NumPy Arrays

by Woche 3

Nachdem wir die wichtigsten Grundlagen in Python kennengelernt haben, können wir uns nun mit dem ersten zusätzlichen Model beschäftigen: NumPy. NumPy steht für *numerical python* und ist eine Bibliothek, die das Rechnen mit Zahlen in Python erleichtert und auch beschleunigt. Es ist eine der wichtigsten Bibliotheken in Python und wird in fast jedem wissenschaftlichen Projekt verwendet.

Es sei an dieser Stelle vorweggenommen, dass NumPy 2005 veröffentlicht wurde, während Pandas 2008 veröffentlicht wurde. Pandas baut auf NumPy auf und ist im Grunde eine Erweiterung von NumPy. Aus diesem Grund beschäftigen wir uns hier zuerst also mit NumPy. Trotzdem werden wir erstmals Daten in Tabellen auswerten und auch importieren/exportieren, wenn wir uns mit Pandas beschäftigen.

Dass man `np` als Kürzel für NumPy verwendet, ist in der Python-Community so weit verbreitet ist, dass es schon komisch wäre, wenn man es anders handhabt:

```
import numpy as np
```

Showcase: Einfacher & Schneller

Noch bevor die genaue Funktionsweise von NumPy erklärt wird, soll hier ein kleines Beispiel gezeigt werden, wie NumPy das Rechnen mit Zahlen erleichtert und beschleunigt. Zum Vergleich wollen wir folgendes einmal mit Listen und mit NumPy-Arrays tun: Für die Werte 1-5, welche in einem Objekt gespeichert sind, sollen die Quadratzahlen berechnet werden:

```
# Liste mit Loop
x = list(range(1, 6))
y = []

for i in x:
    y.append(i**2)

print(x)
print(y)
```

```
[1, 2, 3, 4, 5]
[1, 4, 9, 16, 25]
```

```
# Liste mit List Comprehension
x = list(range(1, 6))
y = [i**2 for i in x]




print(x)
print(y)
```

```
[1, 2, 3, 4, 5]
[1, 4, 9, 16, 25]
```

```
# Array
x = np.arange(1, 6)
y = x**2




print(x)
print(y)
```

```
[1 2 3 4 5]
[ 1  4  9 16 25]
```

Es wird direkt offensichtlich, dass der Code mit NumPy deutlich kürzer ist. Das liegt daran, dass NumPy speziell für das Rechnen mit Zahlen geschrieben wurde und deshalb in diesem Fall die Quadrierung direkt auf das Array, also jede einzelne Zahl im Array, angewendet werden kann. Bei Listen ist das nicht ohne weiteres möglich - stattdessen müssen wir dort einen Loop verwenden, um jede Zahl in der Liste zu quadrieren. Dafür sind hier zwei verschiedene Varianten gezeigt: Einmal mit einem Loop und einmal mit einer List Comprehension (siehe Kapitel 2.5). Der NumPy-Ansatz ist aber kürzer als beide Varianten mit Listen.

Neben der Kürze des Codes ist auch die Geschwindigkeit ein wichtiger Vorteil von NumPy. Hier wird mittels dem `timeit` Modul die Zeit gemessen, die benötigt wird, um die Quadrate der Zahlen 1-1000 zu berechnen. Die Zeit wird dabei in Sekunden gemessen und das Ganze 1000 Mal wiederholt. Das Ergebnis ist, dass NumPy in diesem Fall etwa 100x schneller ist als Listen:

```
import timeit
```

```
code_liste = """
x = list(range(1, 1001))
y = [i**2 for i in x]
"""

liste_zeit = timeit.timeit(
  stmt=code_liste,
  number=1000,
  globals=globals()
  )

print(liste_zeit)
```

```
0.023115399992093444
```

```
#

code_array = """
x = np.arange(1, 1001)
y = x**2
"""

array_zeit = timeit.timeit(
  stmt=code_array,
  number=1000,
  globals=globals()
  )

print(array_zeit)
```

```
0.0010273000225424767
```

NumPy Arrays

Das wichtigste Objekt in NumPy ist das `ndarray` (kurz für *n-dimensional array*). Ein Array ist eine Datenstruktur, die es erlaubt, mehrere Werte in einer Variablen zu speichern. Ein `ndarray` kann also mehrere Werte speichern - so wie auch Listen, Tuples, Sets und Dictionaires. Im Gegensatz zu Listen, Tuples, Sets und Dictionaries in Python, die heterogen sein können (verschiedene Objekttypen speichern), sind `ndarray`-Objekte homogen. Das bedeutet, dass sie ausschließlich Werte eines einzigen Datentyps enthalten. Diese Homogenität ermöglicht es, dass die Daten zusammenhängend im Speicher abgelegt werden, was den Zugriff und die Verarbeitungsgeschwindigkeit erheblich verbessert. Darüber hinaus bietet NumPy viele numerische Funktionen an, die

speziell für mit Zahlen gefüllte `ndarray`-Objekte entwickelt wurden, um die Arbeit mit numerischen Daten effizient und effektiv zu gestalten.

erzeugen

`np.array()`

Ein Array kann auf verschiedene Weisen erstellt werden. Die wohl intuitivste ist, ein Array aus einer Liste zu erstellen. Hier erzeugen wir erst eine Liste und konvertieren sie dann in ein array. Neben den Objekten selbst, lassen wir uns auch die Typen der Objekte mittels `print(type(...))` ausgeben:

```
a = [1, 2, -3, 42] # Liste
b = np.array(a)
```

```
print(a)
print(type(a))
```

```
[1, 2, -3, 42]
<class 'list'>
```

```
print(b)
print(type(b))
```

```
[ 1  2 -3 42]
<class 'numpy.ndarray'>
```

Neben Listen können auch Tuples in Arrays umgewandelt werden. Die übergebenen Listen und Tuples dürfen dabei sogar geschachtelt sein (also Listen in Listen, Tuples in Tuples, etc.) - dann werden aber auch mehrdimensionale Arrays erstellt (später mehr dazu).

```
a = (1, 2, -3, 42) # Tuple
b = np.array(a)
print(b)
```

```
[ 1  2 -3 42]
```

```
c = [(1, 2, 3), [4, 5, 6]] # Tuple & Liste in Liste
d = np.array(c)
```

```
print(d)
print(type(d))
```

```
[[1 2 3]
 [4 5 6]]
<class 'numpy.ndarray'>
```

weitere Funktionen

Neben `np.array()` gibt es noch viele weitere Funktionen, um Arrays zu erstellen. Hier sollen einige davon vorgestellt werden:

```
np.zeros(3) # Array mit 3 Nullen
```

```
array([0., 0., 0.])
```

```
np.ones(3) # Array mit 3 Einsen
```

```
array([1., 1., 1.])
```

```
np.full(3, 4.) # Array mit 3 Vieren
```

```
array([4., 4., 4.])
```

> **Hinweis**
>
> Die Funktionen `np.zeros()`, `np.ones()` erzeugen wie beschrieben Arrays mit Nullen und Einsen. Beim Ausgeben der Arrays sieht man außerdem, dass dort `0.` anstatt `0` und `1.` anstatt `1` steht. Das liegt daran, dass NumPy standardmäßig mit `float`-Zahlen und nicht `int`-Zahlen arbeitet (siehe Kapitel 2.2 Datentypen). Man kann es auch prüfen, indem man sich den `type()` eines einzelnen Elements des Arrays ausgeben lässt, z.B. via `type(np.zeros(3)[0])`. Aus diesem Grund - und um zwischen den Beispielen konsistent zu bleiben - haben wir auch in der Funktion `np.full()` eine `float`-Zahl `4.` und nicht `4` übergeben.

Es ist auch leicht möglich sich Zufallszahlen ausgeben zu lassen. Hierbei gibt es verschiedene Funktionen, die Zufallszahlen generieren. Die Funktion `np.random.rand()` gibt z.B. Zufallszahlen zwischen 0 und 1 aus, wohingegen bei der Funktion

`np.random.randint()` ganze Zufallszahlen zwischen zwei selbstgewählten Grenzen generiert werden.

```
np.random.rand(3)
```

```
array([0.21495739, 0.12379982, 0.62025328])
```

```
np.random.randint(low=10, high=20, size=3)
```

```
array([17, 11, 18], dtype=int32)
```

Schließlich seien noch `np.arange` und `np.linspace` genannt. Beide Funktionen generieren Zahlenfolgen. `np.arange` generiert dabei eine Zahlenfolge, die sich aus einer Start- und Endzahl und einem Schritt zusammensetzt. `np.linspace` generiert eine Zahlenfolge, die sich aus einer Start- und Endzahl und einer Anzahl an Zahlen zusammensetzt.

```
# Zahlen von 0 bis 10 in 2er Schritten
np.arange(0, 11, 2)
```

```
array([ 0,  2,  4,  6,  8, 10])
```

```
# 5 Zahlen zwischen 0 und 10
np.linspace(0, 10, 5)
```

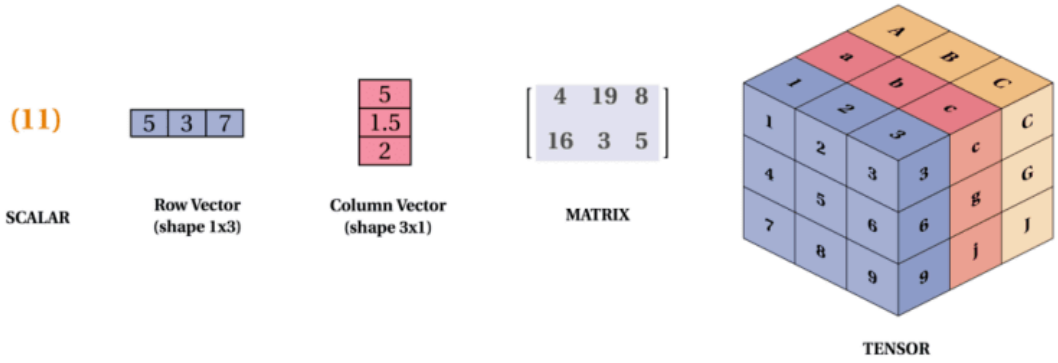
```
array([ 0. ,  2.5,  5. ,  7.5, 10. ])
```

Es fällt auf, dass die beiden Funktionen sich unterschiedlich bzgl. des Einschluss des Endwerts verhalten. Bei `np.arange()` ist der Endwert nicht enthalten (wie auch bei `range()` oder beim Slicing von Listen, siehe Kapitel 2.3), bei `np.linspace()` hingegen schon. Außerdem produziert `np.arange()` standardmäßig Integer und `np.linspace()` Floats.

Mehrdimensional Arrays

Bisher wurden nur eindimensionale Arrays gezeigt und diese werden wir auch vorrangig brauchen. Es gibt aber auch mehrdimensionale Arrays. Eindimensionale Arrays werden auch als Vektoren bezeichnet, zweidimensionale Arrays als Matrizen und mehrdimensionale Arrays als Tensoren. Außerdem gibt es natürlich auch 0-dimensionale

Arrays, also Arrays die nur ein Element/eine Zahl enthalten, welche als Skalare bezeichnet werden.



Quelle: Mukesh Mithrakumar

Wie oben kurz gezeigt, kann ein mehrdimensionales Array aus einer geschachtelten Liste oder einem geschachtelten Tuple erstellt werden. Ebenso, können aber auch Befehle wie `np.reshape()` verwendet werden, um aus einem eindimensionalen Array ein mehrdimensionales Array zu erstellen.

```
x = np.array([[1, 2], [3, 4]])

print(x)
```

```
[[1 2]
 [3 4]]
```

```
x = np.array([1, 2, 3, 4, 5, 6])
y = np.reshape(x, (2, 3))
print(y)
```

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

```
x = np.array([1, 2, 3, 4, 5, 6])
y = np.reshape(x, (3, 2))
print(y)
```

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

Bis auf die unten angegebene *weitere Ressource* soll hier aber nicht weiter auf mehrdimensionale Arrays eingegangen werden. Es sei nur gesagt, dass die meisten Funktionen, die auf eindimensionalen Arrays angewendet werden können, auch auf mehrdimensionalen Arrays angewendet werden können. Bereiche in denen mehrdimensionale Arrays benötigt werden, sind z.B. Bildverarbeitung, neuronale Netze und Simulationen. Gleichzeitig sind Matrizen auch Grundlage für die Schätzung von z.B. Regressionsmodellen, welche wir nutzen werden um Daten zu analysieren. Allerdings werden wir dafür bereitgestellte Funktionen nutzen, sodass wir selbst nicht mit mehrdimensionalen Arrays arbeiten müssen.

Weitere Ressourcen

- Programmieren Lernen #8 - Mehrdimensionale Arrays

Übungen

Finde selbstständig, also mithilfe der Python Dokumentation und/oder des Internets heraus mit welchem Befehl `meinarray.???` (1) man die Anzahl der Elemente eines Arrays herausfinden kann, (2) man die Elemente in einem Array der Größe nach sortieren kann.

```
mein_array = np.array([1, 9, 5])
```

Zeige Anzahl Elemente: `mein_array.` ____Sortiere Elemente: `mein_array.` _____