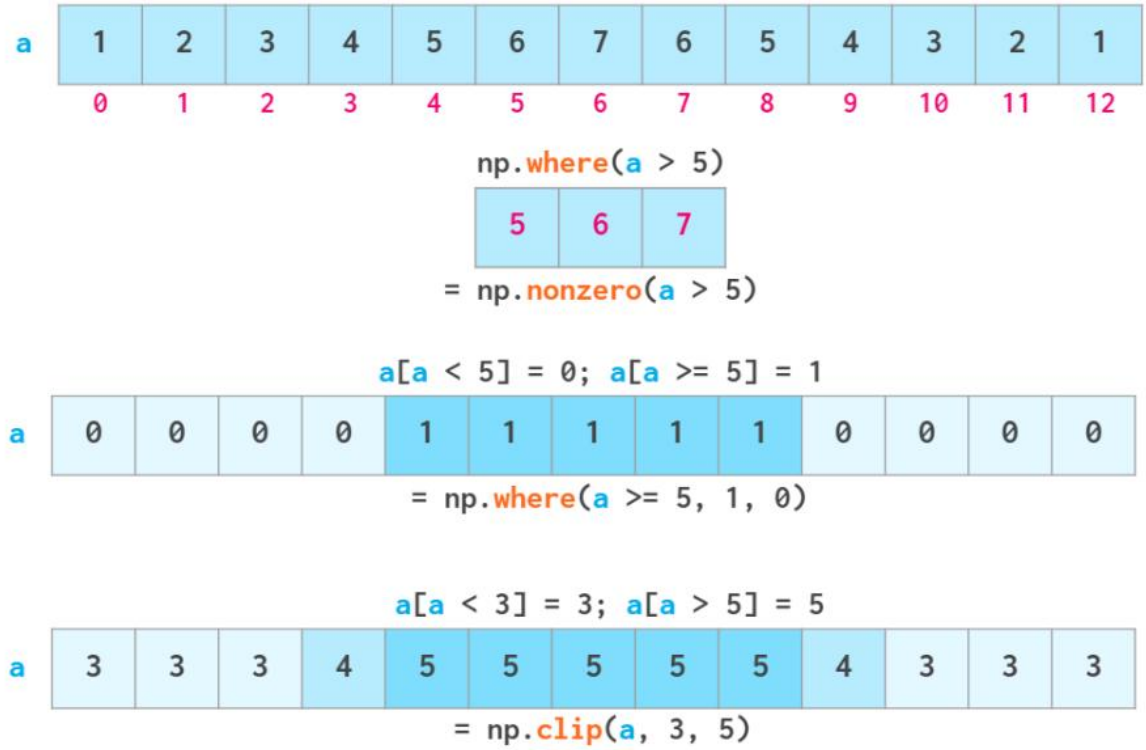
```
a = np.array([1, 2, 3])
b = a         # no copy
c = a[:]      # no copy!!!
d = a.copy() # copy
```

从NumPy数组中获取数据的另一种超级有用的方法是布尔索引，它允许使用各种逻辑运算符，来检索符合条件的元素：



注意：Python中的三元比较3<=a<=5在NumPy数组中不起作用。

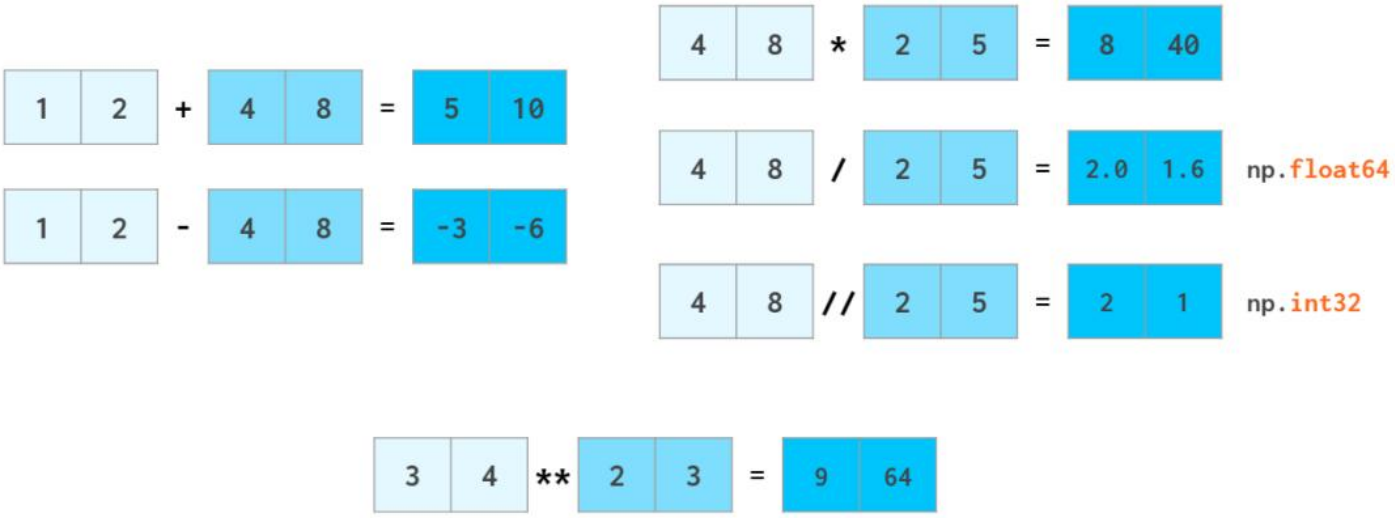
如上所述，布尔索引也会改写数组。它有两个常见的函数，分别是np.where和np.clip：



向量运算

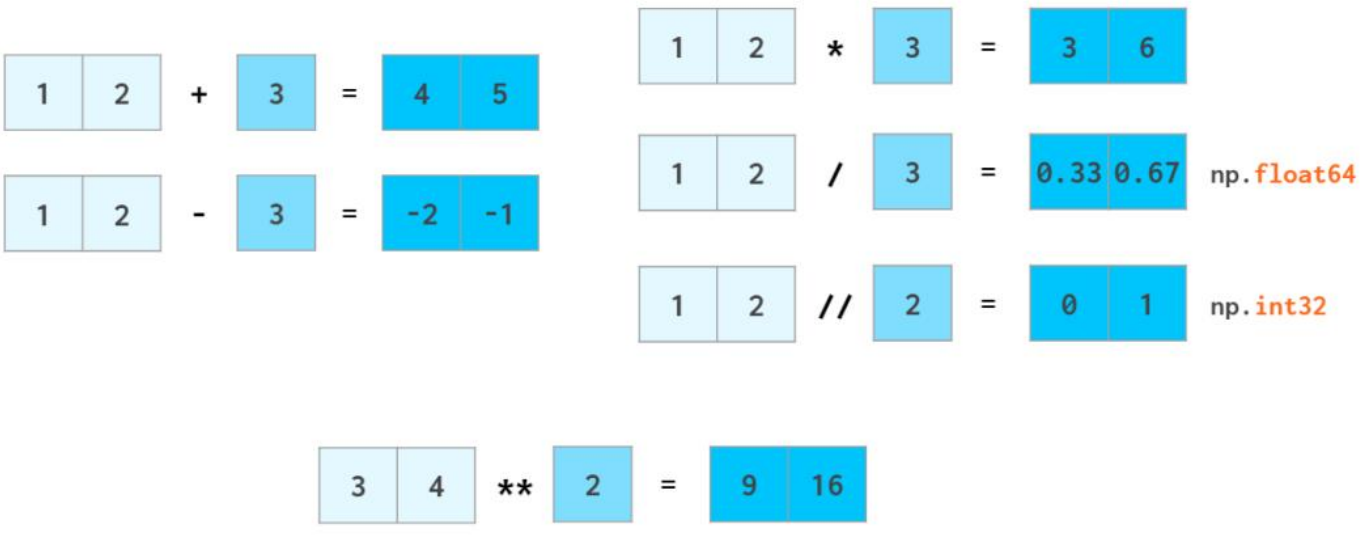
算术运算是NumPy速度最引入注目的地方之一。NumPy的向量运算符已达到C++级别，避免了Python的慢循环。

NumPy允许像普通数字一样操作整个数组（加减乘除、整除、幂）：

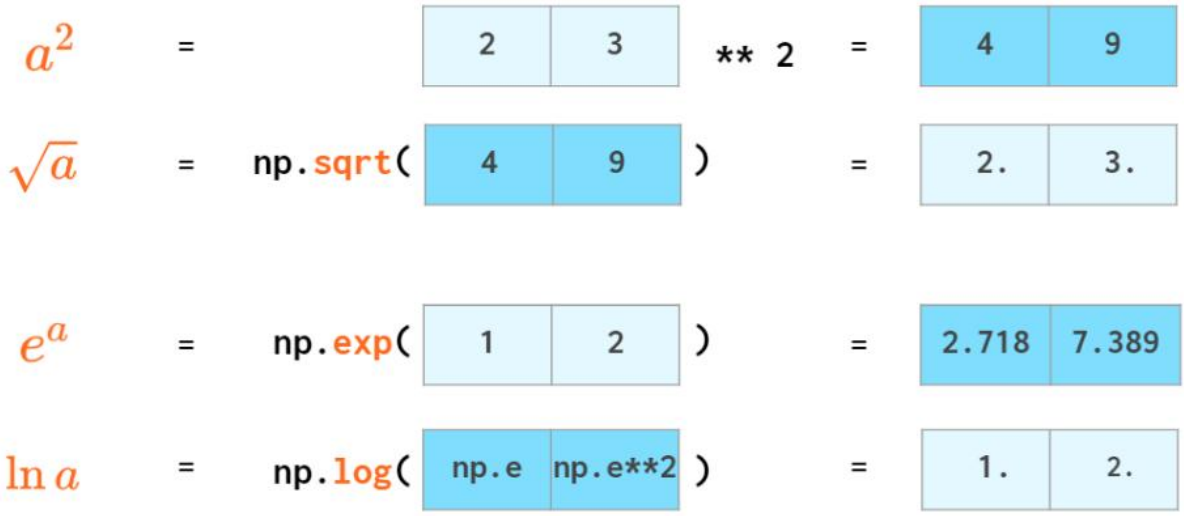


▵ 和Python中一样，a//b表示div b（整除），x**n表示x^n

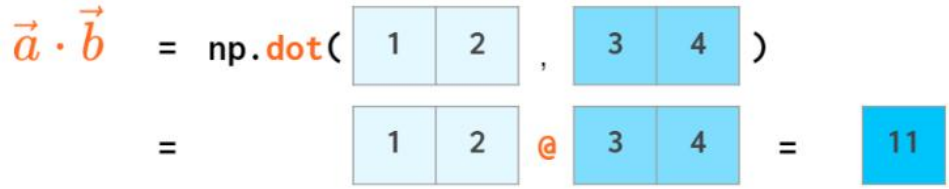
向量还可以与标量进行类似的运算，方法相同：



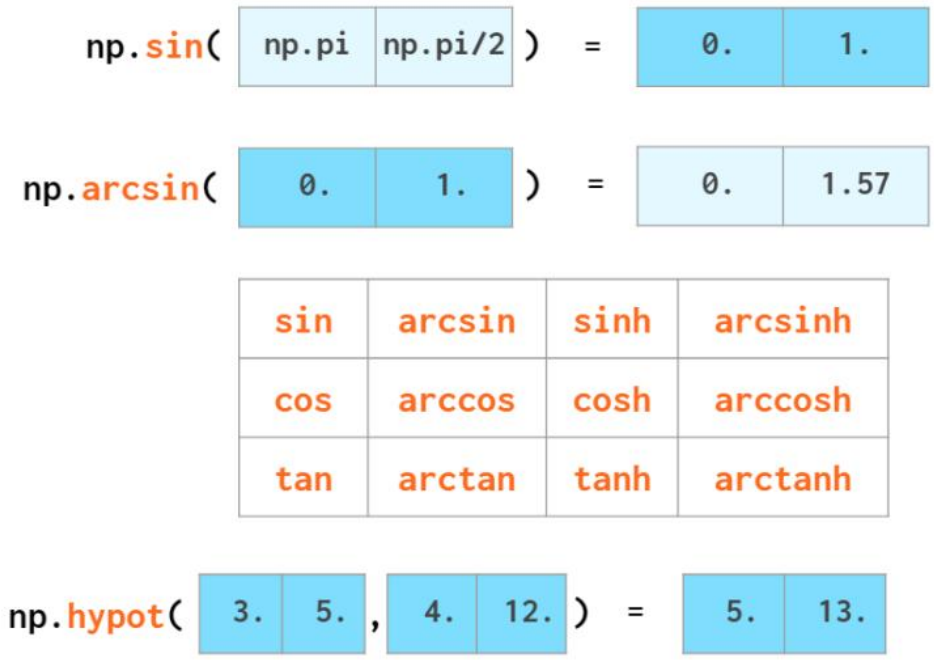
大多数的数学函数都有NumPy对应项用于处理向量：



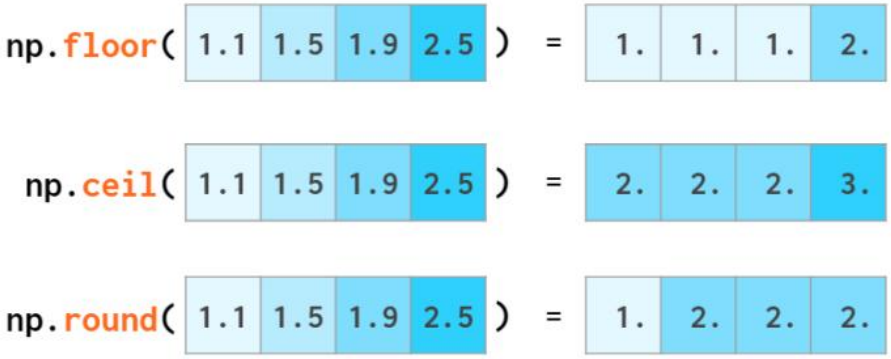
向量的点积、叉积也有运算符：



我们也可以进行三角函数、反三角函数、求斜边运算：

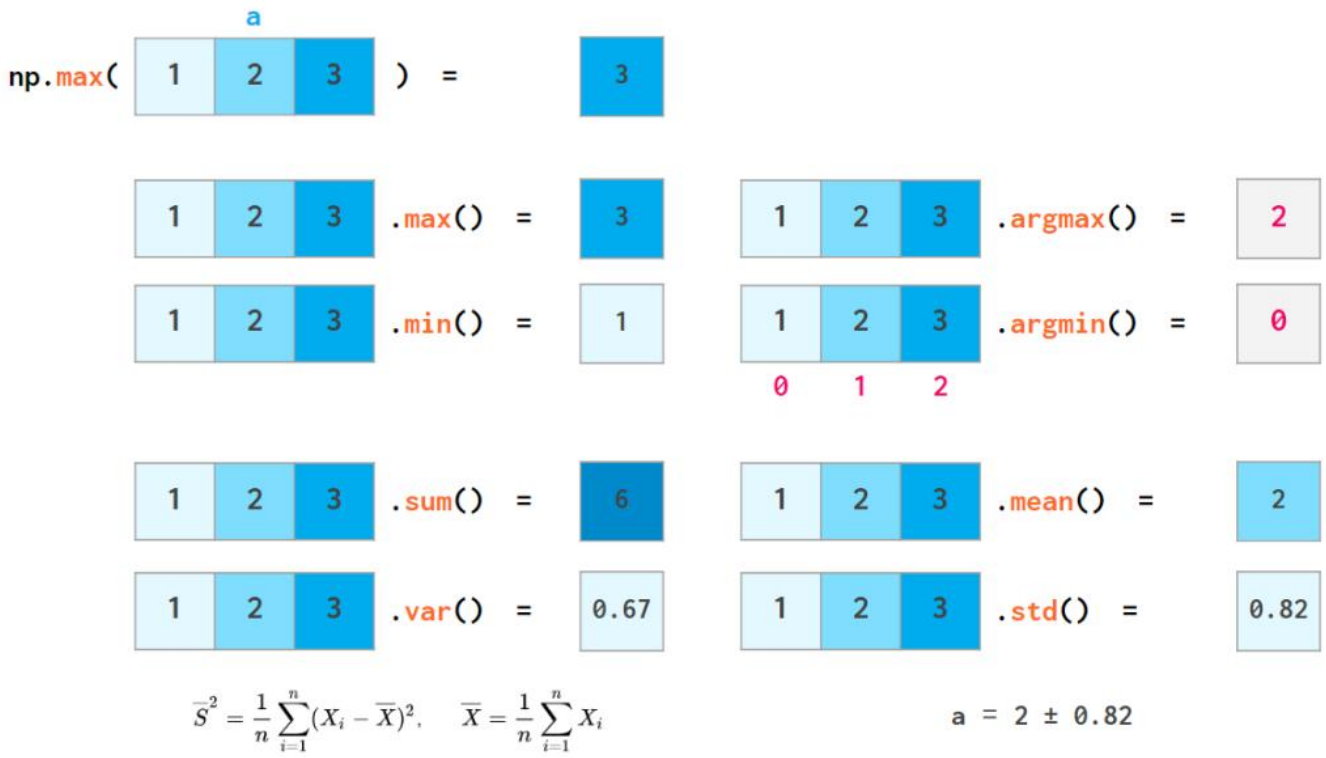


数组可以四舍五入为整数：



▵ floor取下界；ceil取上界；round为四舍六入五取偶

NumPy还可以执行以下基本的统计运算（最大最小值、平均值、方差、标准差）：



不过排序函数的功能比Python列表对应函数更少：

python lists	numpy arrays	
`a.sort()`	`a.sort()`	sorts in-place
`sorted(a)`	`np.sort(a)`	returns new sorted array
`a.sort(key=f)`	–	key function
`a.sort(reversed=False)`	-	ascending/descending

搜索向量中的元素

与Python列表相反，NumPy数组没有index方法。

Python Lists:

```
a.index(x[, i[, j]])    # first occurrence of x in a between indices i and j
```

Numpy Arrays:

```
np.where(a==x)[0][0]                                # finds all occurrences first
next(i[0] for i, v in np.ndenumerate(a) if v==x) # needs numba
np.searchsorted(a, x)                               # needs sorted array
```

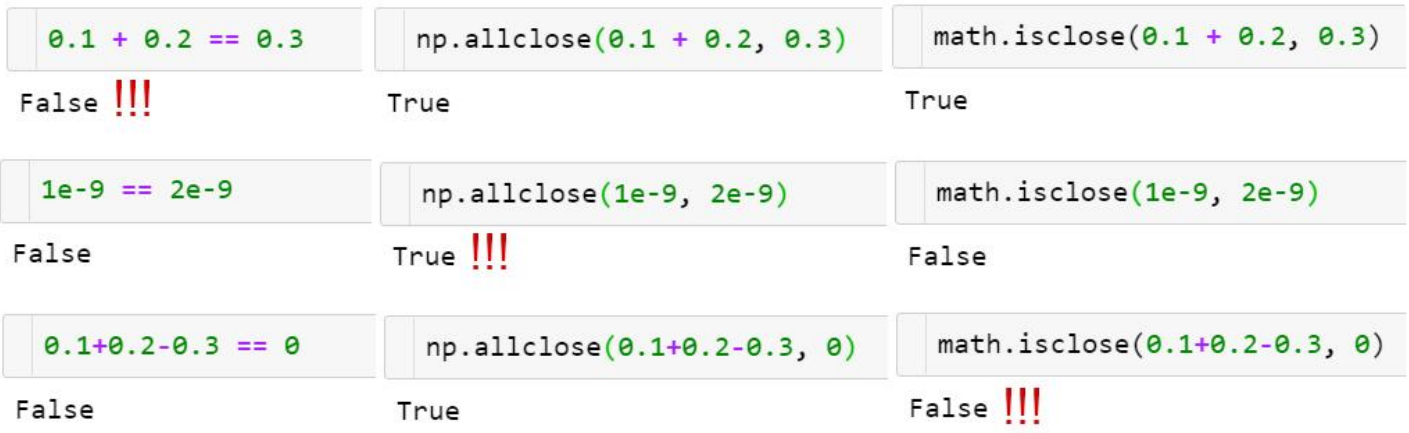
查找元素的一种方法是np.where(a==x)[0][0]，它既不优雅也不快速，因为要查找的项需要从开头遍历数组的所有元素。

更快的方式是通过Numba中的next((i[0] for i, v in np.ndenumerate(a) if v==x), -1)来加速。

一旦对数组进行排序，情况就会变得更好：v = np.searchsorted(a, x); return v if a[v]==x else -1的复杂度为O(log N)，确实非常快，但是首先需要O(N log N)的排序时间。

比较浮点数

函数np.allclose(a, b)用于比较具有给定公差的浮点数组：



np.allclose假设所有的比较数字的等级是1个单位。例如在上图中，它就认为1e-9和2e-9相同，如果要进行更细致的比较，需要通过atol指定比较等级1：np.allclose(1e-9, 2e-9, atol=1e-17) == False。

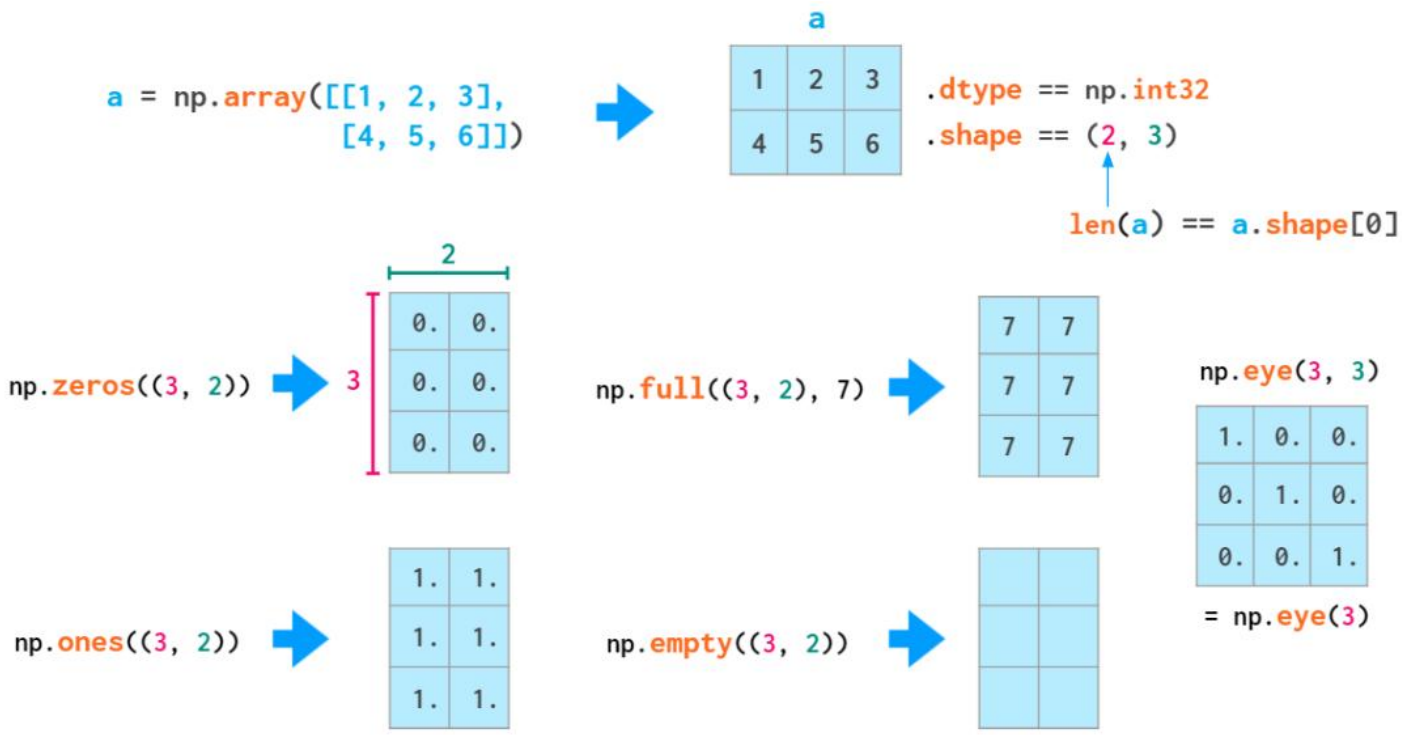
math.isclose进行比较没有假设前提，而是基于用户给出的一个合理abs_tol值：math.isclose(0.1+0.2–0.3, abs_tol=1e-8) == True。

除此之外np.allclose在绝对和相对公差公式中还存在一些小问题，例如，对某些数存在allclose(a, b) != allclose(b, a)。这些问题已在math.isclose函数中得到解决。

矩阵运算

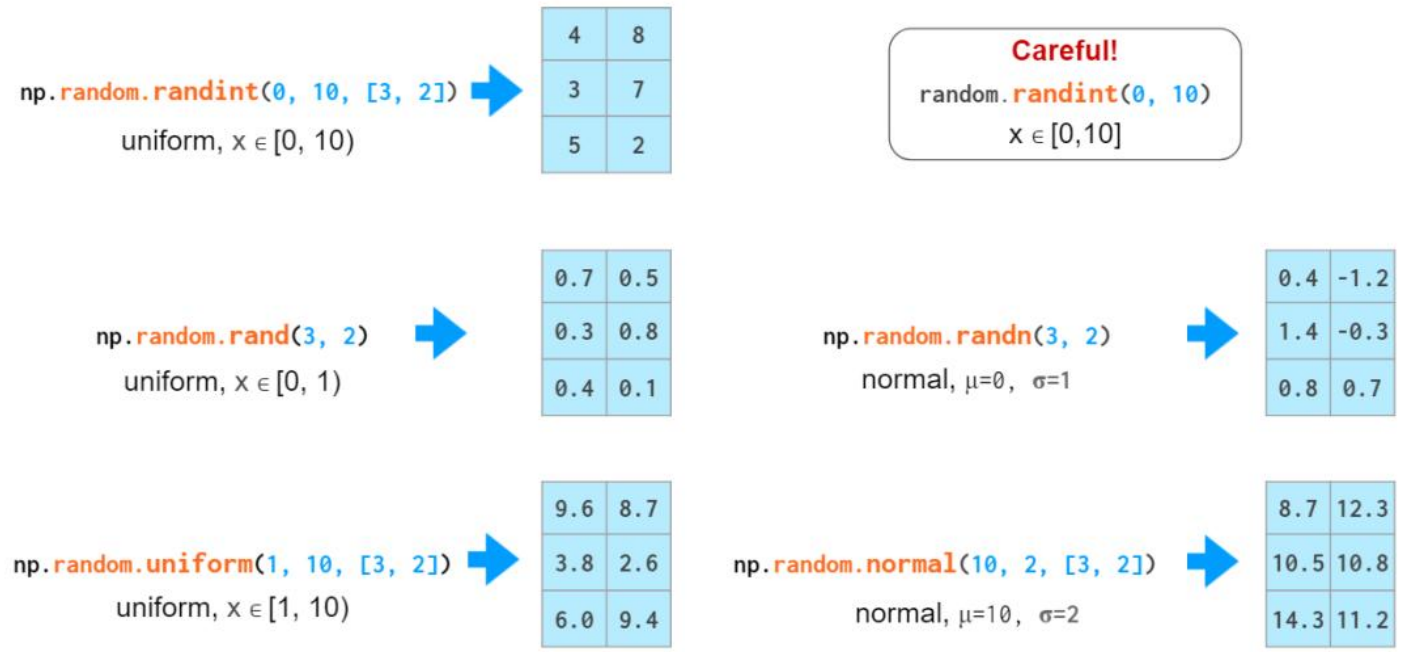
NumPy中曾经有一个专用的类matrix，但现在已弃用，因此下面将交替使用矩阵和2D数组两个词。

矩阵初始化语法与向量相似：

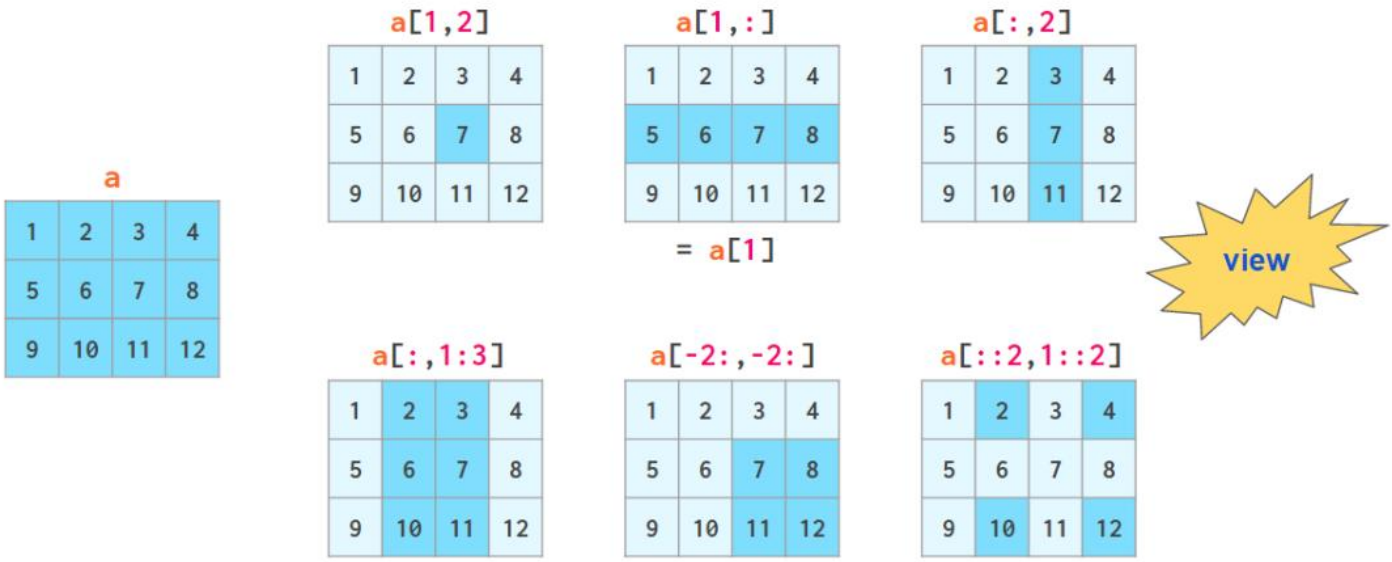


这里需要双括号，因为第二个位置参数是为dtype保留的。

随机矩阵的生成也类似于向量的生成：



二维索引语法比嵌套列表更方便：

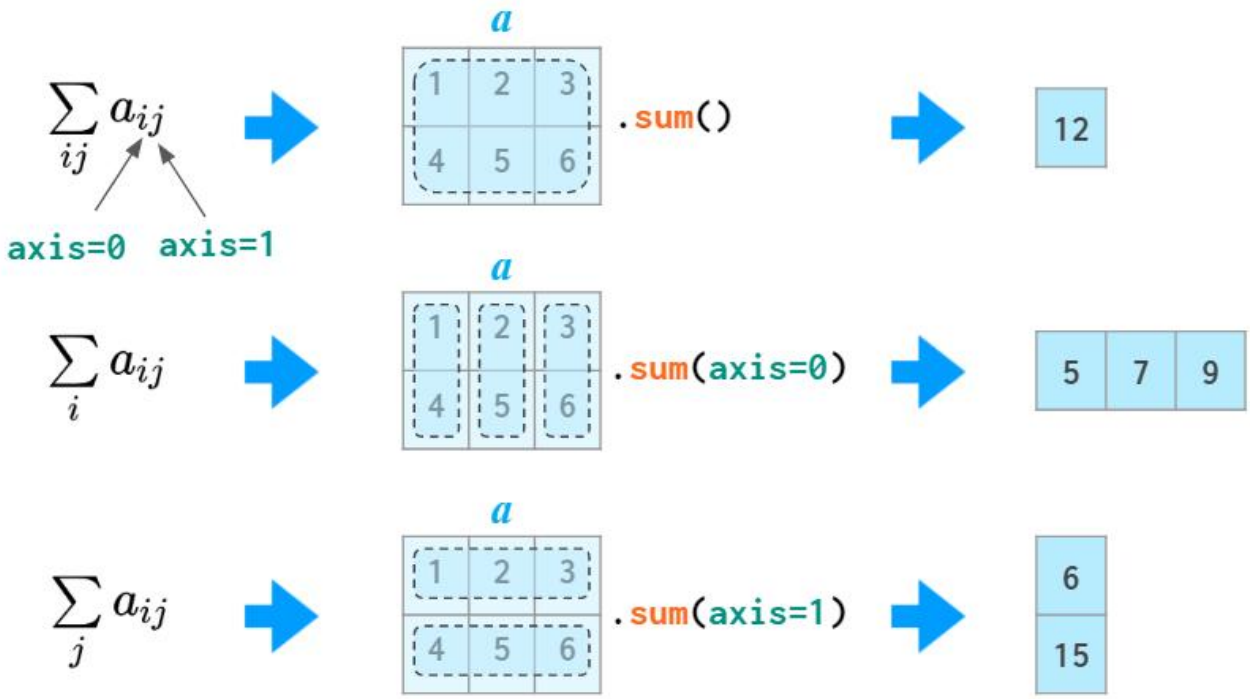


和一维数组一样，上图的view表示，切片数组实际上并未进行任何复制。修改数组后，更改也将反映在切片中。

axis参数

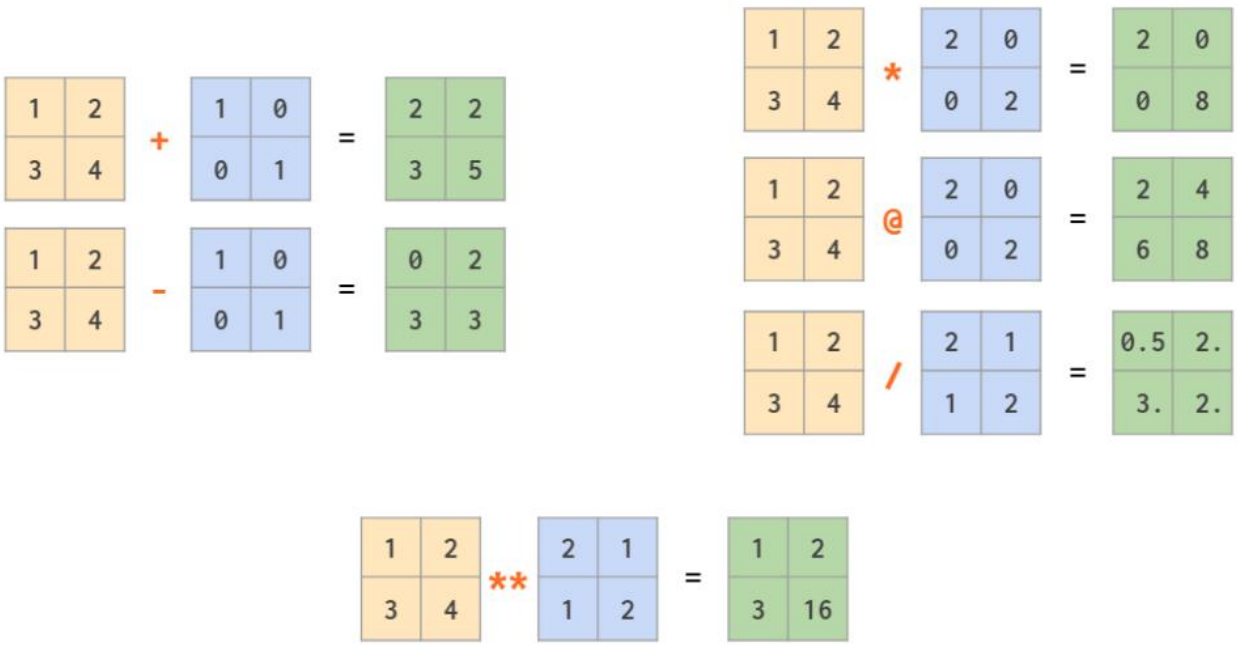
在许多操作（例如求和）中，我们需要告诉NumPy是否要跨行或跨列进行操作。为了使用任意维数的通用表示法，NumPy引入了axis的概念：axis参数实际上是所讨论索引的数量：第一个索引是axis=0，第二个索引是axis=1，等等。

因此在二维数组中，如果axis=0是按列，那么axis=1就是按行。

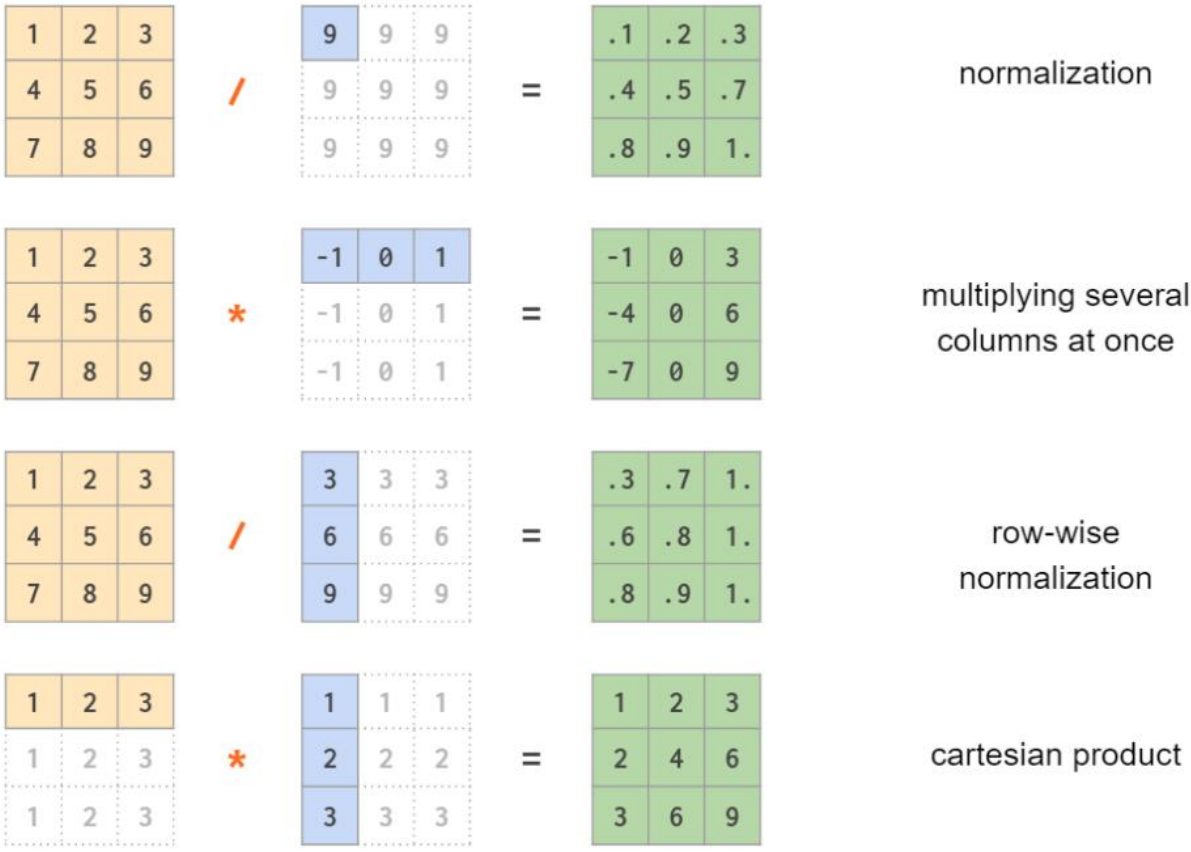


矩阵运算

除了普通的运算符（如+，-，*，/，//和**）以元素方式计算外，还有一个@运算符可计算矩阵乘积：



在第一部分中，我们已经看到向量乘积的运算，NumPy允许向量和矩阵之间，甚至两个向量之间进行元素的混合运算：

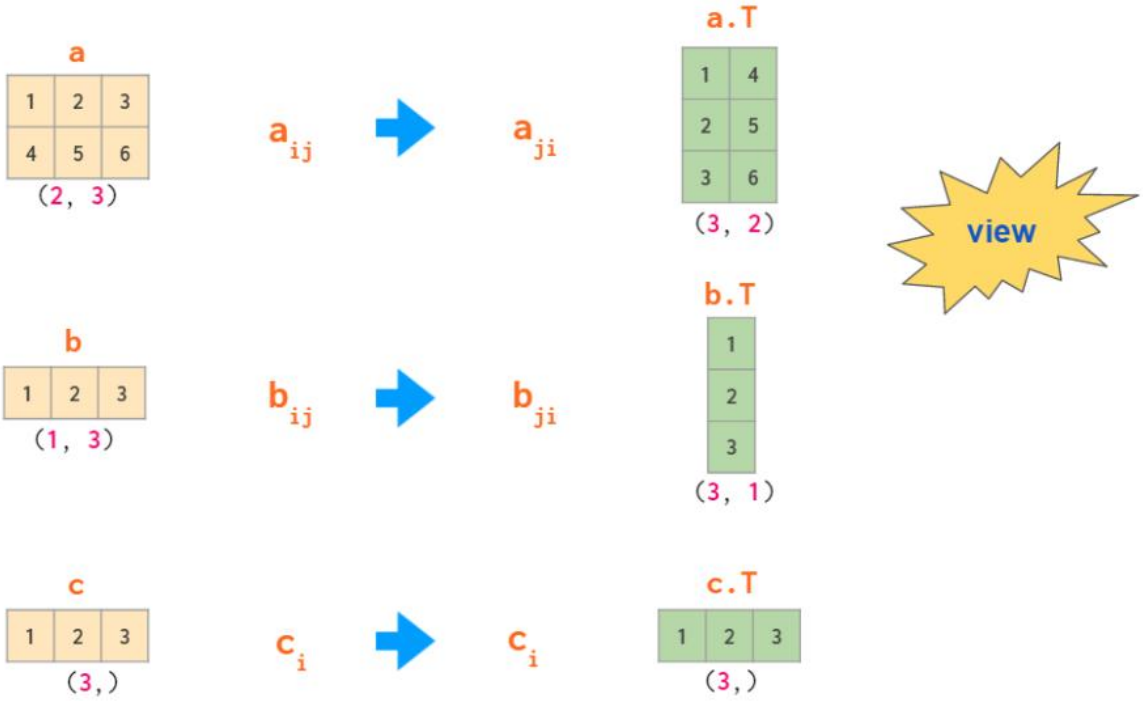


行向量与列向量

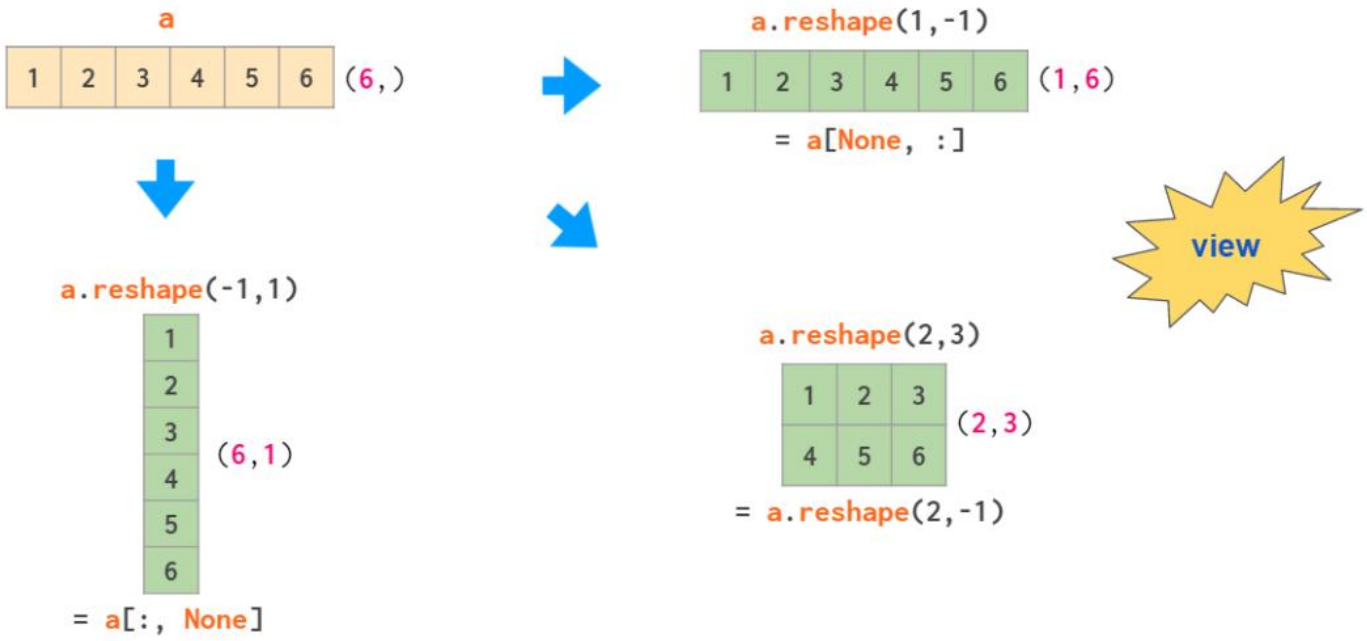
从上面的示例可以看出，在二维数组中，行向量和列向量被不同地对待。

默认情况下，一维数组在二维操作中被视为行向量。因此，将矩阵乘以行向量时，可以使用(n，)或(1，n)，结果将相同。

如果需要列向量，则有转置方法对其进行操作：

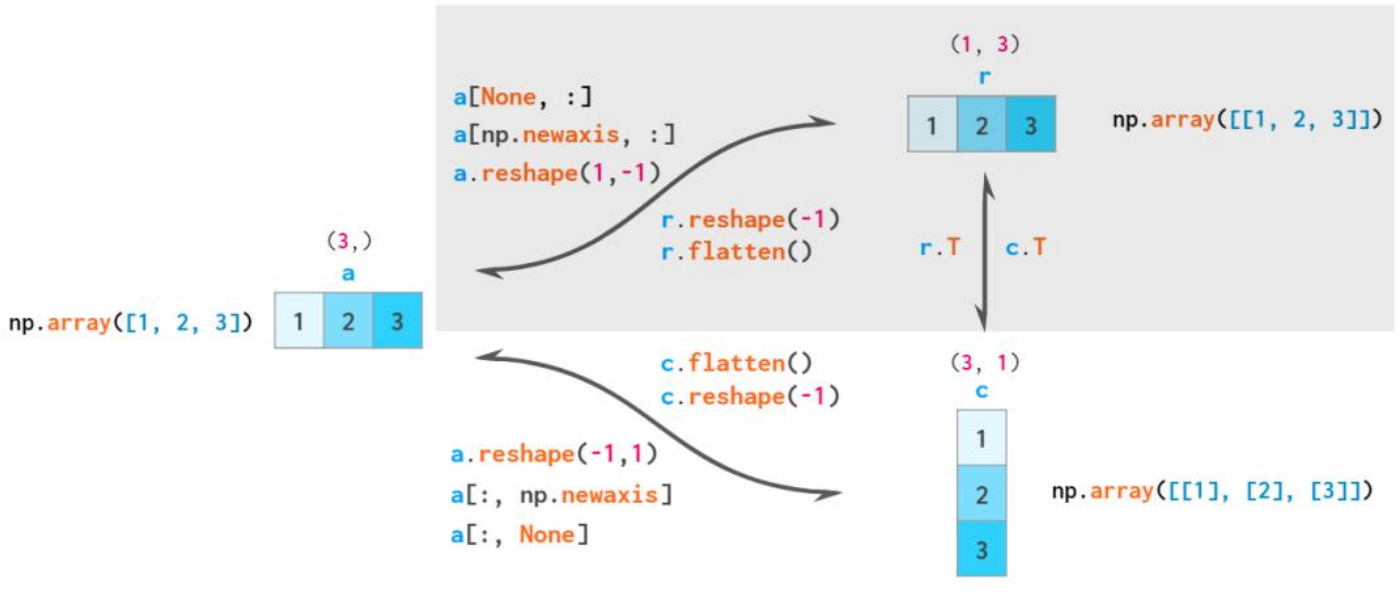


能够从一维数组中生成二位数组列向量的两个操作是使用命令reshape重排和newaxis建立新索引：



这里的-1参数表示reshape自动计算第二个维度上的数组长度，None在方括号中充当np.newaxis的快捷方式，该快捷方式在指定位置添加了一个空axis。

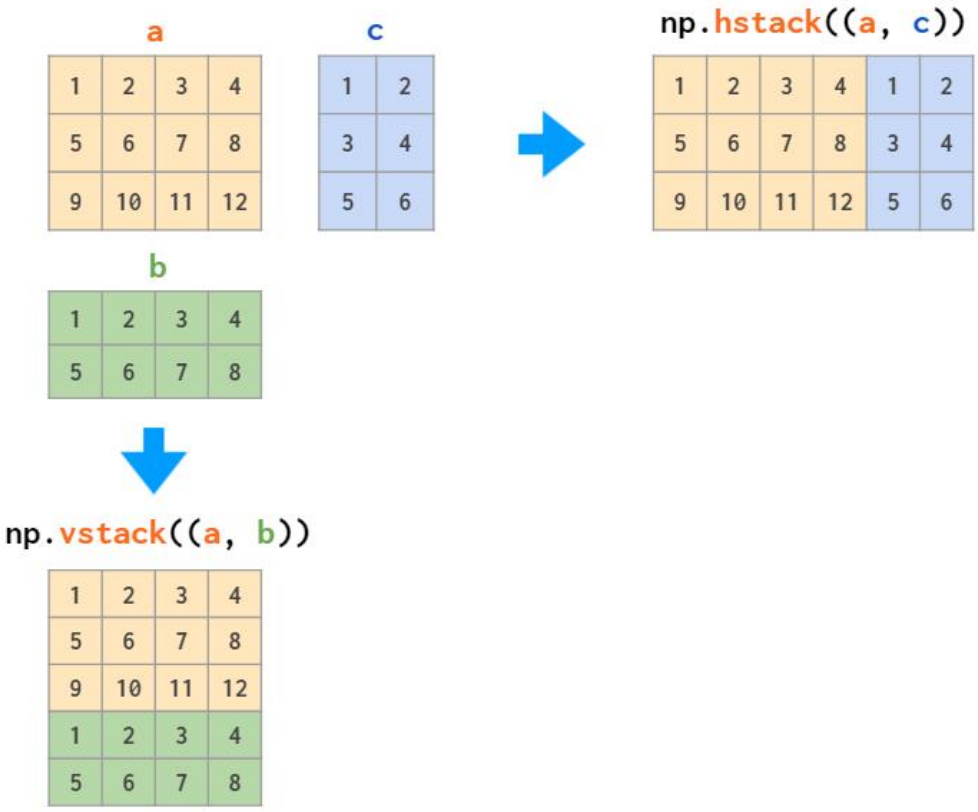
因此，NumPy中总共有三种类型的向量：一维数组，二维行向量和二维列向量。这是两者之间显式转换的示意图：



根据规则，一维数组被隐式解释为二维行向量，因此通常不必在这两个数组之间进行转换，相应区域用灰色标出。

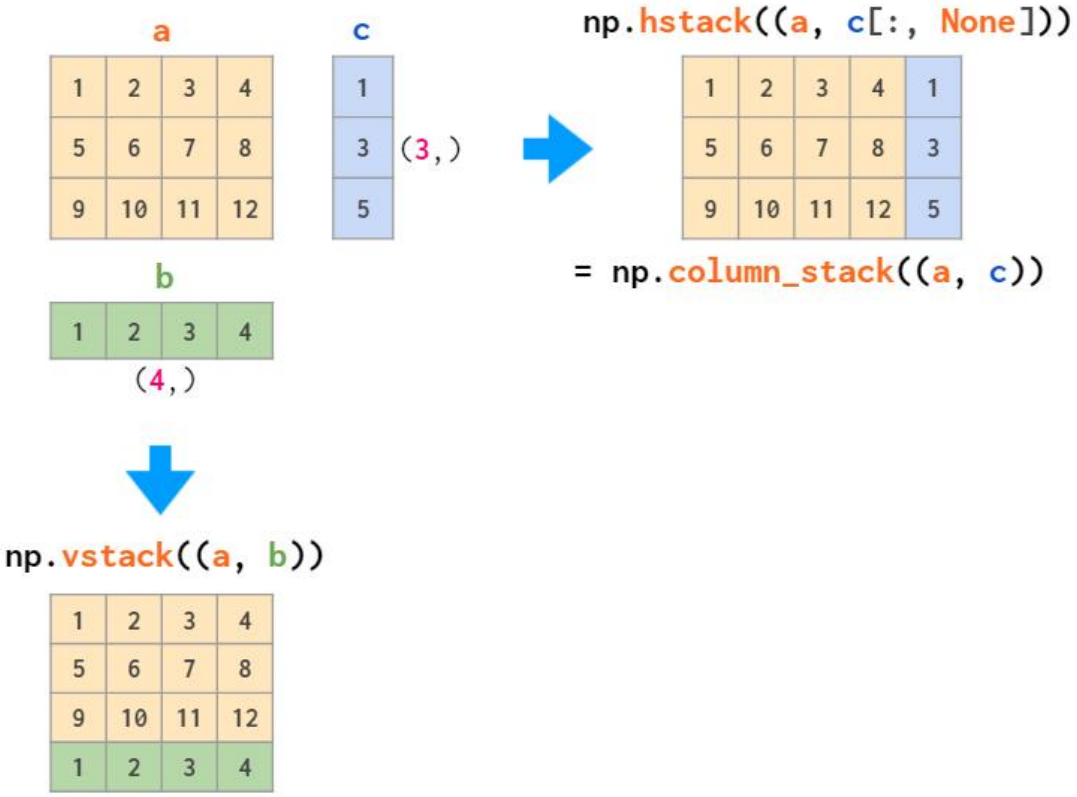
矩阵操作

连接矩阵有两个主要函数：

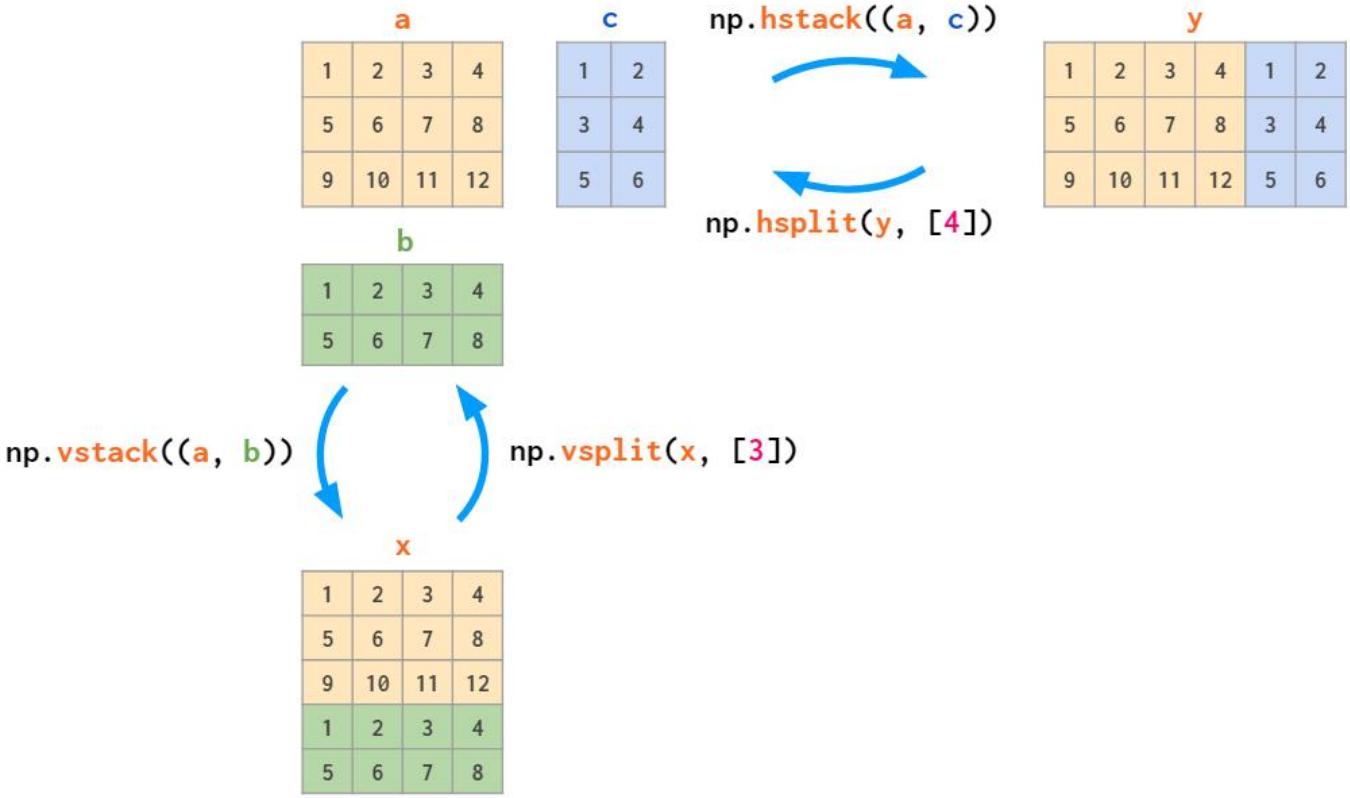


这两个函数只堆叠矩阵或只堆叠向量时，都可以正常工作。但是当涉及一维数组与矩阵之间的混合堆叠时，vstack可以正常工作：hstack会出现尺寸不匹配错误。

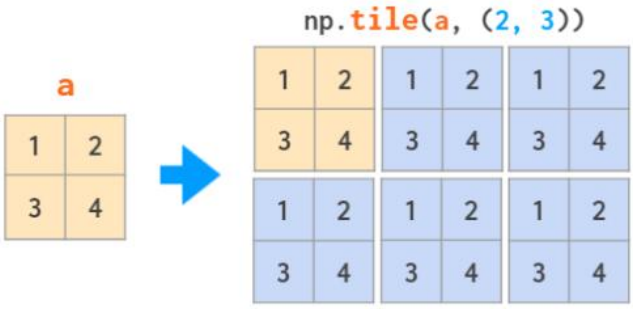
因为如上所述，一维数组被解释为行向量，而不是列向量。解决方法是将其转换为列向量，或者使用column_stack自动执行：

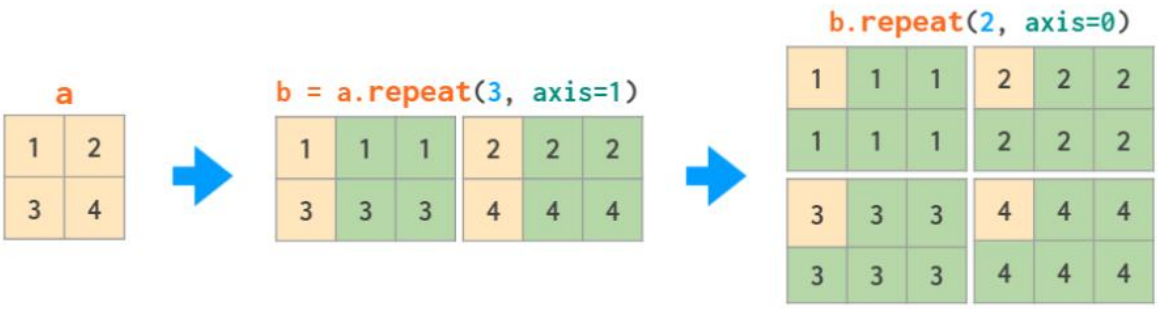

a
c
np.hstack((a, c[:, None]))
(3,)
= np.column_stack((a, c))
b
(4,)
np.vstack((a, b))

堆叠的逆向操作是分裂：

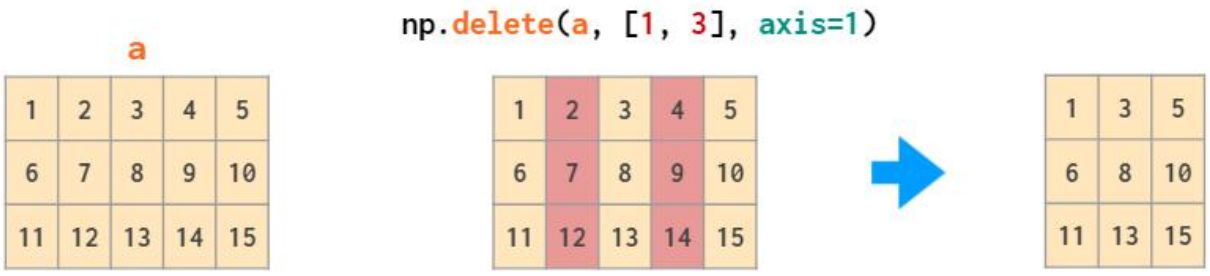

a
c
np.hstack((a, c))
y
np.hsplit(y, [4])
b
np.vstack((a, b))
np.vsplit(x, [3])
x

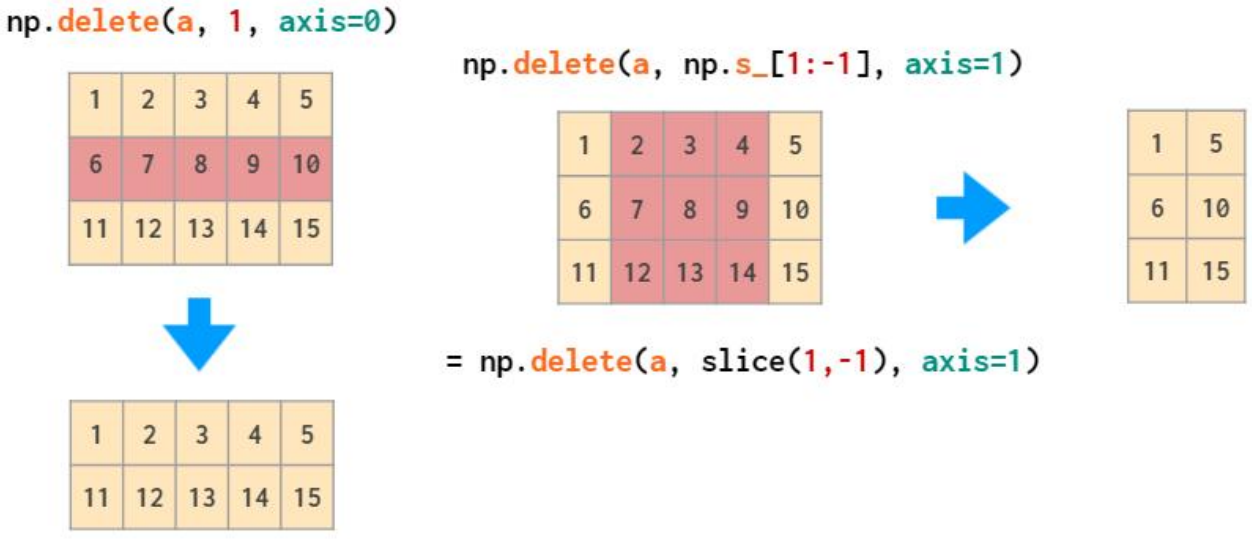
矩阵可以通过两种方式完成复制：tile类似于复制粘贴，repeat类似于分页打印。



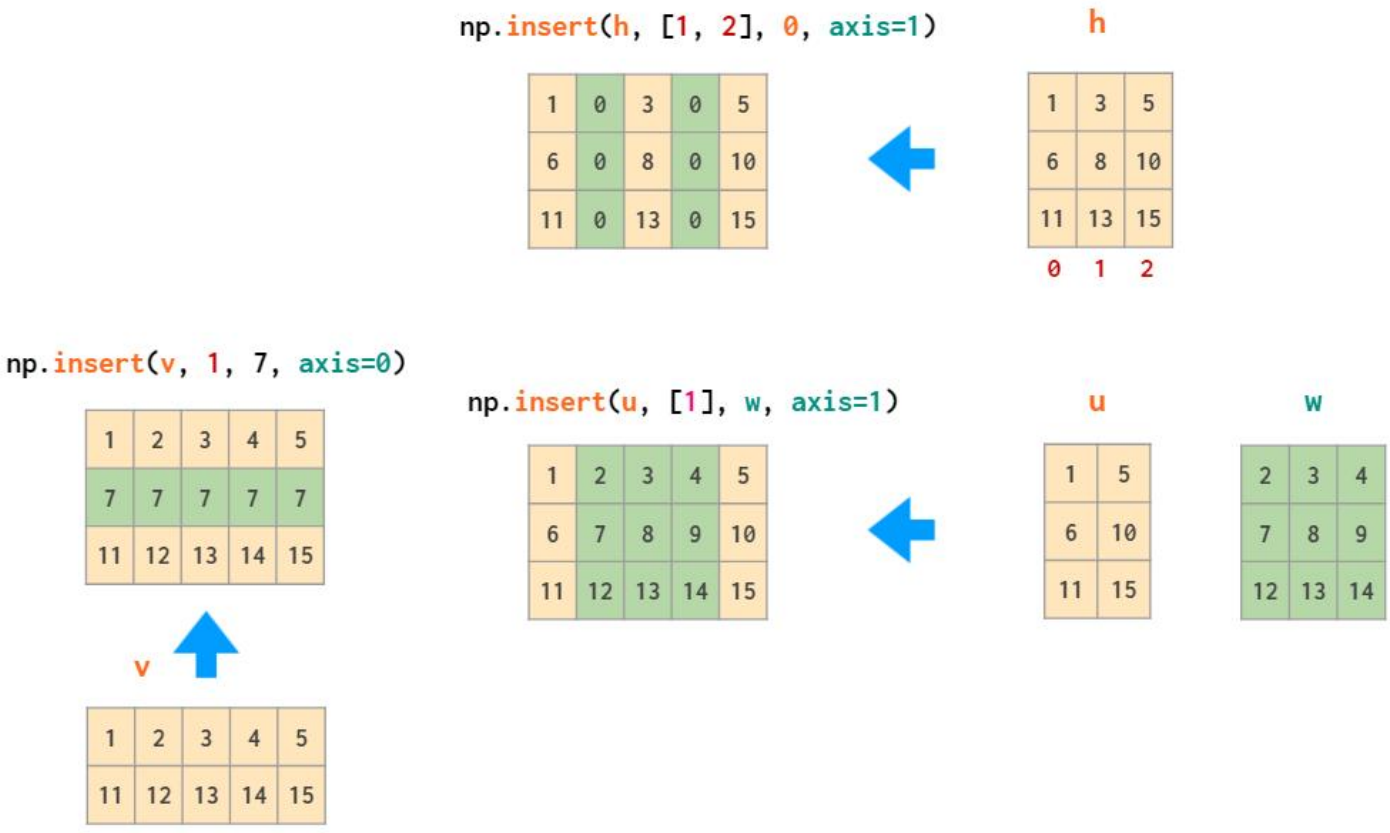


特定的列和行可以用delete进行删除：

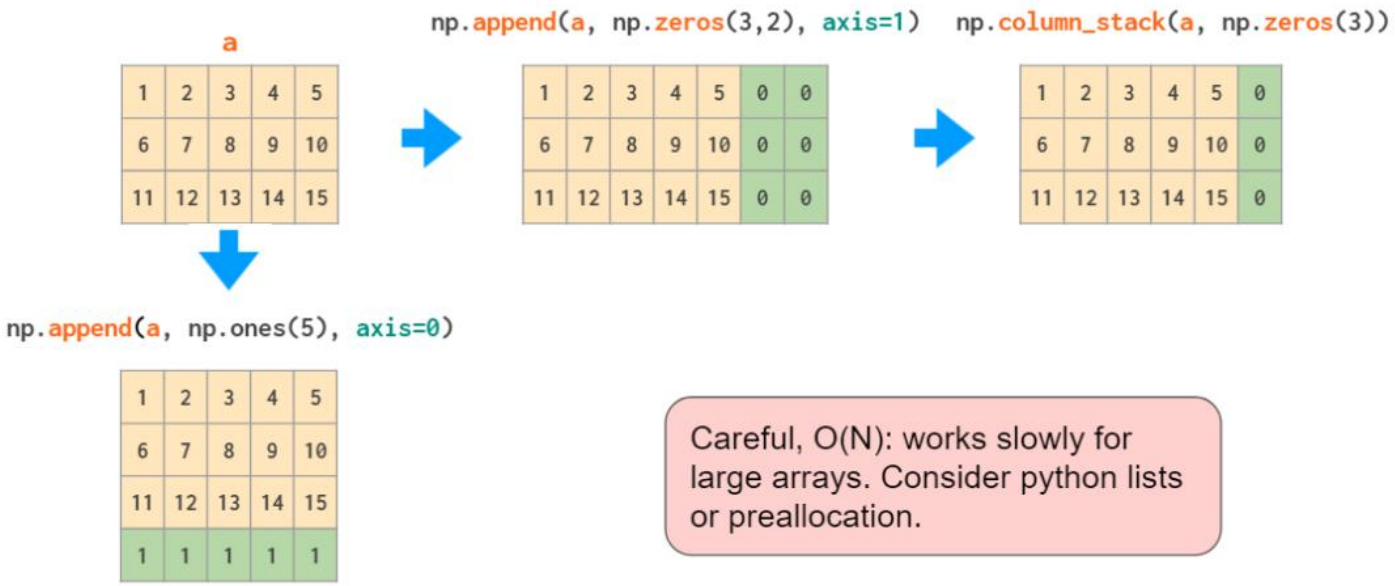




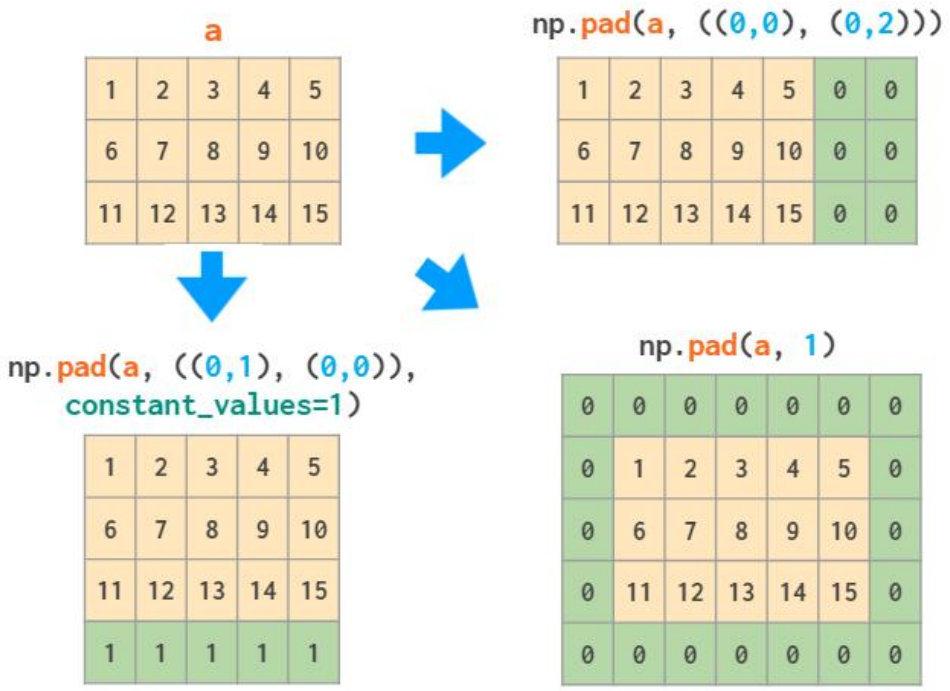
逆运算为插入：



append就像hstack一样，该函数无法自动转置一维数组，因此再次需要对向量进行转置或添加长度，或者使用column_stack代替：



实际上，如果我们需要做的就是向数组的边界添加常量值，那么pad函数就足够了：



Meshgrid

如果我们要创建以下矩阵：

$$A_{ij} = j - i$$

0	1	2
-1	0	1

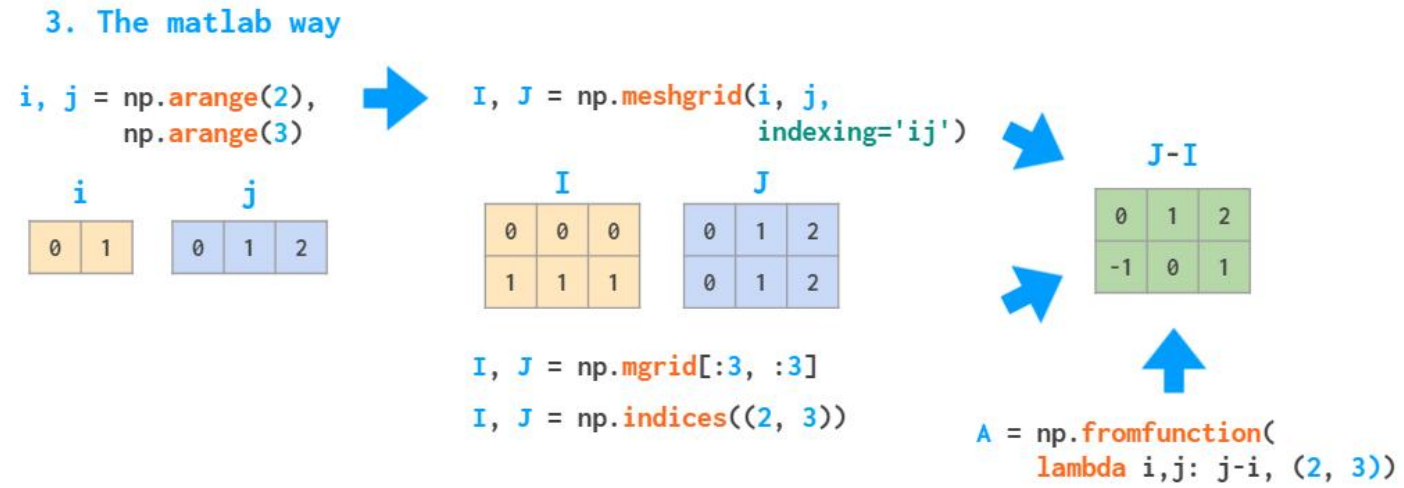
1. The c way

```
a = np.empty((2, 3))
for i in range(2):
    for j in range(3):
        a[i, j] = j - i
```

2. The python way

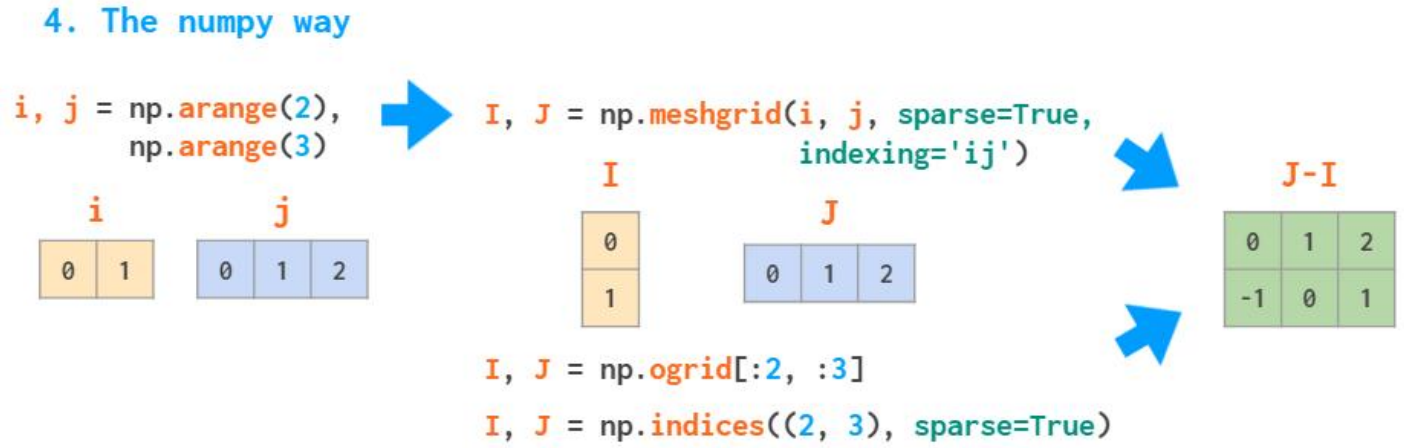
```
c = [[(j-i) for j in range(3)] for i in range(2)]
a = np.array(c)
```

两种方法都很慢，因为它们使用的是Python循环。在MATLAB处理这类问题的方法是创建一个meshgrid：



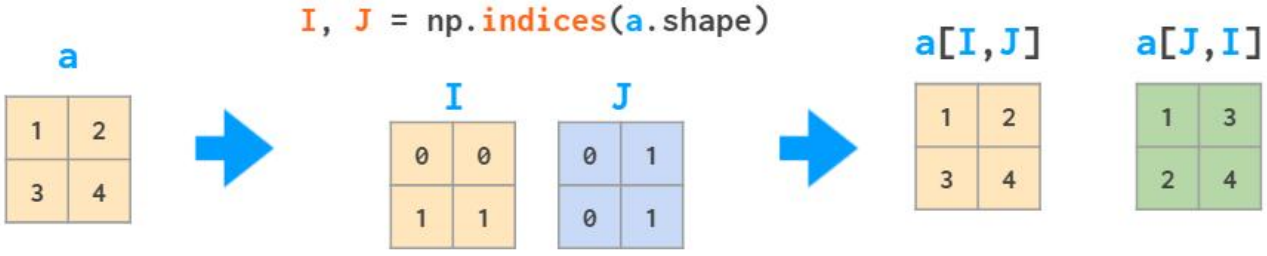
该meshgrid函数接受任意一组索引，mgrid仅是切片，indices只能生成完整的索引范围。fromfunction如上所述，仅使用I和J参数一次调用提供的函数。

但是实际上，在NumPy中有一种更好的方法。无需在整个矩阵上耗费存储空间。仅存储大小正确的矢量就足够了，运算规则将处理其余的内容：



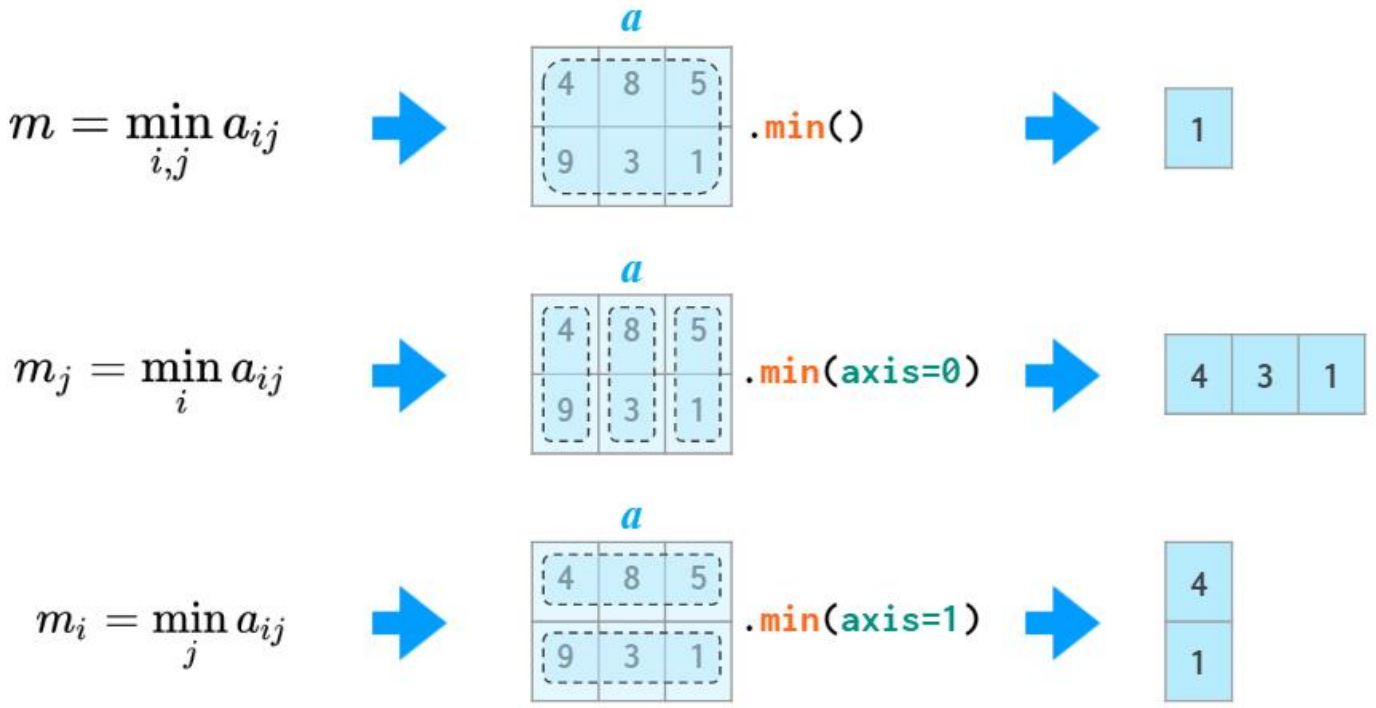
在没有indexing=’ij’参数的情况下，meshgrid将更改参数的顺序：J, I= np.meshgrid(j, i)—这是一种“xy”模式，用于可视化3D图。

除了在二维或三维数组上初始化外，meshgrid还可以用于索引数组：

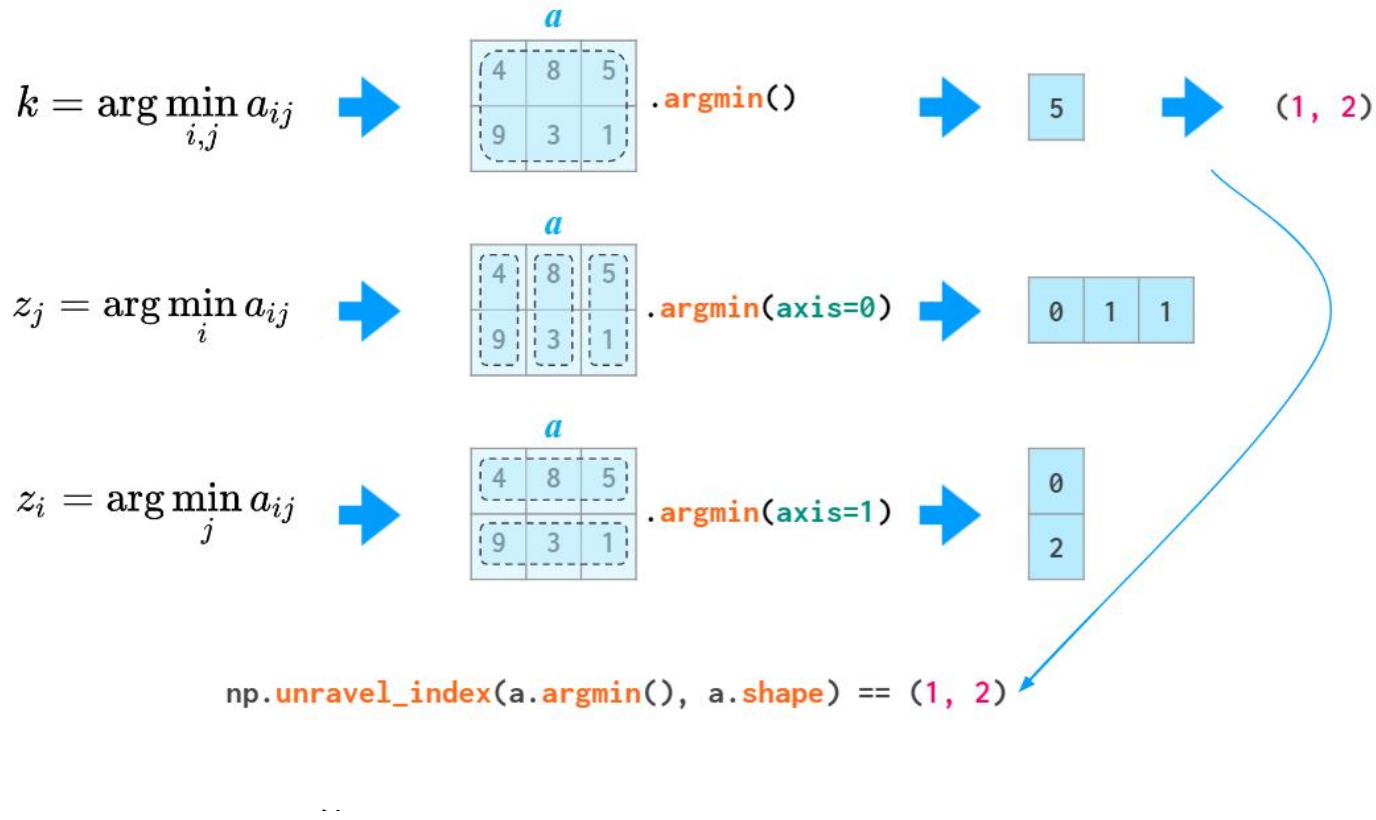


矩阵统计

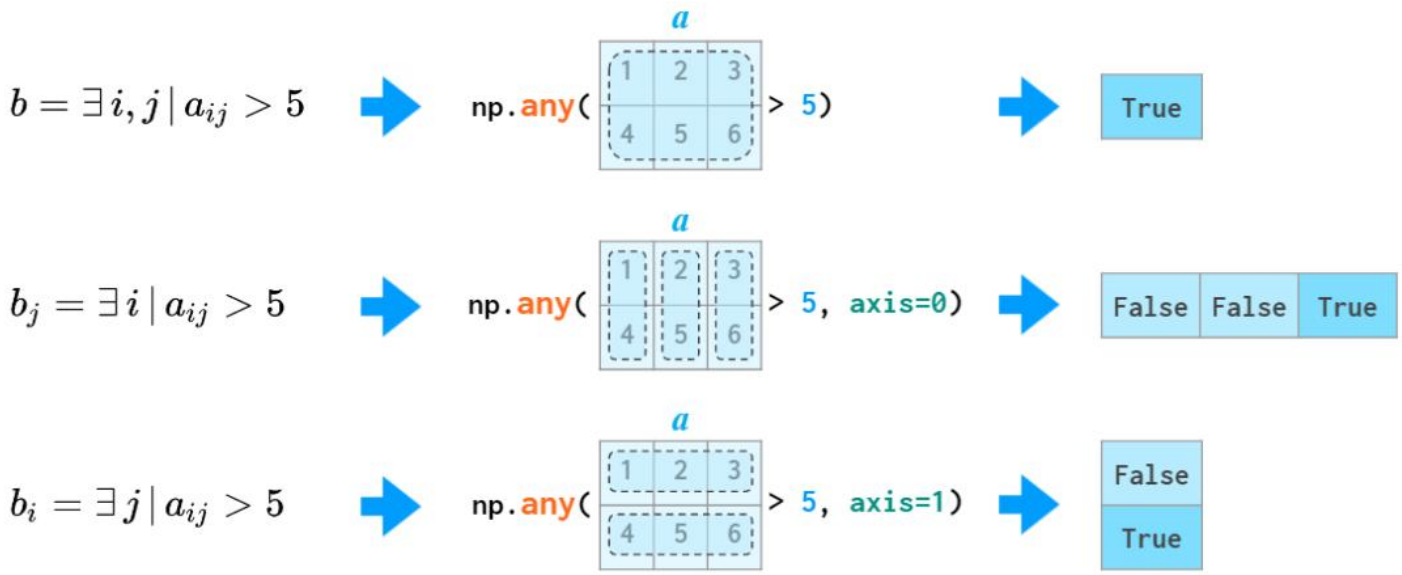
就像之前提到的统计函数一样，二维数组接受到axis参数后，会采取相应的统计运算：



二维及更高维度中，argmin和argmax函数返回最大最小值的索引：



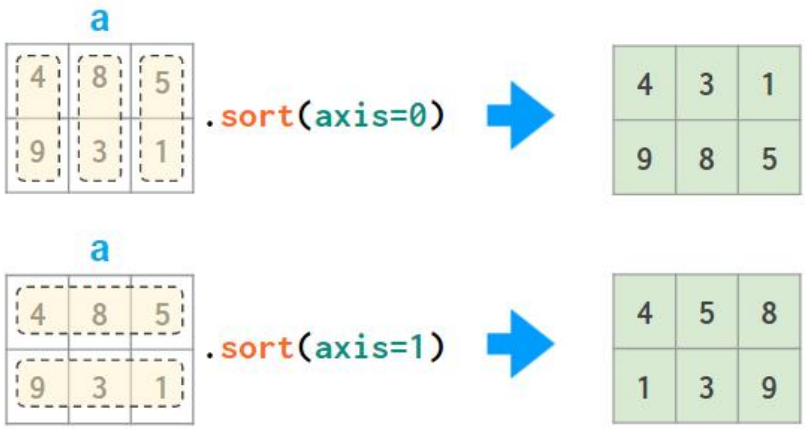
all和any两个函数也能使用axis参数：



矩阵排序

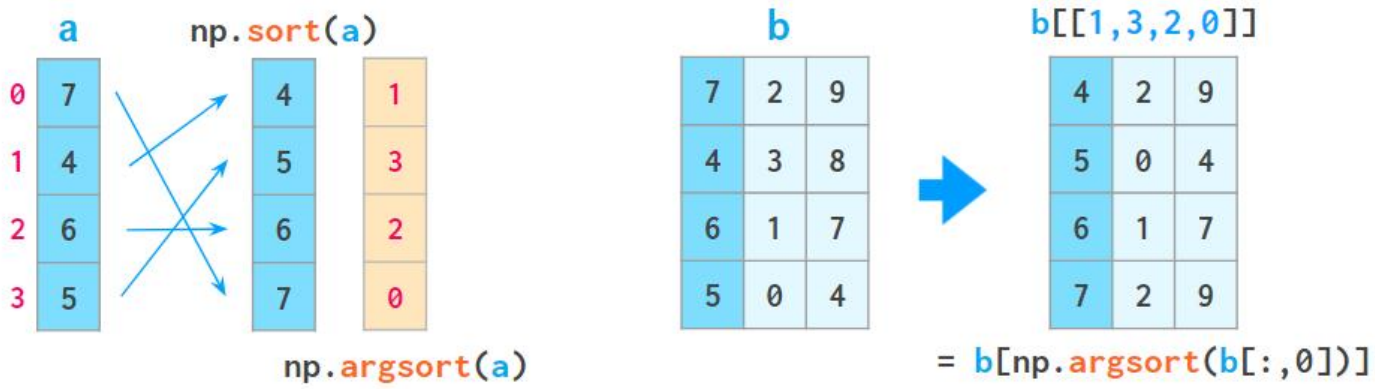
尽管axis参数对上面列出的函数很有用，但对二维排序却没有帮助：

python lists	numpy arrays	
a.sort()	a.sort()	sorts in-place
sorted(a)	np.sort(a)	returns new sorted array
a.sort(key=f)	–	key function
a.sort(reversed=False)	-	ascending/descending
–	a.sort(axis=-1)	which axis to sort along



axis绝不是Python列表key参数的替代。不过NumPy具有多个函数，允许按列进行排序：

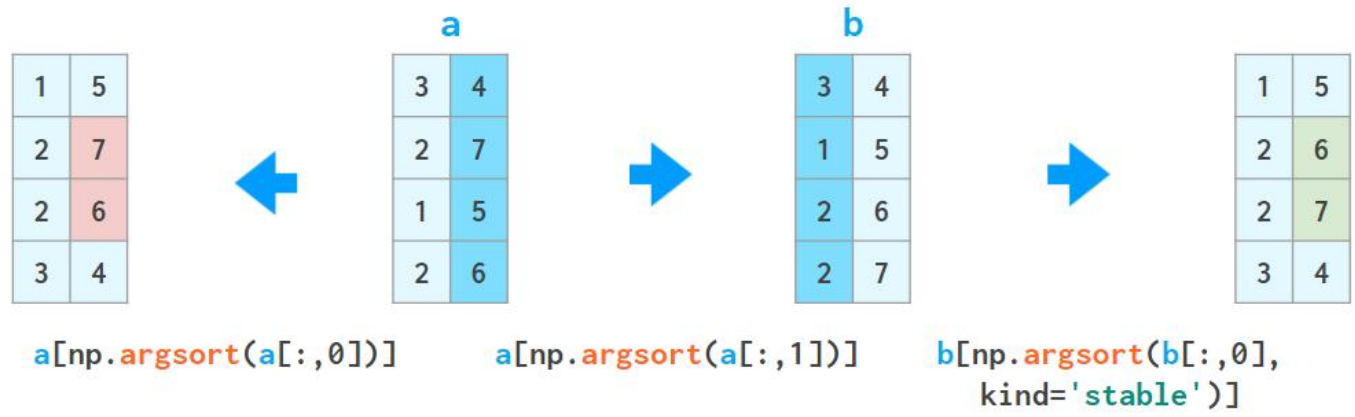
1、按第一列对数组排序：a[a[:,0].argsort()]



argsort排序后，此处返回原始数组的索引数组。

此技巧可以重复，但是必须小心，以免下一个排序混淆前一个排序的结果：

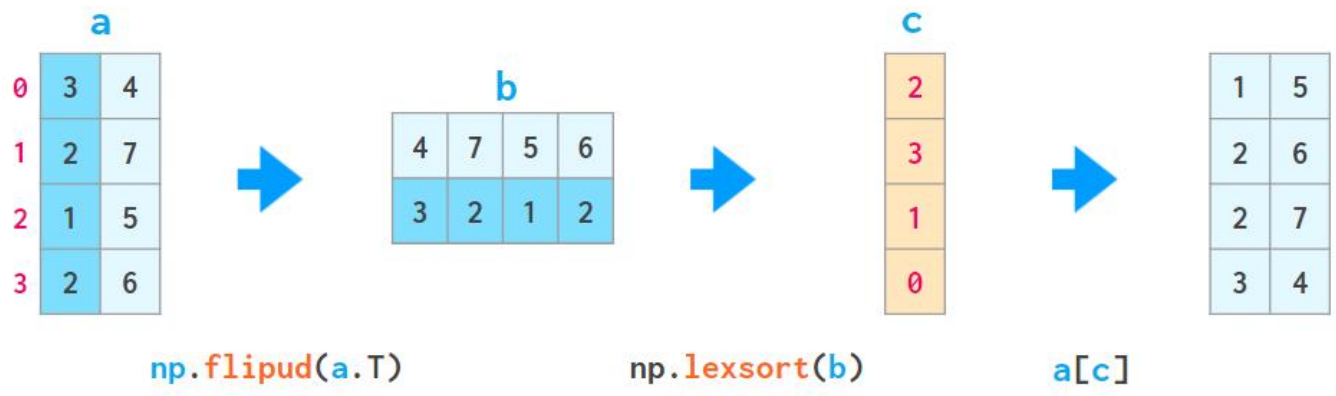
a = a[a[:,2].argsort()]a = a[a[:,1].argsort(kind=’stable’)]a = a[a[:,0].argsort(kind=’stable’)]



2、有一个辅助函数lexsort，该函数按上述方式对所有可用列进行排序，但始终按行执行，例如：

a[np.lexsort(np.flipud(a[2,5].T))]：先通过第2列排序，再通过第5列排序；

a[np.lexsort(np.flipud(a.T))]：按从左到右所有列依次进行排序。



3、还有一个参数order，但是如果从普通（非结构化）数组开始，则既不快速也不容易使用。

4、因为这个特殊的操作方式更具可读性和它可能是一个更好的选择，这样做的pandas不易出错：

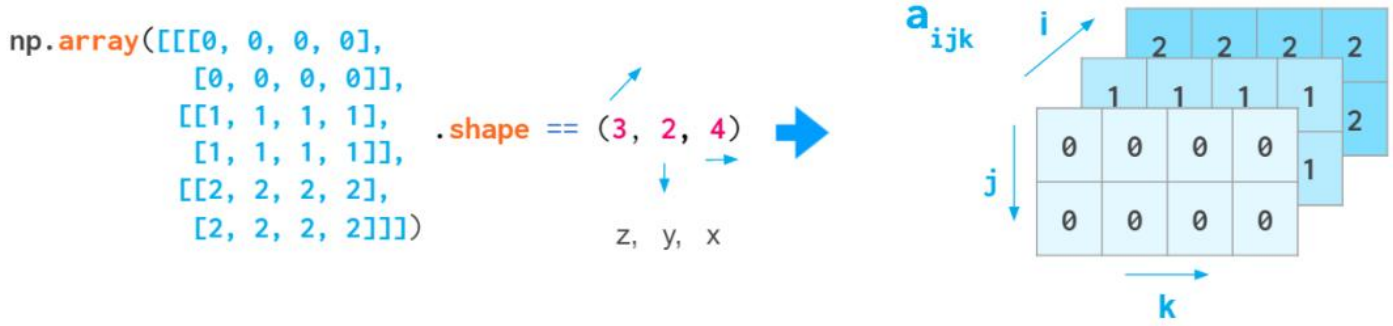
pd.DataFrame(a).sort_values(by=[2,5]).to_numpy()：通过第2列再通过第5列进行排序。

pd.DataFrame(a).sort_values().to_numpy()：通过从左向右所有列进行排序

高维数组运算

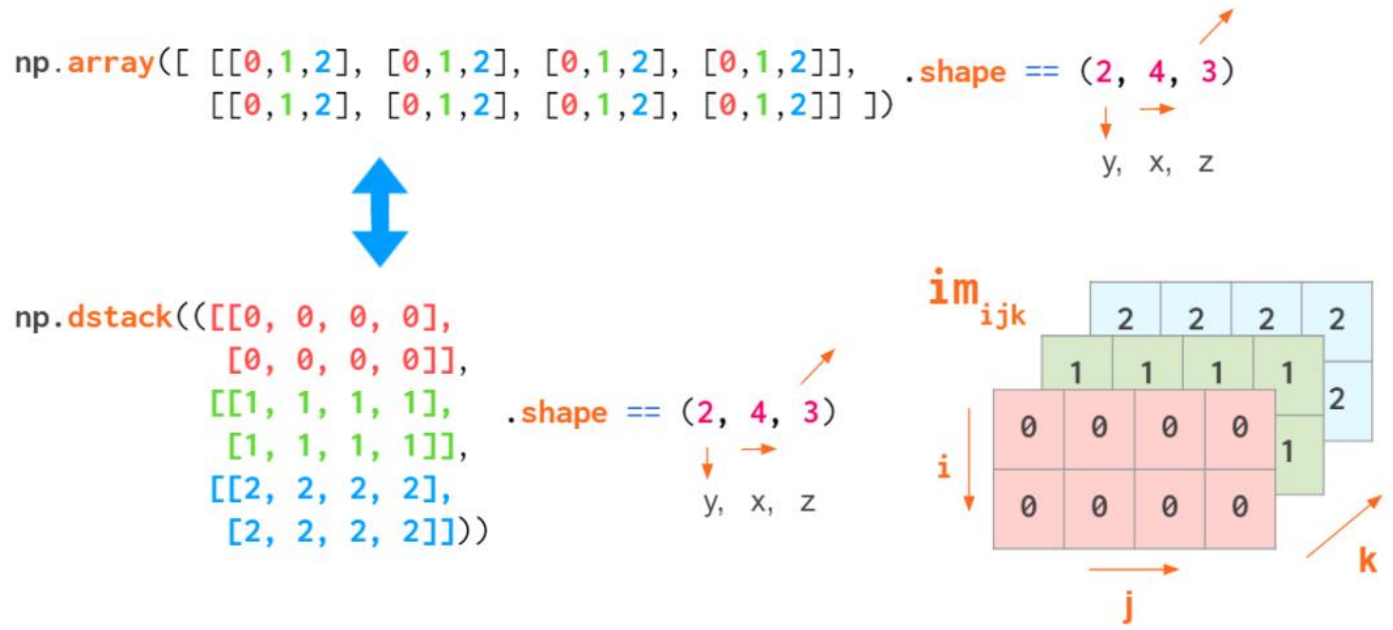
通过重排一维向量或转换嵌套的Python列表来创建3D数组时，索引的含义为（z，y，x）。

第一个索引是平面的编号，然后才是在该平面上的移动：



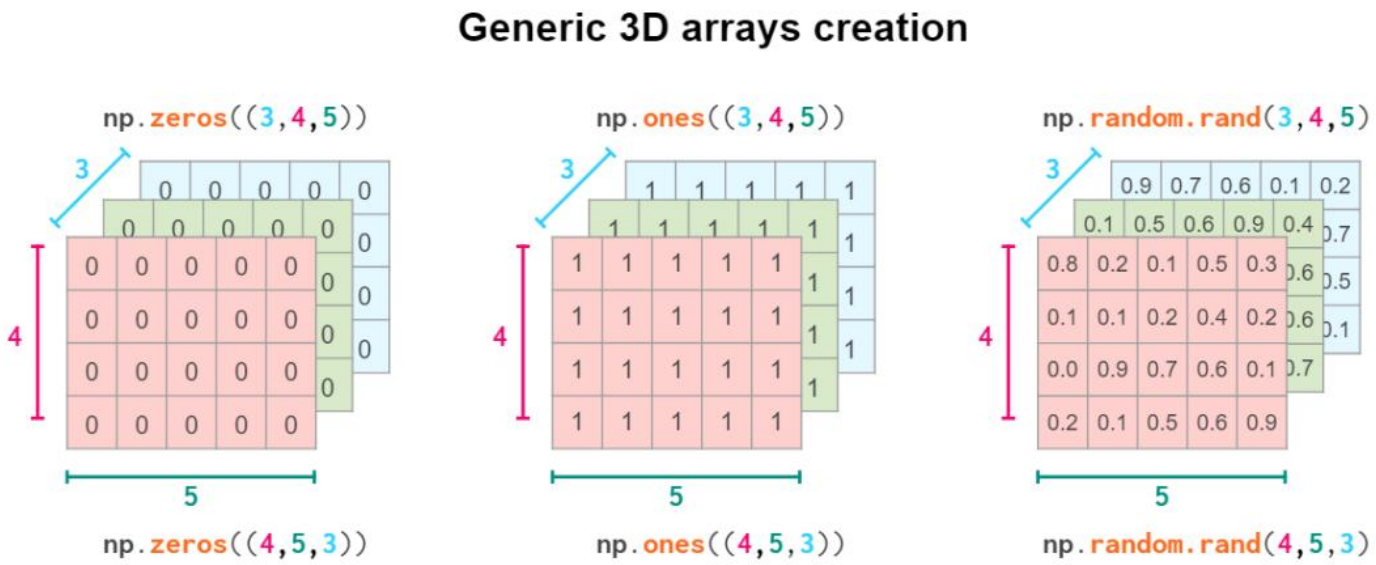
这种索引顺序很方便，例如用于保留一堆灰度图像：这a[i]是引用第i个图像的快捷方式。

但是此索引顺序不是通用的。处理RGB图像时，通常使用（y，x，z）顺序：前两个是像素坐标，最后一个是颜色坐标（Matplotlib中是RGB，OpenCV中是BGR）：

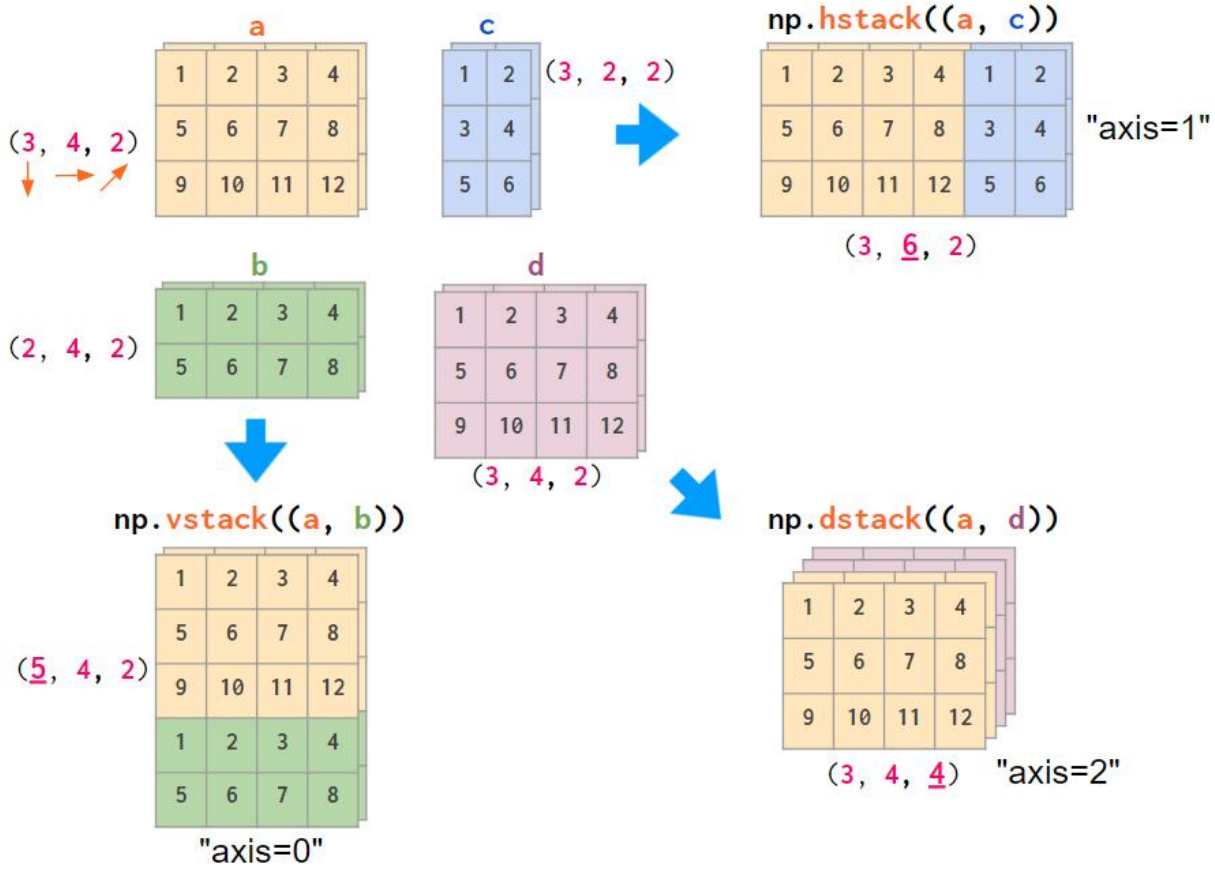


这样，可以方便地引用特定像素：a[i,j]给出像素的RGB元组(i,j)。

因此，创建特定几何形状的实际命令取决于正在处理的域的约定：

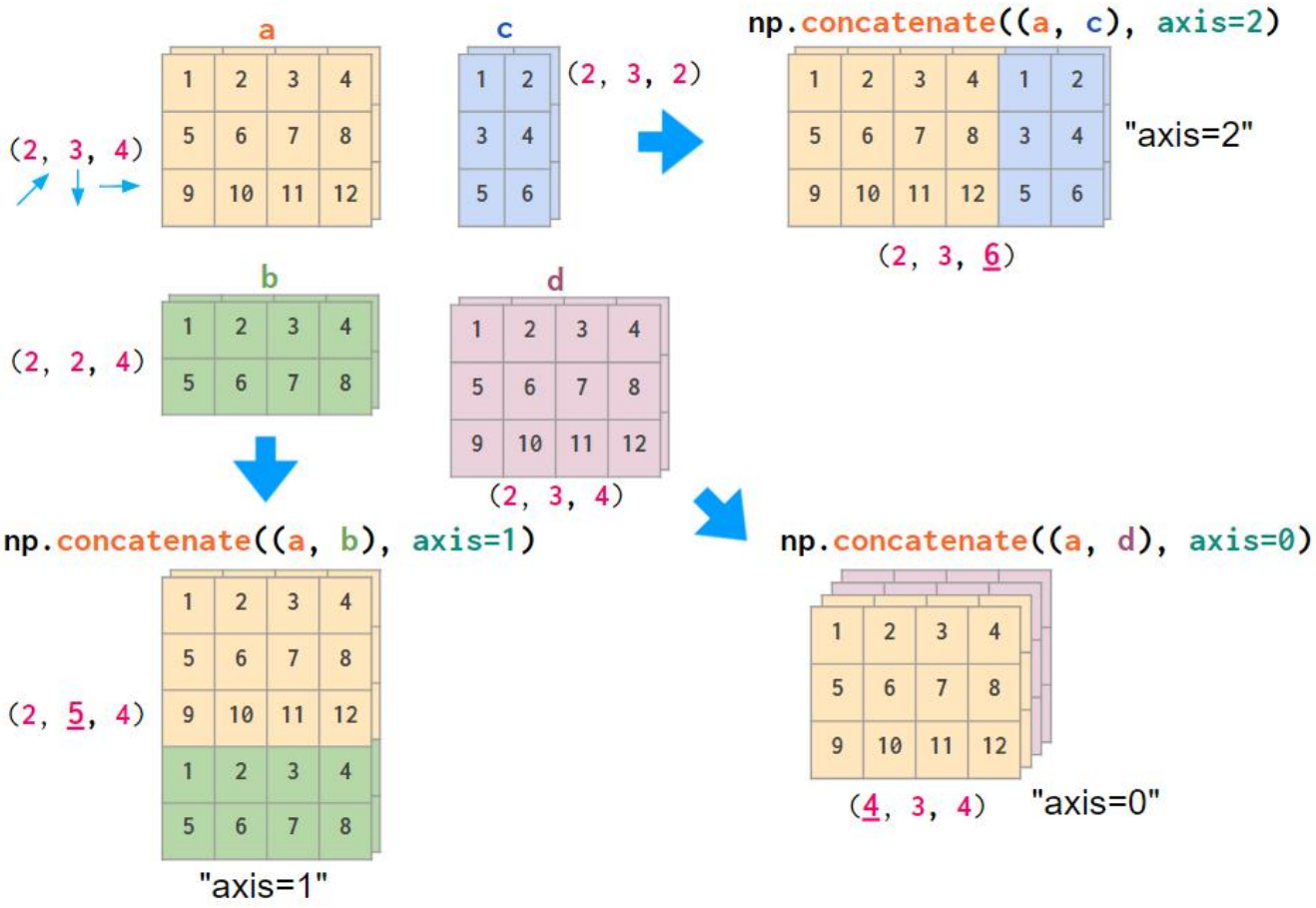


显然，NumPy函数像hstack、vstack或dstack不知道这些约定。其中硬编码的索引顺序是（y，x，z），RGB图像顺序是：

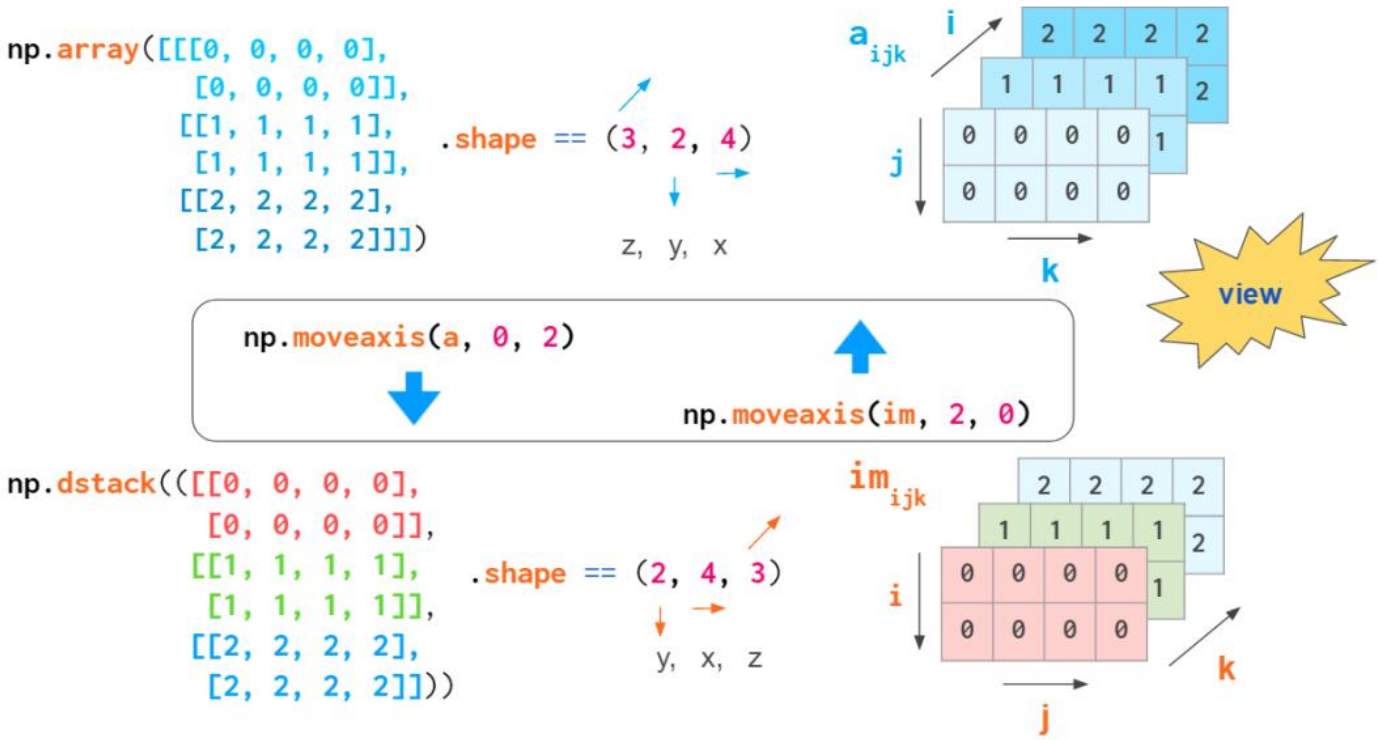


△RGB图像数组（为简便起见，上图仅2种颜色）

如果数据的布局不同，则使用concatenate命令堆叠图像，并在axis参数中提供显式索引数会更方便：



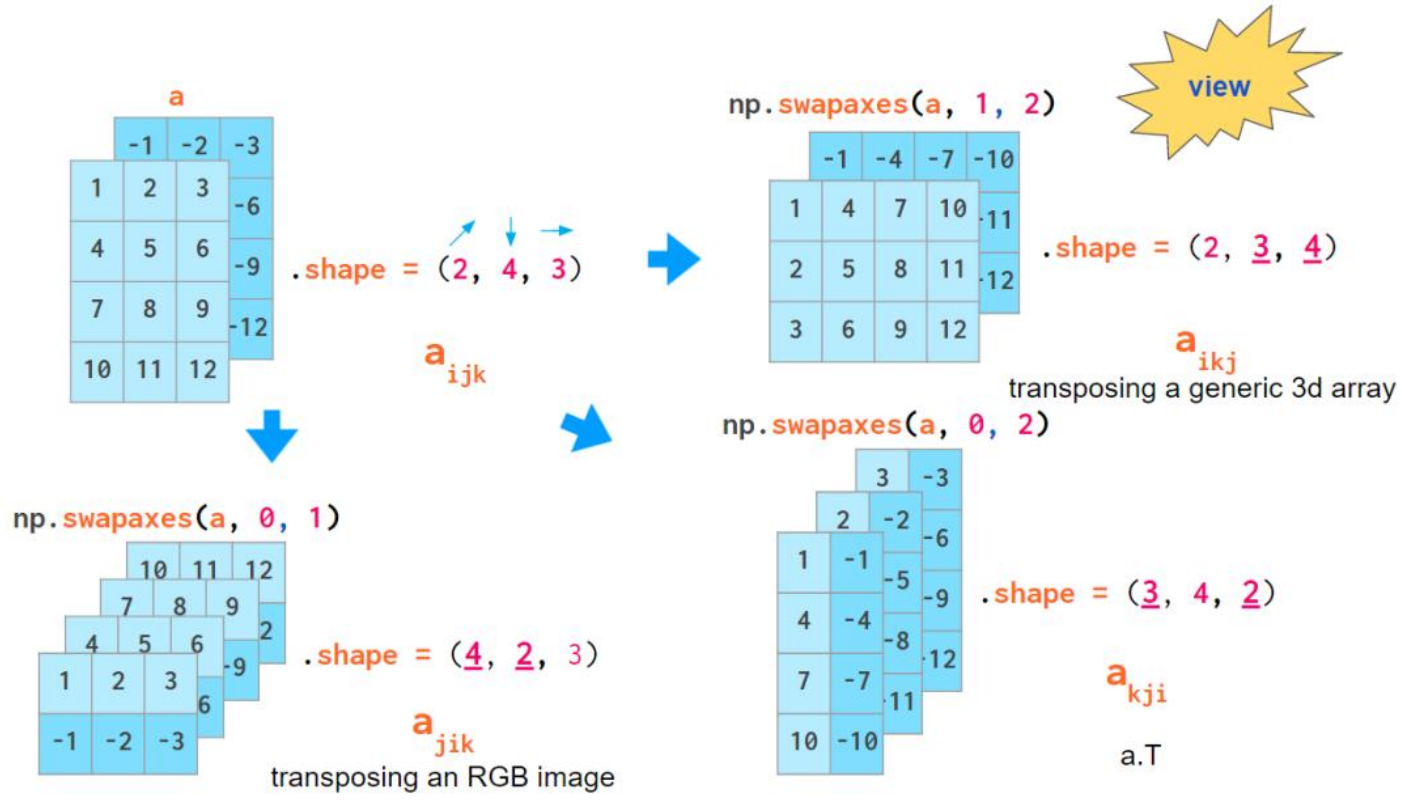
如果不方便使用axis，可以将数组转换硬编码为hstack的形式：



这种转换没有实际的复制发生。它只是混合索引的顺序。

混合索引顺序的另一个操作是数组转置。检查它可能会让我们对三维数组更加熟悉。

根据我们决定的axis顺序，转置数组所有平面的实际命令将有所不同：对于通用数组，它交换索引1和2，对于RGB图像，它交换0和1：



有趣的是，（和唯一的操作模式）默认的axes参数颠倒了索引顺序，这与上述两个索引顺序约定都不相符。

最后，还有一个函数，可以在处理多维数组时节省很多Python循环，并使代码更简洁，这就是爱因斯坦求和函数einsum：

Matrix multiplication

$$c_{ik} = \sum_j a_{ij} b_{jk}$$

```
c = np.einsum('ij,jk->ik', a, b)
```

Tensor multiplication

$$c_{ijlm} = \sum_k a_{ijk} b_{klm}$$

```
c = np.einsum('ijk,klm->ijlm', a, b)
```

它将沿重复索引的数组求和。

最后，若要掌握NumPy，可以前去GitHub上的项目——100道NumPy练习题，验证自己的学习成果。

原文链接：

https://medium.com/better-programming/numpy-illustrated-the-visual-guide-to-numpy-3b1d4976de1d

100道NumPy练习题：

https://github.com/rougier/numpy-100

— 完 —

原标题：《看图学NumPy：掌握n维数组基础知识点，看这一篇就够了》