

本章重点介绍 NumPy(Numerical Python)、Pandas 和 Matplotlib 三个 Python 扩展库，如图 5-1 所示。NumPy 是科学计算的核心库。Pandas 是基于 NumPy 的数据分析工具。Matplotlib 是一款优秀的数据可视化 Python 第三方库。

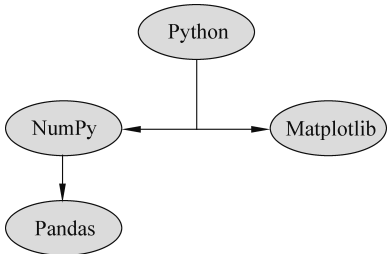


图 5-1 三个扩展库以及 Python 语言之间的关系

5.1 NumPy

NumPy 支持多维数组 ndarray 与矩阵运算，功能涵盖了随机数生成、线性代数等。NumPy 的首要任务是处理多维数组。多维数组是一个元素表，其所有元素都属于同种数据类型。

```
[[ 1., 0., 0.],  
 [ 0., 1., 2.]]
```

NumPy 的维度被称为轴，上述数组由两个轴构成，第 1 个轴的长度等于 2，第 2 个轴的长度等于 3，因此这是一个 2 行 3 列的数组。ndarray 对象的主要属性如表 5-1 所示。

表 5-1 ndarray 对象的主要属性

属 性	说 明
ndarray.ndim	数组的维数(轴数)
ndarray.shape	数组的形状
ndarray.size	数组中元素的总数

续表

属 性	说 明
ndarray.dtype	数组中元素的数据类型
ndarray.itemsize	数组中每个元素所占内存的字节数
ndarray.data	容纳数组元素的缓冲区,通常不使用此属性

```
>>> a = np.array([[0, 1, 2],
                  [3, 4, 5]])           #数组类 ndarray 的别名 array
>>> a.ndim                             #2 行 3 列的多维数组
2                                     #数组 a 的维数
>>> a.shape                             #数组 a 的形状
(2, 3)
>>> a.size                             #数组 a 的元素总数
6
>>> a.dtype                             #数组 a 中元素的数据类型
dtype('int32')
>>> a.itemsize                         #元素所占内存的字节数
4
```

获取函数、模块等的帮助信息,可使用 `numpy.info()` 函数,也可以使用 `help()` 函数。

```
>>> np.info(np.ndarray)                #输出结果省略
>>> help(np.random)                    #输出结果省略
```

使用 `dir()` 函数查看模块中包含的所有成员(属性与方法),以及支持的操作。

```
>>> dir(numpy)                         #输出结果省略
```

5.1.1 创建数组

创建 NumPy 数组主要有 4 种方法,分别是 `array()`、`arange()`、`linspace()` 和 `logspace()`。

```
>>> np.array((1.5, 2.0, 3.5))           #将元组转换为 NumPy 数组
array([1.5, 2. , 3.5])
>>> np.array(1, 2, 3)                   #初学者常犯的错误
>>> np.array([1, 2, 3])                  #写法正确
>>> np.array([(1.5, 1, 2), (2, 3, 4)])   #得到 2 行 3 列 NumPy 二维数组
array([[1.5, 1. , 2. ],
       [2. , 3. , 4. ]])
>>> np.array(range(1, 4))                 #将 range(1, 4) 转换为 NumPy 数组
array([1, 2, 3])
>>> np.array([[1, 2], [3, 4]], dtype=np.float32) #指定元素的数据类型
```

NumPy 提供的 `arange()` 函数,其功能类似于 Python 内置函数 `range()`。

```
>>> np.arange(10, 30, 5)                 #生成[10, 30) 范围内步长为 5 的等差数组
array([10, 15, 20, 25])
>>> np.arange(0, 2, 0.3)                 #步长为浮点数,这点与 range() 函数不同
```

```
array([0. , 0.3, 0.6, 0.9, 1.2, 1.5, 1.8])
>>> np.arange(6).reshape(3, 2)      #得到一个 3 行 2 列的二维数组
array([[0, 1],
       [2, 3],
       [4, 5]])
```

使用 `linspace()`^①函数和 `logspace()`函数分别创建等差和等比数组。

```
>>> np.linspace(0, 1, 5)             #生成[0, 1]范围内 5 个浮点数组成的等差数组
array([0. , 0.25, 0.5 , 0.75, 1.  ])
>>> np.logspace(0, 1, 5).round(3)     #生成由 5 个浮点数组成的等比数组
array([ 1. ,  1.778,  3.162,  5.623, 10.  ])
```

上述代码中等比数组的 5 个浮点数,分别等于 10 的 0 次方、0.25 次方、0.5 次方、0.75 次方和 1 次方。

3 个特殊函数 `zeros()`、`ones()`和 `empty()`,分别生成全零数组、全 1 数组和空数组。

```
>>> np.zeros((2, 3))                 #生成 2 行 3 列的全零数组
array([[0., 0., 0.],
       [0., 0., 0.]])
>>> np.empty((2, 3))                 #生成 2 行 3 列的空数组,只申请内存空间
array([[0., 0., 0.],
       [0., 0., 0.]])                #不执行初始化操作,其元素值不确定
```

5.1.2 算术运算与线性代数

数与数组、数组与数组之间的算术运算^②,是在元素级别上进行的。

```
>>> a = np.array([3, 4, 5])
>>> b = np.array([1, 2, 3])
>>> a * 2
array([6, 8, 10])
>>> b > 2
array([False, False, True])
```

使用 `@`运算符(Python 版本号在 3.5 及以上)或 `dot()`函数实现通常意义上的矩阵乘法。

```
>>> a = np.array([[1, 1],
                  [0, 1]])
>>> b = np.array([[2, 0],
                  [3, 4]])
>>> a * b          #只是对应位置上的元素相乘
array([[2, 0],
       [0, 4]])
>>> a @ b          #通常意义上的矩阵乘法,等价于 a.dot(b)
```

① `linspace` 指线性空间(Linear Space)。

② 算术运算包括加法、减法、乘法、除法、幂等。

```
array([[5, 4],
       [3, 4]])
```

通过指定轴参数 `axis`, 使计算操作作用在指定的轴上, 如图 5-2 所示。

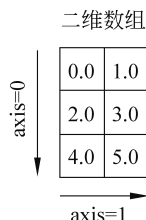


图 5-2 二维数组

```
>>> a = np.array([[0, 1],
                  [2, 3],
                  [4, 5]])

>>> a.mean(axis=None)           # 数组所有元素的平均值, 等价于 a.mean()
2.5

>>> a.mean(axis=0)             # 垂直于 x 轴的方向上求数组 a 的平均值
array([2., 3.])

>>> a.mean(axis=1)             # 垂直于 y 轴的方向上求数组 a 的平均值
array([0.5, 2.5, 4.5])

>>> a.std().round(3)           # 标准差(Standard Deviation)
1.708

>>> a = np.array([[1, 4, 8],
                  [5, 1, 4],
                  [0, 7, 9]])

>>> np.sort(a, axis=None)      # 先将数组扁平化, 然后再排序
array([0, 1, 1, 4, 4, 5, 7, 8, 9]) # 原数组不变, 即不是原地排序 (In-place)

>>> a.sort()                   # 原地排序, 数组被改变, 等价于 a.sort(axis=1)
>>> a
array([[1, 4, 8],
       [1, 4, 5],
       [0, 7, 9]])

>>> a.cumsum(axis=1)           # 垂直于 y 轴的方向上求累加和
array([[1, 5, 13],
       [1, 5, 10],
       [0, 7, 16]], dtype=int32) # 累加的 cumulative
```

可使用 `average()` 函数计算数组的加权平均。

```
>>> a = np.array([[0, 1, 2],
                  [3, 4, 5]])

>>> weight = [0.3, 0.7]       # 权重数组

>>> np.average(a, axis=0, weights=weight)
array([2.1, 3.1, 4.1])
```

```
>>> a = np.array([[1., 2.],
                  [3., 4.]])
>>> a.transpose()           # 矩阵的转置(Transpose), 等价于 a.T
array([[1., 3.],
       [2., 4.]])
>>> np.diagonal(a)          # 矩阵 a 的主对角线(Diagonal)
array([1., 4.])
>>> np.linalg.inv(a)        # 求逆(Inverse)矩阵
array([[ -2. ,  1. ],
       [ 1.5, -0.5]])      # linalg = linear algebra 线性代数
```

5.1.3 通用函数

NumPy 提供的通用函数包括 `sin()`、`cos()`、`exp()` 等。这些函数的操作对象是数组中的元素而不是数组本身, 而且生成一个新数组作为输出。

```
>>> a = np.array([0, 1, 2])
>>> np.exp(a).round(3)      # 求 e 的幂, 指数为数组元素
array([1. , 2.718, 7.389])
>>> a = np.random.rand(1, 3).round(3)  # 生成 1 行 3 列[0, 1) 内的随机数数组
>>> a
array([[0.044, 0.572, 0.454]])
>>> np.sin(a).round(3)
array([[0.044, 0.541, 0.439],
       [0.749, 0.107, 0.358]])
```

Python 语言的内置模块 `random` 有一个 `randint()` 函数。

```
>>> import random
>>> a = random.randint(1, 5)      # 生成 [1, 5] 范围内的随机整数
>>> a
4
>>> b = np.random.randint(1, 5)   # 生成 [1, 5) 范围内的随机整数, 不包括 5
>>> b
1
```

尽量使用 `np.random.randint()` 函数, 而不是 `random.randint()` 函数, 因为前者的效率更高。

函数 `random.random()`、`np.random.random()`、`np.random.rand()` 和 `np.random.randint()` 都能生成随机数。`random()` 是内置模块 `random` 的一个函数, 可生成 `[0, 1)` 范围内的浮点数。

```
>>> random.random()
0.2611025605918177
```

函数 `np.random.random()` 与 `random.random()` 的功能相同。

`np.random.rand()` 函数可创建具有指定形状的、`[0, 1]` 范围内的随机数数组。

```
>>> np.random.rand(3).round(3)           # 创建 1 行 3 列的数组
array([0.417, 0.9 , 0.576])
>>> np.random.rand(1, 2)                 # 创建 1 行 2 列的数组
array([[0.83704391, 0.15624938]])

np.random.randint()函数可创建具有指定形状的随机整数数组。

>>> np.random.randint(5, size=(2,4))      # 生成 2 行 4 列[0, 5)范围内的整数数组
array([[4, 3, 0, 3],
       [3, 2, 1, 4]])
>>> np.random.randint(1, [3, 5])          # 生成 1 行 2 列的整数数组
array([1, 2])                             # 两个元素分别来自[1, 3)和[1, 5)
>>> np.random.randint([5, 7], 10)        # 生成 1 行 2 列的整数数组
array([5, 8])                             # 两个元素分别来自[5, 10)和[7, 10)
```

NumPy 的常用函数还包括 `add()`、`sqrt()`、`var()`、`np.random.choice()`、`square()`、`sign()`、`log()`、`floor()`、`argmax()`、`argmin()`等。

5.1.4 索引、切片和迭代

类似于 Python 语言的字符串、列表和元组，一维数组也可以被索引、切片和迭代。

```
>>> a = np.array([5, 6, 7, 8, 9])
>>> a[2]
7
>>> a[2:4]
array([7, 8])
>>> a[::-1]                               # 将数组 a 逆序输出
array([9, 8, 7, 6, 5])
>>> a                                     # 数组 a 本身并没改变
array([5, 6, 7, 8, 9])
>>> for i in a:                             # 迭代, 输出省略
    print(i ** (1/2))
```

多维数组的每个轴对应一个索引, 这些索引之间以逗号分隔。

```
>>> a = np.array([[ 0,  1,  2,  3],
                  [10, 11, 12, 13],
                  [20, 21, 22, 23],
                  [30, 31, 32, 33]])
>>> a[2, 3]                               # 得到第 3 行第 4 列的元素
23
>>> a[0:4, 1]                             # 得到第 2 列第 1~4 行的所有元素
array([ 1, 11, 21, 31])
>>> a[:, 1]                               # 得到第 2 列的所有元素, 等价于 a[0:4, 1]
array([ 1, 11, 21, 31])
```

假如数组 `a` 有 3 个轴, `a[-1]` 等价于 `a[-1, :, :]`。也就是说, 如果只指定前面几个轴, 后面的轴不指定的话, 那么切片将包含剩余轴上的所有元素, 此时也可以用“...”表示剩余轴上

的所有元素。

```
>>> a[-1]                                # 数组 a 的最后一行
array([30, 31, 32, 33])
>>> a[-1, :]                            # 等价于 a[-1]
array([30, 31, 32, 33])
>>> a[-1, ...]                          # 等价于 a[-1] 和 a[-1, :]
array([30, 31, 32, 33])
```

“...”具有伸缩性,它可自动生成代码所需的任意多个冒号。假如数组 x 有 5 个轴,则:

(1) `x[ 1, 2, ... ]`等价于 `x[ 1, 2, :, :, : ]`;

(2) `x[ 4, ..., 5, : ]`等价于 `x[ 4, :, :, 5, : ]`。

除了通过整数或切片进行索引外,还可以使用整数数组进行索引。

```
>>> a = np.array([ 0, 1, 4, 9, 16, 25])
>>> i = np.array([1, 1, 5, 3])
>>> a[i]                                # 数组 a 中位置 i 处的元素
array([ 1, 1, 25, 9])
>>> i = np.array([ [3, 4], [2, 3] ])    # 二维索引数组
>>> a[i]                                # 数组 a[i]与数组 i 的形状相同
array([[ 9, 16],
       [ 4, 9]])
```

借助于布尔索引可以显式地指定数组中需要的项和不需要的项。

```
>>> a = np.array([[ 0,  1,  2,  3],
                  [ 4,  5,  6,  7],
                  [ 8,  9, 10, 11]])
>>> b = a > 4
>>> b                                    # 布尔数组 b 与数组 a 的形状相同
array([[False, False, False, False],
       [False,  True,  True,  True],
       [ True,  True,  True,  True]])
>>> a[b]
array([ 5,  6,  7,  8,  9, 10, 11])      # 返回由选定元素组成的一维数组
>>> a[b] = 0                             # 将布尔索引与赋值操作相结合
>>> a
array([[0, 1, 2, 3],
       [4, 0, 0, 0],
       [0, 0, 0, 0]])
```

使用布尔索引指定数组的维度:

```
>>> a = np.array([[ 0,  1,  2,  3],
                  [ 4,  5,  6,  7],
                  [ 8,  9, 10, 11]])
>>> b1 = np.array([False, True, True])
>>> a[b1]                                # 选择数组的第 2 行和第 3 行
array([[4,  5,  6,  7],
       [8,  9, 10, 11]])
```

```
[8, 9, 10, 11])
>>> b2 = np.array([True, False, True, False])
>>> a[:, b2]                                # 选择数组的第 1 列和第 3 列
array([[ 0, 2],
       [ 4, 6],
       [ 8, 10]])
>>> a[b1, b2]                                # 得到主对角线上的元素,第 2、3 行与第 1、3 列
array([ 4, 10])
```

在默认情况下,迭代操作是在多维数组的第 1 个轴进行的。

```
>>> a = np.array([[ 0, 1, 2, 3],
                  [10, 11, 12, 13]])
>>> for row in a:
    print(row)
```

上述代码的输出结果:

```
[0 1 2 3]
[10 11 12 13]
```

```
>>> a = np.array([[0, 1, 2],
                  [3, 4, 5]])
>>> for ele in a.flat:                      # 属性 flat 可将多维数组扁平化为一维数组
    print(ele, end=" ")                    # 属性 flat 并不改变原数组的形状
```

上述代码的输出结果:

```
0 1 2 3 4 5
```

5.1.5 形状变换

数组的形状(Shape)由各个轴以及轴上的元素个数决定。

```
>>> a = np.array([[0, 1],
                  [2, 3],
                  [4, 5]])
>>> a.shape
(3, 2)
```

可通过各种命令更改数组的形状^①。ravel()、reshape()以及转置(.T)都返回修改后的数组,但不改变原数组。

```
>>> a.ravel()                                # 返回扁平化的数组
array([0, 1, 2, 3, 4, 5])
>>> a.reshape(2, 3)                          # 由 3 行 2 列转换为 2 行 3 列的新数组
array([[0, 1, 2],
       [3, 4, 5]])
```

^① 数组的扁平化,既可以使用数组的 flat 属性,也可以使用数组的 ravel()方法。


```
>>> a.T                                #转置(Transpose)
array([[0, 2, 4],
       [1, 3, 5]])
```

读者自行验证原数组 `a` 并没有发生改变。`resize()` 方法也可以改变数组的形状,不同之处是它改变数组本身。当改变数组的形状时,如果将某个维度指定为 `-1`,则系统会自动推导该维度的长度。

```
>>> a = np.array([0, 1, 2, 3, 4, 5])
>>> a.reshape(3, -1)                  #根据第1维的长度3,推导出第2维的长度2
array([[0, 1],
       [2, 3],
       [4, 5]])
```

5.1.6 堆叠与分割

两个数组既可以沿着水平方向堆叠在一起,也可以沿着垂直方向堆叠在一起。

```
>>> a = np.array([[4, 3],
                  [9, 3]])
>>> b = np.array([[7, 0],
                  [9, 5]])

>>> np.hstack((a, b))                 #水平堆叠(Horizontal)
array([[4, 3, 7, 0],
       [9, 3, 9, 5]])

>>> np.column_stack((a, b))
array([[4, 3, 7, 0],
       [9, 3, 9, 5]])

>>> np.c_[a, b]                       #c = column 列
array([[4, 3, 7, 0],
       [9, 3, 9, 5]])

>>> np.vstack((a, b))                 #垂直堆叠(Vertical)
array([[4, 3],
       [9, 3],
       [7, 0],
       [9, 5]])
```

#尝试代码 `np.r_[a, b]`, `r = row 行`
#尝试代码 `np.row_stack((a, b))`

函数 `np.hstack()`、`np.vstack()`、`np.row_stack()` 和 `np.column_stack()`,以及两个 CClass 实例 `np.r_` 与 `np.c_` 的用法非常灵活,读者没有把握时要多实践。

数组能堆叠在一起,也能拆开。水平分割用 `hsplit()` 函数;垂直分割用 `vsplit()` 函数;既水平分割又垂直分割用 `array_split()` 函数。

5.1.7 广播

广播(Broadcasting)用于解决在不同形状的数组之间进行算术运算的问题。在某些约束条件下,较小的数组在较大的数组上“广播”,以使两个数组的形状相互兼容。

```
>>> a = np.array([[0],
```

```
[1],
[2]])
>>> b = np.array([0, 1, 2])
>>> a + b
array([[0, 1, 2],
       [1, 2, 3],
       [2, 3, 4]])
```

上述两个数组的加法,其计算过程如下。

```
array([ [0 + 0, 0 + 1, 0 + 2]
        [1 + 0, 1 + 1, 1 + 2]
        [2 + 0, 2 + 1, 2 + 2] ] )
```

5.2 Pandas

Pandas 拥有 Series 和 DataFrame 两种重要的数据结构,如表 5-2 所示,可用于对噪声数据等进行清洗,以方便后续的数据分析与处理。

表 5-2 Pandas 的两种数据结构

名 称	维 度	说 明
Series	一维	带有标签的同种数据类型组成的一维数组。与 list 和 numpy.array 类似,但是 list 中的元素可以是不同的数据类型;而 array 与 Series 只允许存储相同的数据类型
DataFrame	二维	带有标签的异种数据类型组成的二维数组

5.2.1 Series

1. 创建 Series

创建 Series 的基本语法格式如下。

```
pandas.Series(data=None, index=None, name=None)
```

- data: 输入数据,接收 array 或 dict;
- index: 索引,接收 array 或 list,必须与数据 data 的长度相同;
- name: Series 对象的名称,接收字符串。

(1) 参数 data 是 NumPy 数组。

```
>>>import pandas as pd
>>>s = pd.Series(np.arange(3), index=['a', 'b', 'c'], name='ndarray')
>>>print(s)
```

上述代码的输出结果:

```
a    0
b    1
c    2
```