NumPy & SciPy 入門

Contents

NumPy & Scipy の機能紹介
　→ ndarrayクラスの操作を中心に説明

NumPy & SciPy を使ったプログラミング
　→ 線形回帰、主成分分析, K-Means
　→ Pythonの特徴であるOOPも取り入れる

ndarrayのviewと参照渡し

Contents

NumPy & Scipy の機能紹介
　→ ndarrayクラスの操作を中心に説明

NumPy & SciPy を使ったプログラミング
　→ 線形回帰、主成分分析, K-Means
　→ Pythonの特徴であるOOPも取り入れる

ndarrayのviewと参照渡し

What is NumPy/SciPy?

Pythonで数値計算

数値計算 ≒ 繰り返し作業、ループ

Pyhton　：ループが遅い、その他諸々は書きやすい。
C,Fortran：ループが速い、冗長な表現が多い。

⇩

ループのある作業をC,Fortranで書き、
それをpythonから呼べたら便利!

What is NumPy/SciPy?

NumPy

- Cで実装されたndarray class
- Universal Function
- 乱数の生成
- f2pyによるFortranとの連携

SciPy

- NumPyを元に様々な数値計算の関数の集合
- BLAS/LAPACKを使った行列計算
- FFT,クラスタリング、関数最適化 などなど

What is NumPy & SciPy?

numpy.ndarray class

数値計算用のN次元配列

Homogeneous N-dimensional Array
各要素の型がすべて同じ → CやFortranの配列

強力なインデクシング表現
A[0:10, 3] etc

Universal functionによる直感的な数式の表現
y[:] = 3.0 * np.sin(x[:]) + x[:]**2 + e[0,:] etc

ndarray class

ndarrayの生成

- ✔np.array : listなどをndarrayに変換
- ✔np.empty : 任意のサイズを確保,Cのmalloc相当
- ✔np.zeros : 0で初期化,Cのcalloc相当
- ✔np.ones : 1で初期化
- ✔np.identity : 単位行列 etc

ndarray class

ndarrayの属性

✔dtype : 各要素の型, float64 etc

✔ndim : 配列の次元

✔shape : 各次元の要素数のtuple

✔size : 1次元にした時の長さ

✔data : 実際のデータがbuffer objectとして保持されている。

ndarray class

要素の参照、代入

✔個々の参照 : x[2], x[-1], A[1, 2], B[3, 2, 5]

✔スライスによる一括参照 : x[from:to:step]
e.g.　x[2:6], x[::-1], A[1, :], A[::2, :6

✔1つの要素へ代入 : x[4] = 10.0

✔スライスを使った代入 : x[1:5] = 3.0,　A[0, 1:7] = x[0:6]

ndarray class

Universal Functions

配列のすべての要素に対して同じ操作を施す。(*elementwise operation*)

✔b[:] = 2.0 * a[:] + 1.0

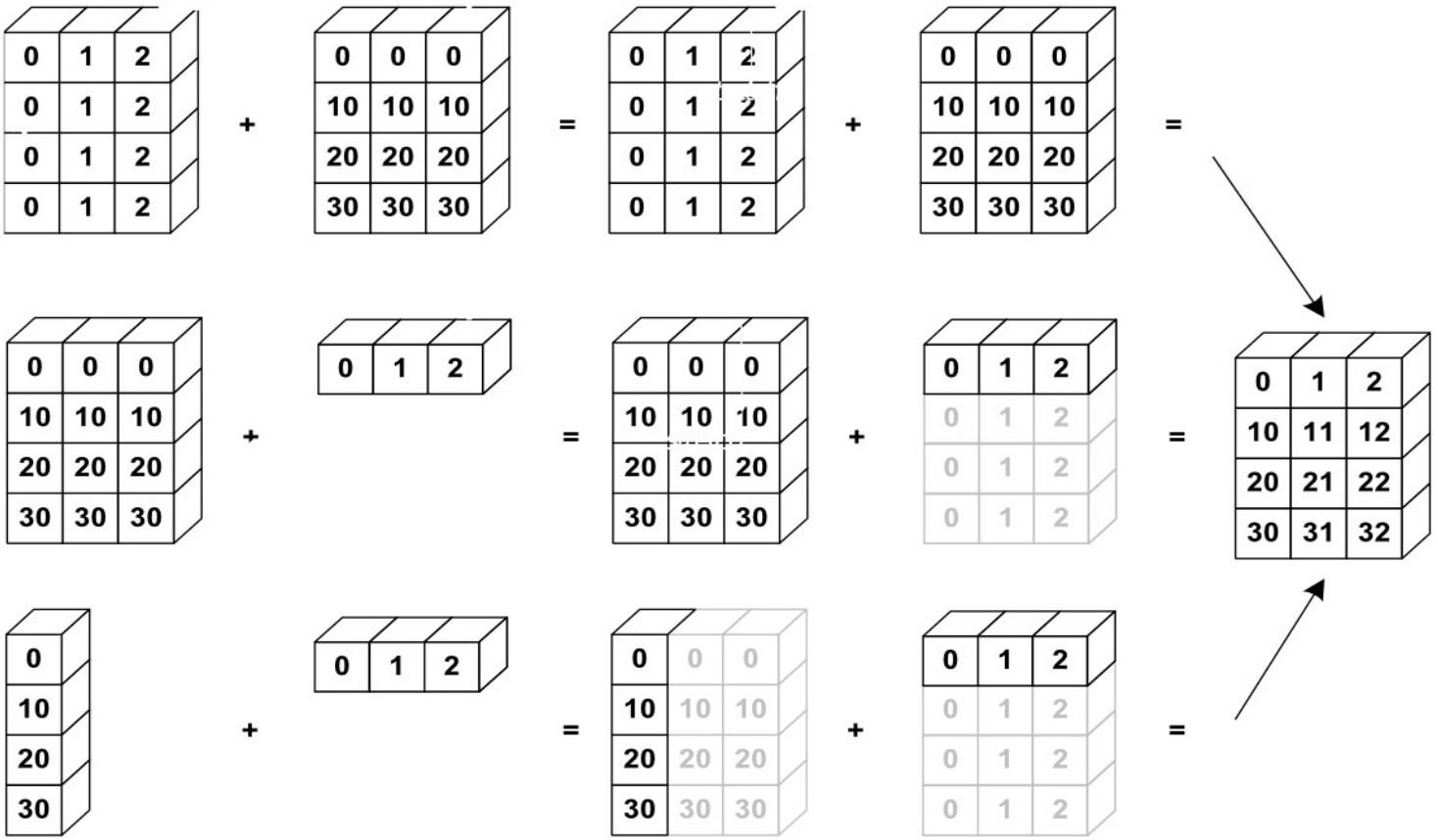
✔B[:,:] = np.exp(A[:,:])

✔C[:,1:10] = B[:,3:12] + np.sin(B[:,:9])

✔D = C[:,1:10] * C[:,1:10] ← 行列積ではないので注意!

ndarray class

Broadcast : 配列形状の自動調整



EuroScipy 2010, Python Scientific Notes より引用

ndarray class

Broadcastをうまく使うためのコツ

np.newaxisを使って配列の次元を揃える

✔A[10,3] に x[3] を足す → A[:,:] + x[np.newaxis,:]

```
for i in xrange(3):
    A[:,i] += x[i]
```

相当の計算になる。(もちろんこれより速い。)

✔B[100,4,10] に y[4] を掛ける
→ B[:,:,:] * y[np.newaxis,:,np.newaxis]

```
for i in xrange(4):
    B[:,i,:] *= y[i]
```

ndarray class

Fancy Indexing

✔ixs = [0,2,2,4], x[ixs] → array(x[0],x[2],x[2],x[4])

✔np.where(x[:]>1) → 1より大きいxのインデックスの配列

✔np.where(x[:]>0,x,10) → xの0以上の要素をすべて10にする

✔mask = A[:,:] > 0
→ maskはbool型でAと同じshapeをもつndarray
→ A[mask]は0以上のAの要素が入った1D-ndarray

✔mask = np.sum(A[:,:]**2,1) < 0, inner_sphere = A[mask,:]
→ 球の内側のデータ

ndarray class

io関係

- ✔np.savetxt : ファイルにndarrayを書き込む
  np.savetxt(“data.log”,data)
- ✔np.loadtx : ファイルからndarrayに読み込む
  data = np.loadtxt(“data.log”)
- ✔PythonのbuiltinのPickleも使える
  大きいデータをバイナリで保存する際に便利

NumPyと 乱数

numpy.random

- ✔Mersenne Twisterによる乱数生成
- ✔rand : [0,1)上の一様乱数
  r = rand(100,3) → 一度に生成して配列に格納
- ✔randn : 標準正規乱数、randと同様に配列に格納もできる
- ✔dirichlet, normal, t, beta, poissson 他多数
  shapeを引数にとって配列に格納もできる。
  rand,randnとは書式が多少違うので注意!

NumPyの統計関数

✔np.max, np.min : 最大最小

✔np.argmax, np.argmin : 最大最小の位置

✔np.mean, np.var, np.std : 平均、分散、標準偏差

✔np.sort, np.argsort : 配列のソートとそのインデックス

　これらは任意次元のndarrayとaxisを引数にとって任意の軸に対して実行可

✔np.cov : 共分散,データは2D-ndarrayのみ
shapeは(ndim,nobs)の順なので注意!

NumPy/SciPyで行列計算

np.dot (BLASのラッパー)

np.dot(a, b)[i,j,k,m] = sum(a[i,j,:] * b[k,:,m])

例 x,y 1D-array, A,B 2D-array

- dot(x,y) → スカラ, BLASの***dot相当
- dot(A,x) → ベクター, BLASの***mv相当
- dot(A,B) → 行列, BLASの***mm相当(dgemmとか)

その他、outer, tensordotとかもある

NumPy/SciPyで行列計算

scipy.linalg (LAPACKのラッパー)

- det : 行列式
- inv, pinv : 逆行列、擬似逆行列
- solve, lstsq : 連立方程式の解、最小自乗解
  Ax = b → x = solve(A,b)
- eig, eigh, svd : 固有値分解、特異値分解 (***ev,***svd)
  eig_val, eig_vec = eigh(A)
- 行列の因子分解
  lu, qr, cholesky etc

NumPy/SciPyで行列計算

scipy.linalg (LAPACKのラッパー)

- det : 行列式
- inv, pinv : 逆行列、擬似逆行列
- solve, lstsq : 連立方程式の解、最小自乗解
  Ax = b → x = solve(A,b)
- eig, eigh, svd : 固有値分解、特異値分解 (***ev,***svd)
  eig_val, eig_vec = eigh(A)
- 行列の因子分解
  lu, qr, cholesky etc

特殊関数

scipy.special

- ほとんどがUniversal Functionなのでndarrayを食わせると一気に計算してくれる。
- gamma関数群 (分布関係でよく使う)
  gamma, gammaln, digamma
- ベッセル関数、楕円関数など諸々 (あまりつかったことない...)

その他諸々

- scipy.spatial : KD-treeとか距離計算とか
- scipy.sparse : 疎行列とその線形代数
- scipy.cluster : 階層/非階層クラスタリング
- scipy.fftpack : Fourier変換
- scipy.interpolate : スプライン補完とか
- scipy.optimize : 関数最適化、非線形フィッティングとか
- scipy.constants : 科学定数集

Matplotlib

とにもかくにも `import matplotlib.pyplot as plt`

- plot(x, y ,[symb, label, linewidth]) : xとyをsymbでプロット
- legend : labelを表示
- xlabel, xlim, xtics : 軸の表示設定、yも同様
- show : 画面にプロットの結果を表示
- savefig : 画像ファイルにプロットを保存 (png, eps, svg, pdf)

便利なPythonのパッ ケージ

- scikits.learn : NumPy&SciPyを使った機械学習のライブラリ
- PyMC : MCMCによるベイズ推定
- Networkx : グラフアルゴリズム
- OpenOpt : 関数最適化 (Pythonインターフェイスあり)
- OpenCV : 画像処理 (Pythonインターフェイスあり)
- NLTK : 自然言語処理
- pyMPI, PyCUDA : MPI, CUDAへのインターフェース
- Biopython, PyMol, MODELLER : バイオインフォマティクス
- pygresql, mysqldb, pysqlite2 : SQLへのインターフェイス
- Universal Feed Parser : RSS, ATOMのパーサー

PyPI <http://pypi.python.org/pypi> で欲しいパッケージを検索できる。

Contents

NumPy & Scipy の機能紹介
→ ndarrayクラスの操作を中心に説明

NumPy & SciPy を使ったプログラミング
→ 線形回帰、主成分分析, K-Means
→ Pythonの特徴であるOOPも取り入れる

ndarrayのviewと参照渡し

NumPy & SciPy を用いたプログラミング

大原則

- 極力ループにPythonのforではなく、NumPy対応する関数を使う。(特にデータ数に対するループは厳禁!)
- 大抵の操作はあるのでよく探すこと!

- ホットスポットの検出にはPythonのプロファイラが便利。
- それでもやっぱり遅いよ! → f2py, Cythonなどを検討

NumPy & SciPy を用いたプログラミング

Principal Component Analysis

解き方 共分散行列の固有値分解 or データ行列の特異値分解

実装方 (共分散行列版)
1.np.covを使って共分散行列を計算
2.scipy.linalg.eighを使って固有値分解
3.np.dotを使って射影

詳細はソースコード(pca.py)を用いて説明

NumPy & SciPy を用いたプログラミング

Least Square Fit

$$y_n = \sum_i x_{ni} c_i + \epsilon \quad \text{or} \quad \mathbf{Y} = \mathbf{X}\mathbf{c} + \boldsymbol{\epsilon}$$

解き方 $\hat{\mathbf{c}} = \underbrace{\mathrm{pinv}(\mathbf{X})}_{\text{pseudo-inverse}}\mathbf{Y}$

実装方

a) scipy.linalg.svdをコール ← 一番低レベル

b) scipy.linalg.pinvをコール

c) scipy.linalg.lstsqをコール

詳細はソースコード(regression.py)のを用いて説明

NumPy & SciPy を用いたプログラミング

K-Means (理論)

$$\ln \mathrm{P}(x_n|c,\theta_c) = \ln \mathcal{N}(x_n;\mu_c,\Sigma_c)$$

x_n : observable
c_n : hidden variable
θ_c : model parameters

- E-Step $c_n = \underset{c}{\operatorname{argmax}} \ln \mathrm{P}(x_n|c,\theta_c)$

- M-Step $\theta_c = \underset{c}{\operatorname{argmax}} \sum_{c_n=c} \ln \mathrm{P}(x_n|c,\theta_c)$

$$\mu_c = \frac{1}{N_c} \sum_{c_n=c} x_n$$

$$\Sigma_c = \frac{1}{N_c} \sum_{c_n=c} (x_n - \mu_c)(x_n - \mu_c)^T$$

NumPy & SciPy を用いたプログラミング

K-Means (実装)

- **E- step**

各サンプルに対してlnPの計算 (二次形式、Mahalanobis距離)
→ scipy.spatial.distance.cdist

各サンプルに対してlnP最大のクラスタ番号を選ぶ
→ np.argmax

- **M-step**

c_n = c のサンプルの選択 → ndarrayのfancy indexing機能

平均、共分散の計算 → np.mean, np.cov

詳細はソースコード(kmeans.py)のを用いて説明

Contents

NumPy & Scipy の機能紹介
→ ndarrayクラスの操作を中心に説明

NumPy & SciPy を使ったプログラミング
→ 線形回帰、主成分分析, K-Means
→ Pythonの特徴であるOOPも取り入れる

ndarrayのviewと参照渡し

ndarrayとview

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

A[0,0]の値は?

ndarrayとview

view：同じメモリ領域を異なるndarrayオブジェクトで共有する機能
メモリを共有しているの配列の要素を変更すると、他の配列の対応する値も変更される。 知らないとかなりハマる。(体験談)

viewを返す表現、関数

A.view()

A[from:to] (スライス)

A.T, np.transpose(A) (転置)

A.reshape(shape), np.reshape(A,shape) (次元変換)

A.swapaxes(a,b), np.swapaxes(A,a,b) (軸の交換)

np.tile(A,(a,b,...)) (同じ配列を並べる。a,b.. = 1の時はもとのAとメモリを共有!)

A.baseで参照元の配列の内容を見れる。

ndarrayとview

同じメモリ領域を共有しているかを調べる方法

A.__array_interface__[“data”][0]
がメモリの領域を指しているのでこれを比較する

例

```
def isMemoryShared(a,b):
    mem_a = a.__array_interface__[“data”][0]
    mem_b = b.__array_interface__[“data”][0]
    return mem_a == mem_b
```

メモリを共有したくないときはnp.copyを使う

```
B = np.copy(A[1:3,:])
```

a = a + 1, a += 1

- a = a + 1
実は一度コピーを作成するので初めと終わりの”a”は
メモリ上では全くの別物。

- a += 1
aのメモリ上のデータを直接変更している。
(In-place Operation)

•np.exp(a,out=a)
universal functionでoutを指定するとin-placeで計算

a.__array_interface__[“data”][0]で確認してみる。

値渡しと参照渡し

C言語では値渡しと参照渡しを使い分けられる。

値渡し (call by value)

```
void f1(int x){
   x = x + 1;
}
```

→ f1の外ではxの値は元のまま。

参照渡し (call by reference)

```
void f2(int *x){
   *x = *x + 1;
}
```

→ f2の外でもxの値は1増える。

値渡しと参照渡し

Pythonでは基本は値渡し! だけど...

例外

- リストの要素を変更
- インスタンスのメンバーを変更
- ndarrayの要素を変更
- ndarrayをin-place operationで変更

値渡しと参照渡し

```
def npf1(x):
    # これはx自身が更新される
    x[0] = 1
```

```
def npf2(x):
    # xは不変
    x = x + 1
```

```
def npf3(x):
    # xは更新される
    x += 1
```

x.__array_interface__で確認! → mutate.py

まとめ

- NumPyのndarrayクラスの特徴であるindexingとunivesal functio よって数式を直感的にコードに変換できる。
- ScipyをはじめとしたNumPyを使ったパッケージや他のPythonパッケージをうまく利用するといろいろできそう。
- Pythonの特徴であるOOPとNumPyの高速な数値計算がうまく融合してかなり効率的なプログラミングが可能。
- ndarrayのviewの仕組みは知っておかないと意外とハマリやすい...

Thanx for Listening!