

~~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

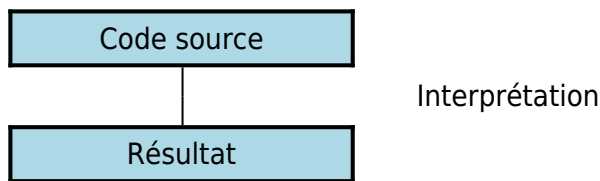
- L'assembleur (à partir des années 50's)
  - Mnémoniques équivalentes aux instructions machines, donc fonction du processeur utilisé
  - Instructions de bas niveaux (appel d'une variable en mémoire, opération arithmétique entre 2 opérandes,...)
- Fortran, Cobol, Pascal, C, Basic,... (années 60s et 70s)
  - 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



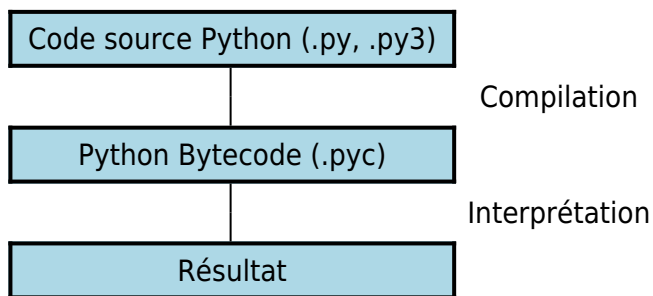
- Etape de traduction du code source en langage machine
- Liaison éventuelle du code avec des bibliothèques existantes de code compilé
- Exécution ultérieure du code machine (sur un ordinateur ne disposant pas du compilateur par exemple)
- Le compilateur peut optimiser le code (passes multiples)

## 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

```
>>> a =7/3
2.3333333333333335
>>> b = 7//3
2
```

```
>>>
```

- En python, chaque “objet” possède son type et un identifiant :
  - `type(a)`
  - `id(a)`
  - `type(b)`
  - `id(b)`


## De nombreuses autres possibilités avec les nombres...

```
>>> Navogadro=6.02214199E23
>>> kboltzmann=1.3806505E-23
>>> print Navogadro*kboltzmann
8.31447334956
>>> 2**0.5
1.4142135623730951
>>> (5+2j)*(3-7j)
(29-29j)
>>> (1.+1./1E6)**1E6
2.7182804690957272
>>>
```


- Les expressions numériques s'évaluent en respectant les règles habituelles de priorités : parenthèses, exponentiation, multiplication, division, addition, soustraction (“PEMDAS”)
- On peut aussi travailler facilement avec des tableaux contenant des milliers de données !

## Un peu de logique : le type booléen !

```
>>> 12 < 16
True
>>> 12 < 11
False
>>> 12 == 12, 12 == 13
(True, False)
>>> 12 < 16 or 12 < 11
True
>>> 12 < 16 and 12 < 11
False
>>> type(12 < 11)
<class 'bool'>
```

- Les tests, comparaisons et leurs combinaisons logiques sont utiles pour réaliser des opérations de manière conditionnelle. Pour la logique booléenne : cf.  [Algèbre de Boole](#)

## Les chaînes de caractères

- appelées aussi “string”
- mots, phrases, ou texte long
- délimitées par ' (apostrophe) ou " (guillemet)
- la casse est significative
- caractères accentués, spéciaux et chiffres permis (caractères  [Unicode](#))
- CONSEIL : éviter les accents dans les noms des variables

- peuvent comprendre des retours à la ligne (Enter) si délimitées par ""

## Les chaînes de caractères

```
>>> a='bonjour'
>>> b="bonjour"
>>> c='Bonjour'
>>> print a==b,a==c
True False
>>> d="pâté123#"
>>> print d
pâté123#
>>> é=d
>>> long=""un
deux
...
dix""
>>> print(long)
un
deux
...
dix
>>>
```

## Opérations sur les chaînes

```
>>> s='Mons, le 15 septembre 2009'
>>> s[8:]
' 15 septembre 2009'
>>> s.find('le')
6
>>> s.split()
['Mons,', 'le', '15', 'septembre', '2009']
>>> s.upper()
'MONS, LE 15 SEPTEMBRE 2009'
>>> s.replace(' ', '_')
'Mons,_le_15_septembre_2009'
>>>
```

## Créer son premier programme

- Utiliser Idle3 comme éditeur (ou tout autre éditeur)
- Sauvegarder
- Exécuter
- Fermer
- Rouvrir Idle3 et le programme
- Exécuter

```
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-
```

```
""" Programme élémentaire en Python
pour afficher une chaîne de caractères
"""
chaine = 'Message : Hello World !'
print(chaine)
```

## Un peu plus loin dans Python

### Types de haut niveau

Au delà des types de base (integer, float, string,...) on peut avoir des types sophistiqués (containers)

- listes
- dictionnaires
- tuples
- sets
- ...

### Listes

- collections/séquences ordonnées d'objets (types de base ou autres), introduits entre crochets et séparés par des virgules
- peuvent être homogènes ou hétérogènes (types identiques ou mélangés)
- on peut les compléter ou enlever des éléments dynamiquement
- indicées (numérotées) à partir de 0
- utilisables comme tableaux multidimensionnels
- nombreuses manipulations possibles (opérations, méthodes) : accéder, concaténer, trier, compléter, rechercher, réduire,...

### Listes

```
>>> a1 = [31, 16, 'mot', 'rouge', 1+3j, [2, 'bleu', 3.14]]
>>> a1
[31, 16, 'mot', 'rouge', (1+3j), [2, 'bleu', 3.14]]
>>> a2 = [121, 'vert', 'tomate']
>>> a3=a1+a2
>>> a3
[31, 16, 'mot', 'rouge', (1+3j), [2, 'bleu', 3.14], 121, 'vert', 'tomate']
>>> len(a3)
9
>>> a3[4]
(1+3j)
>>> a3[5]
[2, 'bleu', 3.14]
>>> a3[5][1]
'bleu'
>>> a3[2:6]
['mot', 'rouge', (1+3j), [2, 'bleu', 3.14]]
```

## Listes

```
>>> a3[-1]
'tomate'
>>> a3.pop()
'tomate'
>>> a3
[31, 16, 'mot', 'rouge', (1+3j), [2, 'bleu', 3.14], 121, 'vert']
>>> a3.pop()
'vert'
>>> a3.pop()
121
>>> a4=a3.pop()
>>> a4
[2, 'bleu', 3.14]
>>> a3.append(19.3)
>>> a3
[31, 16, 'mot', 'rouge', (1+3j), 19.3]
```

## Dictionnaires

- collections/ensembles non-ordonnées de paires de clés et valeurs
- Chaque clé doit être unique (n'apparaître qu'une fois) et identifie la valeur correspondante (les clés sont souvent des nombres ou des chaînes)
- Les valeurs peuvent être un objet de n'importe quel type (de base ou autres)
- Clés et valeurs sont séparées par le caractère ":"
- Les paires clés :valeurs sont séparées par des virgules et le tout encadré par une paire d'accolades {} forme le dictionnaire.

## Dictionnaires

```
>>> d = {'e1': 8, 'e2': 9, 'e4': 11, 'e3': 3, 'e5' : 1}
>>> d.keys()
dict_keys(['e5', 'e3', 'e1', 'e4', 'e2'])
>>> d
{'e5': 1, 'e3': 3, 'e1': 8, 'e4': 11, 'e2': 9}
>>> d['e4']
11
>>> 'e7' in d
False
>>> import operator
>>> print(sorted(d.items(), key=operator.itemgetter(1)))
[('e5', 1), ('e3', 3), ('e1', 8), ('e2', 9), ('e4', 11)]
>>>
```



From:

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

Permanent link:

[https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:progappchim:presentation\\_principes?rev=1486455540](https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:progappchim:presentation_principes?rev=1486455540)

Last update: **2017/02/07 09:19**

