**Применение Python в науке**

**Контекст**

Python часто используется в высокопроизводительных научных приложениях. Этот язык широко применяется в научных кругах и научных проектах, т.к. он лёгок в написании и хорошо работает.

Благодаря высокой производительности научные вычисления на Python часто используют внешние библиотеки, обычно написанные на более быстрых языках (например, C или FORTRAN для операций с матрицами). Основными библиотеками являются NumPy, SciPy и Matplotlib. Подробности об этих библиотеках выходят за рамки данного руководства Python. Тем не менее, всеобъемлющее введение в научную экосистему Python можно найти на Python Scientific Lecture Notes.

**Инструменты**

* IPython

IPython – это усовершенствованная версия интерпретатора Python, которая предоставляет функции, представляющие большой интерес для учёных. Встроенный режим позволяет отображать графики и графики в терминале (Qt-версия). Кроме того, режим блокнота поддерживает грамотное программирование и создание веб-блокнота Python. Этот блокнот позволяет хранить куски кода Python вместе с результатами и дополнительными комментариями (HTML, LaTeX, Markdown). Затем блокнот можно совместно использовать и экспортировать в различные форматы файлов.

**Библиотеки**

* NumPy

NumPy – низкоуровневая библиотека, написанная на C (и FORTRAN) для математических функций высокого уровня. NumPy умело преодолевает проблему запуска более медленных алгоритмов на Python с помощью многомерных массивов и функций, которые работают с массивами. Любой алгоритм может быть выражен как функция массивов, что позволяет быстро запускать алгоритмы.

NumPy является частью проекта SciPy и выпускается как отдельная библиотека, поэтому люди, которым нужны только базовые требования, могут использовать его без установки остальной части SciPy.

NumPy совместим с версиями Python от 2.4 до 2.7.2 и 3.1+.

* Numba

Numba – это компилятор Python, поддерживающий NumPy (специализированный компилятор JIT-just-in-time), который компилирует закомментированный код Python (и NumPy) в LLVM (низкоуровневая виртуальная машина) через специальные декораторы. Если коротко, то Numba использует систему, которая компилирует код Python с LLVM в код, который может выполняться изначально во время работы.

* SciPy

SciPy – это библиотека, которая использует NumPy для более математических функций. SciPy использует массивы NumPy в качестве базовой структуры данных и включает модули для различных широко используемых задач в научном программировании, включая линейную алгебру, интегральное исчисление, решение обыкновенных дифференциальных уравнений и обработку сигналов.

* Matplotlib

Matplotlib – это гибкая библиотека для создания интерактивных 2D и 3D графиков, которые также могут быть сохранены в качестве показателей качества рукописи. API во многом отражает работу MATLAB, облегчая переход пользователей MATLAB на Python. Многие примеры, а также исходный код для их воссоздания доступны в галерее matplotlib.

* Pandas

Pandas – это библиотека обработки данных на основе Numpy, которая предоставляет множество полезных функций для доступа, индексирования, слияния и группировки данных. Основная структура данных (DataFrame) близка к тому, что можно найти в статистическом пакете R; то есть разнородные таблицы данных с индексацией имён, операциями с временными рядами и автоматическим выравниванием данных.

* Rpy2

Rpy2 – это связующее Python со статистическим пакетом R, позволяющее выполнять R-функции из Python и передавать данные между двумя средами. Rpy2 – объектно-ориентированная реализация привязок Rpy.

* PsychoPy

PsychoPy – это библиотека для учёных-исследователей, позволяющая создавать эксперименты по когнитивной психологии и нейробиологии. Библиотека обрабатывает предоставленные стимулы, сценарии экспериментального проектирования и сборы данных.

**Источники**

Установка научных пакетов Python может быть проблематичной, так как многие из этих пакетов реализованы как расширения Python C, которые необходимо скомпилировать. В этом разделе перечислены различные так называемые научные дистрибутивы Python, которые предоставляют предварительно скомпилированные и простые в установке коллекции научных пакетов Python.

* Неофициальные бинарные файлы Windows для пакетов расширения Python

Многие занимаются научными вычислениями в Windows, но множество научных вычислительных пакетов, как правило, трудно создать и устанавлить на этой платформе. Однако Кристоф Гольке составил список двоичных файлов Windows для многих полезных пакетов Python. Список пакетов вырос из основного научного ресурса Python в более общий список. Если вы работаете в Windows, можете это проверить.

* Anaconda

Continuum Analytics предлагает Anaconda Python Distribution, который включает в себя все распространенные научные пакеты Python, а также множество пакетов, связанных с аналитикой данных и биг дата. Anaconda бесплатна, но Continuum продаёт ряд запатентованных дополнений. Бесплатные лицензии для надстроек доступны для учёных и исследователей.

* Canopy

Canopy - ещё один научный дистрибутив на Python, созданный Enthought. Ограниченный вариант Canopy Express доступен бесплатно, полная версия платна. Бесплатные лицензии доступны для учёных.