



Outils numériques et programmation



Martin VÉROT

En tant que scientifiques, le rôle des outils numériques jouera un rôle prépondérant dans votre carrière. En effet, à l'aide de ces outils, il sera possible de :

- traiter et automatiser un grand nombre de tâches. Cela joue un rôle essentiel dans la productivité et la capacité à produire des données exploitables.
- produire des données « digérées » à partir de données brutes (graphiques, modèles, exploitations, etc)
- créer des données numériques via des méthodes de simulation.

Ce cours est un cours introductif qui vise à vous initier à ces différents aspects. Il ne s'agit pas d'un cours de programmation pure :

- nous ne ferons pas d'algorithmique pour optimiser des processus;
- nous n'aborderont des problématiques plus globales de *design pattern*, test unitaire, etc.
- la conception d'interface graphique ne sera pas évoqué
- Ici, l'accent sera mis essentiellement sur la programmation fonctionnelle et pas sur la programmation orientée objet (bien qu'en python, tout soit objet).

Il ne s'agit pas non plus d'un cours sur les bases de données qui ne seront pas du tout abordées, ni de programmation web.

Le choix du langage et des outils s'est tourné du côté des systèmes UNIX (Linux et assimilé) qui forment est un environnement de travail fréquent dans le monde scientifique, gratuit, documenté et très riche. Pour la programmation, c'est le langage Python qui a été choisi car c'est un des langages de programmation couramment utilisé dans le monde scientifique, de nombreuses librairies y sont disponibles, la communauté est active et mature. S'il a ses limites, il a également de nombreuses qualités, en particulier le fait que ce soit un langage de haut niveau, très expressif et qui limite les besoins d'aller « mettre les mains dans le cambouis ». Cela correspond à la volonté du cours dont le mantra pourrait être : « *get things done* ».

La compréhension et l'appétence pour les choses numériques étant variables, une partie de ce qui sera écrit ici sera peut-être du charabia pour certains, des évidences pour d'autres. Mais le but est de forger une culture numérique minimale qui permette à tout le monde de progresser pour éviter de finir à passer des journées entières à ouvrir des fichiers, lire une donnée, la mettre dans un fichier excel pour ensuite la tracer et la modéliser à la main.^a

L'activité de programmation est ingrate, surtout au début : cela demande du temps, de la patience, un peu d'abnégation pour faire des choses qui sont basiques. Mais la pratique aide : les heures passées à travailler cette année peuvent servir de base pour gagner une productivité et un confort de travail énorme sur une carrière complète. Un bon programmeur sait exploiter sa fainéantise au maximum pour laisser son programme faire le travail à sa place. Mais la fainéantise a un coût : il faut passer le temps nécessaire à construire un programme pour qu'il corresponde à ses besoins spécifiques. Le retour sur investissement sera d'autant plus important que vous aurez pris l'habitude de programmer. L'expérience et l'habitude permettent de ne pas faire les mêmes erreurs, et il est fréquent de ré-utiliser des morceaux de code ou idées déjà mises en œuvre ailleurs. Le maître mot est donc de programmer pour faire ce dont vous avez besoin, quel que soit le sujet, le but, le moyen.

a. Toute ressemblance avec des situations rencontrées en thèse par l'auteur serait purement fortuite ... ou pas.

J'espère que vous arriverez à prendre goût à cette activité pour réussir à faire avancer vos programmes, idées, concepts et votre science là où elle n'aurait pu aller sans l'aide d'outils numériques.

Ce cours est le successeur de celui donné par Christophe Winisdoerffer. Il s'en inspire donc largement. Je tiens d'ailleurs à le remercier chaleureusement pour m'avoir permis à l'époque de progresser moi-même et pour les nombreuses discussions que nous avons eu sur le sujet. Plusieurs exercices proposés pour ce cours sont directement tirés de ceux proposés les années précédentes. Les différents intervenants du module ont également contribué à l'enrichir. Enfin, je tiens également à remercier chaleureusement le CBP pour nous accueillir en ses murs, et plus particulièrement Emmanuel Quemener qui se charge d'en assurer le bon fonctionnement en toutes circonstances.

Table des matières

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | La philosophie du cours | 9 |
| I | Quelques notions sur le système et la ligne de commande | 11 |
| 2 | L'utilisation du terminal au XXI^e siècle | 13 |
| 2.1 | Avantages et inconvénients des interfaces graphiques | 14 |
| 2.2 | Avantages et inconvénients de la ligne de commande | 14 |
| 2.3 | Et au final, on fait quoi ? | 15 |
| 3 | Commandes de base | 17 |
| 3.1 | ▲ Trouver les utilitaires en ligne de commande et LA commande maîtresse : man | 17 |
| 3.2 | Système de fichier et arborescence | 18 |
| 3.2.1 | ▲ Mieux connaître l'arborescence : la commande ls | 18 |
| 3.2.2 | Les dossiers et fichiers particuliers | 18 |
| 3.2.3 | ▲ Se déplacer avec la commande cd | 19 |
| 3.2.4 | ▲ Création, modification, suppression de fichiers ou dossiers | 21 |
| 3.2.5 | ▲ Trouver des fichiers | 22 |
| 3.2.6 | ▲ Droits | 23 |
| 3.2.6.1 | Exécuter un programme/fichier | 23 |
| 3.2.6.2 | Connaître les droits | 23 |
| 3.2.6.3 | Modifier les droits | 24 |
| 3.3 | ▲ Aller plus vite dans le terminal | 24 |
| 3.4 | ■ Les liens | 25 |
| 3.5 | Redirection de la sortie | 26 |
| 3.6 | Quelques utilitaires | 26 |
| 3.6.1 | Connaître l'espace disque et la taille de certains dossiers | 26 |
| 3.6.2 | Les fichiers texte | 27 |
| 3.6.2.1 | ▲ Trouver une ligne contenant une chaîne de caractère dans plusieurs fichiers : grep | 27 |
| 3.6.2.2 | Voir la fin d'un fichier : tail | 28 |
| 3.6.2.3 | Concaténer des fichiers : cat | 28 |
| 3.6.2.4 | Comparer des fichiers : diff et wdiff | 28 |
| 3.6.2.5 | ■ ♦ Faire des modifications de fichiers (remplacement de chaîne de caractère, etc) : sed et awk | 28 |
| 3.6.3 | Les fichiers pdf | 29 |
| 3.6.4 | Reconnaissance de caractères : tesseract | 29 |
| 3.6.5 | Les images : ImageMagick | 30 |

| | | |
|--------|--|----|
| 3.6.6 | Les vidéos : ffmpeg | 30 |
| 3.6.7 | Compression et décompression | 30 |
| 3.7 | ■ Enchaînement de commande : le pipe | 31 |
| 3.8 | ■ Les alias et le fichier .bashrc | 31 |
| 3.9 | ■ Environnement : PATH | 32 |
| 3.10 | ■ Travail sur des machines distantes | 33 |
| 3.10.1 | Connexion sur des machines distantes : ssh | 33 |
| 3.10.2 | Au CBP : x2go | 34 |
| 3.10.3 | ■ Copie à distance : scp | 34 |
| 3.11 | Gestion des processus | 35 |
| 3.11.1 | Fermer un processus qui buggue ou ralentit le système | 35 |
| 3.11.2 | Gérer l'exécution des processus dans le terminal | 36 |
| 3.12 | Scripts et personnalisation | 37 |
| 3.13 | Éditeurs de texte : IDE versus les deux indémodables vi et emacs | 37 |
| 3.14 | Ce qu'il faut retenir | 39 |

II Programmation en python 41

| | | |
|---------|--|----|
| 4 | Avant de se lancer | 43 |
| 4.1 | Décortiquer un problème avant de commencer | 43 |
| 4.2 | ▲ Nommage des variables | 44 |
| 4.3 | Trouver de l'aide | 44 |
| 4.3.1 | Le facile : l'appel à un ami | 44 |
| 4.3.2 | Le moins plaisant (mais plus complet) : « RTFM » | 45 |
| 4.3.3 | Le pénible : consulter le code source | 45 |
| 4.4 | Déboguer un programme | 45 |
| 4.4.1 | Compartimenter/factoriser | 45 |
| 4.4.2 | Lire les messages d'erreur | 46 |
| 4.4.3 | Commenter son code (avec du texte) | 46 |
| 4.4.4 | Afficher ses variables et leur type | 46 |
| 4.4.5 | Revenir en arrière jusqu'à revenir à un programme fonctionnel | 46 |
| 4.4.6 | Faire un appel à l'aide | 46 |
| 4.5 | Commenter son code | 47 |
| 4.6 | Structure d'un script python | 48 |
| 4.7 | Ce qu'il faut retenir | 48 |
| 5 | Les bases | 51 |
| 5.1 | Types de base | 51 |
| 5.1.1 | Nombres | 51 |
| 5.1.1.1 | ◆ Représentation flottante, comparaison et précision | 51 |
| 5.1.2 | Chaînes de caractère | 52 |
| 5.1.3 | Listes | 53 |
| 5.1.4 | Tuples | 53 |
| 5.1.5 | Dictionnaires | 53 |
| 5.1.6 | Fonctions | 54 |
| 5.2 | ◆ Objets mutables et immutables | 56 |
| 5.2.1 | ◆ Première conséquence : copie d'objets mutables/imbriqués : « shallow copy » versus « deep copy » | 57 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 5.2.2 | ◆ Deuxième conséquence : éléments mutables et fonctions | 59 |
| 5.2.2.1 | ◆ Modification d'un élément mutable au sein d'une fonction | 59 |
| 5.2.2.2 | ◆ Élément mutable comme argument optionnel | 59 |
| 5.3 | Espaces de nommage | 59 |
| 5.3.1 | ◆ les différents espaces de nommage | 59 |
| 5.3.2 | ■ Portée des variables | 60 |
| 5.4 | Structures de bases : boucles et conditions | 60 |
| 5.4.1 | Boucles | 61 |
| 5.4.1.1 | Boucles for | 61 |
| 5.4.1.2 | Boucles while | 61 |
| 5.4.2 | Conditions if, elif, else | 61 |
| 5.4.2.1 | Instructions break, pass et continue | 62 |
| 5.5 | Gestion des fichiers | 62 |
| 5.6 | Évaluer la performance de son code | 63 |
| 5.7 | Ce qu'il faut retenir | 63 |
| 6 | Modules, librairies, packages et frameworks | 65 |
| 6.1 | Un peu de vocabulaire | 65 |
| 6.2 | Au fait, une librairie ça sert à quoi ? | 65 |
| 6.3 | Import d'une librairie ou d'un module | 66 |
| 6.3.1 | Import spécifique | 67 |
| 6.3.2 | Import « à la sauvage » | 67 |
| 6.4 | Quelques librairies courantes | 68 |
| 6.5 | Ce qu'il faut retenir | 69 |
| 7 | La manipulation de tableaux avec Numpy | 71 |
| 7.1 | Les ndarray | 71 |
| 7.1.1 | Propriétés essentielles | 71 |
| 7.1.2 | Fonctions pour la création | 72 |
| 7.2 | Sélection d'éléments et <i>slicing</i> | 73 |
| 7.3 | Opérations sur les tableaux, <i>broadcasting</i> et notion d'axe | 74 |
| 7.3.1 | ◆ <i>Broadcasting</i> ⓘ | 74 |
| 7.3.2 | ◆ Opération sur les tableaux, notion d'axe | 75 |
| 7.4 | Points divers | 75 |
| 7.4.1 | Dérivation numérique <i>versus</i> dérivation analytique | 75 |
| 7.4.2 | Nombres pseudo-aléatoires | 75 |
| 7.5 | Ce qu'il faut retenir | 76 |
| 8 | Faire des graphiques avec Matplotlib | 77 |
| 8.1 | Principes généraux | 77 |
| 8.1.1 | Bibliographie | 78 |
| 8.2 | Utilisation de matplotlib | 79 |
| 9 | Scipy et numpy pour résoudre quelques problèmes numériques courants | 85 |
| 9.1 | Constantes numériques | 85 |
| 9.2 | « Philosophie » des fonctions scipy | 85 |
| 9.3 | Ajustement de courbe | 86 |
| 9.4 | Transformée de Fourier | 86 |
| 9.5 | Recherche de zéros | 87 |


| | | |
|-------|--|----|
| 9.5.1 | Fonctions unidimensionnelles | 87 |
| 9.5.2 | Fonctions vectorielles à plusieurs variables | 87 |
| 9.6 | Minimisation de fonction | 88 |
| 9.7 | Intégration | 88 |
| 9.8 | Équations différentielles ordinaires | 89 |
| 9.8.1 | Équation différentielle scalaire du premier ordre | 89 |
| 9.8.2 | Équation différentielle vectorielle du premier ordre | 89 |
| 9.8.3 | Équation différentielle du second ordre | 89 |
| 9.9 | Fonctions statistiques | 90 |
| 9.10 | Arrangement, combinaison | 90 |

| | | |
|------------|---|-----------|
| III | Pour aller plus loin | 91 |
| 10 | Les expressions régulières | 93 |
| 11 | Tableaux non numériques | 95 |
| 12 | Les gestionnaires de version : git/github | 97 |
| 13 | Calcul symbolique | 99 |
| 14 | Jupyter | 101 |
| 15 | La programmation orientée objet | 103 |
| 16 | Interaction avec Excel | 105 |
| 17 | Deep learning | 107 |

Chapitre 1






La philosophie du cours

Vous aurez différentes ressources mises à disposition :

1. ce *polycopié* pour lire des concepts, idées méthodes qui ne peuvent pas forcément être intuités ;
2. des *cahiers Jupyter* pour que vous puissiez voir des portions de code en action, avec des exemples, erreurs, choses à compléter. Le tout pour avoir un retour rapide et un cycle d'apprentissage court. Les cahiers jupyter sont accessibles directement en cliquant sur les icônes . Sinon, ils sont tous disponibles [sur github](#) avec 'ch' suivi du numéro de chapitre correspondant dans le polycopié comme préfixe.
3. des *exercices plus complets* qui correspondent à des tâches complexes qui demandent de combiner des idées, fonctions, portions de code. Ils sont tous disponibles [sur github](#) avec le préfixe 'exo-'.

Les deux premiers types de ressources constitueront la partie de travail individuel à fournir. Cela sera évalué avec des questionnaires réguliers pour voir si vous avez compris les concepts centraux. Les exercices complets seront pour leur part ce sur quoi nous nous concentrerons lors des séances. Pour que ces heures soient productives, il faudra absolument avoir travaillé sur les ressources précédentes.

Dans le cours, certains paragraphes seront étiquetés avec les symboles suivants :

-  pour les notions qui ne demandent pas d'effort particulier.
-  pour les notions un peu plus complexes qui nécessitent en général au moins un exemple pour comprendre
-  pour les notions plus complexes qui demandent de s'appropriier la notion. En général, le concept sera maîtrisé avec l'écriture d'un script.
-  Pour indiquer les petites astuces ou points de détail utiles.
-  Pour indiquer de la documentation spécifique.

Première partie

Quelques notions sur le système et la ligne de commande

Chapitre 2

L'utilisation du terminal au XXI^e siècle

À l'âge des apps, de l'ergonomie, de l'UX design et autres joyeusetés, la confrontation à l'utilisation des lignes de commandes peut sembler totalement désuète pour le novice (figure 2.1). L'écran noir avec l'unique capacité de taper quelques caractères peut sembler limitative voire rétrograde. Et pourtant, la puissance de l'écrit continue à surpasser le « clic souris », en particulier lorsqu'il s'agit de mélanger l'action de différents programmes. Là où les programmes à interface graphique communiquent en général très mal entre eux, les lignes de commande vont pouvoir permettre d'automatiser des actions sur des fichiers, processus ou autre. La force de la ligne de commande qui la rend encore indétrônable réside dans sa simplicité : pas besoin d'aller dans le douzième sous-menu qui aura changé de place à la version suivante du logiciel. Ici, tout est écrit, ré-utilisable, finement paramétrisable et surtout ré-utilisable. En effet, surtout pour les scientifiques, il est courant d'avoir à répéter l'extraction de données d'une manipulation. Pour les enseignants, il n'est pas moins courant d'avoir à répéter des tâches plus ou moins basiques.

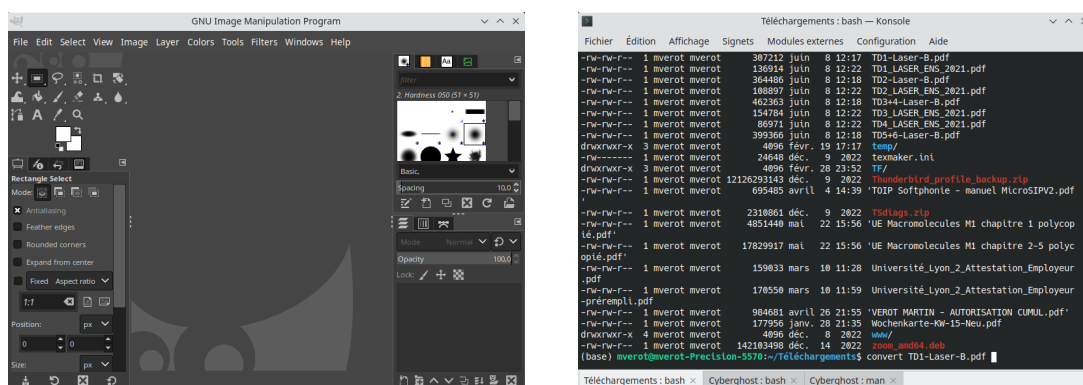


FIGURE 2.1 – Logiciel à interface graphique à gauche, console avec invite de commande à droite.

Or quoi de plus lassant que de traiter sa vingtième page scannée pour avoir un fond blanc, ouvrir son centième fichier pour trouver la valeur de l'énergie totale de son système. Trouver la position du maximum d'une courbe et j'en passe. Au troisième millénaire, les deux mondes ont encore totalement leur place et chacun présente des avantages et inconvénients du point de vue du profane.

2.1 Avantages et inconvénients des interfaces graphiques

Avantages

- Simple d'utilisation en apparence
- Rétroaction immédiate sur les actions entreprises
- Permet d'enchaîner des actions indépendantes et peu reproductibles

Inconvénients

- Limité à quelques programmes
- Une proportion non négligeable des programmes les plus connus avec interface graphique sont payants
- En général très peu adapté au traitement répétitif ou de masse,
- Difficulté à combiner différents programmes
- Pour le travail sur des machines à distance, généralement impossible
- Pour certains logiciels, chaque nouvelle version amène son lot de chamboulement dans les menus et sous-menus qui changent de place.

2.2 Avantages et inconvénients de la ligne de commande

Avantages

- Beaucoup de programmes capables de faire des actions très spécifiques.
- Une documentation généralement fournie
- La possibilité de « finetuner » les paramètres du programme pour faire exactement ce qui est souhaité
- Énorme capacité à répéter une séquence d'action spécifique
- Plus économe en ressources sur des environnements partagés

Inconvénients

- Beaucoup plus aride initialement
- Mémorisation pas toujours facile des options et sous-options
- Absence de rétro-action immédiate qui peut engendrer de la frustration voire des erreurs difficilement réparables
- Une courbe d'apprentissage initiale plus élevée que pour un logiciel à interface graphique
- La compréhension des options et possibilités n'est pas toujours évidente
- Il est parfois difficile de savoir qu'il existe déjà des programmes tout fait pour faire des actions utiles

2.3 Et au final, on fait quoi ?

Le but n'est pas de jeter le bébé avec l'eau du bain : il faut savoir utiliser chaque outil lorsqu'il est le plus adapté. Mais pour tout ce qui est tâches répétitives, le temps passé à optimiser les choses peut très rapidement être rentabilisé (figure 2.2).

HOW LONG CAN YOU WORK ON MAKING A ROUTINE TASK MORE EFFICIENT BEFORE YOU'RE SPENDING MORE TIME THAN YOU SAVE?
(ACROSS FIVE YEARS)

| | | HOW OFTEN YOU DO THE TASK | | | | | |
|-----------------------------|------------|---------------------------|-----------|------------|------------|------------|------------|
| | | 50/DAY | 5/DAY | DAILY | WEEKLY | MONTHLY | YEARLY |
| HOW MUCH TIME YOU SHAVE OFF | 1 SECOND | 1 DAY | 2 HOURS | 30 MINUTES | 4 MINUTES | 1 MINUTE | 5 SECONDS |
| | 5 SECONDS | 5 DAYS | 12 HOURS | 2 HOURS | 21 MINUTES | 5 MINUTES | 25 SECONDS |
| | 30 SECONDS | 4 WEEKS | 3 DAYS | 12 HOURS | 2 HOURS | 30 MINUTES | 2 MINUTES |
| | 1 MINUTE | 8 WEEKS | 6 DAYS | 1 DAY | 4 HOURS | 1 HOUR | 5 MINUTES |
| | 5 MINUTES | 9 MONTHS | 4 WEEKS | 6 DAYS | 21 HOURS | 5 HOURS | 25 MINUTES |
| | 30 MINUTES | | 6 MONTHS | 5 WEEKS | 5 DAYS | 1 DAY | 2 HOURS |
| | 1 HOUR | | 10 MONTHS | 2 MONTHS | 10 DAYS | 2 DAYS | 5 HOURS |
| | 6 HOURS | | | | 2 MONTHS | 2 WEEKS | 1 DAY |
| | 1 DAY | | | | | 8 WEEKS | 5 DAYS |

FIGURE 2.2 – Temps que l'on peut passer à automatiser la tâche en fonction du temps économisé au final et de la fréquence à laquelle on effectue la tâche. Sur 5 ans, pour une tâche répétée 5 fois par jour, si on gagne 5 minutes par opération, alors tant qu'on met moins de 4 semaines à l'automatiser, on reste gagnant! ©xkcd <https://xkcd.com/1205>

Chapitre 3

Commandes de base

Cette partie vise à introduire le terminal et ses avantages. Sans tomber dans une liste à la Prévert des commandes utilisables et de leurs options, le but est ici de fournir quelques bases et pistes pour avoir un bagage minimal. Encore une fois, la pratique, les habitudes et les besoins se chargeront de vous faire progresser dans l'utilisation de certaines commandes, utilitaires ou pratiques. En particulier, ici, on décrit l'utilisation de bash, environnement utilisé au CBP de l'ENS de Lyon et sur la plupart des distributions courantes. La programmation en bash sera évoquée mais là encore, le sujet est trop vaste pour pouvoir être traité en intégralité.

💡 Dans ce chapitre, les commandes seront indiquées sur fond grisé comme ceci : `mkdir`. De plus, le symbole « \$ » en début de ligne est le prompt et indique qu'il s'agit d'une ligne de commande tapée dans le terminal.

3.1 ▲ Trouver les utilitaires en ligne de commande et LA commande maîtresse : `man`

Nous allons ici parler de différentes commandes de base. Cela peut suffire pour créer un sentiment d'overdose pour le néophyte. Cependant, il faut se dire que :

- la pratique est la meilleure maîtresse pour connaître lesdites commandes ;
- chacun connaît son petit lot de trucs et astuces, comme pour les applications sur smartphone, la commande jugée indispensable par certains sera totalement inutile pour d'autres ;
- internet est notre meilleur ami, en particulier avec une question posée en anglais de la forme « *What is the command line for [votre besoin du moment] under Linux ?* »

Une fois l'utilitaire trouvé, il peut y avoir un nombre d'options qui peuvent s'ajouter. Celles-ci correspondent généralement au fait d'ajouter des « -a », « -r », « -o », etc qui peuvent être plus ou moins cryptiques. Plutôt que de ré-inventer la roue, il est très souvent bien plus utile d'utiliser ces options que de recoder quelque chose qui utilise mal ledit outil. Encore une fois : « Inutile de ré-inventer la roue. » Surtout quand ce sera probablement moins bien fait que par des gens dont c'est le métier. Il arrive parfois que les forums indiquent la bonne option, mais pas toujours.

Pour continuer avec les dictons, en informatique, une des règles maîtresse tient en quatre lettres « RTFM » pour *Read That Fucking Manual*. L'écriture d'un manuel étant pénible, les gens qui se sont embêtés à la faire ne l'ont pas fait par plaisir mais pour que les gens utilisent correctement un programme à son plein potentiel. La commande `man` suivie du nom du

programme. La liste des options, et le manuel du programme est alors donné. Bien que le manuel puisse être long et/ou écrit dans un langage un peu cryptique, cela reste la meilleure source d'information disponible. Quitte à ensuite préciser sa question sur internet pour avoir des exemples illustrés utilisant ladite option. La touche  permet ensuite de fermer l'aide.

3.2 Système de fichier et arborescence

Si les nouveaux systèmes d'exploitation brouillent les cartes en essayant de cacher cela, sur un ordinateur, toutes les données enregistrées sont stockées dans un système de fichier. Et quoi qu'il se passe, ce système de fichier possède deux types d'objets principaux : les dossiers et les fichiers.

Ces deux structures forment l'arborescence de fichier. Cette arborescence fonctionne comme un système de coordonnées sur le disque dur.

Il y a une racine unique qui est le point de départ de toute l'arborescence. Ce point est l'origine. Sous Linux, cette racine correspond au à l'endroit « / »

Ensuite, chaque nouveau dossier correspond à une nouvelle branche ou ramification de l'arbre. Il est ainsi possible de spécifier de proche en proche où sont les choses. Le chemin correspond aux « coordonnées » de l'endroit. Le chemin est donné avec un caractère « / » pour indiquer un nouveau dossier.

Ainsi, le fichier situé au point suivant de l'arborescence :

```
/home/mverot/Téléchargements/Logiciels/test.pov
```

sera dans le dossier « Logiciels » placé dans le dossier « Téléchargements » lui-même dans le dossier « mverot » du dossier « home » situé dans la racine.

3.2.1 ▲ Mieux connaître l'arborescence : la commande ls

Pour pouvoir se déplacer le long de l'arborescence, il faut déjà la connaître. Pour cela, une des commandes les plus utilisées est `ls` (pour *list*). En indiquant un répertoire après la commande, alors celle-ci est exécutée pour le répertoire correspondant.

Dans sa version la plus basique, la commande va afficher tous les noms des dossiers et des fichiers. Certaines options vont permettre d'afficher plus ou moins d'informations (tableau 3.1). Ainsi, il est fréquent d'utiliser `ls -l` ou `ls -lrt`.

La commande `tree` permet de faire un listing analogue à celui obtenu avec la commande `ls -R`.

3.2.2 Les dossiers et fichiers particuliers

Le « home » Sous Linux, les dossiers particuliers n'ont pas la même structure que sous Windows. Un des dossiers les plus important est le « home ». Ce dossier correspond à votre dossier personnel et se situe au sein du dossier « /home ». Comme l'indique son nom : ce dossier est votre maison et n'appartient qu'à vous. Ce dossier a le même nom que votre identifiant sur la machine. Par exemple, pour moi, il s'agit de /home/mverot. Il y aura un home par utilisateur sur la machine. Et chaque utilisateur a tous les droits sur ce dossier (voir section 3.2.6). Ce répertoire est par contre privé et les autres utilisateurs ne peuvent pas voir ce qu'il y a chez vous sauf si vous les autorisez. C'est l'équivalent du dossier personnel sur Windows (« Mes Documents » ou « Ce PC » ou « C : \Users\ »).

| Option | Effet |
|--------|--|
| -l | version détaillée qui donne la taille des fichiers, leur dernière date de modification ainsi que les droits sur le fichier (section 3.2.6) |
| -t | classe les fichiers par dernière date de modification, utile pour avoir les derniers fichiers à la fin |
| -r | pour intervertir l'ordre (alphabétique ou chronologique en fonction des autres options utilisées) |
| -a | liste tous les fichiers, y compris les fichiers cachés qui commencent par un « . » |
| -R | lister les fichiers et dossiers de manière récursive (dans tous les sous-dossiers du répertoire courant) |
| -h | Indique la taille des fichiers sous forme plus lisible (Ko, Mo, etc) |

TABLEAU 3.1 – Quelques options courantes pour la commande `ls`.

dossiers « /bin » « /usr/bin » Ce dossier contient en général les programmes installés. Le dossier « /bin » contenant les programmes essentiels pour le système tandis que « /usr/bin » contient les programmes non essentiels. C'est un peu l'équivalent de « C:\Program Files » sous Windows

dossier « /media » Ce dossier contient les points de montage des médias amovibles (téléphone, disque dur, clé USB)

dossiers et fichiers cachés Les dossiers et fichiers commençant par un point « . » sont des fichiers cachés qui ne sont pas affichés par défaut par la commande `ls` ou dans l'explorateur de fichier.

3.2.3 ▲ Se déplacer avec la commande `cd`

Pour manipuler des fichiers, il est souvent nécessaire de se déplacer. Il est avant tout nécessaire de savoir où l'on est. Pour cela, il est possible d'utiliser la commande `pwd` (*print working directory*) qui indique le lieu où nous sommes sur l'arborescence.

La commande pour se déplacer est `cd` pour *change directory*.


Il est possible de se déplacer de deux manières dans l'arborescence :

- soit en « **chemin absolu** » c'est à dire en partant de la racine à chaque fois. C'est comme utiliser des coordonnées GPS pour trouver un point : tout est référencé par rapport à l'origine de l'arborescence qui est la racine. Dans ce cas, il faut forcément commencer par la racine et donc le caractère « / ». L'avantage de la navigation absolue est qu'elle ne dépend pas de l'endroit où on est.
- soit en « **chemin relatif** » c'est à dire par rapport à l'endroit où vous êtes (l'équivalent de « vous prenez la prochaine à gauche »). Dans ce cas, on indique le chemin par rapport au point de l'arborescence. Le déplacement relatif est avantageux car :
 - si le déplacement est petit, en général, la commande correspondante est plus courte donc plus rapide à taper ;
 - le déplacement relatif permet d'être indépendant de l'arborescence complète mais juste du « paysage local ». Donc par exemple si on décompresse un fichier chez

soi, il est possible de se déplacer de manière similaire si on part du même point de départ.

💡 Le home étant un dossier où il est courant de se déplacer, le symbole tilde « ~ » est équivalent à avoir tapé le chemin correspondant.

💡 Si on veut aller dans des sous-dossiers, il n’y a pas de problème particulier. S’il faut remonter dans l’arborescence, alors il faut utiliser « ../ » pour remonter d’un dossier, « ../../ » pour remonter de deux dossiers, etc..

💡 La touche tabulation  permet de faire de la complétion automatique. Si vous appuyez dessus, le système essaiera de compléter autant que possible le nom du fichier. Si jamais il y a plusieurs possibilités, en appuyant de nouveau sur la touche, le terminal indique les différentes possibilités restantes.

💡 Sans argument supplémentaire, la commande `cd` vous emmène dans votre home.

💡 « ./ » désigne le dossier courant.



| Nom | Modifié | Taille |
|-------------------------|------------------|----------------|
| tmp | 20/07/2023 18:02 | 31 éléments |
| run | 20/07/2023 16:53 | 50 éléments |
| bin | 20/07/2023 14:05 | 3 322 éléments |
| var | 04/01/2023 18:46 | 14 éléments |
| lib64 | 04/01/2023 18:46 | 3 éléments |
| media | 08/12/2022 16:48 | 3 éléments |
| home | 13/10/2022 00:00 | 2 éléments |
| mverot | 20/07/2023 14:07 | 110 éléments |
| Téléchargements | 20/07/2023 17:13 | 145 éléments |
| Images | 20/07/2023 15:19 | 104 éléments |
| Bureau | 20/07/2023 11:41 | 3 éléments |
| Dropbox | 19/07/2023 23:27 | 95 éléments |
| Cours | 20/07/2023 17:24 | 23 éléments |
| python | 22/06/2023 11:22 | 82 éléments |
| Cours-python | 20/07/2023 17:58 | 12 éléments |
| images | 20/07/2023 17:53 | 14 éléments |
| exo | 29/06/2023 22:57 | 1 élément |
| cours_python.tex | 20/07/2023 17:58 | 16,7 Kio |
| cours_python.toc | 20/07/2023 17:58 | 7,1 Kio |
| cours_python.synctex.gz | 20/07/2023 17:58 | 85,3 Kio |
| cours_python.pdf | 20/07/2023 17:58 | 447,7 Kio |

FIGURE 3.1 – Morceau d’arborescence.

Ainsi, pour l’arborescence donnée figure 3.1, toutes les commandes suivantes sont équivalentes :


```
$ pwd
/home/mverot
$ cd Dropbox/Cours/python/Cours-python/
$ cd ../Dropbox/Cours/python/Cours-python/
-----
$ pwd
/home/mverot/Dropbox/Cours/python/Cours-python/images
$ cd ../
```

```
-----
$ cd /home/mverot/Dropbox/Cours/python/Cours-python/
-----
$ cd ~/Dropbox/Cours/python/Cours-python/
```

3.2.4 ▲ Création, modification, suppression de fichiers ou dossiers

Les noms de fichier : les choses à faire et à ne pas faire Même si nous sommes au 21^e siècle, que l’UTF-8 existe, la manipulation de fichiers reste une opération de bas niveau, qui peut facilement être perturbée et mener à des catastrophes monumentales si mal maîtrisée. Bien qu’il soit tout à fait possible de contourner ces recommandations, il y aura **toujours** un moment où les avoir outrepassé vous mènera à des soucis plus ou moins importants.^a La liste ci-dessous n’est pas forcément exhaustive, mais vous aidera à avoir une arborescence propre et facilement manipulable.

1. Ne mettez **JAMAIS** d’espaces dans vos noms de fichiers : en ligne de commande, un espace indique que l’on donne un nouvel argument au programme. Si les caractères ne sont pas échappés avec un « \ », alors **beaucoup** de choses peuvent se passer en fonction de la commande.
2. Ne mettez JAMAIS d’espaces dans vos noms de fichiers, parce que ça peut vraiment mener à une catastrophe.^b
3. N’utilisez pas d’espace dans vos noms de fichiers, parce que c’est vraiment source de problème.^c
4. Évitez les caractères non ASCII (de base) dans vos noms de fichiers. En particulier les caractères accentués, guillemets, de ponctuation (sauf le . avant l’extension de fichier), etc.
5. Pour les fichiers numérotés, mettez du padding (des zéros) pour que l’ordre de classement corresponde à l’ordre numérique (0001, 0002, 0003, etc plutôt que 1,2,3,4, ect). Car l’ordre de tri courant est un tri alphabétique qui place le fichier « 2-output.out » après le fichier « 10-output.out ».
6. Pour les fichiers avec des dates dedans, préférez l’ordre année-mois-jour (2023-07-21 pour le 21 juillet 2023) plutôt que l’ordre mois-jour-année (21-07-2023). Encore une fois car avec l’ordre année-mois-jour les fichiers seront naturellement classé par ordre chronologique. Ce qui ne sera pas le cas sinon.
7. Si possible, mettez une extension à votre fichier pour indiquer explicitement à vos utilisateurs le type de fichier fourni. (oui, ce n’est pas nécessaire, mais c’est gentil pour les autres !) Et ce n’est pas parce que Windows a décidé de masquer cette information dans son navigateur que c’est une bonne idée !

 Il est possible d’utiliser des jokers ou *wildcards* pour les noms de fichier afin de rendre les opérations plus souples (tableau 3.2).

a. Si si, surtout quand vous vous y attendrez le moins et que vous aurez fait une grosse bêtise.
 b. Oui, c’est suffisamment important pour être dit deux fois.
 c. Et même une troisième fois !

| Joker | Rôle | Exemples |
|-------|--|--|
| ? | un unique caractère | cat?.png / cata.png cat0.png mais pas cathy.png |
| * | n'importe quel caractère | cat* / cathy.png catapulte.png cata.txt mais pas cabale.png |
| [xyz] | n'importe quel caractère indiqué entre les crochets une fois | test[abc] / testa testb testc mais pas testab ni test |

TABLEAU 3.2 – Caractères et wildcards.

Déplacer ou renommer un fichier ou un dossier : la commande `mv` La commande `mv` (*move*) permet de déplacer un fichier il faut indiquer le fichier source en premier et la destination ensuite.

```
$ mv ancien-nom.txt nouveau-nom.txt
$ mv fichier-a-deplacer.txt nouveau-dossier/nouveau-nom.txt
$ mv fichier-a-deplacer.txt nouveau-dossier/
```

Copier un fichier ou un dossier : la commande `cp` La commande `cp` (*copy*) permet de copier les fichiers ou dossiers, sa syntaxe est analogue à celle de la commande `mv`. Pour copier des dossiers intégralement, il faut utiliser l'option « -r » ou « -R ».

Supprimer un fichier ou un dossier : la commande `rm` La commande `rm` (*remove*) permet de supprimer les fichiers ou dossiers, pour supprimer un dossier, il faut utiliser l'option « -r » ou « -R » (sinon, il existe aussi la commande spécifique `rmdir` pour supprimer les dossiers vides uniquement).

💡 **La commande `rm` est TRÈS dangereuse**, en particulier quand on la combine avec des options et des jokers. Ainsi, la commande « `rm -rf *` » peut supprimer tous les fichiers et sous-dossiers du répertoire courant sans aucun avertissement. Pour peu qu'une commande `cd` ait emmené dans le mauvais répertoire, alors on peut se retrouver à effacer le mauvais répertoire et tout ce qu'il contient!

Créer un dossier : la commande `mkdir` La commande `mkdir` (*make directory*) permet de créer un dossier.

Créer un fichier : la commande `touch` La commande `touch` permet de créer des fichiers vides, (elle permet également de mettre à jour la date de dernière modification d'un fichier)

3.2.5 ▲ Trouver des fichiers

Pour trouver des fichiers, les navigateurs restent malgré tout peu efficaces. Dans le terminal, la commande `find` est extrêmement efficace. Par défaut, la recherche s'effectue à partir du répertoire courant mais il est possible de préciser un autre répertoire. L'option « -name » permet de faire une recherche sur le nom de fichier et l'option « -iname » pour une recherche insensible à la casse (aux majuscules et minuscules).

Pour trouver un fichier contenant le mot python dans son home :

```
$ find ~ -name '*python*'
```

Pour trouver un fichier contenant le mot Python dans le répertoire courant :

```
$ find . -iname '*python*'
```

Les options de la recherche sont très nombreuses, la lecture du manuel de la commande indique comment faire des recherches plus spécifiques : profondeur de la recherche, permissions, par droits, avec des expressions régulières (section 10), etc.^d

3.2.6 ▲ Droits

3.2.6.1 Exécuter un programme/fichier

Pour exécuter un programme, il faut le lancer en précisant le nom du fichier pour le différencier d'une ligne de commande.

```
$ ./script.py
```

permettra ainsi d'exécuter le fichier "script.py" pour peu que celui-ci ait un shebang et soit exécutable (voir ci-après, sections 3.12 et 4.6).

3.2.6.2 Connaître les droits

Comme les ordinateurs peuvent être partagés, Les systèmes UNIX assurent un compartimentage strict des données. Il y a ainsi plusieurs catégories d'utilisateurs (tableau 3.3).

| Lettre | Groupe |
|--------|---|
| u | l'utilisateur ou <i>user</i> propriétaire du fichier, cette information est donnée par la commande <code>ls -l</code> par la première colonne après le premier nombre et avant le deuxième nombre (qui est la taille du fichier) |
| g | le groupe ou <i>group</i> , c'est à dire un groupe d'utilisateurs, cette information est donnée par la commande <code>ls -l</code> par la deuxième colonne après le premier nombre et avant le deuxième nombre (qui est la taille du fichier) |
| o | les autres ou <i>other</i> , tous les autres utilisateurs |
| a | tout le monde, soit les trois groupes précédents |

TABLEAU 3.3 – Les différents groupes d'utilisateurs.

Chaque groupe d'utilisateurs a ainsi des droits spécifiques sur chaque fichier et chaque dossier. Cela évite ainsi que n'importe qui puisse consulter ce qu'il y a dans votre home.

Il y a également plusieurs types d'autorisation listés dans le tableau 3.4.

La commande `ls -l` permet d'indiquer les droits de chaque groupe sur le fichier.

```
$ ls -l
-rw-rw-r-- 1 mverot mverot      525 avril 18 13:32 fireflyFileOne.inp
drwxr-xr-x 9 mverot mverot    4096 févr. 25 21:53 Zotero
```

d. Bonne lecture pour la description de la centaine d'options disponibles!

| Lettre | Chiffre | Droit |
|--------|---------|---|
| r | 4 | Droit de lecture : permet d'accéder à un fichier mais pas de le modifier. |
| w | 2 | Droit d'écriture : permet d'écrire ou modifier le fichier. |
| x | 1 | Droit d'exécution : permet de lancer le fichier en tant que programme. |

TABLEAU 3.4 – Les différents droits possibles.

- La première lettre indique s'il s'agit d'un dossier (lettre « d »), d'un lien (lettre « l », voire 3.4) ou d'un fichier (avec un tiret « - »)
- Les trois lettres suivantes (2 à 4) indiquent les droits du propriétaire. Ici, le propriétaire a le droit de lecture et modification sur le fichier "fireflyFileOne.inp" et tous les droits sur le dossier "Zotero".
- Les trois lettres suivantes (5 à 7) indiquent les droits du groupe. Ici, droit de lecture et modification sur le fichier "fireflyFileOne.inp" et droit de lecture et d'exécution sur le dossier "Zotero".
- Les trois lettres suivantes (8 à 10) indiquent les droits des autres utilisateurs. Ici, droit de lecture sur le fichier "fireflyFileOne.inp" et droit de lecture et d'exécution sur le dossier "Zotero".

3.2.6.3 Modifier les droits

Il est possible de changer les droits avec la commande `chmod` (*change mode*). Cette commande attend en deuxième argument le changement de droits à appliquer puis pour finir le fichier ou dossier sur lequel appliquer le changement.


Pour indiquer le changement de droit, il faut indiquer le groupe concerné (voir tableau 3.3). Ensuite si on veut ajouter (+), définir (=) ou retirer (-) certains droits et pour finir les droits concernés (tableau 3.4) – pour cela, on peut soit indiquer les lettres, soit un chiffre compris entre 0 et 7 correspondant à la somme des chiffres des droits concernés.

Ainsi, la commande suivante retirera le droit de lecture et d'écriture à tout le monde sur le fichier "secretfile.txt".

```
$ chmod a-rw secretfile.txt
```

Tandis que la commande suivante donnera accès aux autres utilisateurs pour qu'ils puissent exécuter le programme "pythonkiller.py"

```
$ chmod o+x pythonkiller.py
```

 *En pratique, nous nous servirons beaucoup de la commande `chmod +x truc.py` pour rendre nos scripts pythons exécutables. En effet, sans cette étape, il sera impossible de les exécuter.*

3.3 ▲ Aller plus vite dans le terminal

Les lignes à taper dans le terminal peuvent être plus ou moins longues, pour s'y déplacer plus rapidement, il y a quelques astuces listées tableau 3.5. Une version plus complète est disponible sur la page suivante [Handy Keyboard Shortcuts for the Linux Bash Terminal](#).












| Commande | Effet |
|---|---|
|  +  | Aller au début de la ligne |
|  +  | Aller à la fin de la ligne |
|  +  | Effacer après le curseur |
|  +  | Effacer avant le curseur |
|  +  /  | se déplacer d'un mot vers la gauche ou vers la droite |

TABLEAU 3.5 – Raccourcis au sein du terminal.

3.4 ■ Les liens

Outre les fichiers et les dossiers, il existe un troisième type d'objet dans l'arborescence : les liens. Cela permet de faire ... un lien sur un fichier sans le copier intégralement.

Cela peut-être utile si :

- on veut utiliser un fichier dans un répertoire d'analyse alors que celui-ci se trouve dans un répertoire de production de données ;
- on veut éviter de copier ou déplacer un fichier si celui-ci est très volumineux.
- un même fichier est utilisé à plein d'endroits différents. Il est alors plus avantageux que les modifications de ce fichier soient immédiatement répercutées partout où il est utilisé.

Il s'agit presque d'un raccourci mis à part que l'environnement du lien reste celui de son répertoire.

Pour créer un lien, la commande est `ln source lien` où "source" indique le fichier sur lequel on va faire un lien et "lien" sera le nom du lien. Il existe deux types de liens différents :

- les liens en dur *hard links* qui ont l'avantage de continuer à pointer sur le fichier source même si celui-ci est déplacé ou renommé (moyennant quelques restrictions : on ne peut pas faire de lien en dur sur un dossier ou sur un autre disque).
- les liens symboliques ou *soft links* qui peuvent servir pour des dossiers mais qui deviennent cassés si jamais la source est déplacée ou renommée.

La seule différence entre les deux est que pour créer un lien symbolique, il faut utiliser l'option « -s ».

```
$ ln fireflyFileOne.inp ./lien-dur
$ ln -s fireflyFileOne.inp ./lien-symbolique
$ ls -l
-rw-rw-r-- 2 mverot mverot      525 avril 18 13:32 lien-dur
-rw-rw-r-- 2 mverot mverot      525 avril 18 13:32 fireflyFileOne.inp
lrwxrwxrwx 1 mverot mverot       18 juil. 22 01:59 lien-symbolique ->
  fireflyFileOne.inp
```

On peut voir que le lien dur a exactement les mêmes caractéristiques que le fichier original (taille comprise) alors que le lien symbolique a une date de modification différente et est beaucoup plus petit en taille. Il est également indiqué avec une flèche pour indiquer le fichier auquel il fait référence.

3.5 Redirection de la sortie

Beaucoup de commandes affichent des choses dans le terminal. Cependant, il peut être utile de stocker le résultat de ces commandes dans un fichier. Cela est permis grâce aux opérateurs de redirection qui sont les suivants :

- `>` redirige la sortie vers le fichier indiqué en **écrasant** le contenu du fichier si jamais il existe déjà.
- `>>` redirige la sortie vers le fichier indiqué en **ajoutant** le contenu à la fin du fichier si jamais il existe déjà.
- `<` permet à l'inverse de prendre un fichier en tant qu'argument d'une commande.

3.6 Quelques utilitaires

3.6.1 Connaître l'espace disque et la taille de certains dossiers

Pour les futurs utilisateurs de centre de calcul, le respect par chacun des utilisateurs des différents espaces disque est **CRUCIAL**. C'est une source de tensions entre utilisateurs et de dysfonctionnement importante uniquement liée à l'activité humaine. En général, chaque utilisateur a droit à différentes tailles d'espace : un certain quota individuel dans le home qui est relativement petit, un espace plus grand et partagé dans un répertoire de travail appelé "scratch".

La commande `df -h` (l'option "-h" permettant d'avoir les tailles écrites en format plus facilement lisible) liste tous les disques et leur utilisation.

```
$ df -h
Filesystem      Size  Used Avail Use% Mounted on
tmpfs           3,2G  2,6M  3,1G   1% /run
/dev/nvme0n1p7 480G  274G  182G  61% /
tmpfs           16G   352M   16G   3% /dev/shm
tmpfs           5,0M   4,0K   5,0M   1% /run/lock
/dev/nvme0n1p1 286M  119M  168M  42% /boot/efi
tmpfs           3,2G   132K   3,2G   1% /run/user/1000
```

Dans l'exemple, on peut ainsi voir que le disque est utilisé à 61% avec encore 182 Go de libre pour un disque d'une capacité de 480 Go.

La commande `du -h` permet de connaître la taille d'un dossier. En l'exécutant depuis son home, il est alors possible de vérifier si on dépasse son quota ou non.

Règles d'usage sur des clusters de calcul En général, sur un cluster, le home est censé contenir les fichiers source de ses calculs et les fichiers de sortie condensés (indiquant des énergies ou résultats principaux). Cet espace est généralement « le nerf de la guerre » car il contient les fichiers importants des utilisateurs, il est donc généralement archivé, sauvegardé avec différentes options. Il est généralement limité à quelques dizaines de Giga-octets. Sa taille réduite et le fait qu'il soit sauvegardé implique la règle suivante :

« **On ne calcule JAMAIS dans son home.** »

Cela permet :

- d'éviter de transférer des fichiers volumineux avec un faible débit;

- d'éviter de consommer de l'espace disque partagé avec d'autres utilisateurs, ce qui pourrait compromettre le bon fonctionnement global du cluster (tous les utilisateurs utilisant leur home);
- d'éviter de consommer des ressources pour la duplication et l'archivage des données du home;
- de ralentir le remise en route du cluster en cas de saturation de l'espace disque : les administrateurs systèmes ne pouvant pas faire de ménage dans le home sans risquer de faire de dégâts, alors qu'ils peuvent plus facilement libérer de l'espace sur des dossiers partagés mais non sauvegardés.

De plus, il faut veiller à faire régulièrement le ménage dans tous ses dossiers, y compris dans les dossiers de calcul et ne pas hésiter à archiver certains fichiers de données volumineux (pouvant parfois faire plusieurs tera-octets). L'espace de stockage n'est jamais gratuit, même s'il a tendance à toujours augmenter avec le temps.

☀ Dans le cadre de l'UE, les calculs que nous allons faire étant brefs, nous exécuterons nos fichiers dans le home. Mais dès que l'on a des opérations dont la durée totale dépasse la minute, il faut calculer sur l'espace dédié adapté. (Qu'il s'agisse d'un unique gros calcul sur plusieurs nœuds de plusieurs heures ou de milliers de calculs très brefs.)

3.6.2 Les fichiers texte

En tant que scientifiques, il sera courant de manipuler des fichiers de données créés par des programmes donc à la structure relativement fixe. Il existe toute une série de petits utilitaires qui peuvent servir pour manipuler les fichiers texte. Sans chercher à être exhaustif, le but est ici d'en donner une description succincte pour savoir où chercher en cas de besoin.

3.6.2.1 ▲ Trouver une ligne contenant une chaîne de caractère dans plusieurs fichiers : **grep**

La commande **grep** est une commande extrêmement utile pour afficher le contenu d'une ligne contenant une ligne de caractère bien précise. Cela peut aussi bien être une valeur pour une pression donnée, une énergie calculée, etc. Il est possible d'utiliser des expressions régulières (10), ainsi que de nombreuses options, bien évidemment toutes décrites dans le manuel.

Par exemple, pour trouver toutes les lignes contenant la chaîne de caractère "E(RAM1)" dans les fichiers avec l'extension ".log" dans les sous-dossiers du répertoire courant. On a donc récupéré une valeur dans 6 fichiers différents en une seule commande !

```
$ grep 'E(RAM1)' */*.log
1-4-opt/1-4-opt.log: SCF Done: E(RAM1) = -0.135738260762
1-5-opt/1-5-opt.log: SCF Done: E(RAM1) = -0.154419935035
1-8-opt/1-8-opt.log: SCF Done: E(RAM1) = -0.154062741345
2-3-opt/2-3-opt.log: SCF Done: E(RAM1) = -0.145644211402
2-6-opt/2-6-opt.log: SCF Done: E(RAM1) = -0.150934360839
2-7-opt/2-7-opt.log: SCF Done: E(RAM1) = -0.150202328553
```

3.6.2.2 Voir la fin d'un fichier : tail

Pour les personnes faisant des simulations, il est également courant de chercher à voir si elles sont finies ou non. En général, les programmes utilisés écrivent une ligne particulière en toute fin de fichier lorsque le calcul est fini. La présence de cette ligne en fin de fichier ou non permet alors de vérifier l'état du calcul. La commande `tail` permet ainsi de voir la fin du fichier sans avoir à ouvrir de programme tierce.

Ci-dessous, un exemple pour afficher la dernière ligne des fichiers en .log dans les sous-dossiers du répertoire courant. Dans ce cas, tous les calculs se sont correctement finis vu qu'il est indiqué "Normal termination".

```
$ tail -n 1 -q */*.log
Normal termination of Gaussian 09 at Mon Apr 11 23:40:49 2022.
Normal termination of Gaussian 09 at Mon Apr 11 23:40:56 2022.
Normal termination of Gaussian 09 at Mon Apr 11 23:41:05 2022.
Normal termination of Gaussian 09 at Mon Apr 11 23:41:16 2022.
Normal termination of Gaussian 09 at Mon Apr 11 23:41:22 2022.
Normal termination of Gaussian 09 at Mon Apr 11 23:41:27 2022.
```



La commande `head` fait l'inverse en affichant le début d'un fichier.

3.6.2.3 Concaténer des fichiers : cat

La commande `cat` (*catenate*) permet de mettre plusieurs fichiers textes bout à bout. Elle permet aussi de passer le contenu d'un fichier dans la sortie du terminal (eventuellement pour pouvoir enchaîner des commandes voir 3.7).

Pour concaténer deux fichiers dans le fichier "out.txt", il faut utiliser la commande suivante :

```
cat fichier1.txt fichier2.txt > out.txt
```

3.6.2.4 Comparer des fichiers : diff et wdiff

Les commandes `diff` (*difference*) et `wdiff` (*word difference*) permettent de comparer des fichiers. La commande `diff` compare des lignes complètes alors que `wdiff` compare mot à mot. La commande `colordiff` peut permettre de mettre en évidence les différences avec de la couleur (si elle est disponible). Cela peut être très utile pour savoir quel fichier correspond à la dernière version ou analyser les différences (par exemple pour voir les changements effectués par un collaborateur sur un article ou un programme).

3.6.2.5 Faire des modifications de fichiers (remplacement de chaîne de caractère, etc) : sed et awk

Il peut être très utile d'automatiser la création de fichier. Par exemple pour faire varier un paramètre de manière discrète. En général, cela se traduit par le fait de modifier un chiffre ou une valeur sur une unique ligne d'un fichier d'entrée. Plutôt que de créer ces fichiers à la main, il peut être (beaucoup) plus simple de partir d'un fichier et faire des modifications. Pour cela, les commandes `sed` et `awk` sont des outils de choix. Il existe des livres complets destinés à l'utilisation de ces deux commandes. Pour simplifier les choses, `sed` est un peu plus limité que `awk` mais est aussi relativement plus facile à maîtriser pour les opérations

simples et courantes. Les deux programmes sont capables d'utiliser les expressions régulières pour faire des opérations de remplacement (section 10). `awk` est également capable de faire des traitements plus sophistiqués sur des données tabulaires, faire des opérations mathématiques sur des données, etc.

Sans rentrer dans les détails, quelques exemples sont donnés pour faire des remplacements basiques avec la commande `sed`. Ce dernier fonctionne par défaut sur des lignes uniquement.

Pour remplacer la chaîne de caractère "temperature=24" par "temperature=30" dans le fichier "input24.txt" :

```
sed -e 's/temperature=24/temperature=30/' input24.txt > input30.txt
```

L'option "-e" indique d'exécuter la commande donnée entre guillemets, le "s" indique que l'on fait une substitution(remplacement) les trois slash "/" séparent d'un côté le motif recherché et de l'autre le motif de substitution. Par défaut, `sed` n'effectue qu'un remplacement par ligne, si on veut remplacer toutes les occurrences, il faut ajouter l'option "g" après le "/" final. De même, si on veut limiter la substitution à certaines lignes ou une gamme de ligne, alors il faut l'indiquer avant le "s" initial :

```
sed -e '24s/é/e/g' input24.txt > input30.txt
```

Remplacera ainsi tous les caractères "é" en "e" à la ligne 24.

Il est aussi possible de supprimer des lignes, en ajouter, utiliser des plages de valeur, etc. Un bon tutoriel sur le sujet vous aidera à progresser si jamais vous en avez l'utilité. On verra qu'il est possible de faire des choses similaires en python, mais cela pourra nécessiter plus d'efforts.

Pour `awk`, n'étant pas expert dans le domaine, je vous renvoie également à un bon tutoriel si jamais vous en avez besoin.

3.6.3 Les fichiers pdf

Le tableau 3.6 vous liste quelques commandes qui peuvent s'avérer utiles pour manipuler des documents pdf.

Il peut être utile d'utiliser l'utilitaire `ghostscript` pour réduire la taille des pdf contenant des images haute résolution – comme un rapport de stage. La commande suivante peut permettre de se ramener à une taille plus raisonnable :

```
gs -sDEVICE=pdfwrite -dCompatibilityLevel=1.4 -dPDFSETTINGS=/printer -
dNOPAUSE -dQUIET -dBATCH -sOutputFile="fichier-compresse.pdf" fichier-
enorme-car-plein-dimages.pdf
```

L'option /ebook à la place de /printer permet une réduction encore plus importante de la taille (au détriment de la résolution des images).

3.6.4 Reconnaissance de caractères : tesseract

Pour tout ce qui concerne la reconnaissance de caractère, la commande `tesseract` est très robuste. Il est possible d'indiquer la langue dans laquelle la reconnaissance de caractère doit être effectuée. Pour de la reconnaissance de caractère sur des textes contenant des formules mathématiques, je n'ai par contre pas de solution miracle à proposer.

Pour faire de la reconnaissance de caractère en français sur le fichier "file.png" :

| Commande | Utilisation |
|--------------------------|---|
| <code>pdftotxt</code> | convertit un pdf en fichier texte (sans faire de reconnaissance de caractère!), l'option "-layout" permet d'essayer de garder la mise en page originale (surtout pour les tableaux), la commande <code>pdf2txt</code> est similaire |
| <code>pdfseparate</code> | sépare les pages d'un pdf <code>pdfseparate cours_python.pdf %d-cours-python.pdf</code> |
| <code>pdfunite</code> | réunit plusieurs pdf |
| <code>pdfimages</code> | extraît les images d'un pdf |
| <code>pdfjam</code> | pour mettre deux pages par feuille, et faire bien d'autres choses <code>pdfjam --nup 2x1 --landscape -o out-nup.pdf fichier-input.pdf</code> |
| <code>pdfbook2</code> | pour avoir une impression en format livret (pour une reliure au centre) |
| <code>gs</code> | ghostscript, utilitaire très puissant pour modifier les pdf, les convertir en image, etc |

TABLEAU 3.6 – Quelques commandes liées à la manipulation de documents pdf

```
$ tesseract "file.png" "outputText" -l fra
```

3.6.5 Les images : ImageMagick

Pour tout ce qui concerne la manipulation d'image, l'utilitaire ImageMagick permet d'effectuer une large palette d'opérations. la commande correspondante est `convert`. Il est possible de couper, redimensionne, gérer la transparence, faire des rotations, enlever le fond d'une image, faire de la détection de contours, etc. Encore une fois, plutôt que de longuement décrire l'utilisation de ce programme, ce sera plutôt de l'aide en ligne qui vous indiquera la bonne combinaison d'options adaptée à vos besoins.

3.6.6 Les vidéos : ffmpeg

Le programme `ffmpeg` est l'équivalent d'ImageMagick pour les vidéos, les options sont tout aussi nombreuses et permettent de faire de l'extraction de la conversion, etc.

3.6.7 Compression et décompression

Pour compresser en zip des fichiers, la commande est de la forme :

```
$ zip archive *
```

Pour mettre tous les fichiers du répertoire courant dans le fichier "archive.zip". La commande pour dézipper est `unzip`.

Pour la compression d'un ensemble de fichier, si la taille est un enjeu, il faut mieux utiliser le « format » `.tar.gz` qui compresse plus efficacement un ensemble de fichier alors que zip comprime les fichiers individuellement.

Pour décompresser une archive, la commande à utiliser est la suivante :

```
tar -xvzf archive.tar.gz
```

Et pour compresser :

```
tar -cvfz archive *
```

Les options "-x" et "-c" indiquant l'extraction ou la création respectivement. Les options "-v" (*verbose*) sont là pour afficher les fichiers concernés, l'option "-z" indique le format de compression ou décompression (gzip) et l'option "-f" indique que le fichier est donné en paramètre.

3.7 ■ Enchaînement de commande : le pipe

Si chaque commande peut être individuellement puissante, il est possible de faire des choses encore plus puissantes en combinant plusieurs d'entre elles. Le caractère `|` ou pipe permet de faire cela. Dans ce cas, il est possible d'enchaîner des commandes, par exemple trouver des fichiers avec la commande `find` pour ensuite les déplacer avec la commande `mv`. En fonction des situations, la commande `xargs` permet d'utiliser la sortie d'une commande précédente en tant qu'argument pour la commande suivante.

Par exemple, pour trouver la dernière occurrence d'une chaîne de caractère, il est possible de combiner les commandes `grep` et `tail` :

```
$ grep 'E(RAM1)' anthracene-2-7-opt.log
SCF Done: E(RAM1) = -0.145473375628 A.U. after 16 cycles
SCF Done: E(RAM1) = -0.149406876134 A.U. after 13 cycles
SCF Done: E(RAM1) = -0.150154480084 A.U. after 12 cycles
SCF Done: E(RAM1) = -0.150196887686 A.U. after 11 cycles
SCF Done: E(RAM1) = -0.150202328553 A.U. after 10 cycles
$ grep 'E(RAM1)' anthracene-2-7-opt.log | tail -n 1
SCF Done: E(RAM1) = -0.150202328553 A.U. after 10 cycles
```

La commande `tail` utilise ainsi le résultat de la commande `grep` pour ne garder que la dernière ligne et donc afficher le résultat final de l'énergie après optimisation de la géométrie (qui est le seul chiffre intéressant).

Ainsi, la combinaison de deux commandes basiques peut rapidement mener à des résultats très puissants. D'autant plus qu'il est possible d'utiliser plusieurs pipe de suite et donc d'encore démultiplier la puissance des différentes commandes.

3.8 ■ Les alias et le fichier .bashrc

Il arrive d'avoir à taper régulièrement des commandes avec certaines options. Pour cela, il est parfois utile de se faire des raccourcis personnels. Pour cela, il est possible de créer des alias qui sont de nouvelles commandes personnalisées. Pour cela, le mécanisme passe par un fichier dans lequel on définit ces alias : le fichier ".bashrc" qui se trouve dans la racine du home. Par défaut, ce fichier est caché. Il faut donc commencer par ouvrir ce fichier avec les commandes suivantes :

```
$ cd
$ gedit .bashrc &
```

Le programme `gedit` permet alors de modifier le fichier pour ajouter ses alias. Pour cela, il suffit d'ajouter un ligne commençant par alias, puis sa définition.

Par exemple, pour avoir directement l'affichage des données sous forme complète classées par ordre chronologique, il est possible d'utiliser la ligne suivante :


```
#mes alias
alias ll='ls -lrt'
```

Il faut ensuite enregistrer le fichier puis forcer le système à le recharger pour qu'il prenne en compte l'alias nouvellement défini. Cela se fait avec la commande `source .bashrc`. Il est alors possible d'utiliser directement votre nouvel alias.

💡 Le fichier `.bashrc` contient également des informations importantes, et s'il est mal configuré, cela peut mener à des catastrophes. Il est donc de bon ton de **toujours** faire une copie de sauvegarde avant de le modifier pour pouvoir revenir en arrière.

💡 Le fichier `.bashrc` est ce qui permet de personnaliser l'environnement, il est généralement utile d'en garder une archive pour revenir à un terminal configuré aux petits oignons en cas de changement de machine ou d'utilisation d'un nouvel environnement de travail.

3.9 ■ Environnement : PATH

Le système va chercher les commandes disponibles dans certains répertoires particuliers du système. L'ensemble de ces dossiers s'appelle le PATH. Pour le visualiser, il est possible d'utiliser la commande suivante :

```
$ echo $PATH
/home/mverot/.local/bin:/usr/local/sbin:/usr/local/bin:/usr/sbin:/usr/bin:/sbin:/bin:/usr/games:/usr/local/games:/snap/bin
```

Chaque répertoire utilisé est séparé par le symbole `:`. Il est possible de savoir exactement où se trouve chaque programme avec la commande `which`.

Sur un environnement partagé, en général, si l'administrateur installe un logiciel, il fait en sorte que ce dernier soit accessible à tous les utilisateurs en s'assurant que le dossier d'installation fasse partie du PATH. Cependant, il arrive également que certains utilisateurs aient à installer des programmes pour leurs besoins personnels. Il est alors intéressant de les ajouter au PATH pour y avoir accès quel que soit le répertoire courant.

Pour faire l'ajout de manière temporaire en ajoutant par exemple le dossier "Scripts" de son home :

```
export PATH="$PATH:$HOME/Scripts"
```

💡 Attention, la modification du PATH, si elle est mal faite peut amener à une catastrophe : on peut par exemple perdre l'accès à tous les programmes si on a enlevé les répertoires importants. Il faut donc être minutieux et rigoureux lors de ces opérations.

Il est également possible de faire l'ajout de manière permanente en modifiant le fichier `.bashrc` :

```
$ cd
$ gedit .bashrc &
##ajouter la ligne suivante au fichier puis l'enregistrer
PATH="$PATH:$HOME/Scripts"
$ source .bashrc
```


💡 Le fichier `.bashrc` contient également des informations importantes, et s'il est mal configuré, cela peut mener à des catastrophes. Il est donc de bon ton de **toujours** faire une copie de sauvegarde avant de le modifier pour pouvoir revenir en arrière.

3.10 ■ Travail sur des machines distantes

Pour le calcul de grande ampleur, il est maintenant systématique d'avoir recours à des clusters de calcul. Pour cela, il faut travailler sur des ordinateurs distants. Le fait d'avoir à travailler à distance fait qu'en général, il n'est pas possible de s'y connecter avec une interface graphique. En effet, cela est couteux en bande passante et pour des interfaces partagées avec plusieurs centaines d'utilisateurs, cela demanderait trop de ressources. Un des outils privilégiés est le protocole `ssh`. Ce protocole est sécurisé et robuste.

Le protocole `ssh` permet de se connecter sur une machine distante. Cependant, en général, plutôt que d'aller directement sur les machines d'intérêt, il faut passer par une passerelle (*gateway*) (figure 3.2). Cette passerelle sert à rendre moins vulnérable aux attaques les machines qu'elle protège.

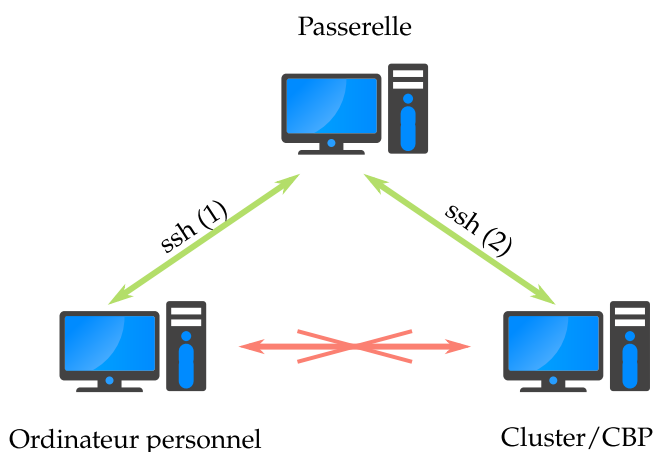


FIGURE 3.2 – Schéma traditionnel d'une connexion `ssh` via une passerelle pour accéder à un cluster. Il n'est pas possible de se connecter directement en `ssh` au cluster et il est nécessaire de passer par une passerelle.

3.10.1 Connexion sur des machines distantes : `ssh`

La commande pour se connecter en `ssh` à une machine est ... `ssh` il faut indiquer son identifiant en préfixe, suivi d'un "@" puis le nom de la machine. Si jamais son identifiant est le même sur les deux machines, alors il n'est pas nécessaire de le préciser.

Pour l'ENS de Lyon, il faut commencer par activer son accès `ssh` via l'ENT : <https://intranet.ens-lyon.fr/ent> (connexions réseaux > Activer l'accès SSH).

La procédure donnée ci-après indique comment se connecter à une machine du CBP depuis l'extérieur de l'ENS de Lyon. Depuis l'ENS, il n'est pas nécessaire de passer par la passerelle.

1. Pour se connecter à la passerelle de l'ENS de Lyon, il faut se connecter avec son nom d'utilisateur sur la machine `ssh.ens-lyon.fr` :

```
$ ssh mverot@ssh.ens-lyon.fr
```

Puis ensuite, il faut taper son mot de passe qui est le même que celui de l'ENS de Lyon pour le webmail.

2. Ensuite, pour se connecter au CBP, il faut choisir une des machines depuis la page <https://www.cbp.ens-lyon.fr/python/forms/CloudCBP> (accessible elle-même depuis <https://www.cbp.ens-lyon.fr/doku.php?id=ressources:ressources>) et lui ajouter le suffixe ".cbp.ens-lyon.fr" :

```
ssh mverot@c8220air7.cbp.ens-lyon.fr
```

Encore une fois, le mot de passe est le même que le mot de passe général de l'ENS de Lyon.

Il est possible d'enchaîner les deux commandes sur une seule ligne (noter l'ajout de l'option "-t") :

```
ssh -t mverot@ssh.ens-lyon.fr ssh -t mverot@c8220air7.cbp.ens-lyon.fr
```

Dans ce cas, deux mots de passe sont demandés : un pour se connecter sur la passerelle et un pour se connecter au CBP. Il s'agit ici du même mot de passe dans les deux cas, mais dans certains cas, il peut s'agir de deux mots de passe différents.

Lors de ces différentes manipulations, rien n'a changé en apparence (si ce n'est l'apparition de quelques messages pour indiquer la connexion sur une nouvelle machine). Cependant, nous avons bien changé de station de travail ! Pour le vérifier, il est possible d'utiliser la commande `hostname` puis `hostname -d` qui permet de donner le nom de la machine sur laquelle nous sommes et son nom de domaine. Pour fermer la connexion ssh, il suffit de taper la commande `exit` deux fois d'affilé (une fois pour fermer la connexion entre la passerelle et le CBP et la deuxième fois pour fermer la connexion entre l'ordinateur actuel et la passerelle).



Sous Windows, l'utilitaire putty permet de se connecter en ssh.

3.10.2 Au CBP : x2go

Au CBP, il est possible d'avoir une connexion avec une interface graphique complète via l'utilitaire x2go. Pour cela, toutes les informations sont disponibles sur la page suivante : <https://www.cbp.ens-lyon.fr/doku.php?id=ressources:x2go4cbp>. On travaille alors à distance « comme si on y était ». (ou presque : certains programmes ne s'ouvrent pas à distance à cause de contraintes techniques)

3.10.3 Copie à distance : scp

S'il est nécessaire d'utiliser des centres de calcul pour réaliser des simulations, il est en général très utile ou nécessaire de faire des étapes de post-traitement sur son ordinateur personnel (par facilité, pour avoir accès à certains programmes ou pour pouvoir utiliser certains programmes avec des interfaces graphiques). Il faut alors faire des transferts de fichier.

En ayant accès à un navigateur web, il existe plusieurs outils accessibles en étant membre de l'ENS :

- un serveur de transfert de fichier interne à l'établissement : <https://filesender.ens-lyon.fr>
- un autre plus générique pour les membres du réseau RENATER dont l'ENS fait partie <https://filesender.renater.fr/>.

Dans les deux cas, les fichiers peuvent faire plusieurs dizaines de giga-octets.

Lorsque l'accès à un navigateur n'est pas possible, il est possible d'utiliser la commande `scp`. Cette commande permet de faire une copie d'une machine A à une machine B. La première partie de la commande indique le fichier source et la deuxième partie la destination. Comme la commande est exécutée depuis la machine A (ou la machine B) il est en général plus facile d'écrire la partie de la commande concernant la machine locale. Pour la machine locale, il suffit de préciser le chemin (absolu ou relatif) et pour la machine distante, il faut préciser les informations de connexion (comme pour la commande `ssh`) puis utiliser le caractère `:` pour préciser le chemin sur la machine distante. Encore une fois, il faut rentrer son mot de passe sur la machine distante pour que le transfert soit effectif.

💡 Malheureusement, sur la machine distante, il n'est pas possible d'utiliser la complétion automatique vu que le terminal n'a pas accès à l'arborescence sur celle-ci.

Pour un utilisateur "mverot" et les deux machines A et B s'appelant respectivement "calvin.reseauA" et "hobbs.reseauB", si on cherche à transférer un fichier "data.out" dans le répertoire "Simulation" situé dans son home sur la machine A vers le répertoire "Analyse" dans le home de la machine B.

Si on est sur la machine A et que l'on veut copier sur la machine B :

```
$ pwd
/home/mverot/Simulation
$ hostname
calvin
$ scp data.out mverot@hobbs.reseauB:~/Analyse
$ scp ~/Simulation/data.out mverot@hobbs.reseauB:~/Analyse
```

Si on est sur la machine B et que l'on veut copier depuis la machine A :

```
$ pwd
/home/mverot/Analyse
$ hostname
hobbs
$ scp mverot@calvin.reseauA:~/Simulation/data.out .
$ scp mverot@calvin.reseauA:~/Simulation/data.out ~/Analyse
```

3.11 Gestion des processus

3.11.1 Fermer un processus qui bugue ou ralentit le système

Comme toujours, il peut arriver de faire des bêtises, avoir un programme qui plante ou autre. Pour cela, il est possible d'ouvrir un gestionnaire de processus (équivalent du bon vieux Ctrl+Alt+Suppr sous Windows). Pour cela, on utilise généralement la commande `top` qui liste les processus les plus gourmands en ressources. Il est en général utile de lister les processus qui nous appartiennent car il est en général impossible d'agir sur les autres. Pour cela, il faut utiliser l'option `-u` avec son nom d'utilisateur.

```
top - 11:29:32 up 5 days, 12:03, 4 users, load average: 1,30, 0,88, 0,90
Tasks: 448 total, 1 running, 447 sleeping, 0 stopped, 0 zombie
%Cpu(s): 1,8 us, 1,1 sy, 0,0 ni, 97,1 id, 0,0 wa, 0,0 hi, 0,0 si, 0,0 st
```

```
MiB Mem : 31763,1 total, 17084,9 free, 8225,0 used, 6453,1 buff/cache
MiB Swap: 2048,0 total, 1191,2 free, 856,8 used. 21814,6 avail Mem
```

| PID | USER | PR | NI | VIRT | RES | SHR | S | %CPU | %MEM | TIME+ | COMMAND |
|---------|--------|----|-----|---------|--------|-------|---|------|------|----------|------------|
| 2377227 | mverot | 20 | 0 | 1131,1g | 216860 | 99108 | S | 16,9 | 0,7 | 13:31.52 | brave |
| 2362307 | mverot | 9 | -11 | 1689300 | 16596 | 6720 | S | 5,0 | 0,1 | 8:25.29 | pulseaudio |
| 2362409 | mverot | 20 | 0 | 1950748 | 69960 | 43452 | S | 4,7 | 0,2 | 0:22.92 | konsole |
| 2375439 | mverot | 20 | 0 | 32,4g | 39452 | 29644 | S | 4,3 | 0,1 | 8:34.79 | brave |
| 2362051 | mverot | 20 | 0 | 3771764 | 50736 | 35436 | S | 4,0 | 0,2 | 12:18.70 | kwin_x11 |
| 2375432 | mverot | 20 | 0 | 33,1g | 148328 | 85188 | S | 2,3 | 0,5 | 15:19.85 | brave |
| 56021 | mverot | 20 | 0 | 4139756 | 75580 | 1136 | S | 2,0 | 0,2 | 16:39.96 | cryfs |
| 2378253 | mverot | 20 | 0 | 1131,1g | 822696 | 87644 | S | 1,0 | 2,5 | 1:48.56 | brave |
| 2378612 | mverot | 20 | 0 | 1131,1g | 823212 | 88236 | S | 1,0 | 2,5 | 1:46.16 | brave |
| 2377907 | mverot | 20 | 0 | 32,9g | 25844 | 24616 | S | 0,7 | 0,1 | 1:48.60 | brave |
| 2378797 | mverot | 20 | 0 | 1131,1g | 824040 | 87796 | S | 0,7 | 2,5 | 1:46.24 | brave |
| 2379065 | mverot | 20 | 0 | 1131,1g | 823844 | 87992 | S | 0,7 | 2,5 | 1:43.75 | brave |
| 2949277 | mverot | 20 | 0 | 1222456 | 161596 | 79952 | S | 0,7 | 0,5 | 1:54.29 | inkscape |
| 768457 | mverot | 20 | 0 | 16884 | 5840 | 4608 | R | 0,3 | 0,0 | 0:00.09 | top |

On peut alors voir l'utilisation du processeur (colonne "CPU") et de la RAM ("%MEM") pour chacun des processus. La colonne la plus utile est la colonne "PID" qui permet d'avoir l'identifiant du processus.

Une fois le processus fautif identifié, il est possible de le clore avec la commande `kill` suivie du nom du processus. En cas de processus récalcitrant à la commande précédente, l'option "-9" indiqué avant l'identifiant du processus fermera de manière plus agressive le processus.

```
$ kill 2377227
$ kill -9 2377227
```

3.11.2 Gérer l'exécution des processus dans le terminal

Par défaut, le lancement d'une commande bloque le terminal tant que le processus n'est pas fini. Si jamais la tâche dure longtemps ou que la commande ouvre une fenêtre, le terminal est alors inutilisable. Pour éviter ou contourner cela, il y a plusieurs moyens :

- Le premier est d'ajouter une esperluette "&" après la commande. Par exemple `$ gedit &` permet de lancer l'éditeur de texte `gedit` sans bloquer le terminal.
- `Ctrl` + `Z` permet de suspendre le processus, on reprend la main sur le terminal, mais le programme est arrêté. Pour reprendre le processus mis en pause, il faut utiliser la commande `fg`.
- Pour arrêter le processus qui bloquait le terminal : `Ctrl` + `C` (c'est l'équivalent du `kill` vu précédemment mais sans avoir besoin de chercher l'identifiant du processus)

commande `nohup`

3.12 Scripts et personnalisation

Jusqu'à présent, nous n'avons utilisé que des commandes qui tenaient sur une seule ligne, mais il peut être intéressant d'enchaîner des commandes sur un fichier (sans avoir besoin du pipe), utiliser des variables pour faire certaines opérations, etc. Pour cela, il est possible de créer des scripts en bash. L'extension correspondante est ".sh". Le fichier doit être exécutable et commencer par une ligne spéciale :

```
#!/bin/bash
```

Cette ligne est appelée "shebang" et permet d'indiquer au système le langage utilisé pour pouvoir l'interpréter correctement.

Il est possible de définir des variables avec le symbole "=" sans espace avant ni après. Pour les réutiliser, il faut ajouter un "\$" devant. Ainsi le script suivant enregistre le répertoire courant dans un variable "CURR_DIR" (*current directory*), puis crée un répertoire de travail (*working directory*) indiqué dans la variable "WORK_DIR", s'y déplace, y crée un fichier "testfile" avant de retourner dans le répertoire de départ.

```
CURR_DIR=$PWD
WORK_DIR=/scratch/mverot/
mkdir -p WORK_DIR
cd $WORK_DIR
touch testfile
cd $CURR_DIR
```

Il est possible d'utiliser des boucles sur des fichiers :

```
for f in *.png
do
    echo $f
done
```

permettra ainsi d'afficher le nom de tous les fichiers ayant l'extension png (équivalent de `ls *.png`).

Dans l'exemple ci-dessus, le fichier sans son extension est accessible avec la commande suivante : `${f%.png}`

3.13 Éditeurs de texte : IDE versus les deux indémodables vi et emacs

Pour éditer un fichier, il existe différents utilitaires. Sous Linux, il existe `gedit`, `nano` et bien d'autres équivalents. Les options sont plus ou moins évoluées, avec éventuellement de la coloration syntaxique, des aides à la saisie, etc. Pour éditer des scripts pythons, les IDE Spyder, pyzo sont également légion. Chaque logiciel a ses avantages et inconvénients propre.

Au-delà de ces éditeurs spécialisés, il existe deux programmes phares pour l'édition sans interface graphique dans le terminal : `vi` / `vim` et `emacs`. Là encore, la préférence pour l'un ou l'autre est une histoire de querelle de chapelle. Emacs utilise la syntaxe LISP et demande en général abondamment d'utiliser la touche `ctrl`. Vi utilise pour sa part des modes capable de faire différents type d'édition mais il est possible de s'y perdre. Dans les deux cas,

la maîtrise d'un seul de ces logiciels est suffisamment technique pour qu'on s'y consacre pleinement. Par contre, pour de l'édition de fichier, ils sont tous les deux généralement bien plus puissants que bon nombre d'IDE. IDE qui n'hésitent d'ailleurs pas à implémenter des fonctionnements directement inspirés de l'un ou l'autre pour permettre des modifications plus efficaces ou perfectionnées.

L'explication du fonctionnement de l'un ou l'autre de ces deux programmes est le sujet de nombreux livres, sites, tutoriels. Là encore, il faut s'en servir quotidiennement pour se perfectionner progressivement afin d'être capable de faire ce que l'on souhaite. La courbe d'apprentissage est raide mais extrêmement rentable sur le long terme pour ceux qui passeront beaucoup de temps à programmer ou lancer des simulations.

3.14 Ce qu'il faut retenir

- Les commandes données tableau 3.7
- Savoir qu'il faut éviter les espaces dans les noms de fichiers
- Savoir modifier le fichier `.bashrc` et le recharger avec la commande `source .bashrc` pour définir un alias ou modifier son PATH.
- Connaître le principe des passerelles pour les connexions en ssh.

| Commande | Utilisation |
|---|---|
| <code>man</code> | Manuel de la commande |
| <code>pwd</code> <code>ls</code> | Emplacement dans l'arborescence pour donner le répertoire courant Lister les fichiers et les sous-dossiers, « -l » pour une version exhaustive, « -t » pour trier par date, « -r » pour inverser l'ordre, « -a » pour afficher les fichiers cachés |
| <code>cd</code> | Déplacement dans l'arborescence. « ../ » pour remonter d'un dossier, « ./ » dossier courant « / » racine, « ~ » home. |
| <code>mv</code> <code>cp</code> <code>rm</code> <code>mkdir</code> | déplacer ou renommer un fichier ou des répertoires copier un fichier ou des répertoires supprimer un fichier ou des répertoires créer un répertoire |
| <code>find</code> | trouver un fichier ou un dossier « -name » pour indiquer le nom du fichier |
| <code>chmod</code> | changer les droits sur un fichier, « +x » pour rendre exécutable |
| <code>grep</code> <code>tail</code> <code>sed</code> | trouver les lignes contenant une chaîne de caractère précise dans un fichier afficher la fin d'un fichier faire des recherches/remplacer dans un fichier |
| <code>zip</code> / <code>unzip</code> <code>tar</code> | compression et décompression au format zip compression et décompression au format tar.gz « -xvfz » pour l'extraction, « -cvzf » pour la création |
| <code>df -h</code> <code>du -h</code> | connaître l'espace disque connaître la taille d'un dossier |
| <code>ssh</code> <code>exit</code> <code>scp</code> | connexion à une machine distante fermeture d'une connexion ssh transfert de fichier d'un ordinateur à un autre |
| <code>top</code> / <code>kill</code> & <code>Ctrl</code> + <code>C</code> | lister les processus en cours d'exécution/tuer un processus pour rendre le processus non bloquant arrêter le processus en cours d'exécution dans le terminal |

TABLEAU 3.7 – Commandes de base à retenir.

Deuxième partie

Programmation en python

Chapitre 4

Avant de se lancer

La programmation demande de se forger des habitudes. Ces habitudes sont généralement dictées par le bon sens et l'expérience de programmeurs confirmés. Elles peuvent sembler pénibles et contraignantes initialement, mais elles sont là pour faciliter les choses sur le long terme.

Lors de la programmation, il existe plusieurs phases :

1. la phase de programmation initiale lors de laquelle on développe son code pour répondre à nos besoins ;
2. les phases de test et débogage qui ont lieu lors de la phase de programmation ;
3. la phase de polissage du code : rédaction des commentaires, de la documentation, renommage des variables, etc ;
4. la phase d'utilisation initiale ;
5. la phase d'extension lors de laquelle on a tendance à ajouter de la complexité au programme initial pour lui ajouter des fonctionnalités
6. la phase de maintien du code pour le maintenir fonctionnel sur le long terme

Les phases qui sont souvent le plus chronophages sont celles de débogage et de maintien du code ou de légère amélioration. Les conseils qui vont suivre viseront à les rendre moins pénibles.

4.1 Décortiquer un problème avant de commencer

 La liste qui suit n'est pas une obligation mais elle donne des pistes sur la manière d'attaquer un problème.

- Avant tout, il faut commencer par chercher si quelqu'un n'a pas déjà fait ce que vous cherchez à faire. Dans le meilleur des cas, vous aurez économisé quelques heures à programmer, la personne qui l'aura fait l'aura mieux fait que vous et vous pourrez passer directement à autre chose. Au pire, vous aurez vu des bouts de code ou cela vous aura donné des idées sur ce que votre programme devrait faire.
- Ensuite, faites-vous une petite liste de ce que vous voulez faire, cela n'a pas forcément besoin d'être écrit proprement quelque part. Ça peut être griffonné sur un bout de papier ou même rester dans votre tête.
- Laissez mijoter un peu votre idée, le temps de laisser les choses décanter, affiner vos besoins, penser à une fonctionnalité intéressante que vous auriez pu oublier.

- Une fois le besoin exprimé, fractionnez-le en une succession d'étapes simples de manière procédurale. Réfléchissez à comment vous feriez les choses si vous aviez à les faire à la main. Inutile de chercher à optimiser les choses.
- Pour chacune des étapes, cherchez de l'aide sur internet pour résoudre le problème (chatGPT, stackoverflow, vos anciens scripts, vos amis, vos collègues sont vos meilleurs amis pour vous guider!)
- Normalement, à ce stade, vous allez pouvoir commencer à programmer.

Rappelez-vous : la programmation est d'autant plus facile que vous aurez de l'expérience. Donc commencez par programmer des choses simples, qui vous font envie, et surtout forcez-vous à programmer !

4.2 ▲ Nommage des variables

Pour les noms de variable, privilégiez des noms explicites.

Avoir des variables qui ont des noms totalement abstrait :

- rend le code illisible pour un relecteur ;
- augmente la charge cognitive du programmeur ;
- augmente la probabilité de finir par utiliser deux fois le même nom de variable pour deux choses différentes (ce qui mène à des catastrophes !)

Tant que la compacité du code n'est pas une exigence, il est toujours préférable de rendre vos variables explicites. Par contre, il faut faire attention à ne pas tomber dans l'excès inverse pour que le nom des variables puisse toujours s'appliquer malgré les évolutions du code.

Pour le nommage, il existe plusieurs conventions, le plus important est d'essayer de maintenir la même convention de nommage au sein d'un même programme.

💡 Normalement, pour les variables et les fonctions, il est recommandé d'utiliser des minuscules avec des "_" pour séparer les mots.

💡 Essayez d'utiliser des noms de variable en anglais : si jamais vous partagez votre code, un russe a beaucoup moins de chance de comprendre votre code s'il est écrit avec des noms de variable français plutôt qu'en anglais.

💡 N'utilisez JAMAIS de caractères accentués dans vos noms de variable : un américain (ou un chinois) n'arrivera pas à taper un "é" sur son clavier.

4.3 Trouver de l'aide

4.3.1 Le facile : l'appel à un ami

Pour trouver de l'aide, cela peut tout à fait commencer par une recherche internet. En général, il faut mieux taper sa question en anglais pour augmenter la probabilité d'avoir une réponse. Les forums comme stackoverflow permettent souvent d'avoir des propositions de réponse ou des solutions approchantes. Cependant, attention aux copier-coller trop hâtifs : ils faut prendre le temps de comprendre la ou les solutions proposées. De plus, il peut arriver que la solution ou la question ne corresponde pas exactement à ce que vous souhaitez faire. Dans ces cas là, inutile de jeter le bébé avec l'eau du bain. Cela peut constituer une piste de départ et permettre d'affiner le nom de votre recherche avec le nom d'une fonction.

Vous pouvez également trouver de nombreux tutoriels sur l'utilisation de certaines bibliothèques ou fonctions. Cela nécessite par contre d'avoir une idée de la fonction ou bibliothèque à utiliser. N'hésitez pas à vous en servir.

Il est maintenant également possible de demander à une intelligence artificielle d'écrire un morceau de code à votre place. Même si ce n'est pas forcément une solution miracle (le code peut buguer d'entrée). Cela peut vous aider à construire un morceau de code ou vous donner des pistes.

4.3.2 Le moins plaisant (mais plus complet) : « RTFM »

Lorsque les solutions précédentes ne suffisent pas (voire tout le temps), il faut également en passer par la case certes moins agréable mais néanmoins nécessaire de la lecture du manuel ou de la documentation. Comme en section 3.1, l'adage « RTFM » pour *Read That Fucking Manual* est de rigueur. La documentation est la première source d'information. C'est elle qui fait référence et souvent, c'est là que vous trouverez les options miracles des différentes fonctions pour faire en sorte de faire exactement ce que vous souhaitez.

Si la lecture du manuel peut parfois être aride, surtout pour un néophyte vu qu'il peut y avoir des termes très abscons. C'est une étape essentielle pour pouvoir progresser.

Pour les plus grosses librairies, le manuel peut se trouver en ligne sur un site dédié. Mais pour les librairies plus confidentielles, il peut être nécessaire d'aller lire la documentation ou y accéder dans le code source. Certaines librairies peuvent vous y aider.

4.3.3 Le pénible : consulter le code source

Même si je ne le souhaite à personne, il peut arriver d'avoir à aller lire dans le code source directement du code non documenté. Si jamais ça vous arrive, posez vous la question de savoir si vous avez vraiment besoin de le faire (car normalement, tout code doit être commenté, voir section 4.5). C'est en général un mauvais signe de la part de la personne qui a conçu le programme.

Mais quand il n'y a pas le choix... Il faut alors vous approprier le code de quelqu'un d'autre à la volé, vous verrez que l'exercice est généralement extrêmement fastidieux et chronophage et reviens presque à repartir de zéro.

4.4 Déboguer un programme

Un bon programmeur est avant tout quelqu'un capable de tester et déboguer son programme. Un programme qui ne fonctionne pas est un programme inutile. Aussi bien pour l'utilisateur que pour le programmeur (et vous allez souvent être dans les deux rôles!).

Cependant, un des énormes avantages de la programmation est de pouvoir tester généralement à peu de frais son code en condition réelles ou approchant. Il est **indispensable** de tester son code. Il faut cependant avoir certains réflexes pour rendre l'opération plus facile.

Il existe toute un formalisme associé à la manière de concevoir un programme pour le déboguer au mieux : les tests unitaires. Cependant, n'étant pas informaticiens de métier, nous allons aborder les choses sous un angle plus pragmatique et simpliste.


4.4.1 Compartimenter/factoriser

Une des manières les plus efficaces pour déboguer un programme est de concevoir et mettre au point de petits blocs « indépendants ». Cela va généralement de pair avec la partie 4.1. On peut en général déboguer chaque sous-partie du problème exprimé.

De plus, une des très bonnes manières de compartimenter les choses est de créer des fonctions. En effet, chaque fonction constitue un bloc indépendant. De plus, si elles sont bien créées, les variables d'entrée sont naturellement listées. Et pour finir, cela permet de mettre à jour et déboguer son code à un unique endroit plutôt qu'à tous les endroits où on utilise un code identique.

4.4.2 Lire les messages d'erreur

Pour tous les bugs qui affichent une erreur explicite, les messages d'erreurs permettent généralement de faciliter les choses. En effet, ils affichent généralement la chaîne qui a déclenché l'erreur. Il faut alors aller chercher la ligne qui est indiquée. De plus, un copier coller du message d'erreur sur internet pourra permettre de l'expliquer en langage courant.

 Il arrive que la ligne d'erreur indiquée soit la mauvaise à quelques lignes près, par exemple en cas d'oubli de parenthèse. Si jamais vous ne voyez pas d'erreur à l'endroit indiqué, n'hésitez pas à remonter de quelques lignes.

4.4.3 Commenter son code (avec du texte)

On verra bientôt l'intérêt de commenter son code (section 4.5). Mais dès à présent : un code bien commenté vous indiquera les points sensibles et sources d'erreur potentielles. C'est un levier très puissant pour indiquer comment vous avez géré des particularités au moment de l'écriture initiale du code. Un code bien commenté indiquera ce qu'il ne faut pas faire ou à quoi sert une ligne de code qui semble inutile ou abstraite.^a

4.4.4 Afficher ses variables et leur type

En cas de bug, il est souvent utile d'afficher le contenu des variables. Cela peut souvent permettre de voir leur contenu, quelle modification peut les avoir affecté. De même, leur type peut parfois permettre de voir s'il y a des incompatibilité d'opérations sur des objets ayant le mauvais type.

4.4.5 Revenir en arrière jusqu'à revenir à un programme fonctionnel

Pour trouver la source de l'erreur, il peut être judicieux de commenter des morceaux de code pour désactiver temporairement les lignes ajoutées. Si jamais vous avez écrit beaucoup de ligne d'un coup, cela permettra de restreindre la partie à déboguer. De plus en commentant sélectivement quelques parties de votre code, cela permettra de circonscrire la zone à corriger. Commencez par commenter largement, puis réduisez petit à petit la zone commentée pour en venir au nœud du problème progressivement.

4.4.6 Faire un appel à l'aide

En cas d'impossibilité à résoudre son bug, il faut savoir se résoudre à demander de l'aide. Si jamais vous avez quelqu'un avec les bonnes compétences sous la main (ou si vous comptez faire appel à un forum), il faut tout de même montrer patte blanche et que vous avez vous même fait des efforts pour déboguer votre programme.

a. [Un exemple](#) avec une faille dans le protocole SSL.

Il faut commencer par lister ce que vous souhaitez faire, puis proposer un code minimal qui ne fonctionne pas (*Minimal (Not) Working Example*). Cela commencera par montrer vos efforts, de plus cela indiquera rapidement ce qu'il faut regarder et surtout, cela facilitera l'appropriation de votre code.

💡 Dites vous que lire le code de quelqu'un d'autre, c'est à peu près quatre fois plus difficile que de lire le votre. En effet, il faut comprendre l'intention, la méthode, la syntaxe et le cheminement. Si des gens prennent beaucoup de temps pour vous aider, le minimum est donc de prendre soin de leur gentillesse.

4.5 Commenter son code

Une des plus grosses différences entre un programmeur débutant et un programmeur plus expérimenté sera le nombre et la qualité des commentaires laissés au sein du code. En effet, parmi les différentes étapes listées en début de chapitre 4, un débutant passera surtout du temps sur la première phase : rédiger un code qui fait ce qu'il souhaite. Un programmeur plus expérimenté passera pour sa part beaucoup plus de temps sur la troisième phase qui consiste à polir son code.

En effet, bien commenter son code permet de gagner ÉNORMÉMENT de temps sur les deux dernières phases de vie du programme. Avec l'expérience, on apprend généralement avec grande peine que ce sont les phases qui sont les plus chronophages. Se replonger dans un code demande un effort qui peut parfois être proche de celui nécessaire pour repartir de zéro.

Il est donc **crucial** de commenter son code. En particulier :

- toutes les petites astuces qui vous ont pris du temps (corrections d'indices, tri, fonction trouvée sur le net, etc)
- les fonctions : pour cela, la documentation doit être placée entre triple double quote « `"""` » il faut en préciser le but (en une ligne), les arguments et leur type, ainsi que donner l'argument retourné par la fonction
- indiquer le rôle des différentes portions de code
- préciser l'origine d'un code emprunté (lien, article, etc) pour pouvoir retrouver l'accès à des précisions supplémentaires
- écrire le code au fur et à mesure : cette activité est longue mais nécessaire. Elle est cependant d'autant plus facile à accomplir qu'elle est faite au fur et à mesure.

Cependant, il est tout aussi important de :

- garder des commentaires en adéquation avec le code, y compris lors de modifications : des commentaires erronés peuvent être plus dommageables qu'aucun commentaire du tout.
- être simple et concis : il est rarement utile de commenter des portions de code triviales ou compréhensibles. Tout comme il faut aller au plus simple pour que le lecteur comprenne le plus vite possible votre intention.

Pour un logiciel complet, il peut aussi être utile de mettre en place une vraie documentation rédigée pour expliquer plus en détail certains points du code qui sont trop complexes pour être expliqués dans le code.

4.6 Structure d'un script python

Pour toute la suite du cours, on utilisera systématiquement la structure suivante pour les programmes utilisés :

```
#!/usr/bin/env python3
# -*- coding: utf-8 -*-

"""
5 Descriptif du fichier
"""

# Importation des librairies

10 # Definition des fonctions

# Programme principal
if __name__ == "__main__":
    pass
```

- La première ligne `#!/usr/bin/env python3` est le shebang : c'est la ligne où vous indiquez à l'ordinateur le langage qu'il doit utiliser pour interpréter votre script. Cette ligne est **cruciale** pour que votre script soit correctement exécutée. C'est ce qui permet à votre script d'être exécuté en tapant `./script.py` au lieu de `python3 script.py`.
- La description du fichier est indispensable pour avoir une idée globale du but du programme c'est aussi l'occasion d'y mettre une licence, les sources du code utilisé, etc.
- Les librairies doivent être importées au début du fichier afin d'être accessibles à tout instant dans votre programme, y compris au sein des fonctions.
- Les fonctions doivent également être définies au début de votre programme, après l'import des librairies pour être ré-utilisables aussi bien au sein de votre programme que depuis un autre programme.
- La ligne `if __name__ == "__main__":` est tout aussi importante : elle permet de faire en sorte de n'exécuter le code principal que si vous exécutez le script directement (en tapant `./script.py` par exemple). Ainsi, le programme principal du script ne sera PAS exécuté si vous faites un simple import de fonction.

Exemple pour l'intérêt du `if name==main`

4.7 Ce qu'il faut retenir

- Savoir découper un problème complexe en superposition de problèmes plus simples. Il faut donc toujours prendre le temps de planifier son programme pour le découper en morceaux plus simple.
- Utiliser des fonctions est un excellent moyen de compartimenter son code.
- Toutes les variables nécessaires à une fonction doivent être appelées lors de l'exécution de la fonction.
- Pour nommer une variable, elle doit être explicite, suivre une convention de nommage et être utilisable par le plus grand nombre (pas d'accents ni de noms français!)
- Il faut prendre le temps de déboguer un code régulièrement.
- Apprendre à lire les erreurs qui empêchent l'exécution d'un script.
- Pour déboguer : penser à afficher les variables, leur type, commenter des portions de code.

- Il est **indispensable de commenter son code**. En particulier les fonctions.

Chapitre 5

Les bases

En complément du polycopié, des cahiers jupyter interactifs pour montrer certains points du polycopié sont mis à disposition. À chaque fois qu'un concept est illustré dans le cahier jupyter, une icône 📄 qui sera un lien cliquable sera présent pour voir le concept illustré en pratique.

5.1 Types de base

Python est un langage typé mais qui utilise une déclaration de type implicite. Ainsi, il ne sera pas possible de convertir directement un entier en nombre flottant sans explicitement le demander. Il faut donc également faire très attention lors de l'initialisation ou de la déclaration des variables sous peine de créer un objet qui n'aura pas le comportement attendu .

5.1.1 Nombres

Pour les nombres, il y a essentiellement deux types couramment utilisés : les flottants et les entiers 📄. Python accepte la surcharge d'opérateur donc sera capable de faire des opérations comme la division pour les deux types. Cependant, si on veut faire une division entière pour obtenir uniquement le quotient, il faut utiliser l'opérateur `//` 📄. Le reste peut être obtenu avec l'opérateur `%`.

De plus, python gère très bien la notation scientifique, ainsi il est possible de définir le rayon de Bohr $a_0 = 5,2917721 \cdot 10^{-11}$ m avec l'expression suivante : `a0 = 5.2917721e-11`.

5.1.1.1 📄 Représentation flottante, comparaison et précision

Ce paragraphe est extrêmement important pour comprendre certains comportements qui peuvent sembler totalement erratiques si l'on n'est pas conscient du problème.

Les nombres flottants sont stockés physiquement sous une forme particulière dans la mémoire qui engendre des « problèmes d'arrondis ». Ainsi, si on demande à python si 0,9 est égal à $0,3 + 0,3 + 0,3$, sa réponse est .. NON! 📄 Une explication détaillée est fournie dans la documentation python : [Floating Point Arithmetic: Issues and Limitations](#).

Le problème n'est pas lié à python mais à la manière dont les nombres sont stockés en mémoire. Ils correspondent à des fraction mais en base binaire au lieu d'utiliser une base décimale. Il est **indispensable** d'en être conscient pour éviter d'avoir de mauvaises surprises à certains moment. Les modules `decimal` et `fractions` peuvent permettre d'identifier et corriger les erreurs liées. 📄

Si les écarts peuvent sembler anodins, les calculs scientifiques effectuent en général de très nombreuses opérations qui peuvent aboutir à des résultats pour lesquels l'écart entre la valeur théorique et la valeur calculée peut devenir importante. Les bibliothèques `numpy` et `scipy` ont été implémentées de manière à minimiser et pouvoir fournir une estimation des erreurs numériques. Erreurs qui peuvent survenir à cause du calcul en nombre flottant.

De plus, si possible, il faut mieux *tester des inégalités que des égalités* pour éviter d'avoir des conditions non satisfaites.

5.1.2 Chaînes de caractère

Python accepte encore une fois la surcharge d'opérateur et accepte l'opérateur `+` pour les chaînes de caractère. Cela peut avoir des conséquences étranges en cas de confusion entre chaîne de caractère correspondant à un nombre et vrai nombre flottant. ☹ Cependant, python génère une erreur de compilation si on mélange les deux types pour limiter la casse.

Formatage Les chaînes de caractère sont le plus souvent utilisées pour afficher leur contenu ou le contenu de certaines variables. Python offre de très nombreuses options. Les plus courantes sont listées dans le tableau 5.1. Il est généralement préférable d'utiliser la fonction `format` qui est dédiée au fait de formater correctement des variables plutôt que de recourir à des fonctions ou artifices alambiqués qui feront moins bien que cette dernière.^a

| Option | Résultat | Commentaire |
|--|--------------|--|
| <code>"{} {}".format('a', 3.14)</code> | a 3.14 | les variables sont placées séquentiellement |
| <code>"{1} {0}".format('a', 3.14)</code> | 3.14 a | les variables sont placées en fonction du nombre indiqué entre accolades |
| <code>"{truc} {bidule}".format(truc='a', bidule=3.14)</code> | 3.14 a | les variables à placer sont nommées |
| <code>"{:<10}".format('blabla')</code> | blabla_____ | justifié à gauche sur (au moins) 10 caractères |
| <code>"{:>10}".format('blabla')</code> | _____blabla | justifié à droite sur (au moins) 10 caractères |
| <code>"{:d}".format(1)</code> | 1 | Pour les entiers |
| <code>"{:3d}".format(1)</code> | __1 | ... sur (au moins) 3 caractères |
| <code>"{:03d}".format(1)</code> | 001 | en complétant par des zéros si nécessaire |
| <code>"{:f}".format(3.14)</code> | 3.140000 | fixed-point number, 6 chiffres après la virgule (par défaut) |
| <code>"{: .3f}".format(3.14)</code> | 3.140 | 3 chiffres après la virgule |
| <code>"{:10.3f}".format(3.14)</code> | _____3.140 | sur (au moins) 10 caractères |
| <code>"{:e}".format(3.14)</code> | 3.140000e+00 | notation scientifique, 6 chiffres après la virgule (par défaut) |
| <code>"{: .3e}".format(3.14)</code> | 3.140e+00 | 3 chiffres après la virgule |
| <code>"{:10.3e}".format(3.14)</code> | __3.140e+00 | sur (au moins) 10 caractères |

TABLEAU 5.1 – Quelques option de formatage pour mettre sous forme de chaîne de caractère le contenu de variables. ☹ [Documentation officielle](#).

Il existe également l'option d'utiliser `f"""` pour insérer directement des variables `f"la variable truc vaut {truc} et bidule vaut {bidule}"` Cette option est moins verbeuse mais ne propose pas autant de contrôle que la fonction `format`. Il est également possible de faire en

a. Ou à un enchaînement stérile de guillemets et symboles « + » – qui en plus de cela sont peu souples.

sorte de ne pas avoir à échapper les backslash `\` en utilisant `r"""`. Cela est utile pour taper du LaTeX plus facilement.

Pour utiliser les caractères « » et « » en même temps que la fonction `format`, il faut répéter le caractère correspondant. Il est également possible d'aller à la ligne dans une chaîne de caractère en utilisant le caractère « `\` ».

5.1.3 Listes

Les listes sont numérotées en commençant par un élément d'indice 0. Elles sont ordonnées et mutables. Il est possible d'utiliser plusieurs méthodes pour modifier ou manipuler les listes (5.2)

| Méthode | Effet |
|---|--|
| <code>l.append(x)</code> | Ajoute l'élément <code>x</code> à la fin de la liste |
| <code>l.extend(iterable)</code> | Ajoute chacun des éléments de <code>iterable</code> à la fin de la liste |
| <code>l.insert(i, x)</code> | Ajoute <code>x</code> en position <code>i</code> à la liste |
| <code>l.pop([i])</code> | Enlève l'élément à la position <code>i</code> , ou le dernier élément de la liste si aucun argument n'a été indiqué |
| <code>l.remove(x)</code> | Enlève le <i>premier</i> élément égal à <code>x</code> dans la liste |
| <code>l.clear()</code> | Enlève tous les éléments de la liste |
| <code>l.index(x[,start[,end]])</code> | Retourne l'indice du premier élément de la liste égal à <code>x</code> . <code>start</code> , <code>end</code> servent à délimiter les bornes des indices cherchés |
| <code>l.count(x)</code> | Renvoie le nombre d'éléments de la liste. (équivalent à <code>len(l)</code>) |
| <code>l.sort(*, key=None, reverse=False)</code> | Trie les éléments de la liste, <code>key</code> permet d'indiquer une fonction à utiliser avant la comparaison |
| <code>l.reverse()</code> | Intervertir les éléments de la liste |
| <code>l.copy()</code> | Effectue une copie « shallow » (superficielle) de la liste |

TABLEAU 5.2 – Méthodes utilisables sur les listes. ☺

5.1.4 Tuples

Les tuples correspondent à des listes non modifiables, une fois déclarés, ils ne peuvent donc plus être changés. Alors qu'une liste vide peut être initialisée avec des crochets `[]`, un tuple est déclaré avec des accolades `()`. Les tuples servent essentiellement pour stocker des listes de variables qui doivent impérativement rester inchangées au cours du temps dans le programme.

En pratique, il est possible de modifier le contenu d'un tuple si celui-ci contient un objet mutable (voir 5.2). Il est donc déconseillé d'utiliser des objets mutables au sein de tuples pour éviter ce comportement qui est rarement voulu pour un tuple.

5.1.5 Dictionnaires

Les dictionnaires permettent d'associer une « clé » (*key*) à une « valeur » (*value*). Les clés sont uniques. Alors qu'une liste vide peut être initialisée avec des crochets `[]`, un dictionnaire

vide est déclaré avec des accolades {}.

Pour créer des listes de dictionnaires, il faut toujours privilégier le fait de faire des structures homogènes et reproductibles pour pouvoir à chacune des valeurs associées à une clé. ☺. De même, les clés doivent à priori être données en anglais et ne doivent pas contenir de caractères non ASCII – dans les deux cas pour un souci de portabilité du code.

À partir de python 3.7, les dictionnaires deviennent des objets ordonnés (la liste de clé est toujours dans le même ordre) alors que ce n'est PAS le cas dans les versions précédentes.

5.1.6 Fonctions

Pour rappel (voir 4), une fonction se doit de :

- avoir un nom explicite, sans caractère spécial
- toujours être commentée : but, arguments d'entrée, valeur de retour ;
- avoir une valeur de retour autant que possible

Une fonction commence toujours avec le mot clé `def` ensuite, il faut indiquer le nom de la fonction puis entre parenthèse les arguments de la fonction.

💡 **Il faut toujours passer EXPLICITEMENT les arguments d'une fonction à cette dernière.** Sinon, un jour, ça se passera mal, voire très mal, voire très très mal. (section 5.3.1)

💡 Toutes les variables internes d'une fonction n'existent que lors de l'exécution de la fonction. Il est donc possible d'utiliser le même nom de variables dans des fonctions différentes.

Paramètres, arguments optionnels, args, kwargs Il est possible de rendre certains arguments optionnels. Ils sont précisés après les arguments positionnels. Dans ce cas, dans la définition il faut les définir avec un nom explicite et fournir une valeur par défaut (voir section 5.2.2.2 pour les objets mutables). ☺

```
def func(x,y,z=0,liste = None, extended = True):
    _pass
```

Si un utilisateur souhaite changer une des valeurs par défaut, il pourra le faire en précisant la variable qu'il souhaite changer. Si le nom n'est pas précisé, les variables sont prises dans l'ordre de la déclaration de la fonction.


💡 En python, on passe les paramètres par référence, cela veut dire qu'une fonction peut, en son sein modifier les arguments qui lui ont été fournis – si ceux-ci sont mutables (voir section 5.2). Il faut donc faire attention à la manière dont sont manipulés les arguments au sein des fonctions pour éviter d'avoir des comportements non désirés (voir section 5.2.2.1).

Dans la documentation, il est fréquent de trouver dans les définitions des fonctions des `*args` OU `**kwargs`

- `*args` correspond à un ensemble d'arguments optionnels mais non nommés ;
- `**kwargs` correspond à un ensemble d'arguments optionnels mais nommés ;

L'avantage de ces deux solutions est de pouvoir rendre plus souple la définition de vos fonctions.

Packing et unpacking Lorsqu'une fonction retourne une liste, il est possible de faire du « *unpacking* » : cela consiste à affecter directement les variables en tant qu'élément de liste.

Il est possible de ne garder qu'un sous-ensemble d'arguments en « jetant » les éléments non souhaités avec le caractère "_" .

De même, il est possible de transformer directement une liste en suite d'arguments pour une fonction grâce au splat "*".

splat lien avec args et kwargs

5.2 Objets mutables et immutables

L'explication qui suit peut être complétée par la lecture de cet article : [Python's Mutable vs Immutable Types: What's the Difference?](#)

Pour le langage Python, il existe deux types d'objets : les objets mutables et les objets non mutables.

- un élément mutable est un objet qui peut être changé après sa création tout en gardant la même adresse mémoire ;
- un élément immutable est un objet qui peut ne peut pas être changé sans changer l'adresse mémoire dans laquelle il est stocké ;

Différence entre variables et objets Une variable n'a pas intrinsèquement de type, mais c'est l'objet vers lequel elle pointe qui en a un. En effet une variable ne fait que pointer en mémoire vers où est stocké l'objet auquel elle fait référence (figure 5.1).



FIGURE 5.1 – Une variable ne fait que pointer vers un objet qui a une adresse mémoire. C'est l'objet référencé qui impose le type de la variable.

Objet immutable et changement de variable pour un objet immutable, si on en change le contenu, on va en fait avoir créé un nouvel objet avec une nouvelle adresse mémoire et la variable va maintenant pointer vers cette nouvelle référence d'adresse mémoire (figure 5.2).

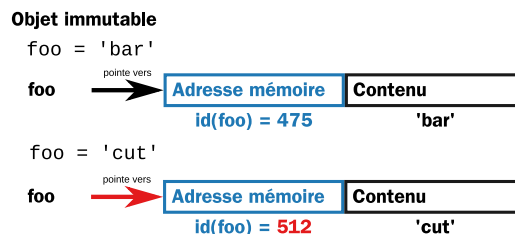


FIGURE 5.2 – Pour un objet immutable, en changer le contenu correspond en fait à 1) créer un nouvel objet en mémoire avec le nouveau contenu 2) mettre à jour la référence de la variable pour pointer vers l'objet que l'on vient de créer.

Objet mutable et changement de variable Pour les objets mutables, il est possible d'en changer le contenu sans que celui-ci change d'adresse en mémoire. En effet, on change en général une référence interne à une adresse mémoire sans avoir à créer de nouvel objet pour la variable (figure 5.3).

La différence vient donc de la référence vers l'adresse mémoire changée : pour un objet immutable c'est directement le lien avec la variable, pour un objet mutable, il s'agit d'une référence interne.

Objet mutable

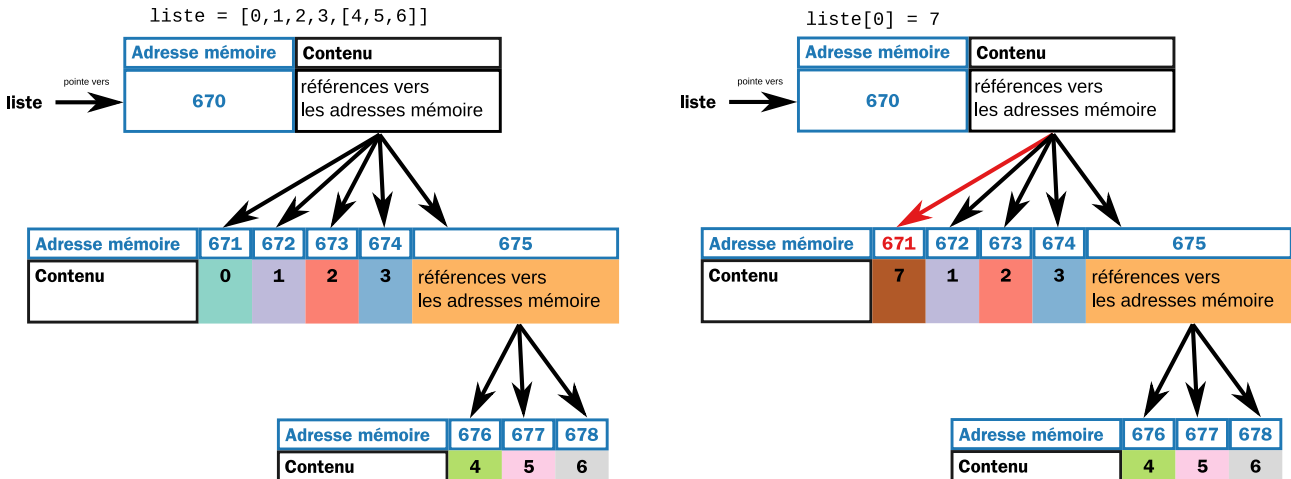


FIGURE 5.3 – Pour un objet mutable, en changer le contenu correspond en fait à 1) créer un nouvel objet en mémoire avec le nouveau contenu 2) mettre à jour la référence en **interne**.

Le tableau 5.3 indique quelles catégories de variables sont mutables ou non en python. On peut voir que les variables mutables sont en général des objets contenant des objets imbriqués.

| Immutable | Mutable |
|---------------------|--------------------|
| int, float, complex | list, dict |
| string | ndarray (numpy) |
| bool | Dataframe (pandas) |
| frozenset | set |
| bytes | bytearray |
| tuples* | |

TABLEAU 5.3 – Variables mutables et immutables. *Les tuples sont immutables mais seulement s'ils ne contiennent pas d'éléments mutables.

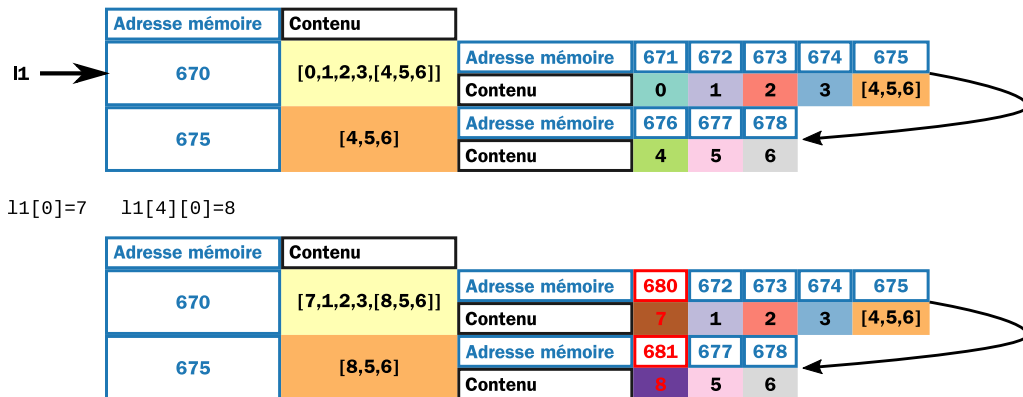
5.2.1 Première conséquence : copie d'objets mutables/imbriqués : « *shallow copy* » versus « *deep copy* »

Pour des éléments imbriqués (liste, tuple, dictionnaire, ndarray, etc), ils sont stockés à un endroit de la mémoire et ces éléments pointent sur chacun des éléments qu'ils contiennent.



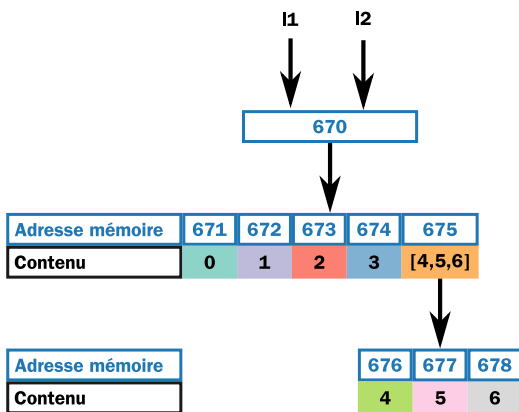
Sur l'exemple 5.4, la liste 1 contient une suite d'adresses (671 à 675) et chacune de ces adresses contient la valeur (soit les entiers 0,1,2,3, soit une liste d'entier [4,5,6]. Lors de la modification d'un élément de liste, on change le contenu de l'adresse mémoire en interne pour pointer vers un nouvel objet, mais uniquement cela. La liste pointe toujours vers la même adresse mémoire.

Dans le cas d'une *shallow copy* (copie superficielle), la copie se fait directement au niveau de l'adresse mémoire principale. Comme les deux variables correspondent à la même adresse mémoire, la modification d'une liste correspond automatiquement à la modification de l'autre également !



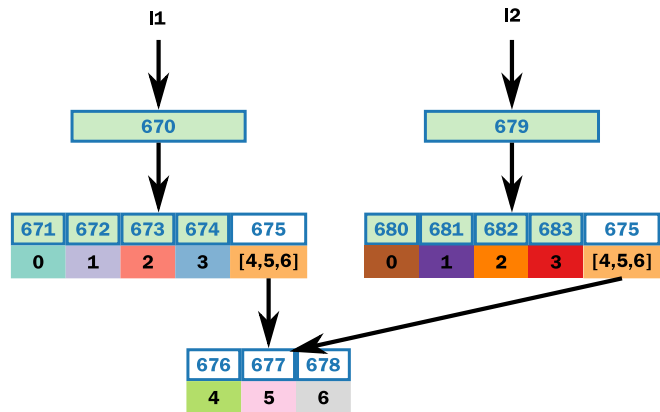
Changer un élément de liste revient à changer une case colorée sans changer l'adresse mémoire vers laquelle pointe la liste.

Shallow copy : `l2 = l1`



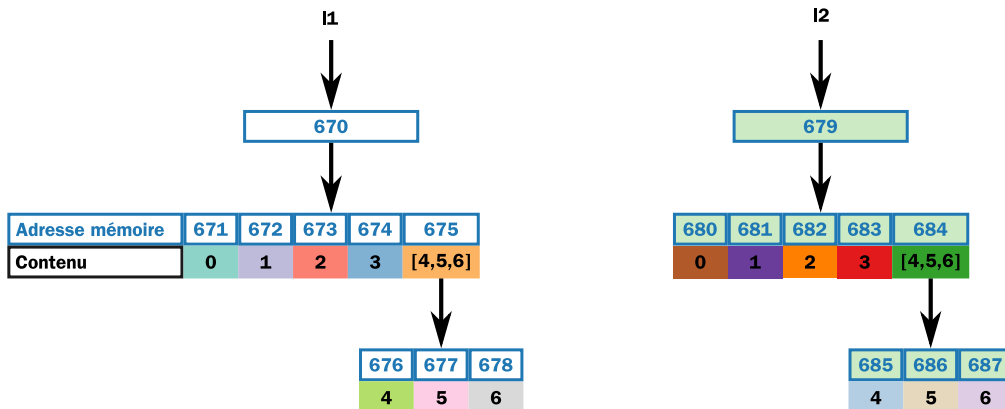
Modifier une liste modifie l'autre car on utilise dans les deux cas les mêmes adresses mémoire

Copie moins shallow `l2 = l1.copy()`



Modifier une liste ne modifie pas l'autre (au premier rang d'imbrication uniquement) car toutes les cases vertes créées lors de la copie sont indépendantes

Deep copy : `l2 = copy.deepcopy(l1)`



Les deux listes sont totalement indépendantes

FIGURE 5.4 – Mécanisme de stockage des listes et profondeur de copie.

Dans le cas d'une copie avec la méthode `.copy()` on pointe vers deux adresses différentes donc les listes peuvent être modifiées indépendamment. De plus, les références de premier niveau sont différentes et peuvent donc être modifiées indépendamment.

Dans le cas d'une copie avec la fonction `deepcopy()` de la librairie `copy` tous les éléments sont totalement indépendants. La modification d'une liste à un niveau quelconque est totalement indépendante et ne modifie donc pas l'autre liste. Par contre, on occupe... deux fois plus d'espace en mémoire.^b

5.2.2 Deuxième conséquence : éléments mutables et fonctions

5.2.2.1 Modification d'un élément mutable au sein d'une fonction

Si un des arguments d'une fonction est mutable, alors le modifier au sein de la fonction le modifie également en dehors de la fonction. Pour éviter cela, il faut faire une copie ou créer un nouvel élément mutable au sein de la fonction. ☹ Pour un objet immuable, le changer au sein de la fonction n'a pas d'influence en dehors de celle-ci.

5.2.2.2 Élément mutable comme argument optionnel

Si on utilise un élément mutable comme argument optionnel, alors à chaque appel de la fonction, ce sera l'élément mutable optionnel créé lors de la définition de la fonction qui sera changé. ☹ Ce comportement peut être souhaité.. ou pas. Pour l'éviter, il faut initialiser la variable à `None`, puis après un test, créer la variable mutable lors de l'exécution de la fonction.

5.3 Espaces de nommage

5.3.1 les différents espaces de nommage

Les espaces de nommage correspondent à des lieux abstraits dans lesquels les variables sont accessibles. Ils permettent également de trancher quel variable sera utilisée en cas d'homonymie (portée). Enfin, ils délimitent une temporalité d'existence des variables lors de l'exécution d'un programme.

Dans python, il existe quatre espaces de nommage principaux (*namespaces*) qui sont tous imbriqués « en poupée russe » les uns dans les autres :

- L'espace de nommage **built-in** est celui qui est accessible partout et tout le temps. C'est celui dans lequel les fonctions, constantes, types et exceptions de python sont définies. Il est possible d'avoir leur liste avec la commande `dir(__builtins__)`. `len`, `float`, `True` appartiennent à cet espace de nommage par exemple.
- L'espace de nommage **global** qui contient les variables et fonctions accessibles à l'ensemble du programme. Il est possible de voir le contenu avec la commande `globals()`.
- L'espace de nommage **local** qui correspondent aux variables accessibles au sein d'une fonction. L'interpréteur crée un nouvel espace de nommage lors de l'appel de la fonction et le maintient tant que la fonction n'est pas exécutée. Il est possible de voir le contenu avec la commande `locals()`.
- L'espace de nommage **enclosing** : si une fonction `inner_func` est définie à l'intérieur d'une fonction `outer_func`, les deux fonctions ont leur propre espace de nommage.

b. En pratique, les choses sont un tout petit peu plus compliquées sur le plan technique mais ça ne change rien sur le plan conceptuel.

Mais l'espace de nommage de `outer_func` est accessible depuis `inner_func`. Il s'agit de l'espace de nommage **enclosing** pour `inner_func`

5.3.2 ■ Portée des variables

Lorsque l'on va faire appel à une variable, python va aller chercher le contenu dans le premier espace de nommage où la variable est définie (figure ??).^c Ainsi, si on cherche à utiliser la variable `foo`, python va :

- d'abord aller la chercher dans l'espace *local*, si elle existe à cet endroit, alors elle utilise celle-ci.
- sinon, elle va aller chercher dans l'espace *enclosing*, si elle existe à cet endroit, alors elle utilise celle-ci.
- sinon, elle va aller chercher dans l'espace *global*, si elle existe à cet endroit, alors elle utilise celle-ci.
- sinon elle va aller chercher dans l'espace *built-in*, si elle existe à cet endroit, alors elle utilise celle-ci.
- si la variable n'a pas été trouvée, alors il y a un message d'erreur.

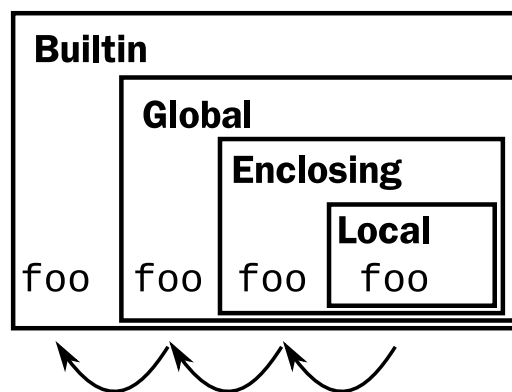


FIGURE 5.5 – Espaces de nommage et portée pour les différentes variables

Cet effet est illustré au sein du cahier jupyter suivant [📄](#).

💡 Pour rappel (section 5.2.2.1), les objet mutables peuvent être modifiés au sein d'une fonction, cela veut donc dire que si une variable n'existait pas dans l'espace de nommage local de la fonction et que l'on a utilisé une variable globale. Alors c'est la variable globale qui sera modifiée. Traquer les bugs dus à ce comportement peut être extrêmement difficile !

5.4 Structures de bases : boucles et conditions

Comme tout langage de programmation usuel, python utilise toutes les structures de boucles et condition usuelles : boucle `for`, `if`, `while`, etc. Il y a par contre quelques spécificité liées au langage.

c. Attention, dans d'autres langages de programmation, les espaces de nommages sont différents. En particulier en Javascript, les espaces de nommage et les règles associées : portée des variables, sont très différentes de tous les autres langages de programmation. Je vous recommande chaudement la lecture de l'ouvrage *Javascript, the good parts* de Douglas Crockford pour mieux connaître toutes les « particularités » de ce langage si jamais vous avez à vous y frotter.

5.4.1 Boucles

5.4.1.1 Boucles for

La structure la plus basique est d'utiliser une itération sur une suite d'entiers. Ici, il faut comprendre que la fonction `range` retourne un objet itérable qui est une liste d'entier. De plus, l'argument donné est l'entier strictement supérieur au plus grand entier de la liste, il ne fera donc pas partie des entiers retournés.

Il est possible de spécifier l'indice départ et la pas.

```
for indix in range(6):
    _print(indix)
```

Parcourir une liste Pour parcourir les listes, il existe différentes façon d'itérer 🍷 :

- utiliser les indices des éléments de la liste `for i in len(liste);`
- itérer sur les éléments de la liste directement avec `for .. in ;;`
- utiliser simultanément les éléments et les indices `for .. in enumerate(liste);;`

Parcourir un dictionnaire Pour un dictionnaire, de base, on itère uniquement sur les clés, mais il est également possible d'itérer sur les paires clé/valeur :

- `for key in dictionnaire:` permet d'accéder aux valeurs des clés existant au sein du dictionnaire (rappel : les clés ne sont ordonnées qu'à partir de python 3.7);
- `for key,value in dictionnaire.items():` permet d'accéder aux paires clé/valeur;

5.4.1.2 Boucles while

Lors des processus itératifs, plutôt que d'avoir une boucle de longueur finie et connue à l'avance, il est possible d'avoir recours à une boucle qui se répète tant qu'une condition n'est pas satisfaite (une condition de convergence en général).

Attention, à cause des erreurs d'arrondi en virgule flottante, il est généralement préférable de vérifier une inégalité qu'une inégalité qui ne sera peut-être jamais vérifiée.

5.4.2 Conditions `if, elif, else`

La structure la plus connue est `if, elif, else` qui permet de faire des tests. Comme dans le cas des boucles while, il faut faire attention aux conditions d'égalités entre deux variables s'il s'agit de nombres flottant. Il est généralement préférable d'utiliser la fonction `isclose` de la librairie `math` ou `numpy`. Il est normalement préférable de mettre les conditions dans leur ordre de probabilité décroissante.

Il est possible de combiner des tests avec les opérateurs `or`, `and`. Tout comme il est possible de tester la négation avec l'opérateur `not`.

Comparateurs Les comparateurs numériques autorisés sont les suivants : `<`, `>`, `<=`, `>=`, `==` (égalité), `!=`. De plus, python demande toujours d'utiliser un double `==` pour tester les égalités.

Il est aussi possible d'utiliser les comparateurs suivants :

- `is` vérifie l'égalité stricte entre objets pour savoir s'il s'agit du même objet à la même adresse mémoire. La comparaison est donc plus stricte que pour l'opérateur `==`. `is not` est l'analogue mais pour la négation de `is`.

- `in` pour savoir si un élément est présent dans un objet (dans une liste en général)
- `isnumeric` pour tester si la variable est numérique, `isinstance` pour savoir si une variable a le type attendu, etc.

5.4.2.1 Instructions `break`, `pass` et `continue`

Au sein des boucles, il est possible d'utiliser les instructions spéciales :

- `pass` permet d'avoir un début de bloc sans rien avoir à faire au sein du bloc, cela permet donc essentiellement de tester la validité de l'en-tête du bloc (condition, boucle) ou alors d'éviter une erreur d'exécution si jamais le bloc est encore vide pour l'instant.
- `break` permet de sortir totalement du bloc d'instruction, ainsi, si l'instruction `break` est exécutée, alors on continue à partir de la fin du bloc
- `continue` permet de sauter pour terminer la boucle courante et aller directement au début de la boucle suivante

5.5 Gestion des fichiers

Il est courant d'avoir à manipuler des fichiers de donnée, aussi bien en lecture qu'en écriture. Les fichiers manipulés peuvent être particulièrement volumineux : il est possible d'atteindre plusieurs dizaines de Go pour certains types de calcul. Il faut donc particulièrement être vigilant à l'usage de la mémoire : il sera impossible de charger intégralement d'aussi gros fichiers en mémoire.

L'ouverture d'un fichier se fait avec la fonction `open` ^①. Le premier argument est le nom du fichier, le deuxième le type d'opérations qui pourront être effectuées avec le fichier (tableau 5.4).^d


| Caractère | Signification |
|-----------|---|
| 'r' | ouvre en lecture (par défaut) |
| 'w' | ouvre en écriture, en effaçant le contenu du fichier |
| 'x' | ouvre pour une création exclusive, échouant si le fichier existe déjà |
| 'a' | ouvre en écriture, ajoutant à la fin du fichier s'il existe |
| 'b' | mode binaire |
| 't' | mode texte (par défaut) |
| '+' | ouvre en modification (lecture et écriture) |

TABLEAU 5.4 – Modes d'ouverture possibles pour les fichiers.

Normalement, tout fichier ouvert doit être fermé lorsque son utilisation est finie avec la méthode `.close()`, sinon, il se peut que son contenu ne soit pas enregistré. Il est possible de rendre la fermeture automatique en utilisant l'instruction `with` :

```
with open(filename, 'r') as f:
    pass
```

À la fin du bloc `with`, le fichier sera alors automatiquement fermé.

Pour lire un fichier, il existe plusieurs méthodes, soit pour le lire en entier, soit pour le charger morceaux par morceaux, cela est illustré dans le script de démonstration suivant .

d. Il est préférable d'ouvrir le fichier avec des droits les plus restreints possibles. Cela pourra par exemple permettre d'éviter d'écrire par inadvertance par dessus un fichier de sortie résultant de plusieurs jours/semaines de calculs.

💡 Lorsque c'est possible, il est préférable d'utiliser des chemins relatifs pour les fichiers afin que le code soit le plus portable possible (indépendant de l'ordinateur sur lequel il est exécuté).

5.6 Évaluer la performance de son code

complexité,timeit

5.7 Ce qu'il faut retenir

- Les types de bases utilisables sous python (`str`, `int`, `float`, `list`, `tuple`, `dict`^e)
- Les options de formatage accessibles pour mettre en forme des variables.
- Que les nombres sont stockés sous forme de flottants, et que cela peut entraîner des erreurs numériques. Entre autre, soit parce que la valeur réellement utilisée n'est pas strictement égale à la valeur écrite par le programmeur, soit parce que l'on mélange de grands et de petits nombres.
- Il existe deux catégories d'objets en python : les objets mutables et les objets immutables.
- Le caractère mutable ou immutable a des conséquences importantes lors de la copie d'objets (*deep copy* versus *shallow copy*).
- Le caractère mutable ou immutable a des conséquences importantes lors de l'exécution de fonctions : une variable globale mutable peut être modifiée par une fonction.
- Comprendre la notion d'espace de nommage et les conséquences en terme de portée des variables.
- Savoir parcourir des listes, dictionnaires, etc. En sachant utiliser, en particulier les structures suivantes :
 - `for element in liste,`
 - `for indix,element in enumerate(liste)`
 - `for key,value in dict.items()`
- Savoir ouvrir et fermer un fichier, le lire ou y écrire.

e. Il existe aussi le type `set`, qui dérive des listes avec certaines particularités et méthodes spécifiques.

Chapitre 6

Modules, librairies, packages et frameworks

6.1 Un peu de vocabulaire

Sous python, on peut parler de module, librairie, package ou framework. Bien que légèrement différents, ces différents termes regroupent tous une simple et même idée : ce sont des choses qui regroupent des ensembles de fonction, classes et objets pour faciliter la programmation ou ré-utiliser des portions de code. Cela peut aller d'un code écrit modestement dans son coin à de grosses machineries de plusieurs dizaines de milliers de lignes de code maintenues par une communauté.

- Un module correspond à un fichier qui contient les fonctions que l'on cherche à utiliser.
- Un package est un ensemble de modules construits de manière cohérente, cela correspond à un répertoire de modules qui sont organisés.
- Une librairie est à visée encore plus large qui correspond généralement à un ensemble de package. Parfois, le terme peut d'ailleurs être utilisé de manière interchangeable avec celui de package.
- Les workflows sont en général plus complexes car en plus de fournir des objets, fonctions ou classe, ils imposent en général une manière de les faire interagir entre eux. Ce qui force en général certaines formes de structuration du code qui les utilise.


Ici, par la suite j'utiliserai essentiellement le terme de librairie qui est le plus générique en programmation.

6.2 Au fait, une librairie ça sert à quoi ?

Les librairies vont en général avoir plusieurs rôles tous aussi importants les uns que les autres.

Factoriser des morceaux de code Les librairies et modules permettent de ré-utiliser des fonctions. C'est leur principal rôle. En définissant les fonctions à un unique endroit, cela implique que les corrections sont alors immédiatement effectives partout où elles sont utilisées. Par contre, cela peut également apporter son lot de nouveaux bugs ou casser la compatibilité du code. Normalement, il faut toujours veiller autant que possible à maintenir une compa-

tibilité ascendante ^a

 Ainsi, il est systématiquement préférable de maintenir ses fonctions à un UNIQUE endroit pour éviter des divergences de fonctionnalités, niveaux de débogage. Même si en retour cela peut parfois demander de vérifier que les fonctions d’une librairie sont utilisables dans divers contextes.

Avoir à disposition des fonctions robustes, déjà écrites et testées La plupart des librairies phares ont plusieurs dizaines d’années de recul. Elles ont été testées, pensées et réfléchies pour répondre aux besoins, être finement paramétrables, etc. Plutôt que de ré-inventer la roue, il est en général plus simple de s’en servir pour faire quelque chose de plus compliqué. Cela permet également de gagner énormément de temps : il n’y a pas à coder les fonctions, et surtout pas à les déboguer. ^b

Bénéficier d’un espace de nommage dédié Les librairies bénéficient d’un espace de nommage dédié. Pour des codes qui deviennent complexes, cela permet d’éviter les conflits de noms qui peuvent mener à des catastrophes avec des objets mutables. Ainsi, on peut avoir des fonctions qui s’appellent `max` dans plusieurs modules différents et qui ont un comportement différent. On peut alors facilement différencier des fonctions en leur assignant des espaces de nommage différent plutôt qu’en cherchant à avoir des noms de fonctions différents. De plus, cela permet d’être plus libre dans l’espace de nommage global en n’ayant pas à se pré-occuper de l’ensemble des noms de fonctions contenus dans une librairie.

6.3 Import d’une librairie ou d’un module

Import d’un module local Il est possible d’importer un module local. Dans ce cas, il est possible de préciser le chemin du fichier qui contient le module. Celui-ci **doit** avoir une extension en `.py` et lors de l’import, il ne faut **pas** ajouter l’extension.

```
import top_module as tm
```

Permet alors d’importer le fichier `top_module.py` placé dans le même répertoire. Au passage, la directive « `as` » permet d’assigner un espace de nommage `tm`. Cela revient conceptuellement à faire un copier coller du fichier importé à l’endroit où le module est importé. Chacune des fonctions ou classes définies dans le module sera alors accessible si on utilise comme préfixe du nom de la fonction l’espace de nommage correspondant. Ainsi, si le fichier `top_module.py` contient la fonction `myFunc()`, alors celle-ci pourra être utilisée avec `tm.myFunc()` sans rentrer en conflit avec l’espace de nommage global du script. Il sera donc également possible de créer une fonction `myFunc()` au sein du script.

Import d’une librairie générique Pour une librairie générique, la syntaxe est rigoureusement identique, la différence étant qu’au lieu d’aller chercher dans le dossier du script, python va généralement chercher dans un ensemble de répertoires prédéfinis la librairie.

a. C’est à dire que les évolutions de la librairie ajoutent des fonctionnalités tout en gardant le code écrit avant ces modifications toujours fonctionnel. Cela peut sembler naturel et simple, mais en pratique, c’est souvent plus compliqué.

b. Attention, pour des librairies obscures, récentes, ou peu utilisées, il se peut que vous découvriez des bugs et que le temps de les découvrir vous coûte plus que le temps de faire un code fonctionnel. Il y a toujours une estimation du bénéfice-risque à avoir lors de l’utilisation d’une librairie spécifique.

Cela demande bien évidemment d’avoir installé la librairie au préalable. Si on dispose des droits administrateurs sous Linux, cela se fait le plus souvent avec la commande :

```
pip install ma_librairie
```

Il est ensuite possible d’importer la librairie comme pour un module local avec la commande `import` :

```
import ma_librairie # ou import ma_librairie as ml
```

Par contre, l’emplacement de cette dernière peut être plus difficile à trouver. La librairie `inspect` peut permettre de trouver le fichier et donc consulter le fichier source pour trouver de la documentation ou le code source.^c De plus, la librairie `inspect` permet d’afficher la documentation de la fonction très facilement 🍷 :

```
#!/usr/bin/env python3
# -*- coding: utf-8 -*-

"""
5 Programme python pour trouver le fichier contenant une fonction donnée
"""

import inspect

10 import scipy
import scipy.optimize as optimize

if __name__ == "__main__":
    _func = optimize.least_squares # Nom de la fonction cherchée dans l'espace de nommage
    approprié
15 _files = inspect.getfile(func) # Fonction pour localiser le fichier contenant ladite
    fonction
    _doc = inspect.getdoc(func)
    _print(files) # Affiche l'emplacement de la fonction
    _print(doc) #Affiche la documentation de la fonction

20 #retourne /usr/lib/python3/dist-packages/scipy/optimize/_lsq/least_squares.py au CBP
```

6.3.1 Import spécifique

Plutôt que d’importer une librairie complète, il est parfois plus judicieux de n’importer que quelques fonctions de ladite librairie plutôt que l’intégralité de celle-ci. La forme de l’import est alors très légèrement différente :

```
from numpy import sqrt
```

Dans ce cas là, la fonction est ajoutée à l’espace de nommage global et pas à celui d’une librairie. Il n’y a donc plus à utiliser de préfixe pour utiliser ladite fonction. 🍷

6.3.2 Import « à la sauvage »

Sinon, il existe également une méthode à ne PAS utiliser :

```
from numpy import *
```

c. voir sections 4.3.2 et 4.3.3.

Dans ce cas là, TOUTES les fonctions de la librairie sont ajoutée à l'espace de nommage global. Ce qui peut engendrer des conflits avec des variables ou fonctions définies au sein du script. ☹️

6.4 Quelques librairies courantes

Il existe un nombre quasiment infini de librairies et modules en python. Les lister tous n'aurait strictement aucun sens. Le tableau 6.1 en présente quelques unes qui peuvent servir.

| Nom de la librairie | But |
|-----------------------------------|---|
| datetime | permet de manipuler des dates |
| os | Permet d'utiliser des lignes de commande au sein de python |
| sys | Accès à certaines données système |
| pathlib, glob | opérations sur le système de fichier et les chemins |
| argparse | permet d'avoir accès des options pour le script comme s'il s'agissait d'une ligne de commande |
| inspect | Pour avoir accès à des données d'une librairie |
| re | Utilisation des expressions régulières (voir 10) |
| openpyxl | Création de fichiers excel sous python |
| black | uniformisation du code |
| tkinter | Génération d'interface graphique |
| django | Framework pour le développement web |
| matplotlib / seaborn | Création de graphiques scientifiques |
| math | Fonctions et objets mathématiques de base |
| itertools | Fonctions pour la combinatoire |
| numpy | Calcul sur des tableaux et opérations mathématiques « de base » usuelles |
| scipy | Outils scientifiques usuelles (statistiques, équations différentielles, FFT, recherche de zéro, fit, etc) |
| pandas | Gestion de tableaux de donnée |
| scikit-learn, tensorflow, pyTorch | Machine learning sous python |
| PySerial | Utilisation du port série sous Python pour communiquer avec des instruments |
| trackpy | Analyse d'images pour suivre des objets |
| h5py | lecture de fichiers HDF5 (format de données scientifiques) |
| sage/sympy | Calcul analytique/symbolique sous python (dérivation analytique, etc) |

TABLEAU 6.1 – Quelques librairies utiles. Par la suite, nous nous focaliserons sur numpy, scipy et matplotlib.

6.5 Ce qu'il faut retenir

- Savoir importer un module en local ou une librairie ;
- Comprendre l'importance du fait d'avoir un espace de nommage pour chaque module ;
- Savoir faire différents types d'imports, et aussi ne pas faire d'import sauvage dans l'espace de nommage global.
- Savoir lire la documentation d'une librairie.

Chapitre 7

La manipulation de tableaux avec Numpy

Pour faire des simulations ou du traitement de données, il est courant de faire appel à des données sous forme de tableaux. L'utilisation de ces tableaux en programmation « bas-niveau » se traduit généralement par l'utilisation répétée de boucle `for`. La bibliothèque `numpy` crée un nouveau type de variable : le type *N-dimensional array* ou `ndarray`. Ces tableaux sont donc multidimensionnels comme annoncé dans leur nom et ont pour particularité :

- de ne pouvoir contenir qu'un unique type d'éléments (par exemple : que des `int`, que des `float`, etc) ;
- d'être forcément homogènes : il doit toujours y avoir le même nombre d'éléments dans chacune des dimensions.

La force de la bibliothèque `numpy` va être de pouvoir effectuer des opérations courantes sur ces tableaux (filtrage, multiplication, dérivation, concaténation, etc) avec une rapidité bien supérieure à celle obtenue via l'utilisation de boucles `for`. De plus, les fonctions proposées sont en général capable d'agir sur tout le tableau ou uniquement certaines dimensions ce qui rend les opérations d'autant plus faciles. ☺

7.1 Les `ndarray`

7.1.1 Propriétés essentielles

Un `ndarray` est caractérisé par différentes grandeurs. Il est crucial de comprendre chacune de ces caractéristiques pour pouvoir exploiter pleinement la puissance de la bibliothèque `numpy`.

Ces caractéristiques sont résumées dans le tableau 7.1. ☺

| Caractéristique | Fonction | Explication |
|-----------------|-------------------------|--|
| Dimension | <code>data.ndim</code> | Dimension du tableau. 1 correspond à un vecteur, 2 à une matrice, 3 à un parallélépipède, 4 un hypercube, etc |
| Shape | <code>data.shape</code> | Indique la longueur de chacune des dimensions sous forme de tuple |
| Taille | <code>data.size</code> | Nombre total d'éléments dans le tableau, il s'agit donc du produit de chacune des valeurs présentes dans <code>data.shape</code> |
| Type | <code>data.dtype</code> | Types d'éléments présents dans le <code>ndarray</code> |

TABLEAU 7.1 – Caractéristiques de base d'un `ndarray` appelé `data`.

Affichage d'un ndarray Pour l'affichage (figure 7.1) :

- le **dernier** axe est toujours affiché de gauche à droite ;
- l'**avant-dernier** axe est toujours affiché de haut en bas ;
- pour les autres, ils sont affichées de haut en bas avec un espace pour séparer chaque « tranche ».

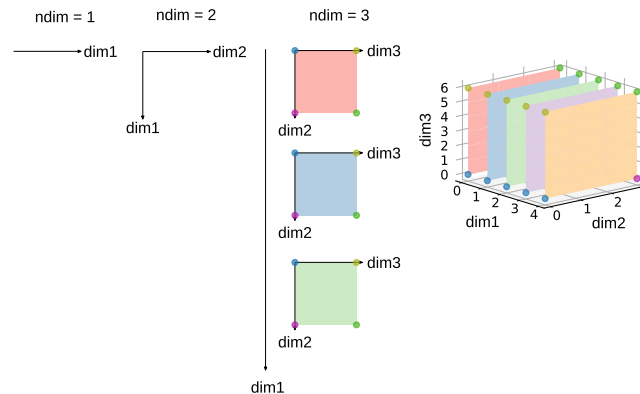


FIGURE 7.1 – Sens d'affichage des ndarray.

7.1.2 Fonctions pour la création

Sans chercher à être exhaustif, il existe différentes manières de créer des ndarray. La plus simple est de les déclarer à la main avec `np.array`, sinon, `np.asarray` permet de convertir l'objet fourni en ndarray. La fonction `np.copy` fait une *shallow-copy* d'un tableau.^a

Sinon, les fonctions présentées tableau 7.2 permettent également de créer des tableaux automatiquement à partir de leur shape. Il est également possible de créer des matrices diagonales, tridiagonales, etc. ☺

| Fonction | Commentaire |
|--------------------|---|
| <code>empty</code> | Crée un tableau non initialisé, les valeurs sont donc quelconques |
| <code>zeros</code> | Crée un tableau rempli avec des zéros |
| <code>ones</code> | Crée un tableau rempli avec des uns |
| <code>full</code> | Crée un tableau rempli avec une unique valeur |

TABLEAU 7.2 – Fonctions usuelles pour la création de ndarray. Toutes ces fonctions existent également avec le suffixe `_like` pour créer un tableau avec un shape identique à celui du tableau d'origine indiqué.

Tableaux unidimensionnels Il est également courant de créer des tableaux unidimensionnels qui contiennent des suites de nombre espacés régulièrement (tableau 7.3).

Coordonnées multidimensionnelles Il peut être parfois utile de travailler sur des tableaux qui contiennent des coordonnées multidimensionnelles au lieu d'éléments simples. Pour cela, la fonction `np.meshgrid` est indiquée. ☺

a. Il faut donc être très vigilant si jamais le ndarray contient des objets mutables (voir section 5.2).

| Fonction | Commentaire |
|--------------------------|--|
| <code>np.arange</code> | suite des entiers |
| <code>np.linspace</code> | suite d'éléments régulièrement espacés compris entre deux bornes |
| <code>np.logspace</code> | suite d'éléments espacés logarithmiquement compris entre deux bornes, se différencie de la fonction précédente essentiellement par la manière dont sont données les bornes |

TABLEAU 7.3 – Fonctions pour créer des tableaux unidimensionnels.

7.2 Sélection d'éléments et *slicing*

Les tableaux N -dimensionnels permettent de stocker des données sous une forme très pratique où chaque axe correspond à un type de données. Par exemple, pour suivre une particule au cours du temps, on peut décider qu'un axe va représenter un pas de temps et qu'un deuxième axe va permettre de stocker les coordonnées x, y, z .

Il est alors important de pouvoir choisir certains éléments du tableau de manière pratique : par exemple, sélectionner toutes les valeurs $x(t)$ ou à l'inverse la position de la particule $(x(t_i), y(t_i), z(t_i))$ à un instant t_i donné. ☺

Accès simple à un élément ou un groupe d'éléments

- Un entier indique une coordonnée précise ;
- Un symbole « : » indique tous les éléments correspondants à cette dimension. Si jamais il y a moins d'indices de fournis que la dimension du tableau, alors c'est équivalent à rajouter des « : » jusqu'à atteindre la dimension du tableau.
- Les entiers négatifs correspondent au fait de compter à partir de la fin. -1 indique le dernier élément dans une dimension, -2 l'antépénultième, etc.

| Groupe d'indice | Résultat |
|--------------------------------------|--|
| <code>data[2,3,4]</code> | On fournit <code>data.dim</code> coordonnées : sélectionne l'élément placé aux indices fournis |
| <code>data[2, :, :] / data[2]</code> | Utilisation du caractère « : » pour sélectionner tous les éléments correspondants. On aura ici un tableau de dimension <code>data.ndim-1</code> et de shape <code>(data.shape[1], data.shape[2],)</code> |

TABLEAU 7.4 – Différentes méthodes pour accéder à des éléments d'un tableau. ☺

💡 À la différence de liste imbriquées, on peut voir que pour un `ndarray`, la sélection d'éléments se fait avec une unique paire de crochets.

Accès à un élément ou un groupe d'éléments spécifique : *slicing* Cela va correspondre au fait de faire du *slicing* (tranchage) du tableau.

Pour faire du *slicing*, on va indiquer les éléments à sélectionner sous la forme :

```
start:stop:step
```

où `start` est l'indice de départ, `stop` est le premier indice exclu, `step` est le pas entre deux indices. ☺

- si `step` est manquant, il vaut 1 ;
- si on indique seulement `start` suivi de `:` on prend tous les éléments à partir de l'indice de départ icnlus ;
- si on indique seuèlement `:` suivi de `stop` on prend tous les éléments jusqu'à celui indiqué par `stop` exclu ;
- par défaut, `start` vaut 1 et `stop` vaut le *shape* de la dimension correspondante.

Si jamais le slicing doit être dynamique (dépendre de certaines variables), il est possible d'utiliser un oslice : `slice(start, end, step)`. Si un des indices vaut `None`, alors il prend la même valeur que par défaut.

Sélection conditionnelle d'éléments Il est possible de faire du *masking* pour sélectionner des éléments uniquement s'ils vérifient une condition. Par exemple, sur un tableau d'entier, on peut sélectionner tous les nombres pairs avec la condition suivante :

```
data[data % 2 == 0]
```

Attention, dans ce cas, le résultat retourné est toujours un élément à une seule dimension vu que le résultat n'a aucune raison d'être un tableau de type `ndarray` (avec toujours autant d'éléments dans chacune des dimensions).

7.3 Opérations sur les tableaux, *broadcasting* et notion d'axe

La librairie `numpy` propose de nombreuses opérations possibles. Les opérations de base sont celles **élément par élément** (addition, multiplication, soustraction, etc).


7.3.1 *Broadcasting* ⓘ

En cas de manipulation de tableaux qui n'ont pas exactement le même *shape*, alors il peut y avoir des incompatibilités. Les règles utilisées par `numpy` sont celles du *broadcasting* qui permet de faire en sorte de se ramener systématiquement à des tableaux ayant une forme analogue.

Règle du broadcasting En partant de la dernière dimension, on se ramène à des tableaux ayant le même *shape* de la manière suivante :

- si les dimensions sont égales, alors on ne fait rien ;
- si une des deux dimensions est égale à 1, alors on « étire » le tableau dans la direction correspondante jusqu'à avoir deux dimensions égales ;
- Si on a « épuisé » les dimensions dans un des deux tableaux, alors on ajoute une nouvelle dimension « par la gauche » et on étire le tableau dans la dimension correspondante.
- sinon, si pour une dimension les dimensions sont différentes sans qu'une des deux soit égale à 1, il y a une erreur.

Puis on continue ainsi de droite à gauche pour toutes les dimensions jusqu'à avoir des dimensions égales pour les deux tableaux. ☺

 Les situation de grand danger sont celles-où il peut y avoir *broadcasting* mais qu'il soit « mauvais » (ne corresponde pas à ce que l'on veut faire). Par exemple si on veut multiplier un vecteur de *shape* (3,) avec une matrice 3×3 mais selon l'avant dernière dimension et pas la dernière dimension. ☹

7.3.2 Opération sur les tableaux, notion d'axe

Pour les tableaux, il est possible d'utiliser un grand nombre de fonctions : somme, moyenne, médiane, dérivée, etc. Cependant, il n'est pas rare d'être intéressé par une opération mais uniquement selon certaines dimensions. Ces dimensions correspondent à des axes du tableau. ☺ Cela permet d'être plus spécifique pour les opérations à mener et évite généralement d'avoir à faire des opérations compliquées pour obtenir un résultat équivalent. En général, la/les dimensions sur lesquelles s'effectue l'opération n'apparaissent plus dans le résultat (sauf si cela est demandé explicitement). ☺

7.4 Points divers

7.4.1 Dérivation numérique *versus* dérivation analytique

La bibliothèque `numpy` n'est **PAS** une bibliothèque pour faire du calcul symbolique/analytique mais pour faire du calcul numérique sur des tableaux. Il faut donc bien comprendre les limites des différents calculs effectués. Ainsi, toutes les opérations de dérivation, intégration et autre vont avoir des limitations par rapport à des opérations analytiques :

- Les formules utilisées sont en général de bonnes approximations numériques mais ne sont pas exactes ;
- De plus, le calcul en nombre flottant (voir section 5.1.1.1) introduit des erreurs dans certains cas.

Dérivation Pour calculer la dérivée, la fonction `np.gradient` utilise une formule centrée d'ordre 2 si l'espacement entre les points est régulier.

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \quad (7.1)$$

On peut montrer qu'il y a deux domaines en fonction de la valeur de h (figure 7.2) :

- Dans un premier temps, lorsque $h \rightarrow 0$, il y a généralement une *amélioration* du résultat car l'approximation est de mieux en mieux vérifiée avec le passage à la limite.
- Cependant, au-delà d'un certain seuil, (en général vers $h \approx 10^{-6}$) le résultat se *dégrade* à cause du calcul en nombre flottant (voir la section 5.1.1.1)

De plus, aux bords, par défaut, `numpy` utilise non pas une formule d'ordre deux, mais une formule d'ordre 1, ce qui peut conduire à des comportements « anormaux » pour les premiers points. Avec l'option `edge_order = 2`, il est possible de se ramener à une formule adaptée qui est d'ordre deux comme pour l'ensemble des autres points. ☺

Il existe des formules d'ordre supérieur à deux, tout comme des fonctions spécifiques pour calculer des dérivées d'ordre supérieur, mais dans ce cas, il faut aller chercher du côté de bibliothèques spécifiques (`findiff` ou `numdifftools` par exemple) ou programmer soi-même ces implémentations particulières du calcul de la dérivée. En particulier l'utilisation répétée de l'opération `np.gradient` pour calculer les dérivées successives peut aggraver les différents problèmes numériques.

7.4.2 Nombres pseudo-aléatoires

`NumPy` propose une série de fonctions pour générer des nombres aléatoires selon des lois variées. ① Au-delà des aspects techniques, il faut surtout se rappeler que les nombres

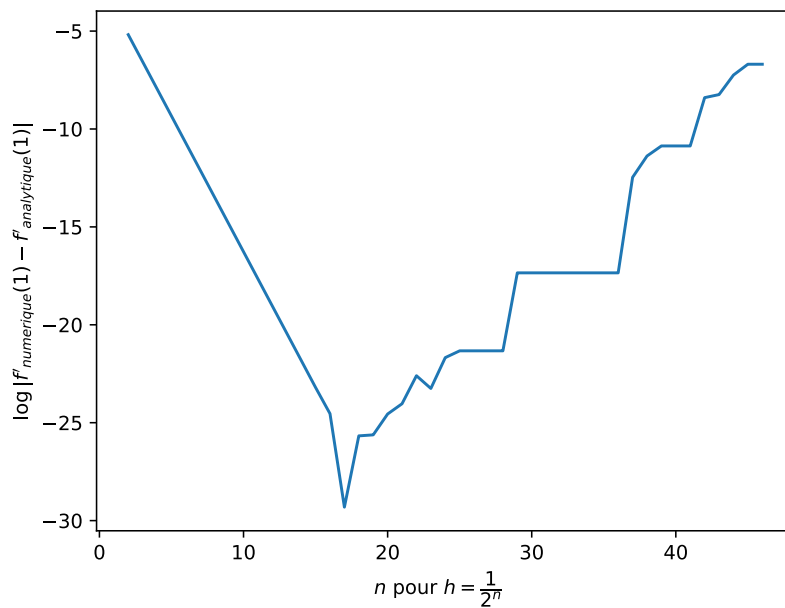


FIGURE 7.2 – Pour la fonction $f(x) = \sin(x)$, logarithme de la valeur absolue de la différence entre la valeur de la dérivée calculée numériquement avec la fonction `np.gradient` de numpy et la valeur analytique pour différentes valeurs de n avec $h = \frac{1}{2^n}$ au point $x = 1$.

aléatoires ne le sont que partiellement : au bout d'un certain temps, ils se répètent, peuvent ne pas suivre la loi qu'ils sont censés représenter pour un grand nombre de tirages, etc. Comme la plupart des générateurs de nombre aléatoires, numpy fait appel à un *seed* qui va déterminer la suite de nombre aléatoire qui sera tirée. S'il n'est pas possible de connaître la valeur de ce seed après un tirage, il est au contraire possible de le fixer à priori avec une valeur. Cela est très utile si on cherche à tester son programme et effectuer des comparaisons sur des nombres aléatoires mais toujours identiques. Par contre, si jamais on se retrouve par hasard avec deux seed identiques, les deux séries de nombres aléatoires qu'on peut tirer se retrouvent alors étroitement corrélées.

Il existe un module spécifique dédié (`secrets` ⓘ) pour le tirage des nombres aléatoires utilisables pour de la cryptographie si jamais l'aspect pseudo-aléatoire n'est pas suffisant. Il faut ainsi retenir que numpy propose la génération de nombres aléatoires suffisants pour faire de la modélisation numérique, mais que ce n'est PAS adapté pour des aspects cryptographiques.

7.5 Ce qu'il faut retenir

- Pouvoir créer un tableau de type `ndarray` ;
- Comprendre la notion de dimension et de shape pour les `ndarray` ;
- Savoir sélectionner un élément ou un groupe d'élément avec du slicing ;
- Connaître et comprendre les règles de broadcasting.
- Savoir utiliser des opérations selon un axe ou un groupe d'axes.
- Être conscient des limites sur le calcul numérique de la dérivée.
- Être conscient des limites de la génération de nombres aléatoires et comprendre la notion de *seed*.

Chapitre 8

Faire des graphiques avec Matplotlib

La création de figure représentative de résultats expérimentaux est cruciale en science pour réussir à montrer à son lecteur les causes, effets, subtilités et résultats expérimentaux. Un bon graphique peut réussir à faire passer un message impossible à synthétiser en une page. Tout comme il peut expliciter des points techniques d'un modèle.

En temps normal, la création d'un bon graphique peut ainsi prendre une voire plusieurs journées. D'autant plus lorsque la quantité de données est importante.

8.1 Principes généraux

Réussir à donner un ensemble de règles à suivre pour la création d'un bon graphique est une gageure. De plus cela est un sujet à part entière. L'expérience rendra les choses plus faciles au fur et à mesure. Je liste ci-dessous quelques règles génériques qui ne sont exhaustives ni toujours à appliquer.

Éviter les camemberts et toute représentation utilisant un angle pour comparer deux valeurs numériques : nos yeux sont extrêmement mauvais pour comparer des angles, il faut donc éviter à tout prix les représentations qui sont basées sur ce principe. Une comparaison faisant appel à une comparaison de longueur est généralement bien plus pertinente. Et pour des valeurs simples, un bon tableau peut être plus pertinent si jamais il est bien présenté. 🍷

Le même principe s'applique pour la comparaison de dérivées ou pour faire la différence entre deux courbes. 🍷

Évitez les courbes en 3D pour tout ce qui est données numériques Encore une fois, notre œil a du mal à comparer des données dans un espace tridimensionnel projeté sur 2 dimensions. Les représentations 3D peuvent être pertinentes pour représenter des données spatiales, mais beaucoup moins pour des données numériques. [site Fundamentals of Data Visualization](#)

Faites des graphiques où les données principales ressortent Il faut mieux rendre les axes, légendes etc un peu moins prégnantes pour faire ressortir les données. De même, il peut être intéressant de souligner des points où il faut regarder, passer les axes en gris au lieu du noir par défaut, etc. De même, réduisez au maximum tout ce qui pourrait distraire l'œil des données (gridline/grilles, surabondance de ticks, etc).

Réfléchissez au fait d’inclure le zéro ou pas Si vous cherchez à comparer des données absolues, n’oubliez pas de donner une référence et donc à priori, indiquez la position du zéro pour montrer si la variation est importante ou non. À l’inverse, si vous êtes intéressés par les variations plutôt que par la valeur absolue, alors ne pas inclure le zéro peut permettre d’utiliser au maximum l’espace pour les souligner. 🔄

Un choix de couleur harmonieux Il est généralement très difficile de trouver un lot de couleurs harmonieuses. Matplotlib propose différents jeux de couleur ① et utilise par défaut les couleurs `tab10` pour différencier les lignes. Pour plus de variations, j’utilise personnellement le site [ColorBrewer](#) qui propose de nombreuses options, indique si le schéma résiste à la photocopie ou au passage en noir et blanc, etc. Au delà de quelques couleurs, il est rapidement très difficile de faire quelque chose qui convienne à la fois aux personnes ayant des déficiences visuelles (daltonismes en particulier), qui résiste à la photocopie, au passage en noir et blanc et soit facilement rendu aussi bien à l’impression que sur écran... Les couleurs criardes/saturées par défaut dans les logiciels de dessin sont tout de même généralement déconseillées, en particulier le jaune sur fond blanc qui ressort souvent très mal.

Ne pas être avare en figure Il est généralement judicieux de multiplier des figures mettant en valeur plusieurs manières de présenter les données pour décrire au mieux un jeu de données complexe que de surcharger une unique figure avec toutes les données.

Allez visiter la galerie La [galerie](#) regorge d’exemples qui peuvent vous aider à construire vos graphiques. Ceux-ci peuvent vous aider à trouver de l’inspiration. Cependant, ce n’est pas toujours parce que vous pouvez faire quelque chose que c’est judicieux de le faire. Et à l’inverse, ce qui doit vous guider est la manière dont vous voulez mettre en valeur vos résultats, pas la bibliothèque python que vous utilisez pour le faire. Ainsi, il est parfois très difficile de faire des choses esthétiques, mais le temps passé à le faire vous fera progresser et contribuera à faire en sorte que votre message soit convaincant.

8.1.1 Bibliographie

Avant de commencer, je vous recommande très chaudement de passer du temps dans la lecture des quelques ressources bibliographiques suivantes :

- [Fundamentals of Data Visualization](#) de Claus O. Wilke : de nombreux exemples illustrés avec de bonnes et mauvaises pratiques. Couvre de nombreux exemples, balaye le sujet tout en restant concis.
- Les livres d’Edward Tufte, ce dernier ayant eu une influence significative sur la présentation des données :
 - *Envisioning information*, Edward R. Tufte, 9780961392116
 - *The visual display of quantitative information* Edward R. Tufte, 9780961392147
 - *Visual explanations : images and quantities, evidence and narrative* Edward R. Tufte, 9780961392123
 - *Beautiful evidence* Edward R. Tufte, 9780961392178
- Son dernier livre : *Seeing with Fresh Eyes : Meaning, Space, Data, Truth* est par contre une réelle déception et ne vaut pas le coup d’œil.

8.2 Utilisation de matplotlib

Le plus simple est probablement de commencer par aller voir les [antisèches sur matplotlib](#) faites par Nicolas Rougier. Ces fiches expliquent toutes les options les plus courantes de matplotlib. Le reste des options se fera au cas par cas en fonction des besoins spécifiques.

Subplots Au-delà des multiples options, le plus important à retenir est que certaines fonctions qui marchent pour un unique graphique (`plt.title`, `plt.xlabel`, etc) ne marchent pas pour des sous-graphiques. La différence principale étant en général le fait d'utiliser un préfixe `set_` pour les sous-figures.

Plutôt que l'utilisation de `plt.subplots` ⓘ, je vous recommande plutôt d'utiliser `gridspec` ⓘ qui offre plus de souplesse – au moins dans sa syntaxe. Une troisième alternative est `subplot_mosaic` ⓘ

Coordonnées Matplotlib permet également de placer des éléments sur un graphique. Il existe alors plusieurs manières de décrire les coordonnées :

- soit en fonction des données du graphique (*data*), cela est pratique pour légender certains points précisément ;
- soit en fonction de la position absolue dans le cadre (*display*), ce qui est plus pratique pour un placement absolu. Attention, les valeurs en coordonnées absolues ne sont calculées qu'au départ et peuvent donc être fausses lors du redimensionnement de la fenêtre.

Pour plus d'informations, il faut aller voir la documentation. ⓘ.

Enregistrement, mise en page Lors de la création des figures, il est recommandé de préciser la taille avec l'argument `figsize` pour éviter de faire des redimensionnement hasardeux et inesthétiques :

```
fig = plt.figure(figsize=(10, 8))
```

La taille indiquée est en pouce.

Il y a intérêt à enregistrer les données (avec la fonction `savefig`) au format `svg` pour pouvoir les retoucher si nécessaire (avec `inkscape` par exemple). Par contre, si le nombre de données est extrêmement grand, alors des options comme `rasterized` évitent d'avoir des images trop lourdes.

De plus, pour ajuster les marges, la fonction `tight_layout()` permet usuellement d'ajuster correctement les espaces pour éviter des chevauchements.

Par défaut, matplotlib affiche un cadre complet autour de chaque figure, cependant, il est possible d'en enlever certaines parties avec `ax.spines[].set_visible(False)` où l'argument de `spines` peut être au choix parmi `top`, `bottom`, `left`, `right`.

Personnalisation Il est possible de changer un très grand nombre de paramètres par défaut, il est possible de les définir via `matplotlib.rcParams` ou via un fichier `matplotlibrc` dans le répertoire courant. ⓘ On pourra noter en particulier la possibilité d'utiliser LaTeX dans sa version complète avec :

```
plt.rcParams.update({
    "text.usetex": True,
    "font.family": "serif"      #'serif', 'sans-serif', 'cursive', 'fantasy', 'monospace'
})
```


Matplotlib for beginners

Matplotlib is a library for making 2D plots in Python. It is designed with the philosophy that you should be able to create simple plots with just a few commands:

1 Initialize

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
```

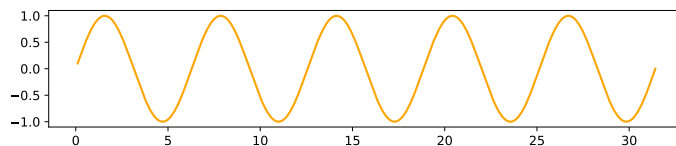
2 Prepare

```
X = np.linspace(0, 4*np.pi, 1000)
Y = np.sin(X)
```

3 Render

```
fig, ax = plt.subplots()
ax.plot(X, Y)
plt.show()
```

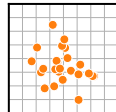
4 Observe



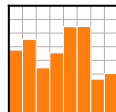
Choose

Matplotlib offers several kind of plots (see Gallery):

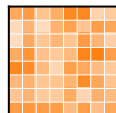
```
X = np.random.uniform(0, 1, 100)
Y = np.random.uniform(0, 1, 100)
ax.scatter(X, Y)
```



```
X = np.arange(10)
Y = np.random.uniform(1, 10, 10)
ax.bar(X, Y)
```



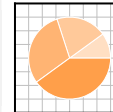
```
Z = np.random.uniform(0, 1, (8,8))
ax.imshow(Z)
```



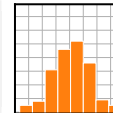
```
Z = np.random.uniform(0, 1, (8,8))
ax.contourf(Z)
```



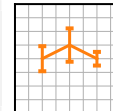
```
Z = np.random.uniform(0, 1, 4)
ax.pie(Z)
```



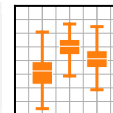
```
Z = np.random.normal(0, 1, 100)
ax.hist(Z)
```



```
X = np.arange(5)
Y = np.random.uniform(0, 1, 5)
ax.errorbar(X, Y, Y/4)
```



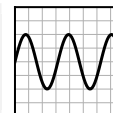
```
Z = np.random.normal(0, 1, (100,3))
ax.boxplot(Z)
```



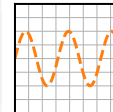
Tweak

You can modify pretty much anything in a plot, including limits, colors, markers, line width and styles, ticks and ticks labels, titles, etc.

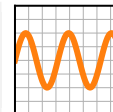
```
X = np.linspace(0, 10, 100)
Y = np.sin(X)
ax.plot(X, Y, color="black")
```



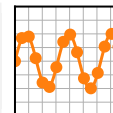
```
X = np.linspace(0, 10, 100)
Y = np.sin(X)
ax.plot(X, Y, linestyle="--")
```



```
X = np.linspace(0, 10, 100)
Y = np.sin(X)
ax.plot(X, Y, linewidth=5)
```



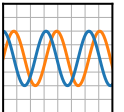
```
X = np.linspace(0, 10, 100)
Y = np.sin(X)
ax.plot(X, Y, marker="o")
```



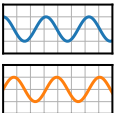
Organize

You can plot several data on the the same figure, but you can also split a figure in several subplots (named Axes):

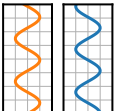
```
X = np.linspace(0, 10, 100)
Y1, Y2 = np.sin(X), np.cos(X)
ax.plot(X, Y1, X, Y2)
```



```
fig, (ax1, ax2) = plt.subplots(2,1)
ax1.plot(X, Y1, color="C1")
ax2.plot(X, Y2, color="C0")
```

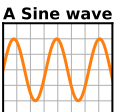


```
fig, (ax1, ax2) = plt.subplots(1,2)
ax1.plot(Y1, X, color="C1")
ax2.plot(Y2, X, color="C0")
```

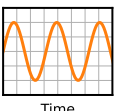


Label (everything)

```
ax.plot(X, Y)
fig.suptitle(None)
ax.set_title("A Sine wave")
```



```
ax.plot(X, Y)
ax.set_ylabel(None)
ax.set_xlabel("Time")
```



Explore

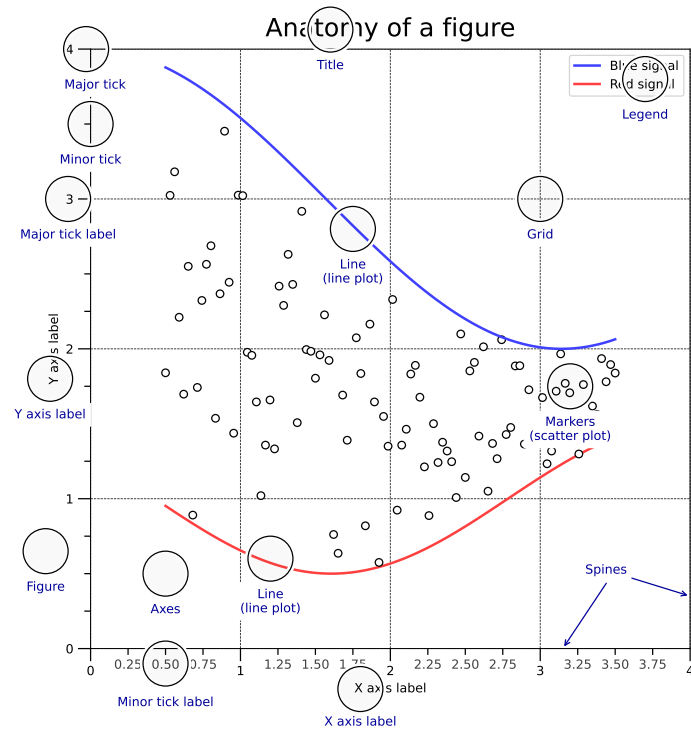
Figures are shown with a graphical user interface that allows to zoom and pan the figure, to navigate between the different views and to show the value under the mouse.

Save (bitmap or vector format)

```
fig.savefig("my-first-figure.png", dpi=300)
fig.savefig("my-first-figure.pdf")
```

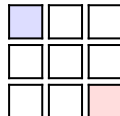

Matplotlib for intermediate users

A matplotlib figure is composed of a hierarchy of elements that forms the actual figure. Each element can be modified.

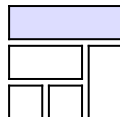


Figure, axes & spines

```
fig, axs = plt.subplots(3,3)
axs[0,0].set_facecolor("#dddfdf")
axs[2,2].set_facecolor("#fffdd")
```



```
gs = fig.add_gridspec(3, 3)
ax = fig.add_subplot(gs[0, :])
ax.set_facecolor("#dddfdf")
```

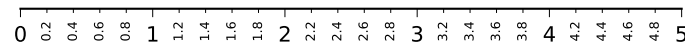


```
fig, ax = plt.subplots()
ax.spines["top"].set_color("None")
ax.spines["right"].set_color("None")
```



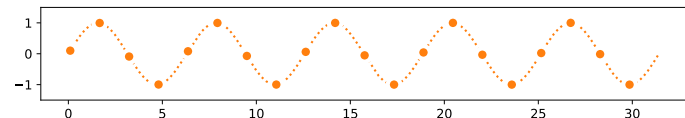
Ticks & labels

```
from mpl.ticker import MultipleLocator as ML
from mpl.ticker import ScalarFormatter as SF
ax.xaxis.set_minor_locator(ML(0.2))
ax.xaxis.set_minor_formatter(SF())
ax.tick_params(axis='x', which='minor', rotation=90)
```



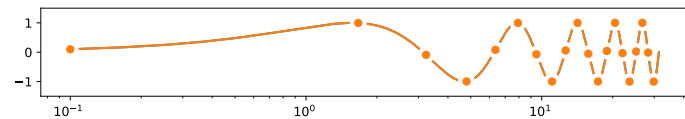
Lines & markers

```
X = np.linspace(0.1, 10*np.pi, 1000)
Y = np.sin(X)
ax.plot(X, Y, "C1o:", markevery=25, mec="1.0")
```



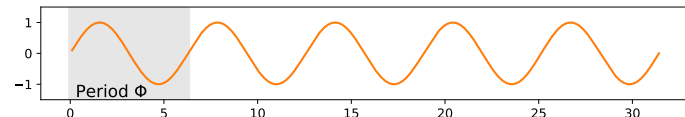
Scales & projections

```
fig, ax = plt.subplots()
ax.set_xscale("log")
ax.plot(X, Y, "C1o-", markevery=25, mec="1.0")
```



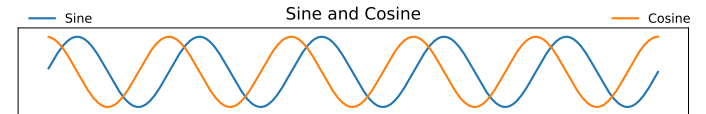
Text & ornaments

```
ax.fill_betweenx([-1,1],[0],[2*np.pi])
ax.text(0, -1, r"Period $\Phi$")
```



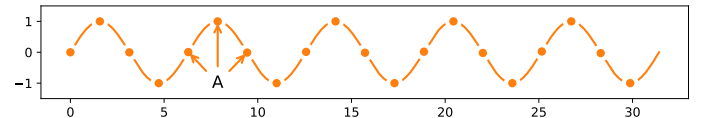
Legend

```
ax.plot(X, np.sin(X), "C0", label="Sine")
ax.plot(X, np.cos(X), "C1", label="Cosine")
ax.legend(bbox_to_anchor=(0,1,1,.1), ncol=2,
         mode="expand", loc="lower left")
```



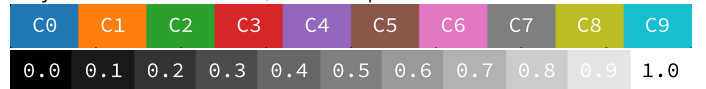
Annotation

```
ax.annotate("A", (X[250],Y[250]),(X[250],-1),
          ha="center", va="center",arrowprops =
          {"arrowstyle" : "->", "color": "C1"})
```



Colors

Any color can be used, but Matplotlib offers sets of colors:



Size & DPI

Consider a square figure to be included in a two-columns A4 paper with 2cm margins on each side and a column separation of 1cm. The width of a figure is $(21 - 2 \times 2 - 1)/2 = 8$ cm. One inch being 2.54cm, figure size should be 3.15×3.15 in.

```
fig = plt.figure(figsize=(3.15,3.15), dpi=50)
plt.savefig("figure.pdf", dpi=600)
```

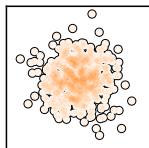
Matplotlib 3.5.0 handout for intermediate users. Copyright (c) 2021 Matplotlib Development Team. Released under a CC-BY 4.0 International License. Supported by NumFOCUS.

Matplotlib tips & tricks

Transparency

Scatter plots can be enhanced by using transparency (alpha) in order to show area with higher density. Multiple scatter plots can be used to delineate a frontier.

```
X = np.random.normal(-1, 1, 500)
Y = np.random.normal(-1, 1, 500)
ax.scatter(X, Y, 50, "0.0", lw=2) # optional
ax.scatter(X, Y, 50, "1.0", lw=0) # optional
ax.scatter(X, Y, 40, "C1", lw=0, alpha=0.1)
```



Rasterization

If your figure has many graphical elements, such as a huge scatter, you can rasterize them to save memory and keep other elements in vector format.

```
X = np.random.normal(-1, 1, 10_000)
Y = np.random.normal(-1, 1, 10_000)
ax.scatter(X, Y, rasterized=True)
fig.savefig("rasterized-figure.pdf", dpi=600)
```

Offline rendering

Use the Agg backend to render a figure directly in an array.

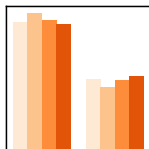
```
from matplotlib.backends.backend_agg import FigureCanvas
canvas = FigureCanvas(Figure())
... # draw some stuff
canvas.draw()
Z = np.array(canvas.renderer.buffer_rgba())
```

Range of continuous colors

You can use colormap to pick from a range of continuous colors.

```
X = np.random.randn(1000, 4)
cmap = plt.get_cmap("Oranges")
colors = cmap([0.2, 0.4, 0.6, 0.8])
```

```
ax.hist(X, 2, histtype='bar', color=colors)
```



Text outline

Use text outline to make text more visible.

```
import matplotlib.patheffects as fx
text = ax.text(0.5, 0.1, "Label")
text.set_path_effects([
    fx.Stroke(linewidth=3, foreground='1.0'),
    fx.Normal([])])
```



Multiline plot

You can plot several lines at once using None as separator.

```
X, Y = [], []
for x in np.linspace(0, 10*np.pi, 100):
    X.extend([x, x, None]), Y.extend([0, sin(x), None])
ax.plot(X, Y, "black")
```



Dotted lines

To have rounded dotted lines, use a custom linestyle and modify dash_capstyle.

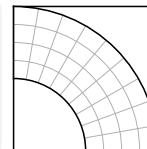
```
ax.plot([0,1], [0,0], "C1",
        linestyle = (0, (0.01, 1)), dash_capstyle="round")
ax.plot([0,1], [1,1], "C1",
        linestyle = (0, (0.01, 2)), dash_capstyle="round")
```



Combining axes

You can use overlaid axes with different projections.

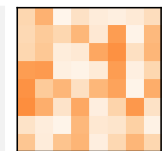
```
ax1 = fig.add_axes([0,0,1,1],
                    label="cartesian")
ax2 = fig.add_axes([0,0,1,1],
                    label="polar",
                    projection="polar")
```



Colorbar adjustment

You can adjust a colorbar's size when adding it.

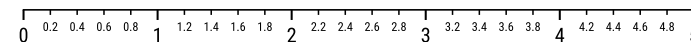
```
im = ax.imshow(Z)
cb = plt.colorbar(im,
                  fraction=0.046, pad=0.04)
cb.set_ticks([])
```



Taking advantage of typography

You can use a condensed font such as Roboto Condensed to save space on tick labels.

```
for tick in ax.get_xticklabels(which='both'):
    tick.set_fontname("Roboto Condensed")
```



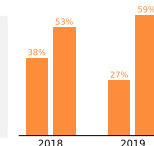
Getting rid of margins

Once your figure is finished, you can call `tight_layout()` to remove white margins. If there are remaining margins, you can use the `pdfcrop` utility (comes with TeX live).

Hatching

You can achieve a nice visual effect with thick hatch patterns.

```
cmap = plt.get_cmap("Oranges")
plt.rcParams['hatch.color'] = cmap(0.2)
plt.rcParams['hatch.linewidth'] = 8
ax.bar(X, Y, color=cmap(0.6), hatch="/" )
```



Read the documentation

Matplotlib comes with an extensive documentation explaining the details of each command and is generally accompanied by examples. Together with the huge online gallery, this documentation is a gold-mine.

Matplotlib 3.5.0 handout for tips & tricks. Copyright (c) 2021 Matplotlib Development Team. Released under a CC-BY 4.0 International License. Supported by NumFOCUS.

Axes adjustments

API

Uniform colormaps

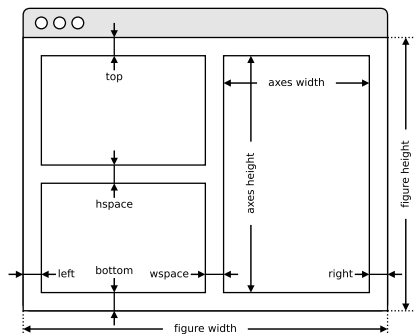
Color names

API

Legend placement

How do I ...

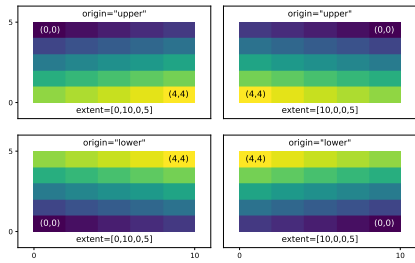
plt.subplots_adjust(...)



Extent & origin

API

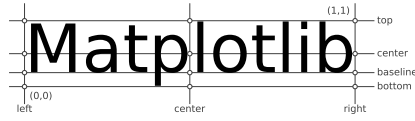
ax.imshow(extent=..., origin=...)



Text alignments

API

ax.text(..., ha=..., va=..., ...)



Text parameters

API

ax.text(..., family=..., size=..., weight=...)
ax.text(..., fontproperties=...)

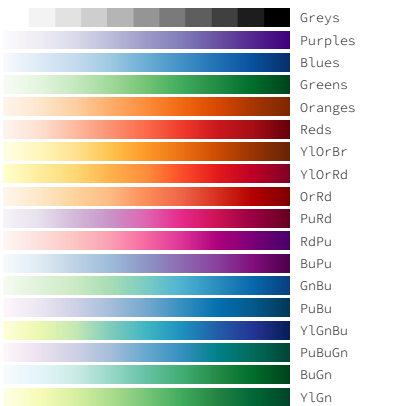
The quick brown fox
The quick brown fox
The quick brown fox
The quick brown fox
The quick brown fox
The quick brown fox

xx-large (1.73)
x-large (1.44)
large (1.20)
medium (1.00)
small (0.83)
x-small (0.69)
xx-small (0.58)

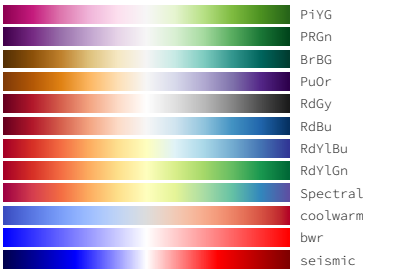
black (900)
bold (700)
semibold (600)
normal (400)
ultralight (100)

monospace
serif
sans
cursive
italic
normal
small-caps
normal

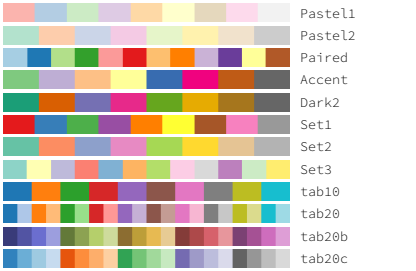
Sequential colormaps



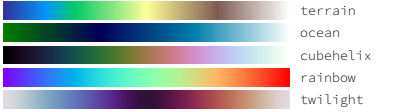
Diverging colormaps



Qualitative colormaps



Miscellaneous colormaps



Color names

API


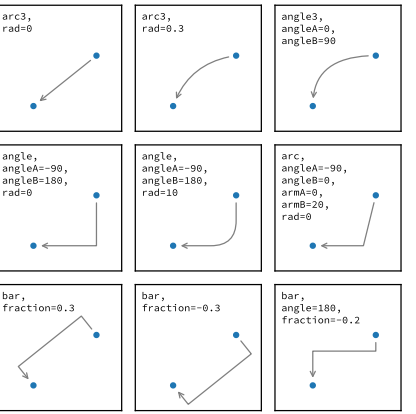
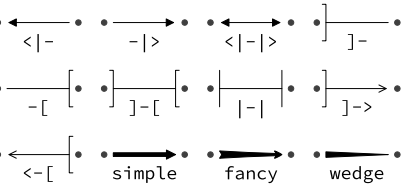


Image interpolation

API



Legend placement



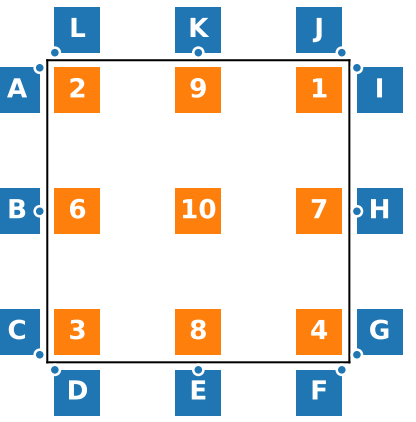
ax.legend(loc="string", bbox_to_anchor=(x,y))

2: upper left 9: upper center 1: upper right
6: center left 10: center 7: center right
3: lower left 8: lower center 4: lower right

A: upper right / (-0.1, 0.9) B: center right / (-0.1, 0.5)
C: lower right / (-0.1, 0.1) D: upper left / (0.1, -0.1)
E: upper center / (0.5, -0.1) F: upper right / (0.9, -0.1)
G: lower left / (1.1, 0.1) H: center left / (1.1, 0.5)
I: upper left / (1.1, 0.9) J: lower right / (0.9, 1.1)
K: lower center / (0.5, 1.1) L: lower left / (0.1, 1.1)

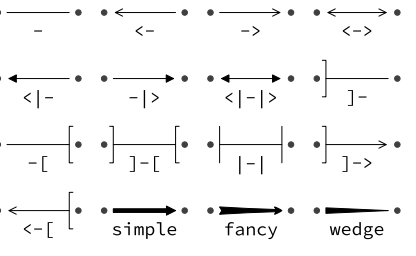
Annotation connection styles

API



Annotation arrow styles

API



How do I ...

resize a figure?
→ fig.set_size_inches(w, h)

save a figure?
→ fig.savefig("figure.pdf")

save a transparent figure?
→ fig.savefig("figure.pdf", transparent=True)

clear a figure/an axes?
→ fig.clear() → ax.clear()

close all figures?
→ plt.close("all")

remove ticks?
→ ax.set_[xy]ticks(())

remove tick labels?
→ ax.set_[xy]ticklabels(())

rotate tick labels?
→ ax.tick_params(axis="x", rotation=90)

hide top spine?
→ ax.spines['top'].set_visible(False)

hide legend border?
→ ax.legend(frameon=False)

show error as shaded region?
→ ax.fill_between(X, Y+error, Y-error)

draw a rectangle?
→ ax.add_patch(plt.Rectangle((0, 0), 1, 1))

draw a vertical line?
→ ax.axvline(x=0.5)

draw outside frame?
→ ax.plot(..., clip_on=False)

use transparency?
→ ax.plot(..., alpha=0.25)

convert an RGB image into a gray image?
→ gray = 0.2989*R + 0.5870*G + 0.1140*B

set figure background color?
→ fig.patch.set_facecolor("grey")

get a reversed colormap?
→ plt.get_cmap("viridis_r")

get a discrete colormap?
→ plt.get_cmap("viridis", 10)

show a figure for one second?
→ fig.show(block=False), time.sleep(1)

Performance tips

scatter(X, Y) slow
plot(X, Y, marker="o", ls="") fast
for i in range(n): plot(X[i]) slow
plot(sum([x+[None] for x in X], [])) fast
cla(), imshow(...), canvas.draw() slow
im.set_data(...), canvas.draw() fast

Beyond Matplotlib

Seaborn: Statistical data visualization
Cartopy: Geospatial data processing
yt: Volumetric data visualization
mpld3: Bringing Matplotlib to the browser
Datashader: Large data processing pipeline
plotnine: A grammar of graphics for Python

Matplotlib Cheatsheets

Copyright (c) 2021 Matplotlib Development Team
Released under a CC-BY 4.0 International License

NUMFOCUS

OPEN CODE = BETTER SCIENCE

Chapitre 9

Scipy et numpy pour résoudre quelques problèmes numériques courants

La bibliothèque scipy s'appuie lourdement sur numpy en interne. Il existe plusieurs sous-modules spécifiques pour certaines utilisations. À la différence de numpy, il faut préciser les sous-modules utilisés. Ainsi il faudra en général au minimum 2 lignes pour faire l'import :

```
1 import scipy
import scipy.stats #statistiques
import scipy.integrate #intégration
import scipy.optimize #ajustement de courbe
```

La liste des différents sous-modules est disponible dans la documentation ⓘ.

9.1 Constantes numériques

Je vous conseille **très très TRÈS fortement** de **toujours** utiliser les constantes numériques du module `scipy.constants` ⓘ 🍷.

1. Avant tout car cela *évite les fautes de frappe* et donc un débogage très difficile : il n'y a rien de plus difficile que de trouver qu'un "8.314" s'est transformé en "8.134".
2. De plus, cela évite généralement *tout problème numérique lié à la troncature* de constantes.
3. Cependant les valeurs utilisées peuvent dépendre de la version de la librairie, par exemple, aujourd'hui, il s'agit des valeurs du CODATA 2018 mais cela peut être amené à évoluer. Pour du maintien sur le long terme, cela peut amener à une instabilité numérique des résultats. Mais cela assure un maintien avec des valeurs relativement récentes des constantes.

9.2 « Philosophie » des fonctions scipy

De manière générique, un grand nombre de problèmes va demander de faire appel à des fonctions qui opèrent sur un grand nombre de variables et paramètres :

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n; \alpha, \beta, \gamma, \dots) \quad (9.1)$$

Et il sera courant de vouloir faire des actions uniquement par rapport à certaines variables ou paramètres. Par exemple, calculer l'intégrale de la fonction mais uniquement par rapport à la variable x_1 . Il faut donc faire comprendre à `scipy` qui sera considéré en tant que paramètre, et qui sera considéré en tant que variable.

Pour cela, il faut en général :

1. mettre en premier les variables qui seront l'objet des fonctions complexes de python pour la fonction sur laquelle on veut agir (variables d'intégration, etc)
2. appeler la fonction complexe de `scipy` (par exemple `integrate` pour faire une intégration) en lui donnant comme argument :
 - la fonction sur laquelle on veut agir
 - les *paramètres* considérés comme fixes avec l'option `args = ()` suivie d'un tuple contenant les valeurs des paramètres.

Ainsi pour faire l'intégration de la fonction f par rapport à x_1 , la structure globale de l'appel à `scipy` pour faire l'intégration *ressemblera* à ☺ :

```
int = scipy.integrate.quad(f, [...], args=(x_2,...,x_n,alpha,beta,gamma,...))
```

9.3 Ajustement de courbe

Les fonctions accessibles sont nombreuses. La syntaxe peut être plus ou moins simple en fonction de ce qui est souhaité. Pour tout ce qui est régression linéaire ou polynomiale, la fonction `np.polyfit` permet d'avoir accès aux paramètres et de faire des régressions pondérées si jamais l'incertitude sur la grandeur observable est connue. ☺

Il est également possible d'utiliser `optimize.curve_fit` et `optimize.least_squares` pour faire des régressions non-linéaires. Les deux fonctions ont des syntaxes assez différentes même si leur finalité est similaire. ☺ `least_squares` permet de fixer des bornes pour les paramètres à trouver (et utilise une syntaxe similaire à celle décrite 9.2) tandis que `curve_fit` utilise des algorithmes particuliers pour chercher les paramètres optimaux et fournit directement la covariance entre les paramètres trouvés.

💡 Dans tous les cas, il est recommandé d'avoir au moins une dizaine de points par paramètre à optimiser.

💡 De plus, pour les régressions non linéaires, il est **crucial** d'essayer de donner une estimation, même grossière des paramètres. En effet, les algorithmes d'optimisation, aussi sophistiqués soit-ils peuvent très facilement tomber dans des minimums relatifs qui ne correspondent pas forcément au valeur optimales des paramètres. On peut également tenter de faire une optimisation avec différents paramètres de départ pour essayer de voir si les paramètres finaux trouvés sont stables.

💡 Attention, les paramètres trouvés sont rarement indépendants, il faut donc bien prendre en compte leur covariance pour exploiter les incertitudes associées.

9.4 Transformée de Fourier

Numpy et `scipy` sont tous les deux capables de faire des *fast fourier transforms*. Cependant, pour un signal réel, la transformée est complexe. Il faut donc soit se ramener à un domaine réel en utilisant `np.abs` pour avoir le module et `np.angle` pour avoir la phase, soit utiliser les

fonctions dédiées pour contourner les « difficultés » associées, qui sont en général préfixées avec « r ». ☺

💡 La transformée de Fourier donnera la valeur moyenne du signal pour une fréquence nulle. Si cela n'est pas intéressant pour le traitement, il est alors judicieux de soustraire la composante moyenne du signal pour ne pas être « parasité » par la composante continue du signal.

9.5 Recherche de zéros

9.5.1 Fonctions unidimensionnelles

Il est également possible de trouver des paramètres permettant de satisfaire une égalité pour des équations non linéaires. Les fonctions possibles sont multiples. Dans tous les cas, on se ramène à un problème de recherche de zéro :

$$g(x) = \alpha \quad (9.2)$$

$$\Rightarrow f(x) = g(x) - \alpha = 0 \quad (9.3)$$

`optimize.root_scalar` est la fonction générique qui peut faire appel à différentes méthodes plus spécifiques. Le plus simple est de commencer par la méthode de Newton-Raphson.① Si non, la méthode `brentq` est une alternative parmi d'autres. ①

Pour la plupart des méthodes :

- on suppose la fonction continue
- il est nécessaire de fournir deux points a et b pour lesquels $f(a) < 0$ et $f(b) > 0$ (ou vice-versa).

La complexité des algorithmes et les propriétés sont discutées dans la documentation ①. La convergence n'est pas assurée pour la méthode de Newton-Raphson alors qu'elle l'est dans les autres cas. ☺

💡 Le conditionnement du problème peut parfois faciliter la résolution.

9.5.2 Fonctions vectorielles à plusieurs variables

Pour les fonctions multidimensionnelles, il est beaucoup plus difficile d'assurer la convergence de la méthode.


Si on a une fonction vectorielle dont on cherche des zéros :


$$f(x_1, \dots, x_n) = \begin{pmatrix} f_1(x_1, \dots, x_n) \\ f_2(x_1, \dots, x_n) \\ \vdots \\ f_m(x_1, \dots, x_n) \end{pmatrix} \quad (9.4)$$



alors la plupart des méthodes exploitent le jacobien qui est la matrice définie par le fait que chaque colonne est la dérivée de chacune des composantes de la fonction par rapport à

chaque variable. On a donc une matrice à m lignes et n colonnes :

$$jac = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{pmatrix} \quad (9.5)$$


 **Il est toujours préférable de donner le jacobien de la fonction s'il est accessible.** Cela permet d'économiser beaucoup de temps de calcul et facilite énormément la convergence.


 Il existe de nombreuses méthodes d'optimisation, la convergence et la rapidité de celle-ci dépendent fortement du problème considéré.

 Comme pour l'optimisation de courbes, il est préférable de donner une estimation, même grossière d'une solution. Que ce soit par une estimation grossière ou des méthodes plus sophistiquées pour assurer la convergence de la solution vers une solution numérique acceptable. 


9.6 Minimisation de fonction

Quel que soit le type de minimisation (unidimensionnelle ou multidimensionnelle). Il est difficile d'être certains que les algorithmes trouvent le minimum absolu de la fonction. En effet, ils peuvent finir dans des minimum locaux.

Comme pour l'ajustement de courbe, il est d'autant plus facile de trouver le minimum que la fonction est connue pour donner un point de départ raisonnable. 

 Pour la minimisation de fonction à plusieurs variables, parmi les différents algorithmes disponibles, il est en général préférable (voire nécessaire) de donner le jacobien pour faciliter la convergence de l'algorithme, voir de donner le Hessien qui est l'analogue du jacobien, mais pour la dérivée seconde.

9.7 Intégration

Pour l'intégration, il existe plusieurs variantes en fonctions du nombre d'intégrations à effectuer (intégrale simple, double, triple, etc). IL est possible d'utiliser les fonctions `quad` et dérivées si jamais l'expression analytique de la fonction est connue ① . Dans ce cas, `scipy` donne une estimation de l'erreur sur l'intégrale. 

Il est également possible de faire l'intégration de fonctions numériques, dans ce cas, on fait généralement une intégration de Simpson ou de Romberg ① . Par contre, dans ce cas, il n'est pas possible d'avoir une estimation de l'erreur commise lors de l'intégration.

9.8 Équations différentielles ordinaires

9.8.1 Équation différentielle scalaire du premier ordre

Pour une équation différentielle du premier ordre de la forme :

$$\frac{dy}{dt} + \frac{1}{\tau}y = f(t)$$

Il faut ré-écrire l'équation différentielle sous la forme :

$$\frac{dy}{dt} = \underbrace{f(t) - \frac{1}{\tau}y}_{=g(t,y)}$$

Il faudra ensuite créer une fonction $g(t, y)$ qui donne la dérivée et scipy va s'occuper de faire l'intégration pour trouver $y(t)$. La fonction pour faire la résolution de l'équation différentielle doit obligatoirement suivre la structure suivante :

- le premier argument de la fonction doit être la variable d'intégration
- Le deuxième argument de la fonction doit être la fonction sur laquelle porte l'intégration $y(t)$,

Un exemple est présenté dans le cahier jupyter associé. 🔄

💡 Les coefficients peuvent ne pas être constants pour l'équation homogène.

9.8.2 Équation différentielle vectorielle du premier ordre

Dans ce cas, la démarche est rigoureusement identique, la différence principale étant que la fonction $g(t, y)$ sur laquelle porte l'intégration est vectorielle. Il y aura donc autant de composantes que la taille du vecteur.

💡 Les équations peuvent coupler différentes composantes du vecteur.

9.8.3 Équation différentielle du second ordre

Pour une équation différentielle du second ordre, il faut transformer l'équation scalaire en équation vectorielle à 2 composantes.

Ainsi, on va transformer l'équation différentielle du second ordre de la forme :

$$\ddot{u} + \frac{\omega_0}{Q}\dot{u} + \omega_0^2 u = f(t)$$

en équation vectorielle qui porte sur le vecteur $\mathbf{v} = \begin{pmatrix} u \\ \dot{u} \end{pmatrix}$ sous la forme :

$$\begin{pmatrix} \frac{d}{dt} u \\ \frac{d}{dt} \dot{u} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{d}{dt} \mathbf{v}[0] \\ \frac{d}{dt} \mathbf{v}[1] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dot{u} \\ \ddot{u} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{v}[1] \\ -\frac{\omega_0}{Q} \underbrace{\dot{u}}_{\mathbf{v}[1]} - \omega_0^2 \underbrace{u}_{\mathbf{v}[0]} + f(t) \end{pmatrix}$$

L'astuce étant d'utiliser la deuxième coordonnée du vecteur comme valeur de la dérivée de la première composante. On fait donc « glisser » la dérivée première, qui est la deuxième coordonnée de \mathbf{v} en tant que coordonnée de la dérivée de la première composante du vecteur.

💡 Les coefficients peuvent ne pas être constants pour l'équation homogène.

9.9 Fonctions statistiques

à faire : cdf, ppf, pdf

9.10 Arrangement, combinaison

itertools

Troisième partie
Pour aller plus loin

Chapitre 10

Les expressions régulières

re

Chapitre 11

Tableaux non numériques

pandas

Chapitre 12

Les gestionnaires de version : git/github

Chapitre 13

Calcul symbolique

sage

Chapitre 14

Jupyter

Pour avoir des graphiques interactifs : [Interaction sous Jupyter](#).

Chapitre 15

La programmation orientée objet

Chapitre 16

Interaction avec Excel

openpyxl

Chapitre 17

Deep learning

scikit learn