

~~REVEAL

transition=convex&controls=1&show_progress_bar=1&build_all_lists=1&open_in_new_window=1~~

Programmer en Python

Généralités

- Qu'est-ce qu'un langage de programmation ?
- Compilation ou interprétation, ou... ?

Rôle des langages de programmation

- Décrire des instructions dans un langage compréhensible par un être humain, mais transformable en d'autres instructions compréhensibles par l'ordinateur (langage machine)
- Automatiser le traitement de l'information;
- Effectuer des calculs, des simulations;
- Traiter l'information en temps réel;
- Fournir un interface à l'utilisateur;

Évolution des langages

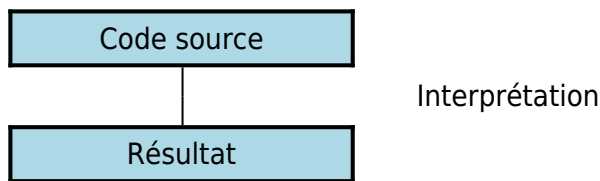
- L'assembleur (à partir des années 50's)
 - Mnémoniques équivalentes aux instructions machines, donc fonction du processeur utilisé
 - Instructions de bas niveaux (appel d'une variable en mémoire, opération arithmétique entre 2 opérandes,...)
- Fortran, Cobol, Pascal, C, Basic,... (années 60s et 70s)
 - Indépendants de l'ordinateur utilisé
 - Proche d'un langage courant, description procédurale
- Les langages à objets (années 80s et 90s)
 - Briques logicielles indépendantes et autonomes
 - Réutilisations aisées, sans devoir les approfondir
 - Java, C++, Python, perl, Ruby. . .sont les plus connus
- Des langages spécialisés (PHP, SQL,...)

Compilation et compilateur



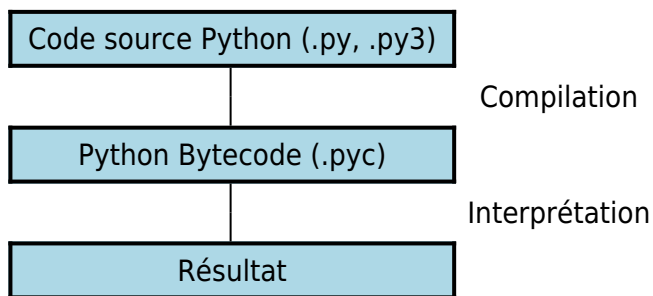
- Etape de traduction du code source en langage machine
- Liaison éventuelle du code avec des bibliothèques existantes de code compilé
- Exécution ultérieure du code machine (sur un ordinateur ne disposant pas du compilateur par exemple)
- Le compilateur peut optimiser le code (passes multiples)

Interprétation et interpréteur



- Traduction dynamique du code source et exécution immédiate en répétant sans cesse :
 - lecture et analyse d'une instruction
 - exécution de l'instruction (si elle est valide)
- Le code est souvent moins optimisé, donc plus lent
- Il est nécessaire de disposer de l'interpréteur sur l'ordinateur
- On peut créer dynamiquement du code à interpréter pendant l'exécution
- On peut éviter la phase lente de compilation

Python / Langages à Bytecodes



- Pour Python (et d'autres langages), c'est un peu plus compliqué...
- Le programme est compilé vers un pseudo-code indépendant de l'ordinateur
- Le Bytecode est interprété par la suite
- Avantages :
 - Facilité de développement (cycle écriture-exécution rapide, "briques" logicielles)
 - Portabilité (même programme pour des ordinateurs et OS différents)

Premier aperçu de Python

- Avantages généraux
- Avantages techniques
- Avantages pour l'apprentissage
- Avantages pour le scientifique, le chimiste
- Les premiers pas avec Python

Avantages généraux

- langage de haut niveau (orienté objet)
- permet d'écrire des petits programmes ou suites d'instructions (scripts)
- licence libre (et gratuit)
- utilisable pour la programmation occasionnelle par des non-informaticiens
- nombreuses bibliothèques existantes (modules)
- moderne et efficace pour les informaticiens
- excellente lisibilité intrinsèque du code

- bien documenté (aide et manuels en ligne, livres, forums, exemples...)

Avantages techniques

- mode interactif
- non déclaratif
- typage de haut niveau, dynamique et fort
- ramasse-miette intégré
- interfaçable avec d'autres langages (à partir de et vers)
- version de base "piles comprises"
 - module mathématique
 - accès aux fichiers et répertoires (+ formats de données standards)
 - compression, archivage, gestion de bases de données
 - fonctions génériques du système d'exploitation
 - réseau et communication, protocoles internet (+email, html)
 - multimedia (son, image)
 - interface graphique (Tkinter)
 - outils de documentation et gestion d'erreurs (débogage)
 - modules spécifiques Windows, Mac, Linux
 - ...

Avantages pour l'apprentissage

- Installation aisée
 - de la version de base
 - de "distributions" étendues (avec des modules complémentaires)
- éditeur inclus (Idle) ou autre (SciTe, Pycharm, Eric,...)
- mode interactif pour les premiers essais
- principes de base identiques à de nombreux langages
- on n'est pas obligé d'utiliser toute la puissance du langage
- cycle d'écriture/essais très rapide

Avantages pour le scientifique, le chimiste

- possible de débiter en quelques jours
- alternative à des logiciels spécialisés (matlab, scilab,...)
- bon pour les calculs scientifiques, le graphisme, les simulations
- modules spécialisés
 - représentations graphiques 2D (Matplotlib)
 - représentations graphiques 3D (Mayavi, Vpython, VTK,)
 - calculs scientifiques (numpy, scipy, . . .)
 - traitement d'images (PIL)
 - chimie (pymol, mmtk, chimera,...)
 - biochimie (biopython)

Les premiers pas avec Python 3

- Sans installation : <https://repl.it/languages/python3>
- [Python Setup and usage](#)



Idle3 : interface d'exécution et d'édition

Idle3 : interpréteur Python en console, avec exécution directe

```
>>> (8.314*300/24E-3)/101325  
1.0256600049346163  
>>>
```

- Commandes : copyrigh, credits, license(), quit, help, help(),...

Notion de variable

On peut attribuer des noms de variables, pas seulement pour des nombres...

```
>>> R=8.314  
>>> L=0.001  
>>> V=24*L  
>>> n=1  
>>> zero=273.16  
>>> T=20+zero  
>>> P=n*R*T/V  
>>> atm=101325  
>>> print(P,P/atm)  
101555.510000000001 1.0022749568221072  
>>>
```

==== Un peu de calcul ====

On peut effectuer quelques calculs sur des entiers :

```
>>> 1236*5698  
7042728  
>>> 12569+6233  
18802  
>>> 12+69+532+65-9  
669  
>>> 12356*458955  
5670847980L  
>>> 123*456  
56088  
>>> 123**456 ?? A ESSAYER ??
```

- On peut travailler avec des très très très grands nombres...

Division et division entière

```
>>> 7/3  
2.3333333333333335  
>>> 7//3  
2
```

```
>>>
```

- En python, chaque “objet” possède son type :
 - `type(7/3)`
 - `type(73)`

From:

<https://dvillers.umons.ac.be/wiki/> - **Didier Villers, UMONS - wiki**

Permanent link:

https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:progappchim:presentation_principes?rev=1485795467

Last update: **2017/01/30 17:57**

