

超基本…数値計算「NumPy」

ご購入はこちら

高橋 知宏

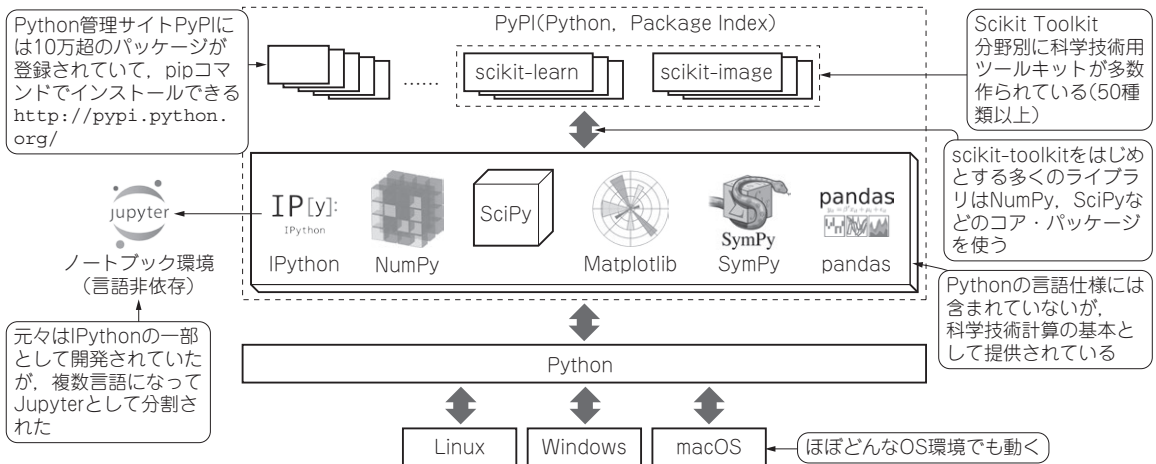


図1 Pythonは科学技術計算用の環境が非常に整っている

本特集で紹介… Pythonの必修科学計算パッケージ

● デファクト・スタンダードがいくつかある

Pythonには、10万を超えるたくさんのパッケージがあります。ウェブ・サイト⁽¹⁾で一元的に管理されており、pipコマンドですぐにインストールできます。

科学技術用途向けのパッケージは、SciKits Toolkitとしてまとめられており⁽²⁾、50種以上がウェブにリストされています⁽³⁾。機械学習のscikit-learnや画像処理のscikit-imageなど、需要が多く定評のあるパッケージがscikit toolkitとして用意されています(図1)。

このようにPythonにはとてもたくさんのパッケージが提供されているのですが、その中でも基礎となるパッケージが今回紹介する。

- (1) 数値計算 NumPy (3) 科学技術 SciPy
(2) グラフ表示 Matplotlib (4) データ分析 pandas

ほとんど標準になっているといってもよいPythonパッケージを図2に示します。

特にNumPyは、多くのパッケージの基礎となっており、この仕組みと使い方を理解しておくことは、Pythonを使うにあたってとても有用だと思います。

● 標準の中の標準! 数値計算NumPy

数値計算に限ればNumPyの実行効率とはとても良く、コンパイラ・ベースの言語を使うことに比べても遜色ありません。CuPyなどで計算資源としてGPUを使う場合もNumPyと同じインターフェースで使えるよう整備されているなど、Pythonでの数値計算ではほぼ標準といっても過言ではありません。NumPyが現在のような形に整備されてきた経緯は、オリジナルの作者によるスライドで解説されています⁽⁴⁾。

パッケージの豊富さはPythonの特徴とも言えますが、こうなった理由の1つとして、NumPyのような全ての計算の基盤となるようなパッケージが、早い時期に良い品質で整備、統一されていたことにより、それを基礎として他のライブラリの発展を促進してきた効果があったのではないかと思います。

数値計算NumPyの基礎知識

● Python科学計算はNumPyから始めるべし

Pythonを利用する上で欠かせないライブラリがNumPyです。その名の通り、Number = 数値を扱うためのライブラリです。たくさんの数値データに対す