



Системы компьютерной математики

(научное программирование)

Н.Ю. Золотых



Символьные вычисления vs численный анализ

ПО для символьных вычислений
(аналитических вычислений/компьютерной алгебры)

- Требуется точный ответ
- Умеет оперировать с выражениями в аналитическом виде
- Поддерживается арифметика произвольной точности

ПО для численного анализа
(численных методов)

- Ответ может быть приближенным
- Как правило, основной тип данных - числа с плавающей запятой и целые числа (и их массивы)
- Используется арифметика фиксированной точности

Пакеты для символьных вычислений (системы компьютерной алгебры)

Общечелевые:

- \$\$ Maple
- \$\$ Mathematica
- \$\$ Wolfram Alpha
- \$\$ muPAD (сейчас в составе MATLAB)
- GeoGebra (своя, част. GPL)
- SageMath (GNU GPL)
- Maxima (GNU GPL)
- Reduce (мод.BSD)
- Yacas (GNU GPL)
- FriCAS (мод.BSD)
- GiNaC (C++ библиотека) (GNU GPL)
- SymPy (Python библиотека) (мод.BSD)
- ...

Специализированные

- GAP (теория групп) (GNU GPL)
- Macaulay2 (алгебраическая геометрия) (GNU GPL)
- PARI/GP (теория чисел) (GNU GPL)
- SINGULAR (коммутативная алгебра и др.) (GNU GPL)
- Normaliz (полиэдры, решетки,...) (GNU GPL)
- ...

Намного более полный список и сравнение см.
https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_computer_algebra_systems



Enter what you want to calculate or know about



Extended Keyboard



Upload



Examples



Random

Compute expert-level answers using Wolfram's breakthrough algorithms, knowledgebase and AI technology

Mathematics ›



Step-by-Step Solutions



Elementary Math

x^2-1 Algebra

Science & Technology ›



Units & Measures



Physics



Chemistry

Society & Culture ›



People



Arts & Media



Dates & Times

Everyday Life ›



Personal Health



Personal Finance



Surprises

Пакеты численного анализа

Общечелевые:

- MATLAB \$\$
- Octave (GNU GPL)
- R (GNU GPL)
- Scilab (GNU GPL)
- Euler Math ToolBox (GNU GPL)
- Python (вместе с библиотеками NumPy, SciPy, Matplotlib и др.)

Намного более полный список и сравнение см.

https://en.wikipedia.org/wiki/Comparison_of_numerical-analysis_software

MATLAB R2020a - academic use

HOME PLOTS APPS EDITOR PUBLISH VIEW

New Open Save Find Files Compare Go To Comment % % % Breakpoints Run Run and Advance Run Section Advance Run and Time

FILE NAVIGATE EDIT BREAKPOINTS RUN

Search Documentation Sign In

D:\Zol\GoogleDrive\matlab\m\lsq\

Current Folder

- Name ^
- marks.dat
- marks.eps
- population.asv
- population.eps
- population.m
- population.m.main.mm.tex
- population.m.pre.tex
- population.m.pre.tex.tex
- shoes.m
- tmp.m
- tmp2.asv
- tmp2.m
- xgalton.m
- xlinsq.asv
- xlinsq.m
- xlsq.eps
- xmarks.m

shoes.m (Script)

Workspace

Name ^	Value
ans	2.0000

Editor - D:\Zol\GoogleDrive\matlab\m\lsq\sgalton.m

```

1 - load galton.dat -ascii
2
3 - x = galton(:, 1);
4 - y = galton(:, 2);
5
6 - xmin = 62;
7 - xmax = 76;
8 - xx = [xmin, xmax];
9 - f = polyfit(x, y, 1); %y = 24 + 0.65x = 68.2 + 0.65(x - 68.2)
10 - yy = polyval(f, xx);
11 - xmean = mean(x); % 68.3
12 - ymean = mean(y); % 68.1
13
14 - xplot = x + rand(size(x)) - 0.5;
15 - yplot = y + rand(size(y)) - 0.5;
16
17 - plot(xplot, yplot, 'om', xx, 'b', xx, yy, 'r', ...
18 - [xmean, xmean], xx, ':k', xx, [ymean, ymean], ':k')
19 - %legend('data', 'y = x', 'regression', 'mean', 2)
20 - xlabel('parents')
21 - ylabel('children')
22 - xlim(xx)
23 - ylim(xx)
24

```

Command Window

fx >>

3 usages of "A" found

UTF-8 script Ln 14 Col 1



Python (Питон, Пайтон) – высокоуровневый язык программирования общего назначения.
















Поддерживает несколько парадигм программирования (структурное, объектно-ориентированное, функциональное и др.)

Основные черты:

- Динамическая типизация (тип переменной определяется во время выполнения и может меняться в процессе работы программы)
- Автоматическое управление памятью
- Интроспекция (возможность получения информации об объекте)
- Обработка исключений
- Поддержка многопоточных вычислений
- Высокоуровневые структуры данных

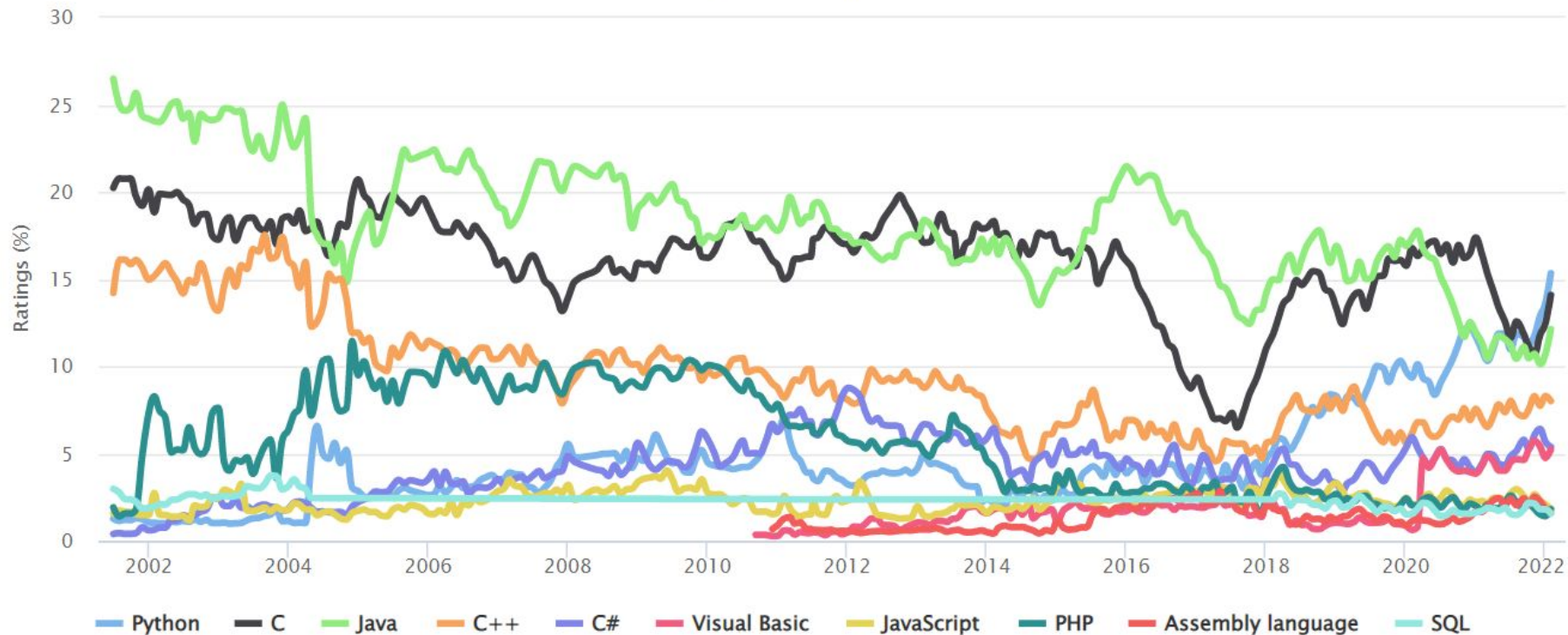
Код организуется в функции и классы, которые, в свою очередь, могут быть организованы в модули, а те - в пакеты.

TIOBE Index for February 2022

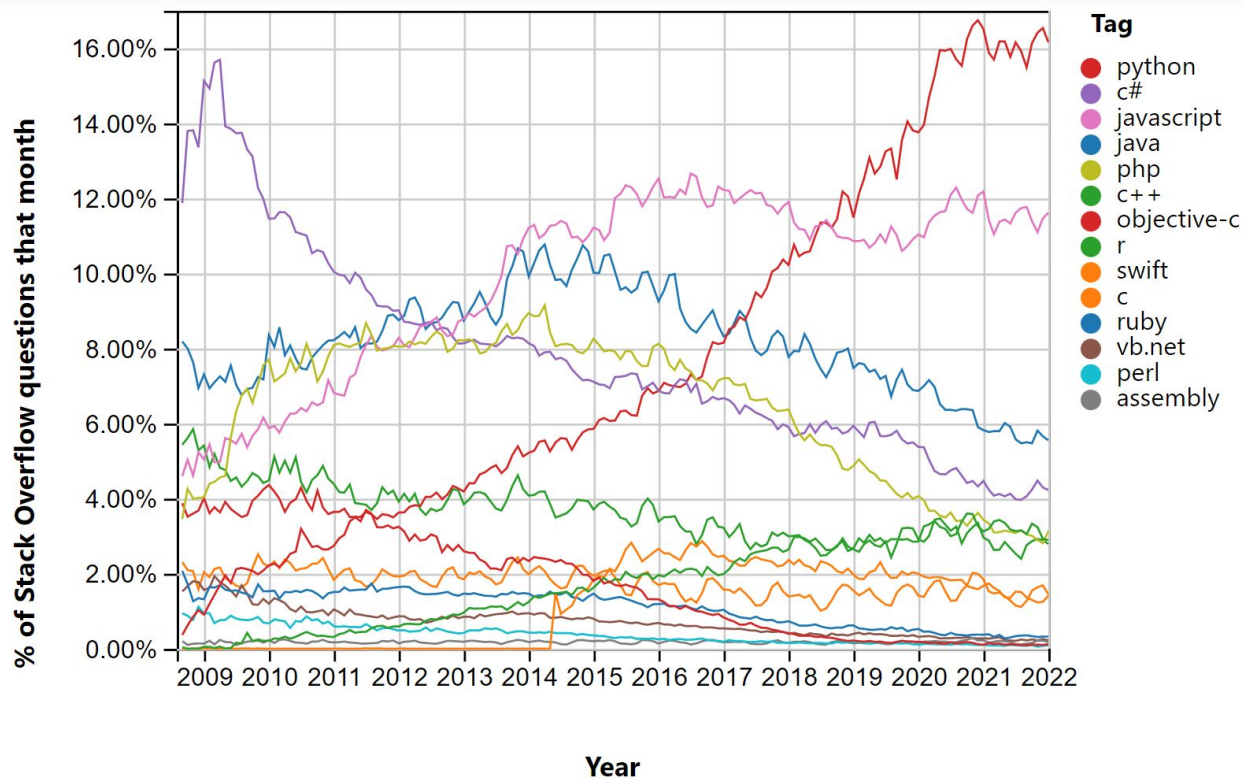
Feb 2022	Feb 2021	Change	Programming Language	Ratings	Change
1	3	▲	 Python	15.33%	+4.47%
2	1	▼	 C	14.08%	-2.26%
3	2	▼	 Java	12.13%	+0.84%
4	4		 C++	8.01%	+1.13%
5	5		 C#	5.37%	+0.93%
6	6		 Visual Basic	5.23%	+0.90%
7	7		 JavaScript	1.83%	-0.45%
8	8		 PHP	1.79%	+0.04%
9	10	▲	 Assembly language	1.60%	-0.06%
10	9	▼	 SQL	1.55%	-0.18%
11	13	▲	 Go	1.23%	-0.05%
12	15	▲	 Swift	1.18%	+0.04%
13	11	▼	 R	1.11%	-0.45%
14	16	▲	 MATLAB	1.03%	-0.03%
15	17	▲	 Delphi/Object Pascal	0.90%	-0.12%

TIOBE Programming Community Index

Source: www.tiobe.com



Stack overflow trends



Feb 2021	Feb 2020	Change	Programming Language	Ratings	Change
1	2	⬆	C	16.34%	-0.43%
2	1	⬇	Java	11.29%	-6.07%
3	3		Python	10.86%	+1.52%
4	4		C++	6.88%	+0.71%
5	5		C#	4.44%	-1.48%
6	6		Visual Basic	4.33%	-1.53%
7	7		JavaScript	2.27%	+0.21%
8	8		PHP	1.75%	-0.27%
9	9		SQL	1.72%	+0.20%
10	12	⬆	Assembly language	1.65%	+0.54%
11	13	⬆	R	1.56%	+0.55%

<https://www.tiobe.com/tiobe-index/>

Другие важные черты

- Многоплатформенный
- Свободно распространяемый, с открытым кодом
- Богатая стандартная библиотека (работа с операционной системой, сетевыми протоколами и форматами интернета, XML, регулярными выражениями, мультимедийными форматами, криптографическими протоколами, архивами, . . .)
- Огромное количество дополнительных библиотек (веб, базы данных, обработка изображений, обработка текста, численные методы, системные вызовы, графика, разработка игр, ...)
- Программный интерфейс для написания собственных модулей на C и C++
- Возможность встраивания интерпретатора python в приложения

Краткая история

Появился в 1990–1991 г.

Автор: *Гвидо ван Россум* (`_Guido van Rossum_`)

Последние релизы:

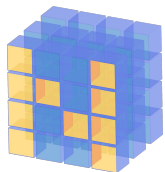
- python 3.x.x
- python 2.x.x

Ветки 2.x и 3.x не совместимы.



Python

- Numpy – векторы, матрица, линейная алгебра
- Scipy – другие численные методы
- Matplotlib – научная графика
- Pandas – манипуляция таблицами (dataframe) и временными рядами (series)
- Scikit-Learn – методы машинного обучения
- Seaborn – визуализация данных



Pandas



seaborn



- “The Most Popular Python Data Science Platform”
- <https://www.anaconda.com/download/>

Anaconda – это дистрибутив Питона, включающий в себя Jupiter Notebook, некоторое количество нужных библиотек, spyder и др.



Google Colaboratory

Возможность все это запустить удаленно

colab.research.google.com

Темы

1. Введение в системы компьютерной математики
2. Основы языка Питон
3. Научная графика
4. Ошибки в научных вычислениях
5. Системы линейных уравнений
6. Интерполяция
7. Аппроксимация
8. Численное интегрирование
9. Дифференциальные уравнения
10. Решение нелинейных уравнений
11. Одномерная минимизация
12. Многомерная оптимизация
13. Условная оптимизация
14. Символьные вычисления

Репозиторий

<https://github.com/NikolaiZolotikh/ScientificPython>

Зачет

- Решаете одну зачетную персональную задачу
- Решение оформляется в Jupyter Notebook
- Выкладываете на гит
- Дедлайн в мае (будет точно известен ближе к концу курса)
- Все замечания надо устранить
- Устная защита
- Если задача не сдана в срок - получаете одну дополнительную задачу
- В случае обнаружения плагиата - получаете 2 дополнительные задачи

Домашнее задание на следующую неделю

- Если вы работали на питоне:
 - Устанавливаете Jupyter Notebook и необходимые библиотеки (см. выше)
- Если вы новичок:
 - Устанавливаете Anaconda
 - Пробуете запускать Jupyter Notebook

или

 - Пробуете запускать Jupyter Notebook в Visual Studio Code