

SciPy

SciPy – пакет прикладных математических процедур, основанный на расширении NumPy Python. Предназначен для обработки данных. Функционал пакета позволяет проводить действия по обработке данных, аналогичные таким пакетам, как MATLAB, IDL, Octave, R-Lab, SciLab.

В пакет включена реализация таких процедур как: условная и безусловная минимизация скалярных функций нескольких переменных (`minim`) с помощью различных алгоритмов (симплекс Нелдера-Мида, BFGS, сопряженных градиентов Ньютона, COBYLA и SLSQP); глобальной оптимизации (например: `basinhopping`, `diff_evolution`); минимизация остатков МНК (`least_squares`) и алгоритмы подгонки кривых нелинейным МНК (`curve_fit`); минимизации скалярной функций одной переменной (`minim_scalar`) и поиска корней (`root_scalar`); многомерные решатели системы уравнений (`root`) с использованием различных алгоритмов (гибридный Пауэлла, Левенберг-Марквардт или крупномасштабные методы, такие как Ньютона-Крылова).

Примеры использования:

```
-sh-4.2$ python3
>>> import numpy as np
>>>
>>> def rosen(x):
...     """The Rosenbrock function"""
...     return np.sum(100.0*(x[1:]-x[:-1]**2.0)**2.0 + (1-x[:-1])**2.0, axis=0)
...
>>> from scipy.optimize import minimize
res = minimize(rosen, x0, method='nelder-mead',
               options={'xtol': 1e-8, 'disp': True})
print(res.x)>>> x0 = np.array([1.3, 0.7, 0.8, 1.9, 1.2])
>>> res = minimize(rosen, x0, method='nelder-mead',
...               options={'xtol': 1e-8, 'disp': True})
Optimization terminated successfully.
    Current function value: 0.000000
    Iterations: 339
    Function evaluations: 571
>>> print(res.x)
[ 1.  1.  1.  1.  1.]
>>>
>>> x0 = np.array([1.3, 0.7, 0.8, 1.9, 1.2])
>>> res = minimize(rosen, x0, method='powell',
...               options={'xtol': 1e-8, 'disp': True})
print(res.x)
Optimization terminated successfully.
    Current function value: 0.000000
    Iterations: 19
    Function evaluations: 1622
>>> print(res.x)
[ 1.  1.  1.  1.  1.]
```

Книги:

- Nunes-Iglesias J., van der Walt S., Dashnow H. *Elegant SciPy: The Art of Scientific Python*. // O'Reilly, 2017.
- Johansson R. *Numerical Python: Scientific Computing and Data Science Applications with NumPy, SciPy and Matplotlib*. // Apress, 2018.
- Rojas G. S. J., Christensen E. A., Blanco-Silva F. J. *Learning SciPy for Numerical and Scientific Computing*. // Packt Publishing, 2015.
- Martins L. F., Ramos R. O., Ayyadevara V. K. *SciPy Recipes: A cookbook with over 110 proven recipes for performing mathematical and scientific computations*. // Packt Publishing, 2017.
- Blanco-Silva F. J. *Mastering SciPy*. // Packs Publishing, 2015.

Сетевые ресурсы:

- *SciPy*. <https://www.scipy.org>
- *SciPy Wiki*. <https://en.wikipedia.org/wiki/SciPy>

Консультация по вопросам использования:

vtasks@jssc.ru