DIRECTION DES SCIENCES DE LA MATIERE

Département de Recherche sur l'Etat Condensé, les Atomes et les Molécules

Laboratoire Interdisciplinaire sur l'Organisation Nanométrique et Supramoléculaire

Inititiation à l'utilisation scientifique de Python

Plan

- Philosophie de Python
- Quelques éléments de syntaxe
  - Types
  - Conditions
  - Boucles
  - Fichiers
  - Fonctions
- Modules
  - Son propre module
  - Modules scientifiques
  - Tableaux
- Tracé de courbes
  - Introduction à Gnuplot
  - Interface avec Python

Philosophie de Python

- Langage de programmation « simple » qui permet de se concentrer sur l'application scientifique et pas la syntaxe
- Interface avec d'autres langages (Fortran, C,…)
- Interfaçage avec de nombreuses librairies graphiques (Tkinter par défaut)
- Portable (utilisable sous unix, mac, pc,…)
- Orienté Objet et donc évolutif
- Open Source et gratuit

Philosophie de Python : Interpréteur de commande

```
additionner 2 valeurs
>>> 1 + 1
2
affecter une variable
>>> a = 1
>>> a
1
Chaîne de caractère
>>> s = "hello world"
>>> print s
hello world
```

On peut aussi créer un programme sans l'interpréteur

Il suffit de lancer l'interpréteur python :

```
Python.exe monprogramme.py
```

Calculatrice scientifique très puissante

Philosophie de Python : Modulaire

- Python est orienté objet
- De nombreux modules sont disponibles :
  - Scientifique
  - Imagerie
  - Réseaux
  - Interfaces graphiques
  - …
- Documentés facilement (grâce à pyDoc)

Aspects du langage

- Indentation importante:

```
If n in range(1,10):
    Print n
Print 'fini'
```

- Documentation
  - Commentaires précédés de #
  - Ou bien ” ” ”

Affectation des variables

- Pas de déclaration des variables
- Comment affecter une variable ?

```
>>>x=[1,2,3]
```

- Une variable se réfère à une zone mémoire

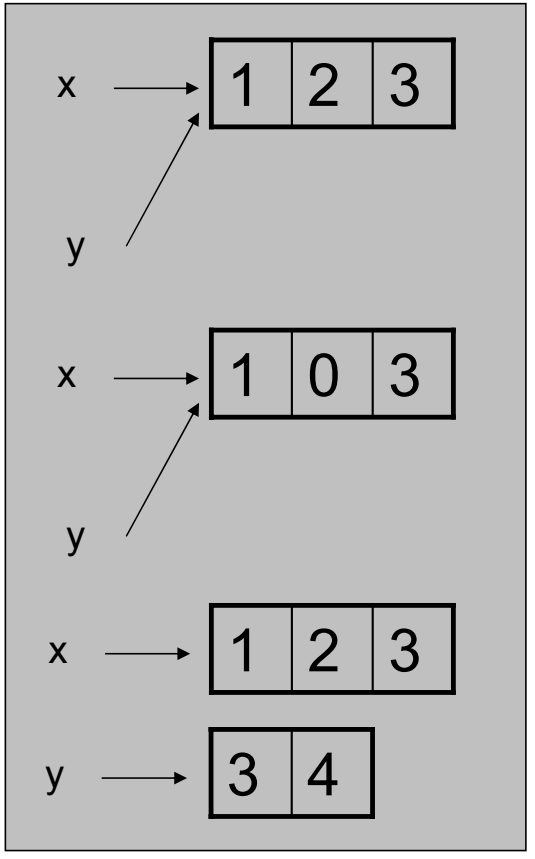
```
>>>Y=X
```

- Deux variables peuvent de référer à la même zone mémoire

```
>>>X[1]=0
>>>Print y
[1,0,2]
```

- Réaffecter une variable :

```
>>>y=[3,4]
```



booleens

- True ou False

```
>>>test=true
>>>if test :
        Print « vrai »

    Vrai
```

Nombres

Entier (int)	`0, 1, 2, 3, -1, -2, -3`
Real (float)	`0., 3.1415926, -2.05e30, 1e-4`
	(doit contenir . ou exposant)
Complex	`1j, -2.5j, 3+4j`

• Addition	`3+4, 42.+3, 1+0j`
• soustraction	`2-5, 3.-1, 3j-7.5`
• Multiplication	`4*3, 2*3.14, 1j*3j`
• Division	`1/3, 1./3., 5/3j`
• Puissance	`1.5**3, 2j**2, 2**-0.5`

Chaines de caractères (string)

- `''abc''` ou `'abc'`
- `'\n'` retour à la ligne

- `'abc'+'def'` `'abcdef'`
- `3*'abc'` `'abcabcabc'`

- `'ab cd e'.split()` `['ab','cd','e']`

- `'1,2,3'.split(',')` `['1', ' 2', ' 3']`

- `','.join(['1','2'])` `'1,2'` ajoute , entre les éléments

- `'   a b c   '.strip()` `'a b c'` enlève les espaces de fin et début

- `'text'.find('ex')  1` #recherche
- `'Abc'.upper()` `'ABC'`
- `'Abc'.lower()` `'abc'`
- Conversion vers des nombres: `int('2'), float('2.1')`
- Conversion vers du texte : `str(3), str([1, 2, 3])`

Listes ou séquences (list)

- **Création**

```
>>>a=[1,2,3, 'blabla',[9,8]]
```

- **Concatenation (pas addition… voir array)**

```
>>>[1,2,3]+[4,5]
[1,2,3,4,5]
```

- **Ajout d'un élément**

```
>>>a.append('test')
[1,2,3, 'blabla',[9,8],'test']
```

- **Longueur**

```
>>>len(a)
7
```

- **range([start,] stop[, step]) -> list of integers**

  Return a list containing an arithmetic progression of integers.

```
>>>range(5)
[0,1,2,3,4]
```

- **Indexation simple**

```
>>>a[0]
1
```

- **Indexation multiple**

```
>>> a[4][1]
8
```

- **Définition d'un élément**

```
>>> a[1]=1
>>> a
[1, 1, 3, 'blabla', [9, 8], 'test']
```

- **Indices négatifs**

```
>>> a[-1]
'test'
>>> a[-2]
[9, 8]
```

- **Parties d'une liste (`liste[lower:upper]`)**

```
>>>a[1:3]
[2,3,'blabla']
>>> a[:3]
[1, 1, 3]
```

Les indices commencent toujours à 0

>>>Help(list)

```
|  append(...)
|      L.append(object) -- append object to end
|
|  count(...)
|      L.count(value) -> integer -- return number of occurrences of value
|
|  extend(...)
|      L.extend(iterable) -- extend list by appending elements from the iterable
|
|  index(...)
|      L.index(value, [start, [stop]]) -> integer -- return first index of value
|
|  insert(...)
|      L.insert(index, object) -- insert object before index
|
|  pop(...)
|      L.pop([index]) -> item -- remove and return item at index (default last)
|
|  remove(...)
|      L.remove(value) -- remove first occurrence of value
|
|  reverse(...)
|      L.reverse() -- reverse *IN PLACE*
|
|  sort(...)
|      L.sort(cmpfunc=None) -- stable sort *IN PLACE*; cmpfunc(x, y) -> -1, 0, 1
```

Usage :

```
>>>Maliste.methode(var)
```

Dictionnaires

Dictionnaire : Association d'une valeur et d'une clé.

- **Création d'un dictionnaire**

```
>>> dico = {}
>>> dico['C'] = 'carbone'
>>> dico['H'] = 'hydrogène'
>>> dico['O'] = 'oxygène'
>>> print dico
{'C': 'carbone', 'H': 'hydrogène', 'O': 'oxygène'}
```

- **Utilisation**

```
>>>print dico['C']
Carbone
```

- **Création d'un nouveau dictionnaire**

```
>>> dico2={'N':'Azote','Fe':'Fer'}
```

- **Concaténation de dictionnaires**

```
>>> dico3=dico+dico2

Traceback (most recent call last):
  File "<pyshell#18>", line 1, in -toplevel-
    dico3=dico+dico2
TypeError: unsupported operand type(s) for +: 'dict' and 'dict'
>>> dico.update(dico2)
>>> dico
{'H': 'hydrogène', 'C': 'carbone', 'Fe': 'Fer', 'O': 'oxygène', 'N': 'Azote'}
```

>>>help(dict)

| **clear(...)**
| D.clear() -> None. Remove all items from D.
|
| **copy(...)**
| D.copy() -> a shallow copy of D
|
| **get(...)**
| D.get(k[,d]) -> D[k] if k in D, else d. d defaults to None.
|
| **has_key(...)**
| D.has_key(k) -> True if D has a key k, else False |
| **items(...)**
| D.items() -> list of D's (key, value) pairs, as 2-tuples
|
| **iteritems(...)**
| D.iteritems() -> an iterator over the (key, value) items of D
|
| **iterkeys(...)**
| D.iterkeys() -> an iterator over the keys of D
|
| **itervalues(...)**
| D.itervalues() -> an iterator over the values of D
|
| **keys(...)**
| D.keys() -> list of D's keys

| **pop(...)**
| D.pop(k[,d]) -> v, remove specified key and return the corresponding value
| If key is not found, d is returned if given, otherwise KeyError is raised
|
| **popitem(...)**
| D.popitem() -> (k, v), remove and return some (key, value) pair as a
| 2-tuple; but raise KeyError if D is empty
|
| **setdefault(...)**
| D.setdefault(k[,d]) -> D.get(k,d), also set D[k]=d if k not in D
|
| **update(...)**
| D.update(E) -> None. Update D from E: for k in E.keys(): D[k] = E[k]
|
| **values(...)**
| D.values() -> list of D's values
|

Conditions

```
if
  <condition>:
  <code>
elif
  <condition>:
  <code>
else:
  <code>
```

Exemples :

```
test=True
if test:
      print 'vrai'
else:
      print 'faux'
->vrai
```

```
if i==1:
      print 'A'
elif i==2:
      print 'B'
elif i==3:
      print 'C'
else:
      print "?"
```

Boucles for loop

for <variable> in <list>:

<code>

```
>>> for i in range(5):
      print i,
0 1 2 3 4

>>> for i in 'abcdef':
      print i,
a b c d e f

l=['C','H','O','N']
>>> for i in l:
      print i,
C H O N
```

```
>>> for i in dico:
      print i,

H C Fe O N
>>> for i in dico:
      print dico[i],


hydrogène carbone Fer
oxygène Azote
```

Boucles while

while <condition>:

<instructions>

Exécution répétée d'instructions en fonction d'une condition

```
>>> test=0
>>> while test<10:
        test=test+1
        print test,


1 2 3 4 5 6 7 8 9 10
```

```
>>> i = 0
>>> while 1:
        if i<3 :
                print i,
        else :
                break
        i=i+1

0 1 2
```

Lecture des fichiers textes

- Rappel sur les fichiers textes :
  - Ouverture du fichier
  - Lecture ligne à ligne
  - La ligne est affectée à une variable texte
  - Fermeture du fichier

- En Python :

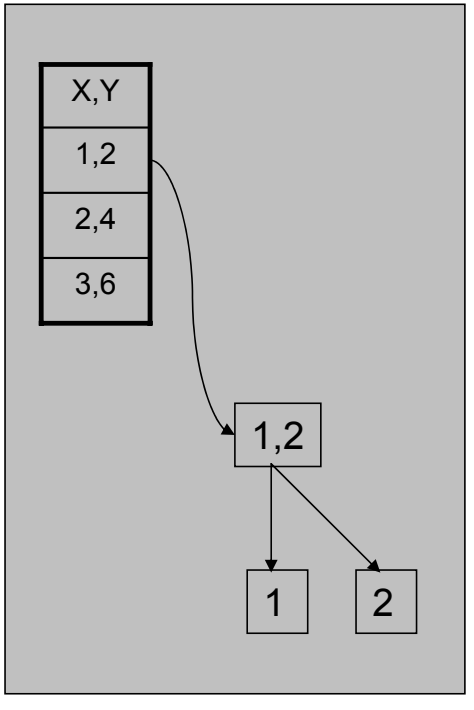
```
>>>f=open('nom_du_fichier.txt','r')
>>>lignes=f.readlines()
>>>f.close()
```

L'instruction `readlines` affecte toutes les lignes du fichier dans une liste.

- Chaque élément de la liste doit désormais être traité.

Dans le fichier il y a 2 colonnes x et y séparés par une ,

```
>>>x=[ ] #liste
>>>y=[ ]
>>>for chaine in lignes[1:]:On ne prend pas la 1ere ligne
        elements=chaine.split(',')
        x.append(float(element[0]))
        y.append(float(element[1]))
```



Ecriture des Fichiers

- Rappel sur les fichiers textes :
  - Ouverture du fichier
  - écriture ligne à ligne
  - Fermeture du fichier

- En Python :

```
>>>f=open('nom_du_fichier.txt','w')
>>>f.write('ligne1\n')
>>>f.write('ligne2\n')
>>>f=close()
```

Fonctions

- Syntaxe :

```
def nomdelafonction(arguments):
    instructions
    return quelquechose
```

```
>>> def addition(a,b):
      c=a+b
      return c

>>> addition(2,3)
5
>>> addition('nom','prenom')
'nomprenom'
>>> addition(1.25,5.36)
6.6100000000000003
```

Modules

- Créer son propre module:

Exo1.py :

```
def addition(a,b):
    c=a+b
    return c
```

Un module qui s'execute :
 # Ajouter ce code à la fin
if __name__ == '__main__':
** test()**

- Utiliser un module

```
>>>import exo1
>>>exo1.addition(1,2)
3
```

- Recharger le module

```
>>>reload(exo1)
```

- Utiliser quelques parties d'un module

```
>>>from Numeric import array
```

- Utiliser tous les composants d'un module

```
>>>from Numeric import *
>>>import Numeric as N
>>> N.sin(3.14)
0.0015926529164868282
```

Plus propre parce que l'on sait quelle module est utilisé…

Modules numeric et scientific

- Numerical Python
  - Nouveau type array (tableau)
  - Fonctions mathématiques universelles permettant de les manipuler

```
>>>import Numeric
```

- Scientific Python
  - Collection de modules pour le calcul scientifique puissantes et complètes

```
>>>import Scientific
```

- Scipy
  - « Fourre-tout » de modules scientifiques
  - Fonctionalités de plotting (?!)
  - Interface genre matlab

Fonctions de Scientific

- PACKAGE CONTENTS
- BSP (package)
- DictWithDefault
- Functions (package)
- Geometry (package)
- IO (package)
- Installation
- MPI (package)
- Mathematica
- NumberDict
- Physics (package)
- Signals (package)
- Statistics (package)
- Threading (package)
- TkWidgets (package)
- Visualization (package)

Type tableau (array)

- Attention, c'est différent d'une liste (sequence)
- Création d'un tableau :

```
>>> N.array([1,2,3,4])
array([1, 2, 3, 4])
>>> N.array([1,2,3,4.])
array([ 1.,  2.,  3.,  4.])
>>> N.arange(0,20,2)
array([ 0,  2,  4,  6,  8, 10,
12, 14, 16, 18])
```

- Création d'un tableau à partir d'une liste

```
>>> l=range(1,10)
>>> a=N.array(l)
>>> a
array([1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8,
    9])
```

- Addition de tableaux

```
>>> t=N.array([1,2,3,4.])
>>> t2=N.array([1,2,3,4.])
>>> t+t2
array([ 2.,  4.,  6.,  8.])
```

- Utilisation de fonctions mathématiques

```
>>> t=N.arange(0,10,2)
>>> t
array([0, 2, 4, 6, 8])
>>> t*N.pi
array([0.,6.28318531, 12.56637,
  18.84955592,  25.13274123])
```

Type tableau (array)

- Tableaux à plusieurs dimensions

```
>>> t=N.arange(0,15)
>>> t.shape
(15,)
>>> tableau2d=N.reshape(t,(3,5))
>>> tableau2d
array([[ 0,  1,  2,  3,  4],
       [ 5,  6,  7,  8,  9],
       [10, 11, 12, 13, 14]])
```

- Accès aux données

```
>>> tableau2d[0,3]
3
```

Attention tableau[y,x] !!!

- Parties

```
>>> tableau2d[:,3]
array([ 3,  8, 13])
```

Fonctions array

Functions

- array - NumPy Array construction
- zeros - Return an array of all zeros
- shape - Return shape of sequence or array
- rank - Return number of dimensions
- size - Return number of elements in entire array or a certain dimension
- fromstring - Construct array from (byte) string
- take - Select sub-arrays using sequence of indices
- put - Set sub-arrays using sequence of 1-D indices
- putmask - Set portion of arrays using a mask
- reshape - Return array with new shape
- repeat - Repeat elements of array
- choose - Construct new array from indexed array tuple
- cross_correlate - Correlate two 1-d arrays
- searchsorted - Search for element in 1-d array
- sum - Total sum over a specified dimension
- average - Average, possibly weighted, over axis or array.
- cumsum - Cumulative sum over a specified dimension
- product - Total product over a specified dimension
- cumproduct - Cumulative product over a specified dimension
- alltrue - Logical and over an entire axis
- sometrue - Logical or over an entire axis
- allclose - Tests if sequences are essentially equal

```
help(Numeric)
help(function)
```

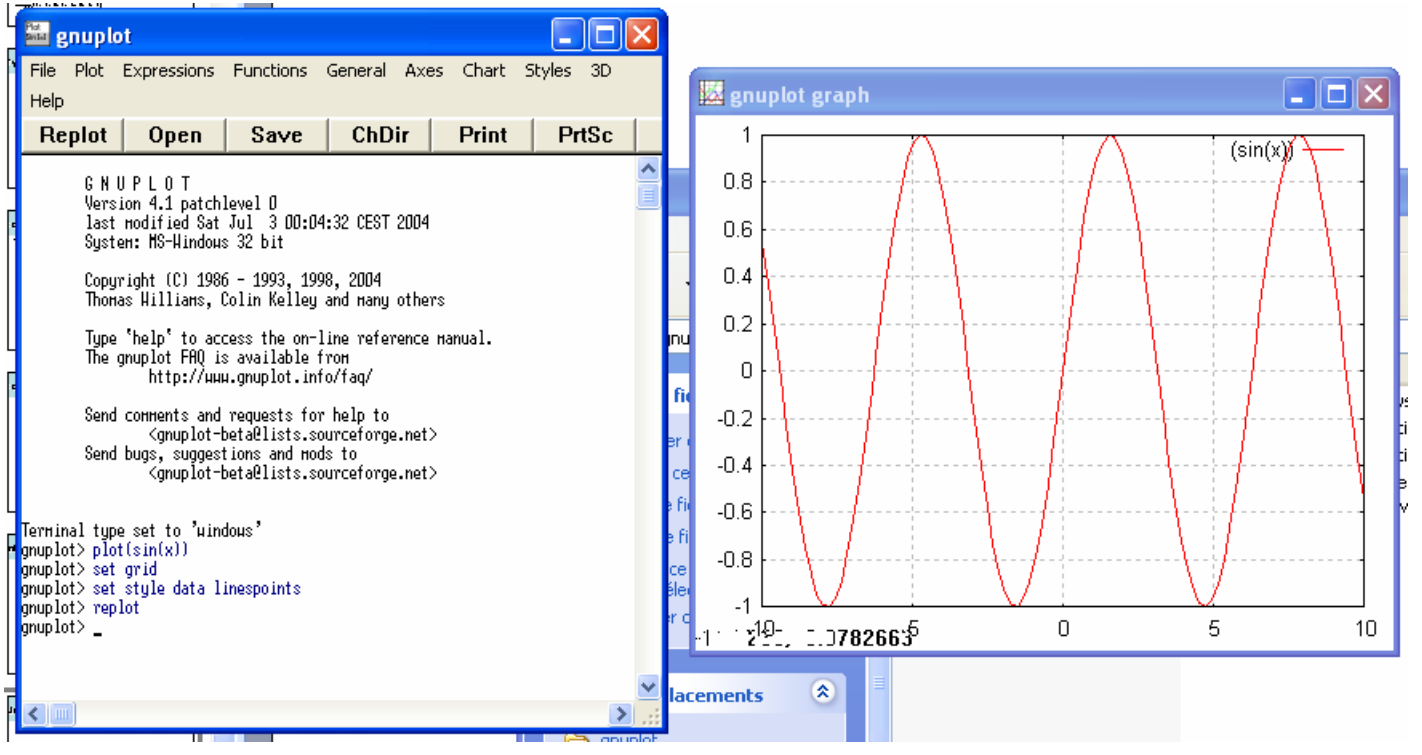
More Functions:

- arrayrange (arange) - Return regularly spaced array
- asarray - Guarantee NumPy array
- sarray - Guarantee a NumPy array that keeps precision
- convolve - Convolve two 1-d arrays
- swapaxes - Exchange axes
- concatenate - Join arrays together
- transpose - Permute axes
- sort - Sort elements of array
- argsort - Indices of sorted array
- argmax - Index of largest value
- argmin - Index of smallest value
- innerproduct - Innerproduct of two arrays
- dot - Dot product (matrix multiplication)
- outerproduct - Outerproduct of two arrays
- resize - Return array with arbitrary new shape
- indices - Tuple of indices
- fromfunction - Construct array from universal function
- diagonal - Return diagonal array
- trace - Trace of array
- dump - Dump array to file object (pickle)
- dumps - Return pickled string representing data
- load - Return array stored in file object
- loads - Return array from pickled string
- ravel - Return array as 1-D
- nonzero - Indices of nonzero elements for 1-D array
- shape - Shape of array
- where - Construct array from binary result
- compress - Elements of array where condition is true
- clip - Clip array between two values
- zeros - Array of all zeros
- ones - Array of all ones
- identity - 2-D identity array (matrix)

Introduction à Gnuplot

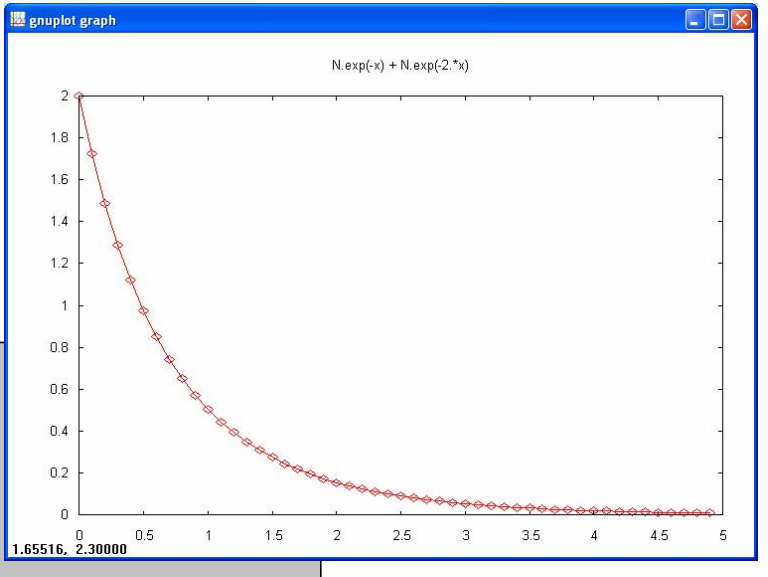
- Gnuplot n'est pas un programme Python
- Gnuplot est un logiciel permettant de tracer des courbes (correctement !)
- En ligne de commande →pas très convivial
- Charge des données issues de fichiers et permet certains calculs
- Permet d'automatiser le tracé des figures
- Dispose d'un grand nombre de types de figures
- Gratuit et OpenSource
- Multiplateforme (windows, linux, mac)
- → Même philosophie que Python
- Python peut interfacer Gnuplot → le tracé est dédié à Gnuplot

Une courbe avec Gnuplot



Interfaçage avec Python

Utilisation du module Gnuplot.py




```
import Gnuplot
import Numeric as N
# Initialize Gnuplot
g = Gnuplot.Gnuplot()
# Set up data
x = N.arange(0., 5., 0.1)
y = N.exp(-x) + N.exp(-2.*x)
curve=Gnuplot.Data(x, y,with='linespoints')
g.title('N.exp(-x) + N.exp(-2.*x)')
g.plot(curve)
```

Références

- www.python.org
- Numerical Python (http://numeric.scipy.org/)
- Scientific Python (Konrad Hinsen) http://starship.python.net/~hinsen/ScientificPython/
- www.SciPy.org
- www.gnuplot.info
- Transparents inspirés de “Introduction to Scientific Computing with Python”
- www-drecami.cea.fr/scm/lions/python