~~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… ?

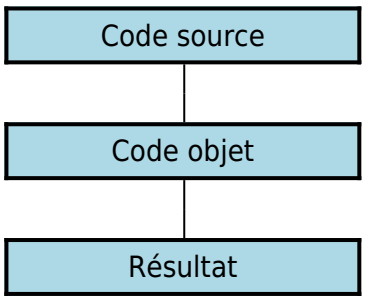
Rôle des langages de programmation

- 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

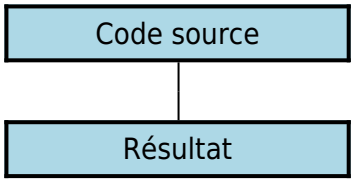
- L'assembleur (à partir des années 50's)
  - Mnémoniques équivalentes aux instructions machines, donc fonction du processeur utilisé
  - Instructions de bas niveaux (appel d'une variable en mémoire, opération arithmétique entre 2 opérandes,…)
- Fortran, Cobol, Pascal, C, Basic,… (années 60s et 70s)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

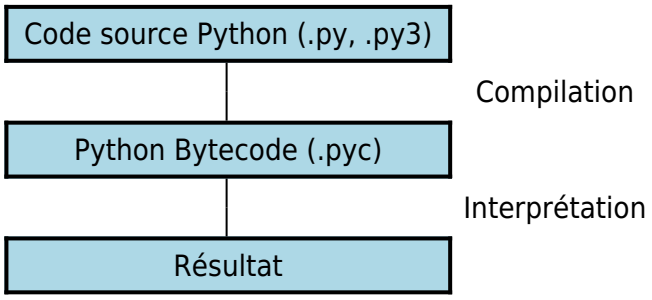
Interprétation et interpréteur



Interprétation

- 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 librairies 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 débuter 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

Ídle3 : interface d'exécution et d'édition

Idle3 : interpréteur Python en console, avec exécution directe

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

- Commandes : copyrigth, 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)
101555.51000000001 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
5670847980
>>> 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 régles 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 (bis)

```
>>> 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 (ter)

```
>>> 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 (bis)

```
>>> 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)]
>>>
```

Tuples

- Les tuples sont comme les listes, MAIS :
- entourés de parenthèses au lieu de crochets
- les éléments sont non-modifiables après la création

- pas de méthodes sur les tuples (rechercher, enlever un élément,...
- les tuples sont plus rapides d'accès que les listes
- ils peuvent être utilisés comme clés de dictionnaires
- il est possible de convertir un tuple en liste et vice-versa

Ensemble (set)

- collection non ordonnée d'éléments non répétés (uniques)
- L'utilisation des ensembles se fait par analogie avec les propriétés et opérations de la théorie mathématique des ensembles : appartenance, cardinalité (nombre d'éléments), union, intersection, différence, ...

Structure conditionnelle

Instruction d'exécution conditionnelle if...elif...else (si...sinon-si...autrement)

- Commence par **if expression** :
- Si l'expression est vraie, le bloc d'instructions qui suit est exécuté
- Si c'est faux, **elif expression** : permet d'enchaîner une seconde condition
- Si aucune condition n'est vérifiée, **else** : permet de déterminer les instructions à effectuer

Structure conditionnelle (exemple)

```
a = int(input('Donnez une note ? '))
if a >= 18:
    print("Excellent")
elif a >= 16:
    print("Très bien")
elif a >= 14:
    print("Bien")
elif a >= 12:
    print("Satisfaisant")
elif a >= 10:
    print("Réussi")
else:
    print("À représenter")
```

Structures de répétition while et for

While

- Commence par **while expression :**
- Si l'expression est vraie, le bloc d'instructions qui suit est exécuté
- L'expression est à nouveau évaluée
- Lorsque l'expression est (devient) fausse, le bloc n'est plus exécuté
- **break** permet de quitter prématurément la structure de répétition

for

- Commence par for element in sequence :
- Le bloc d'instructions qui suit est exécuté autant de fois qu'il y a d'éléments dans la séquence
- Else : permet d'exécuter un autre bloc après avoir considéré tous les éléments

- **break** permet de quitter prématurément la structure de répétition

Exemples while et for

```
print('Structure while !')
c=0
while c< 4:
    print(c)
    c=c+1
print('valeur finale = ',c)

print('Structure for')
a=range(11)
print(a)
for n in a:
    print(n*7)
```

Indentations des structures

L'indentation est intégrée à Python

- Les retraits permettent de reconnaître et exécuter des structures dans des structures
- Efficace, léger et très favorable à une écriture compacte et lisible des programmes
- Tabulations (en fait remplacées par 4 espaces !)
- Importance de la configuration correcte de l'éditeur (utilisation d'espaces)
- Si l'indentation n'est pas respectée précisément : erreur

Exemples d'indentation

```
print('Table de multiplication')
a=range(11)
for i in a:
    for j in a:
        print(i*j,)
    print(' sont multiples de ',i)
```

Fonctions en Python

- Permettent d'étendre le langage
- Résolvent un problème délimité
- Font appel elles-mêmes à d'autres fonctions
- Dépendent de variables (arguments, paramètres)
- Appelables autant de fois que souhaité, avec des arguments quelconques
- Renvoient (ou non) un résultat utilisable dans une expression
- Utilisent des noms de variables à portée locale
- Définies par le programmeur, ou existantes dans des "librairies modules" supplémentaires
- Spécifiées ou définies avant l'utilisation

Exemple de fonction

```
def f1(x):
    return x**2.

def f3(w):
    print("a ",a)
    return a * w**3.

def f2(x):
    a = 1.111111
    print("a ",a)
    return x**1.5 *f3(x)

a = 2.
u = 9.
print("f1 ",f1(u))
print("f2 ",f2(u))
print("f3 ",f3(u))
```

Exemple de fonction (2)

```
def fractions(nummol):
    sum=0.
    for num in nummol:
        sum+=num
    fract=[]
    for num in nummol:
        fract.append(num/sum)
    return fract

li=input("Donnez les nombres de moles des constituants (séparés par des
virgules)")
print(li,type(li))
n = [float(c) for c in li.split(',')]
print(n,type(n))
print(fractions(n))
```

Utilisation de librairies de fonctions standard

```
>>> import math
>>> math.pi
3.141592653589793
>>> math.cos(0)
1.0
>>> math.__dict__
{'tanh': <built-in function tanh>, 'asin': <built-in function asin>, ...
...
>>> math.__doc__
'This module is always available.  It provides access to the\nmathematical
functions defined by the C standard.'
```

```
>>> math.__name__
'math'
```

On peut modifier les noms des fonctions et la façon de les stipuler (espaces de noms) par la directive import

Modules, objets, classes, librairies

Python est un langage très moderne → structures très avancées

- Classes (programmation objet), regroupant variables, données et fonctions
- Module : ensemble de code repris dans un seul fichier
- Paquet ou Librairie : ensemble de modules avec une arborescence en répertoires

La programmation avancée en Python comprend aussi :

- la gestion des erreurs
- des procédures de tests
- la génération de documentation sous différentes formes
- ...

Notion d'algorithme

Algorithme : description des opérations à effectuer pour résoudre un problème

- Indépendant des ordinateurs
- Logique et systématique
- Langage courant structuré
- Transposable pour différents langages de programmation
- Détermine le temps d'exécution et la mémoire nécessaire en terme de proportionnalité à la taille du problème

Exemple : la multiplication matricielle nécessite de l'ordre de N^3 opérations (si N est la taille des matrices)

Référence : http://fr.wikipedia.org/wiki/Algorithmique

Pour terminer

Exemples d'applications

Simple, avec le module standard Turtle

```
from turtle import *

reset()
i=0
while i<120:
    forward(i)
    left(90)
```

```
    i=i+2
input('Hit Enter to continue')
```

Coloré, avec le module standard Turtle

```
from turtle import *

reset()
x=-100
y=-100
i=0
while i < 10:
    j=0
    while j <10:
        up()
        goto(x+i*20,y+j*20)
        down()
        begin_fill()
        n=0
        while n <4 :
            forward(16)
            left(90)
            n=n+1
        color((i*0.1,j*0.1,0))
        end_fill()
        color(0,0,0)
        j=j+1
    i=i+1

input('Hit Enter to continue')
```

Simple, avec l'interface graphique Tkinter

```
from tkinter import *

fen01 = Tk()
fen01.title("Lecture de deux masses")
chaine1 = Label (fen01, text = "introduisez la première masse :")
chaine2 = Label  (fen01, text = "introduisez la deuxième masse :")
chaine1.grid(row =0)
chaine2.grid(row =1)
entr1= Entry(fen01)
entr2= Entry(fen01)
entr1.grid(row =0, column =1)
entr2.grid(row =1, column =1)
bou1=Button(fen01,text='Continuer',command=fen01.quit)
bou1.grid(row=2,column=1)

fen01.mainloop()

m1 = float(entr1.get())
```

```
m2 = float(entr2.get())
fen01.destroy()

print('Masses lues : ', m1,' et ',m2)
```

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

Permanent link:
https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:progappchim:presentation_principes?rev=1487157322

Last update: **2017/02/15 12:15**