

Obliczenia Naukowe

Wykład 11: Pakiety do obliczeń:
naukowych i inżynierskich
Przegląd i porównanie

Bartek Wilczyński

30.5.2016

Plan na dziś

- Pakiety do obliczeń: przegląd zastosowań
- różnice w zapotrzebowaniu: naukowcy, inżynierowie, statystycy/medycy
- Matlab/octave/scipy – obliczenia numeryczne
- Mathematica/Maxima/Sympy – obliczenia symboliczne
- Sage i SageCloud – zintegrowany pakiet opensource
- Excel?

Typowi użytkownicy pakietów obliczeniowych

- Inżynierowie i projektanci (budownictwo, lotnictwo, motoryzacja, itp.)
- Naukowcy doświadczalni (fizycy, chemicy, materiałoznawcy, itp.)
- Statystycy (zastosowania w medycynie, ekonomii, biologii molekularnej, psychologii, socjologii, ubezpieczeniach, itp.)
- Matematycy (przede wszystkim matematyka stosowana)

Obliczenia naukowe

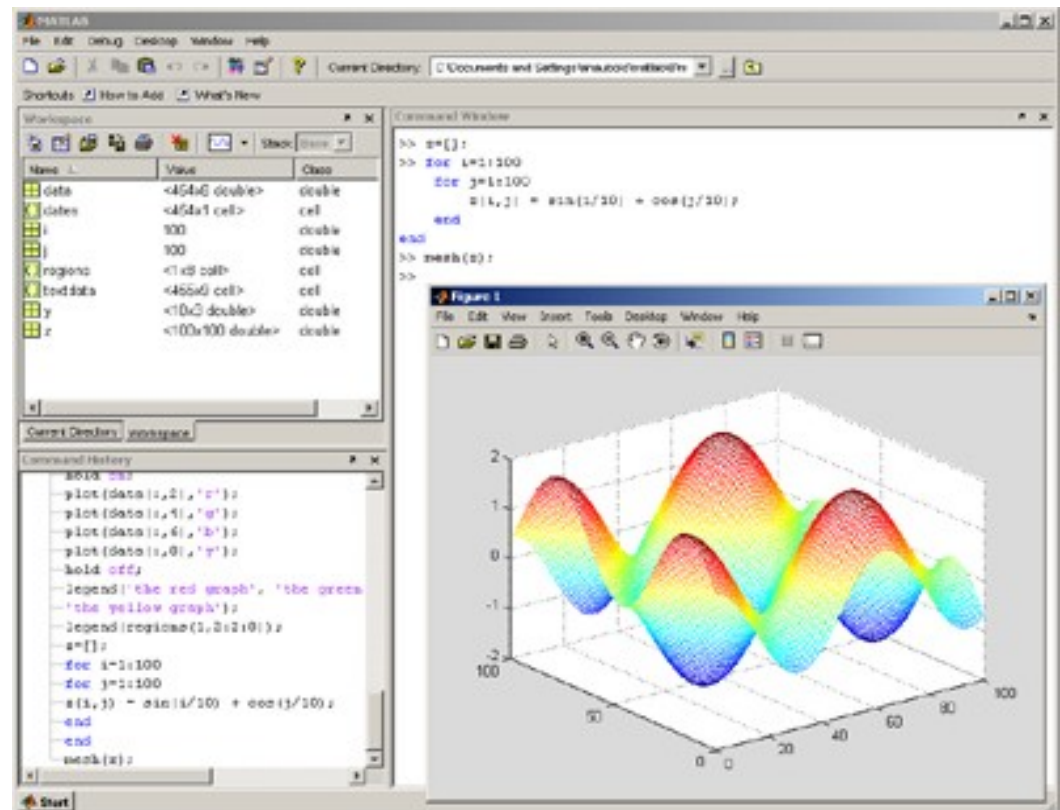
- Komputer jako “potężniejszy kalkulator”
- W zasadzie wszystko można zaprogramować samemu, ale każdemu mogą się przydać:
 - Interfejs użytkownika łatwiejszy niż typowego kompilatora
 - Możliwość zaawansowanej grafiki
 - Dobrze przetestowane standardowe procedury
 - Interfejsy do urządzeń
 - Wsparcie fachowców

Matlab i pakiety “inżynierskie”

- Rozwijany w latach 70'tych przez Cleve Moler'a jako narzędzie dla studentów informatyki, aby nie musieli używać zaawansowanych bibliotek fortranu
- Firma mathworks powstaje w 1984 i wydaje pierwszą wersję Matlab'a
- Najpopularniejszy wśród inżynierów, dobre całki numeryczne, rozwiązywanie równań i wykresy (również 3d)
- Bardzo popularny także do przetwarzania sygnałów i symulacji (simulink)
- Licencja komercyjna – niedrogi dla studentów, droższy dla uczelni, bardzo drogi dla przemysłu

Toolbox'y Matlab'a

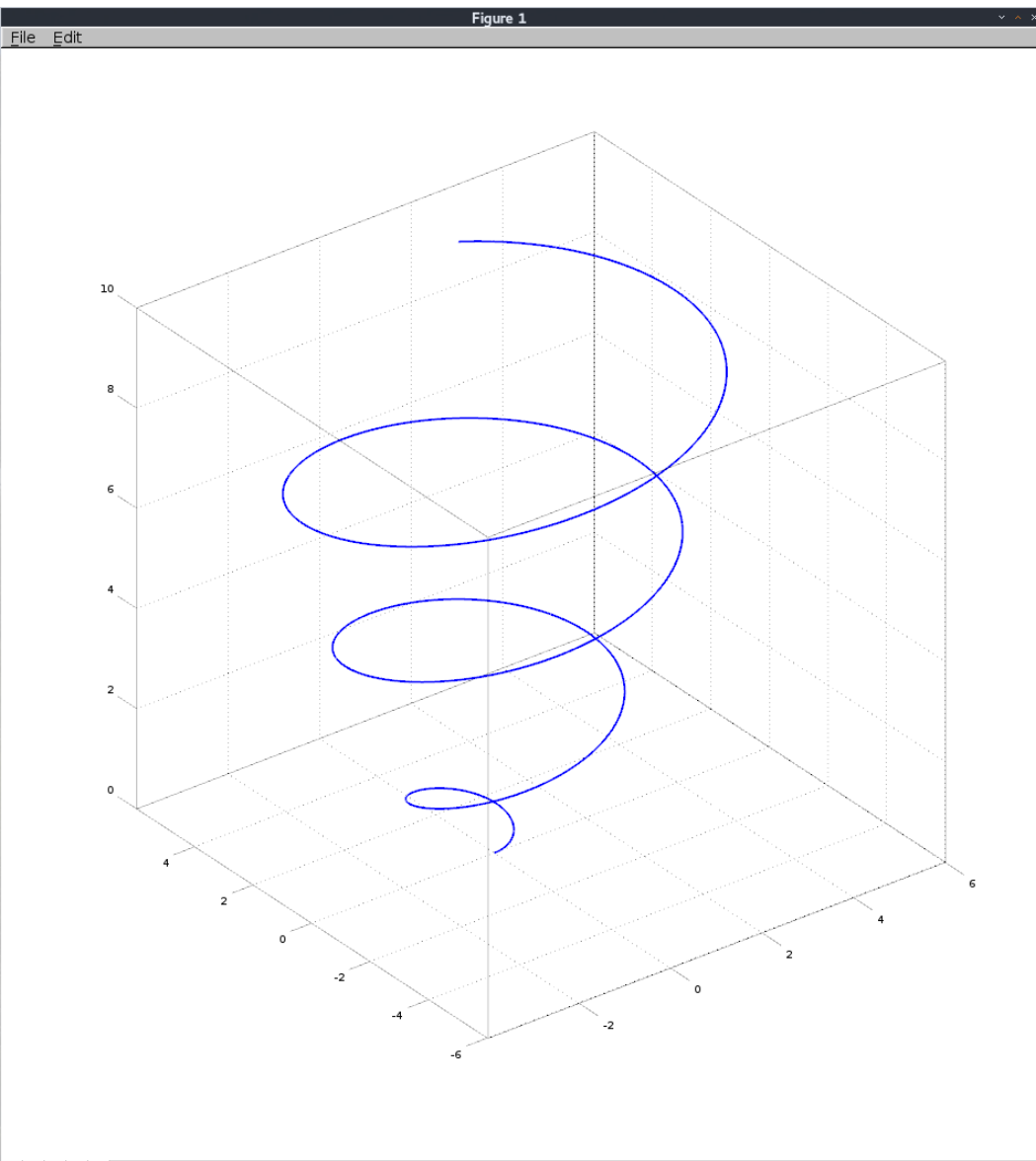
- Wiele dodatkowych (płatnych) bibliotek dla specjalistów
 - Symbolic math
 - Image processing
 - Financial toolbox
 - Bioinformatics
 - Optimization
 - SimBiology



Alternatywy openSource

- GNU Octave (rozpoczęty w 1988, wydania od 1992, rozwijany przez John'a W. Eatona, chemika z University of Wisconsin-Madison)
 - W zasadzie kompatybilny z Matlab'em
 - John W. Eaton Inc. - consulting
- Scipy stack – zestaw bibliotek python'a do obliczeń naukowych
 - Wiele bibliotek, rozwijanych przez niezależne grupy
 - System pakietów, edytor i dystrybucja organizowana przez firmę Enthought, również komercyjne dystrybucje i consulting
 - Wiele konferencji tematycznych dla naukowców i pracowników przemysłu - także źródło dochodu

Interfejs Octave



```
octave
-----
~ » octave
GNU Octave, version 3.8.1
Copyright (C) 2014 John W. Eaton and others.
This is free software; see the source code for copying conditions.
There is ABSOLUTELY NO WARRANTY; not even for MERCHANTABILITY or
FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE. For details, type 'warranty'.

Octave was configured for "x86_64-unknown-linux-gnu".

Additional information about Octave is available at http://www.octave.org.

Please contribute if you find this software useful.
For more information, visit http://www.octave.org/get-involved.html

Read http://www.octave.org/bugs.html to learn how to submit bug reports.
For information about changes from previous versions, type 'news'.

octave:1> t=[0:0.01:20];
octave:2> x=sqrt(t).*cos(t);
octave:3> y=sqrt(t).*sin(t);
octave:4> z=0.5*t;
octave:5> graph=plot3(x,y,z)
graph = -17.921
octave:6> set(graph(1), "linewidth", 2)
octave:7> □
```


Interfejs Enthought Canopy

The image displays the Canopy IDE interface, which is a Python development environment. The main window is titled "Editor - Canopy" and shows a code editor with Python code. The code includes comments and function calls, such as `num_vars = int` and `draw_circle_patch`. The interface is divided into several panels:

- File Browser:** Located at the top left, it shows a list of files and folders, with a filter set to "All Supported Files".
- Welcome to Canopy:** A central panel with the Canopy logo and a message: "Hi, welcome to Canopy! Login to your Enthought account or create one." Below this are three icons: "Editor", "Package Manager", and "Doc Browser".
- Recent files:** A list of recently opened files, including `application.py`, `application_launcher.py`, `util.py`, `prisma.py`, and `mac_metadata.py`.
- Documentation Browser:** A window on the right side showing the "DOCUMENTATION" page. It includes a search bar, navigation buttons, and a list of links for "Canopy User Guide" and "Online Help". The "Online Help" section lists various Python libraries and frameworks, such as Python Tutorial, Python Documentation, IPython, NumPy, SciPy, Traits, TraitsUI, Enaml, Envisage, Chaco, Hovast, and Matplotlib Gallery.
- 3D Visualization:** A window titled "Mayavi Scene 1" showing a 3D visualization of a complex, multi-colored, swirling structure, likely a surface plot or a 3D model.

The bottom of the interface shows a command prompt with the following text:

```
Type "?" for some information.  
In [1]: !run "/var/folders/tr/pfk3l1cgl4ndrbppzjwq_tpd4000gn/T/tmpff1uoh.py"  
In [2]: from mayavi import mlab  
In [3]: mlab.test_plot3d()  
Out[3]: <mayavi.modules.surface.Surface at 0x122be4400>  
In [4]:
```

Obliczenia symboliczne – Mathematica i podobne

- Opracowana w latach 1980'tych przez Stephen'a Wolframa
- Jeden z pierwszych w historii pakietów umożliwiających obliczenia symboliczne
- Bardzo popularna wśród studentów amerykańskich, którzy muszą “zaliczyć” rachunek różniczkowy
- Obecnie także w wersji online: Wolfram Alpha
- Konkurencyjne pakiety: Maple, Mathcad, Symbolic math toolbox w matlabie (dawny muPAD)

Mathematica - interfejs

The image shows a Mathematica notebook interface with several windows and panels.

Main Notebook Window:

- Code:**

```

aa = Table[A[[i, j]], {i, 1, 4}, {j, 1, 4}];
bb = Table[B[[i, j]], {i, 1, 4}, {j, 1, 4}];
ll = Table[L[[i]], {i, 1, 4}];
mm = Table[M[[i]], {i, 1, 4}];
ss = LinearSolve[aa, l];
(ss + mm)[[3]] / (aa + bb)[[3]]

```
- Output:**

```

{0.}
{0.}
{1.}
{0.}

```

0.4

■ p=2: Neumann-Randintegrale

Auf jedem Face kommen die grade. Daher: nur x = 1 wird bei

```

nE[1][y_, z_] = y * (1 - z);
nE[2][y_, z_] = z * (1 - y);
nE[3][y_, z_] = z * (1 - y);
nE[4][y_, z_] = y * (1 - z);
For[i = 1, i <= 4, i++,
  Print[
    Integrate[Integrate[nE[i][y, z] * f[1, y, z], {y, 0, 1}], {z, 0, 1}]]

```

0.0138889

0.0138889

0.0277778

0.0277778

```

nF[y_, z_] = y * (1 - y) * z * (1 - z);
Integrate[Integrate[nF[y, z] * f[1, y, z], {y, 0, 1}], {z, 0, 1}] // N

```

0.00694444
- Plot:** A 2D plot showing four Bessel functions: $J_0(x)$ (red), $J_1(x)$ (green), $J_2(x)$ (blue), and $J_9(x)$ (magenta). The x-axis ranges from 0 to 20, and the y-axis ranges from -0.4 to 1.0.

Help Browser Window:

- Content:**

BesselJ[n, z] gives the Bessel function of the first kind $J_n(z)$.

$J_n(z)$ satisfies the differential equation $z^2 y'' + z y' + (z^2 - n^2) y = 0$.

BesselJ[n, z] has a branch cut discontinuity in the complex z plane running from $-\infty$ to 0.

```

Plot[{BesselJ[0, x], BesselJ[1, x], BesselJ[2, x], BesselJ[9, x]},
  {x, 0, 20},
  PlotStyle -> {RGBColor[1, 0, 0], RGBColor[0, 1, 0], RGBColor[0, 0, 1],
    RGBColor[1, 0, 1]}]

```
- Navigation:** Go Back, Hide Categories
- Categories:** Plot3D, ListPlot3D (selected), ParametricPlot3D
- Text:**

of a surface representing an array of height values.

element of the surface shaded according to the specification in

cs.

e.

representing z values. There will be holes in the surface correspond-

ensions $(m-1) \times (n-1)$.

or RGBColor, or SurfaceColor objects.

[Math`ComputationalGeometry`](#).

Bottom Panel:

- Code:**

```

In[1]:= ListPlot3D[Table[Sin[x y] + Random[Real, {-0.15, 0.15}],
  {x, 0, 3 Pi / 2, Pi / 15}, {y, 0, 3 Pi / 2, Pi / 15}];

```
- Plot:** A 3D surface plot showing a wavy surface with a grid. The x and y axes range from 0 to $3\pi/2$ (approximately 4.71), and the z-axis ranges from -1 to 1.

Wolfram Alpha – mathematica online



integrate sin x dx from x=0 to pi



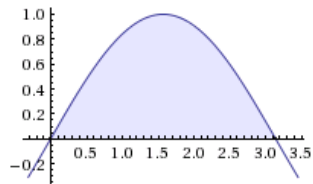
Examples Random

Definite integral:

Step-by-step solution

$$\int_0^{\pi} \sin(x) dx = 2$$

Visual representation of the integral:



Riemann sums:

More cases

$$\text{left sum} \quad \frac{\pi \cot(\frac{\pi}{2n})}{n} = 2 - \frac{\pi^2}{6n^2} + O\left(\left(\frac{1}{n}\right)^4\right)$$

(assuming subintervals of equal length)

Enable interactivity

cot(x) is the cotangent function

Indefinite integral:

Step-by-step solution

$$\int \sin(x) dx = -\cos(x) + \text{constant}$$

Download page

POWERED BY THE WOLFRAM LANGUAGE

Related Queries:

- integrate y(x) - 3 (integrate y(z) sin(x+z) from z = 0...
- area between sinx and cosx from x = 0 t...
- integrate using midpoint method sin(x) fr...
- area under y = sin(x) from x = 0 to pi
- integrate 1/sin(x) dx

- Interfejs online umożliwiający korzystanie z wielu narzędzi do obliczeń symbolicznych
- Duża część funkcjonalności darmowa, ale wiele funkcji (np. rozpisywanie rozwiązania na kroki) - płatna

Obliczenia numeryczne a symboliczne

- W obliczeniach symbolicznych próbujemy obejść problem numerycznych zaokrągleń i przybliżeń poprzez opis równań algebraicznych explicite
- Tego typu pakiety pozwalają na dokładne odwzorowanie równań, jednak cierpią z powodu heurystycznych metod rozwiązania
- Proste operacje w takich pakietach są prostsze niż “na kartce” ale trudne często mogą nastęrczać więcej problemów niż korzyści
- Na pewno są skuteczne do sprawdzania, czy nie pomyliliśmy się w obliczeniach

Typowe funkcje pakietów symbolicznych

- Przekształcanie, upraszczanie wzorów
- Rozwiązywanie równań i układów równań algebraicznych
- Znajdowanie granic wyrażeń i ciągów liczbowych
- Całkowanie i różniczkowanie symboliczne
- Wykresy
- Ładne formatowanie wzorów matematycznych (często przy użyciu LaTeX'a)

Maxima - Obliczenia symboliczne Open Source

- Maxima (1992-), a wcześniej Macsymba (1968-1982)
- Wydana w 1998 na licencji GPL
- Napisana w języku lisp
- Wiele konkurencyjnych interfejsów (WXMaxima, Gmaxima itp)
- Skupiona na obliczeniach symbolicznych

Projekt SymPy

- Projekt narzędzi do obliczeń symbolicznych dla języka python
- Powstaje od ok. 2005 roku, obecnie osiągnął wersję 1.0
- Napisany w pythonie, kładzie nacisk na czytelność kodu i rozszerzalność, niekoniecznie na szybkość i pełność systemu
- Zawiera podstawowe funkcjonalności (zmienne symboliczne, granice, równania, różniczkowanie, całkowanie symboliczne)
- Dobrze integruje się z innymi pakietami w pythonie

SAGE notebook

- Stosunkowo nowy projekt
- Połączenie wielu środowisk obliczeniowych
 - Python (Numpy, Scipy, Sympy, matplotlib, Networkx)
 - Maxima
 - R
 - GAP, FLINT, GD, JMOL, PALP, Singular
- Środowisko w przeglądarce, sesja na serwerze lub “w chmurze”

Interfejs SAGE

Use Sage to Solve Equations

last edited on April 11, 2011 05:45 PM by admin

[Save](#) [Save & quit](#) [Discard & quit](#)

File... Action... Data... Typeset

 [Print](#) [Worksheet](#) [Edit](#) [Text](#) [Undo](#) [Share](#) [Publish](#)

```
var('a b c d e f x y')
```

```
(a, b, c, d, e, f, x, y)
```

```
show(solve(a*x^2 + b*x + c == 0, x)[0])
```

$$x = -\frac{b + \sqrt{-4ac + b^2}}{2a}$$

```
show(solve(x^3 + a*x + b == 0, x)[0])
```

$$x = \frac{(-i\sqrt{3} + 1)a}{6\left(\frac{1}{18}\sqrt{4a^3 + 27b^2}\sqrt{3} - \frac{1}{2}b\right)^{\frac{1}{3}}} - \frac{1}{2}(i\sqrt{3} + 1)\left(\frac{1}{18}\sqrt{4a^3 + 27b^2}\sqrt{3} - \frac{1}{2}b\right)^{\frac{1}{3}}$$

```
solve([a*x + b*y == c, d*x + e*y == f], x, y)
```

```
[[x == -(b*f - c*e)/(a*e - b*d), y == (a*f - c*d)/(a*e - b*d)]]
```

[evaluate](#)

aaa - SageMathCloud - Mozilla Firefox

aaa - SageMathCloud x

https://cloud.sagemath.com/projects/bc74: Search

Projects aaa Bartek Wilczynski About 133ms

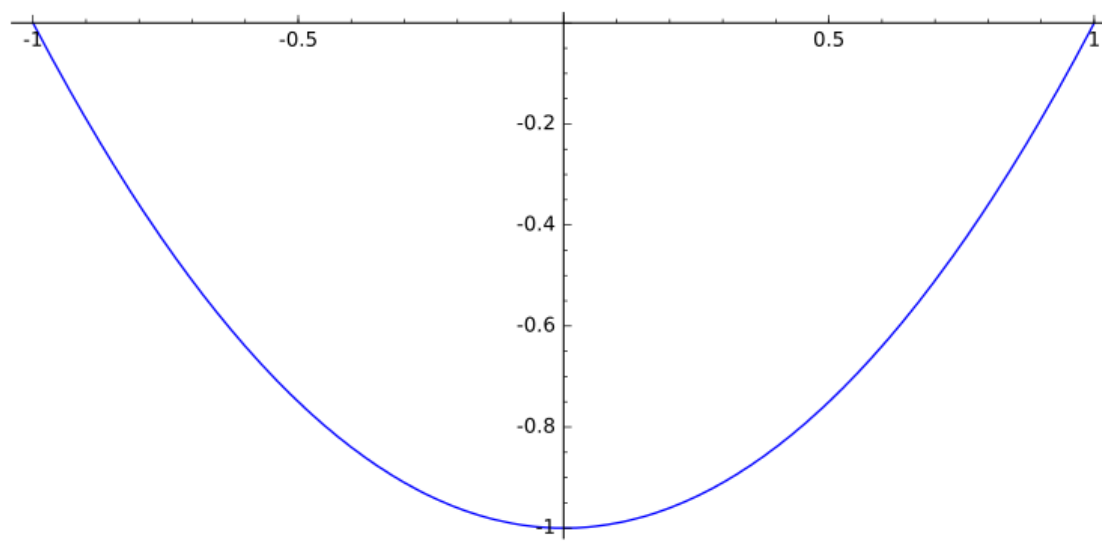
Files New Log Find Settings 2016-05-30-002158.sagews

Modes Help # Data Control Program %sage

x Plots Calculus Linear Graphs Number Theory Rings

```
1
2
3 integrate(1 + x + x^2, x)
4 1/3*x^3 + 1/2*x^2 + x
5
6
7 show(integrate(1 + x + x^2, x))
8 %var x, theta
9
10
11 solve(x**2-1,x)
12
13 [x == -1, x == 1]
14
15
16 plot(x**2-1)
17
```

$$\frac{1}{3}x^3 + \frac{1}{2}x^2 + x$$



18
19

Excel?

- Najpopularniejszy pakiet do obliczeń
- Bardzo prosty interfejs
- Często stosowany również w bio-informatyce
- Ma spore ograniczenia (np. Maksymalna liczba linii w arkuszu), które utrudniają rozwój projektów prowadzonych w arkuszu
- Brak możliwości efektywnego testowania,
- Brak debuggerów
- Ma wiele funkcji, które warto znać, zwłaszcza, że często dane do obróbki dostajemy właśnie w Excel'u