

化学のための Python プログラミング入門

黒崎宏太
医療分子解析学 博士課程

GUIとCUI

- GUI (Graphical User Interface)
人間の直感的な操作とPCの動きが連動している
- CUI (Character-based User Interface)
コマンドを打ってPCを操作していく



CUIに慣れよう！

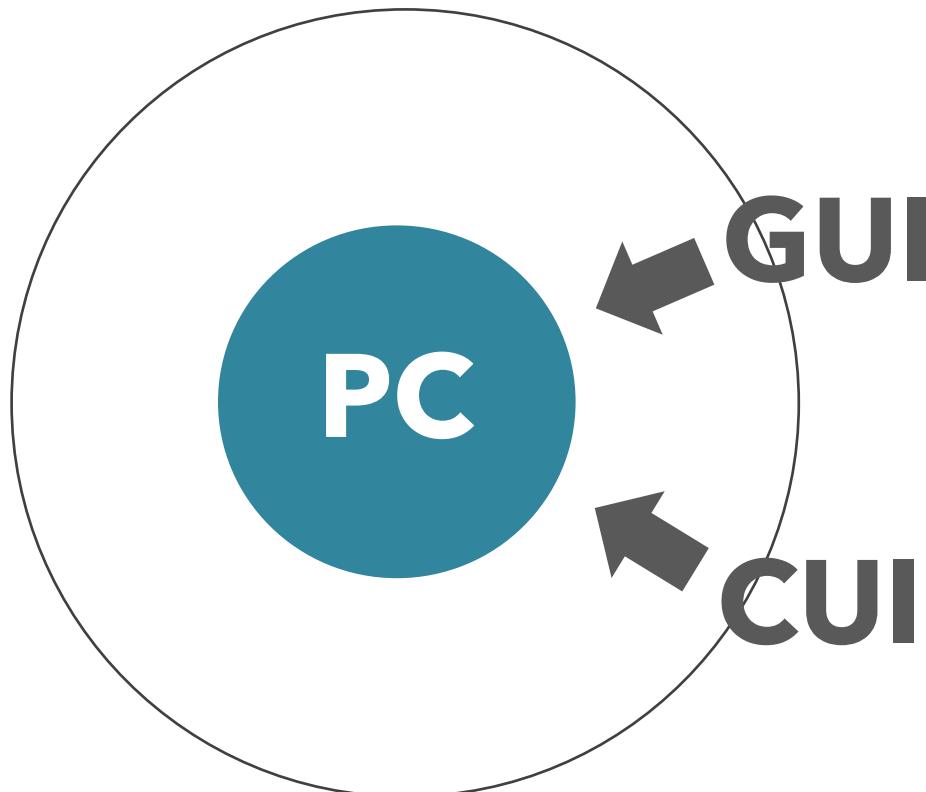
- CUIに慣れることのメリット
 1. ネットで検索して出てくる情報がほとんどCUI
 2. 煩わしいクリック戦争からの脱却
 3. 自動化してコーヒーブレイク



コマンドとプログラムの違い

- ・コマンド
 - ・OSを操作するために出すCUIの指令
 - ・クリックしていたものを文字指令に置き換えたもの
 - ・例) シェルスクリプト
- ・プログラム
 - ・予め仕組んでおいた計算指令
 - ・例) Python, Java, C++, R, etc...

PCをターミナルから動かすイメージ



プログラミングやるならMac?

- Macの利点・欠点

- 利点) GUIとCUIが連動していて直感的
- 利点) Linuxと似ている
- 欠点) ユーザが少ない

- Windowsの利点・欠点

- 利点) CUIがさっぱりわからなくとも操作できる
- 欠点) コマンドが独自的すぎて情報が少ない

WindowsでLinuxコマンドを使う

- WSL (Windows subsystem for Linux)
 - WindowsからLinuxのターミナル操作ができる！

WSLの導入

1. 「Windows の機能の有効化または無効」から「Linux 用 Windows サブシステム」を有効化
2. 「Windows の機能の有効化または無効」から「仮想マシンプラットフォーム」を有効化
3. 管理者権限で Windows Power Shell を起動
以下のコマンドを打つ 成功すると以下のコメントが出る

```
Enable-WindowsOptionalFeature -Online -FeatureName Microsoft-Windows-Subsystem-Linux,VirtualMachinePlatform
```

>> Linux 用 Windows サブシステムには、ディストリビューションがインストールされていません。
ディストリビューションは Microsoft Store にアクセスしてインストールすることができます:
<https://aka.ms/wslstore>

4. Microsoft store からUbuntu **20.04**をインストール

続き

5. 管理者権限でWindows Power Shellを起動
以下のコマンドを打つ

```
wsl --set-version Ubuntu-20.04 2
```

6. Ubuntu 20.04を起動してユーザ名とパスワードを設定する

ターミナルをかっこよくする

1. zshというシェルをインストールする

```
sudo apt-get install zsh
```

2. Zshをデフォルトシェルに変更する

```
which zsh
```

```
chsh -s /usr/bin/zsh
```

3. ターミナルを再起動

続き

4. <https://qiita.com/kinchiki/items/57e9391128d07819c321> を参照

5. 上の内容の要約. 以下のコマンドを打つ

```
git clone --recursive https://github.com/sorin-  
ionescu/prezto.git "${ZDOTDIR:-$HOME}/.zprezto"
```

6. 終わったら以下のコマンドを打つ

```
setopt EXTENDED_GLOB for rcf file in "${ZDOTDIR:-  
$HOME}/.zprezto/runcoms/^README.md(.N); do ln -s "$rcf"  
"${ZDOTDIR:-$HOME}/.${rcf:t}" done
```

7. 最後にターミナルの設ファイルを編集する

```
sudo vi ~/.zpreztorc
```

続き

8. 下のようになっている部分のテーマを書き換える

```
zstyle ':prezto:module:prompt' theme 'sorin'
```



```
zstyle ':prezto:module:prompt' theme 'pure'
```

9. シンタックスハイライティングとオートサジェストを有効化する

```
# Set the Prezto modules to load (browse modules).
# The order matters.
zstyle ':prezto:load' pmodule \
    'environment' \
    'terminal' \
    'editor' \
    'history' \
    'directory' \
    'spectrum' \
    'utility' \
    'completion' \
    'syntax-highlighting' \
    'autosuggestions' \
    'prompt' \
```

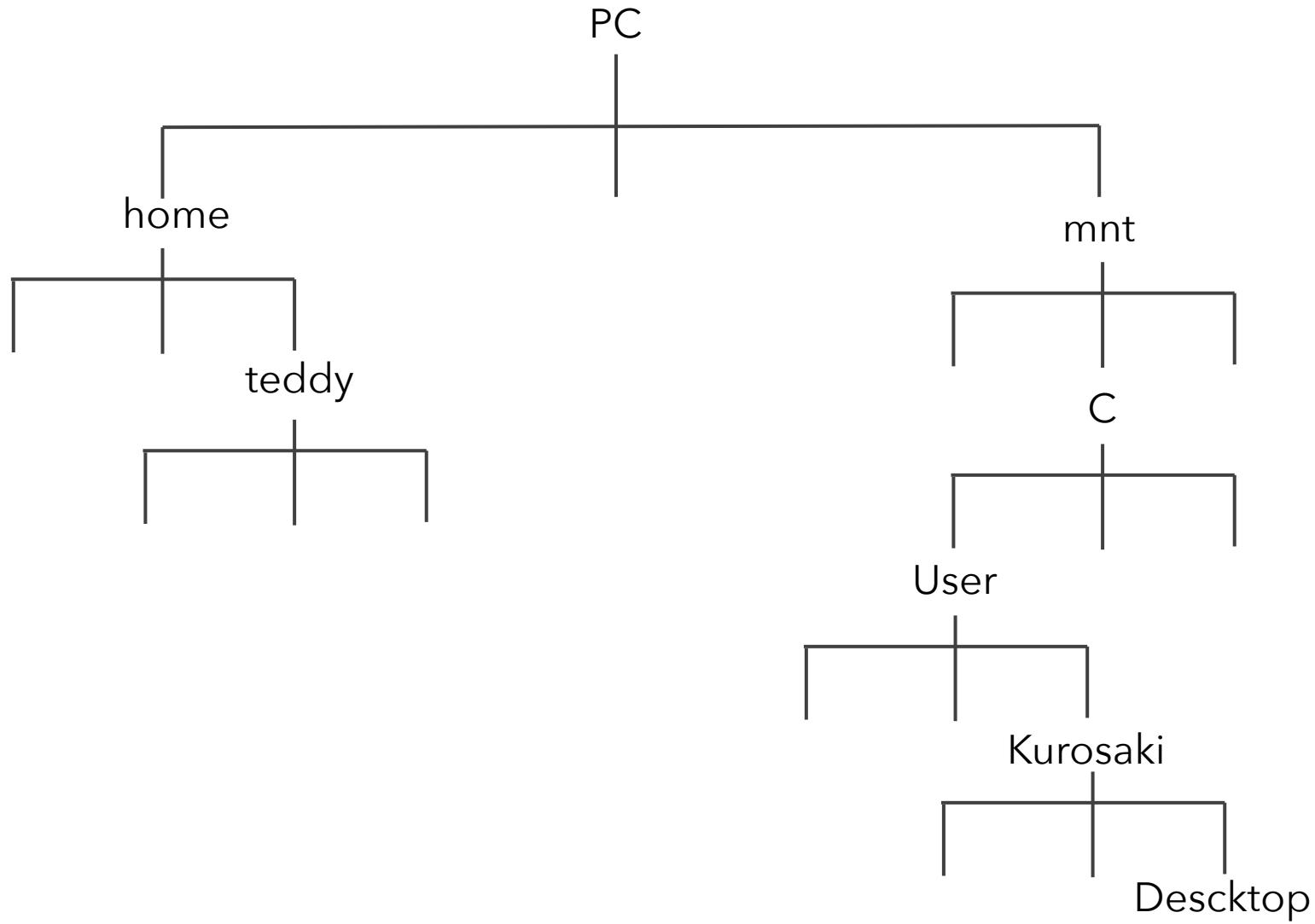
Two white double-headed arrows pointing between 'syntax-highlighting' and 'autosuggestions' in the code snippet.

続き

10. 「Escape」 → :wq とうつ → 「Enter」で保存
11. ターミナルを再起動する

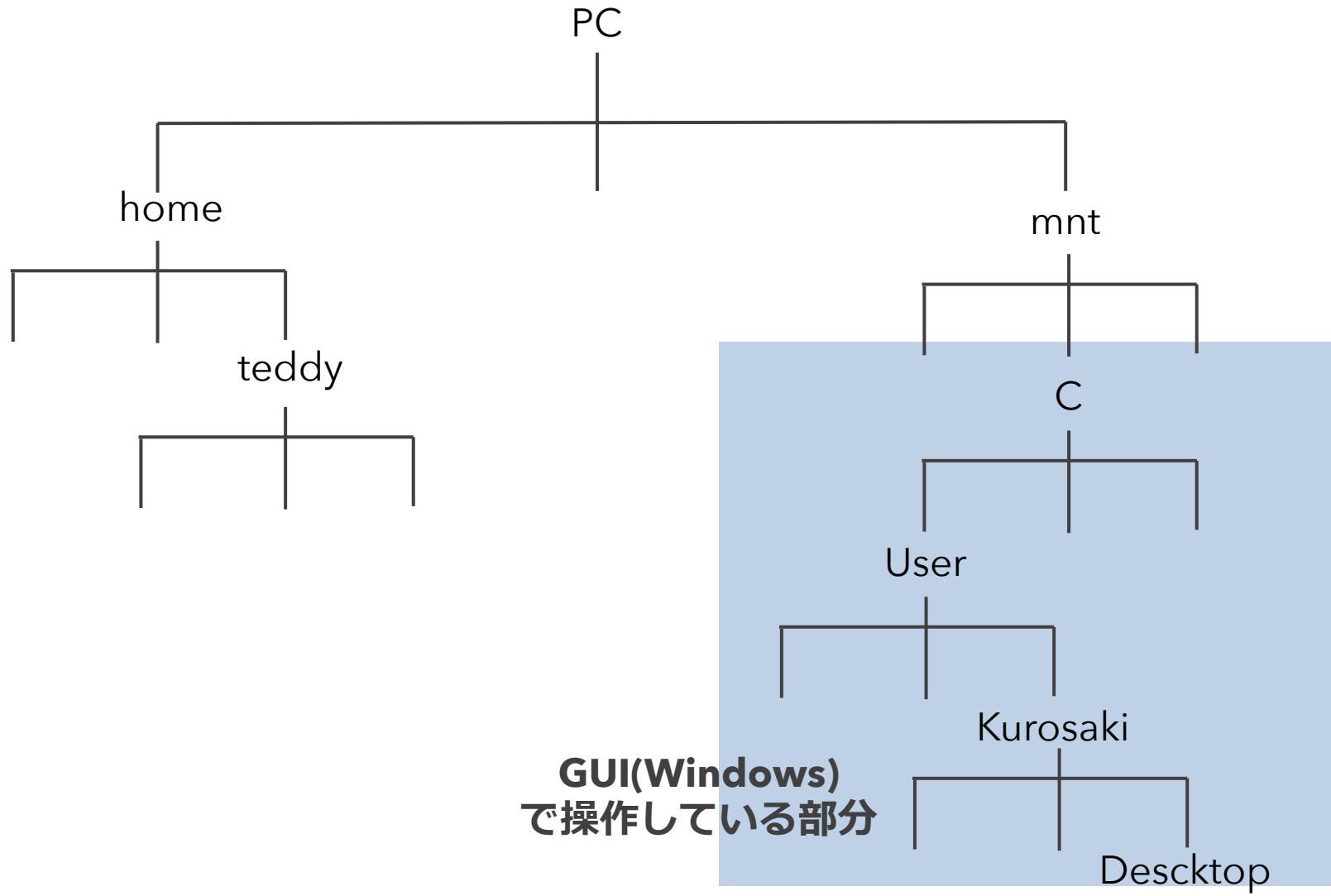
ターミナルを少しいじる

- ディレクトリ構成



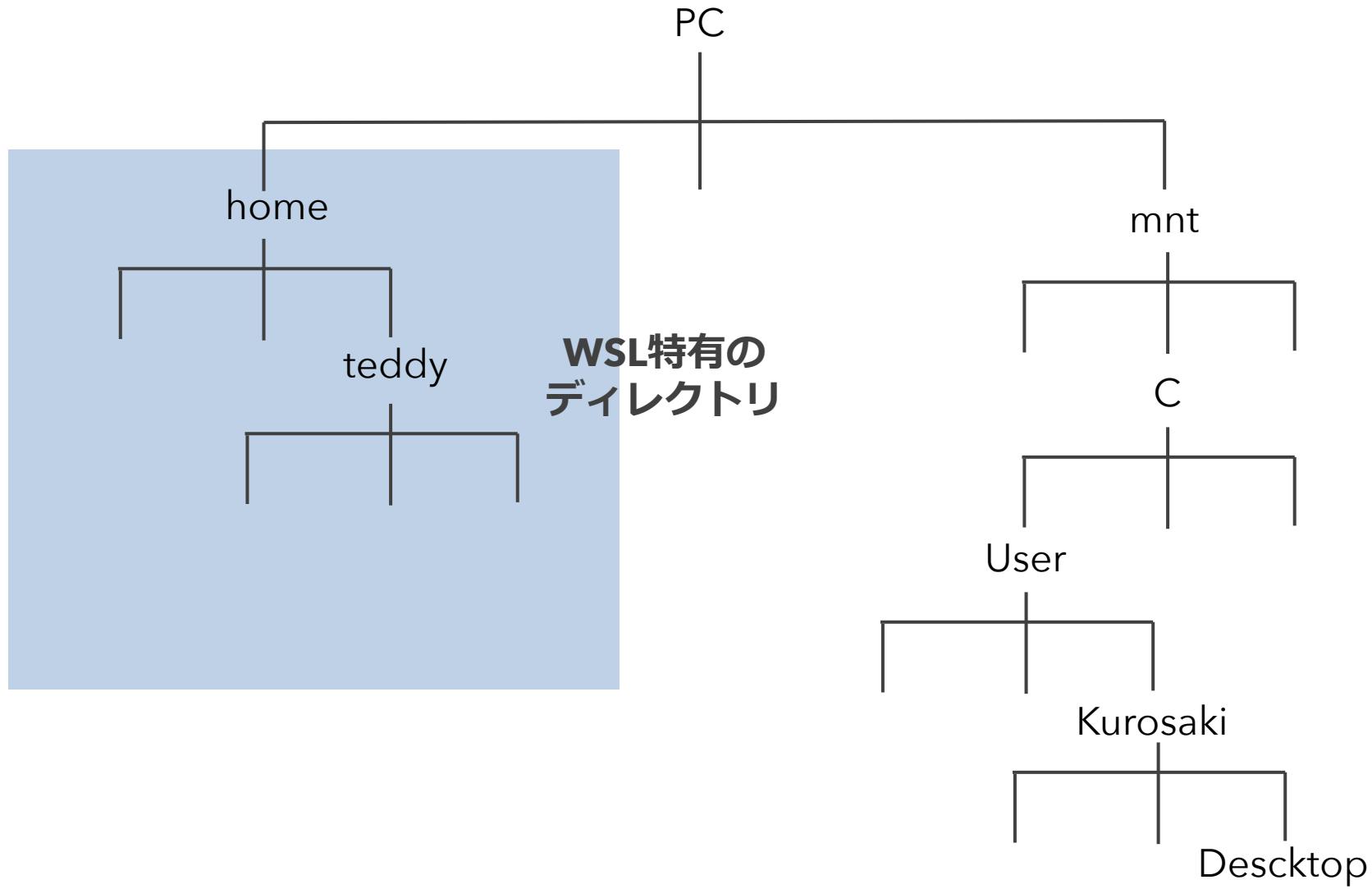
ターミナルを少しいじる

- ディレクトリ構成

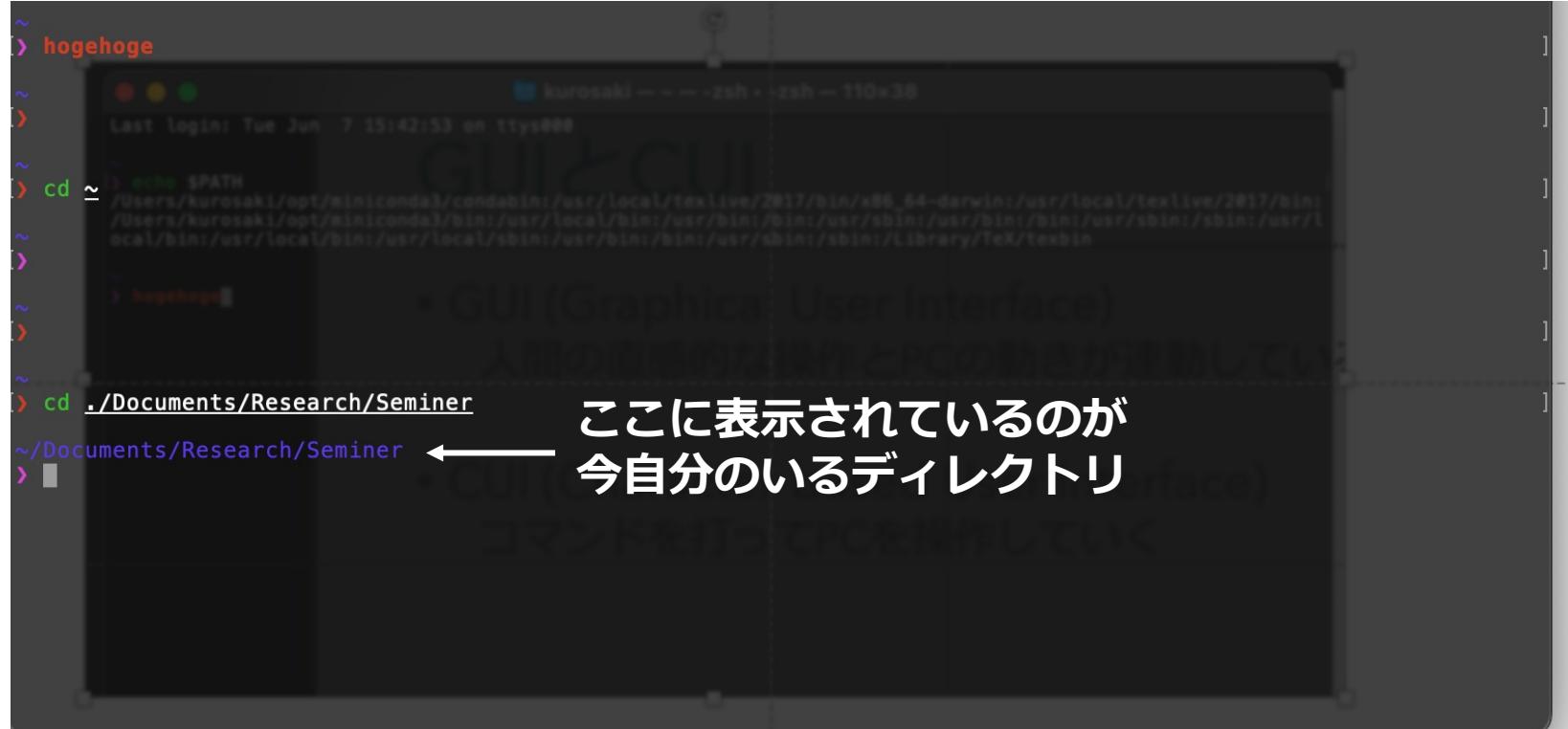


ターミナルを少しいじる

- ディレクトリ構成



ターミナルを少しいじる



A screenshot of a macOS terminal window titled "kurosa(k) --- zsh - zsh - 110x38". The window shows the following command history:

```
~ > hoge hoge
~ >
~ > cd ~
~ > echo $PATH
~ /Users/kurosa(k)/opt/miniconda3/condabin:/usr/local/textlive/2017/bin/x86_64-darwin:/usr/local/textlive/2017/bin:
~ /Users/kurosa(k)/opt/miniconda3/bin:/usr/local/bin:/usr/bin:/usr/sbin:/usr/bin:/usr/sbin:/usr/l
ocal/bin:/usr/local/bin:/usr/local/sbin:/usr/bin:/bin:/usr/sbin:/sbin:/Library/TeX/texbin
~ >
~ > hoge hoge
~ >
~ >
~ > cd ./Documents/Research/Seminer
~/Documents/Research/Seminer
```

A white arrow points from the text "今自分のいるディレクトリ" to the directory path in the terminal output. A white box highlights the path "Documents/Research/Seminer". To the right of the terminal window, Japanese text is overlaid:

ここに表示されているのが
今自分のいるディレクトリ

ターミナルを少しいじる

- ・ディレクトリを移動する(例)

```
cd ./Documents/
```

ターミナルを少しいじる

- ・ディレクトリを移動する(例)

```
cd ./Documents/
```

今いる自分のところから

ターミナルを少しいじる

- ・ディレクトリを移動する(例)

```
cd ./Documents/
```

ディレクトリを切り替える

ターミナルを少しいじる

- ・ディレクトリを移動する(例)

```
cd ./Documents/
```

Documentsに

ターミナルを少しいじる

- ・今いるディレクトリを確認する

```
pwd
```

エディタをインストールする

- エディタって何?
 - プログラミングをしやすくする編集ソフト

The screenshot shows the Microsoft Code Editor interface. The title bar says "chapter1.ipynb — tutorials". The left sidebar shows a file tree with a folder "TUTORIALS" containing "notebook", ".gitignore", and "README.md". The notebook itself has two sections:

- RDkitで分子構造を描写する**: Contains a note about imports and a warning about using the import statement.
- ライブラリをインポートする**: Shows Python code for importing urllib.request, pandas, rdkit, and rdkit.Chem.

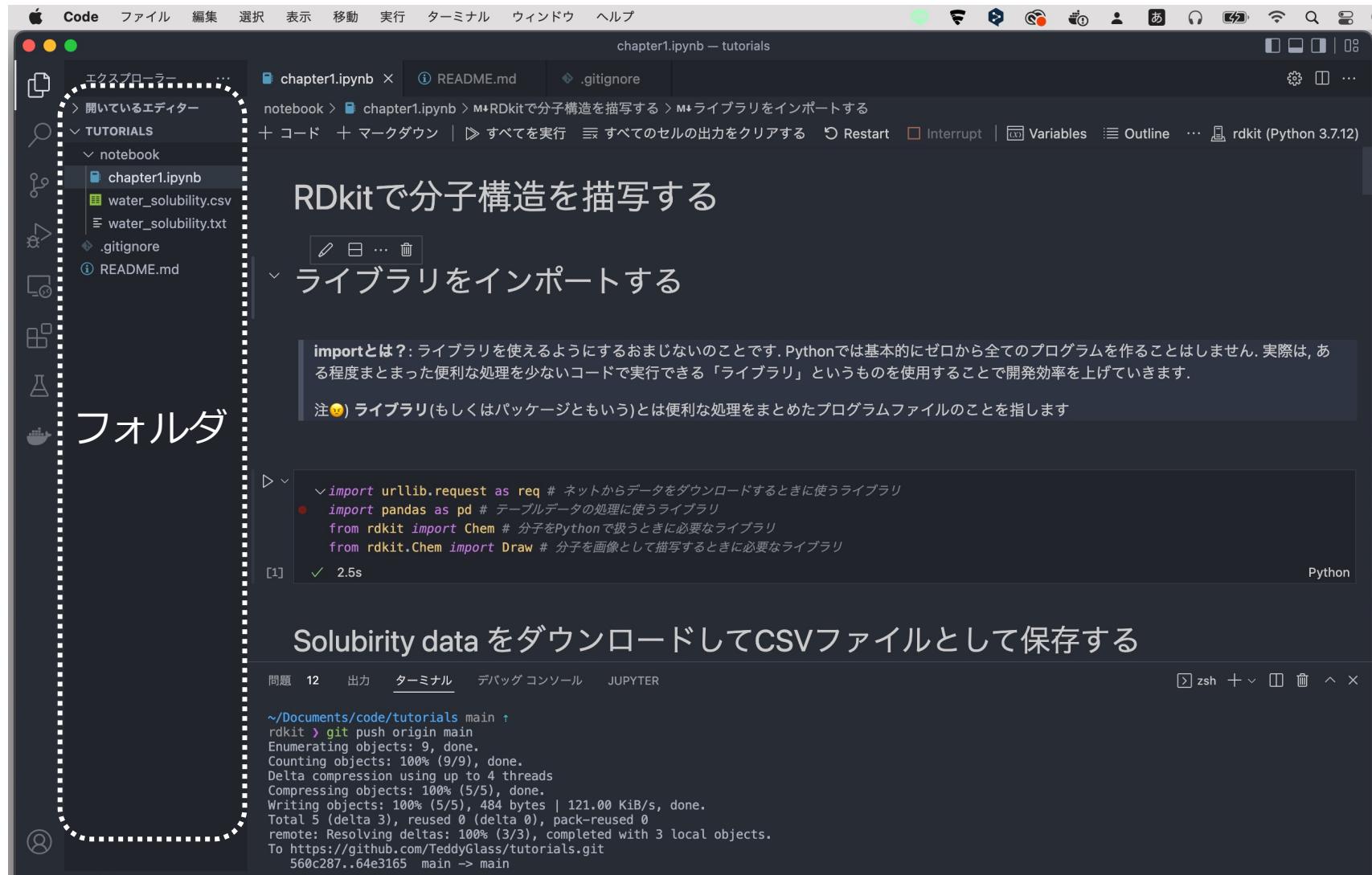
Below the notebook, there's a terminal window showing git push output:

```
~/Documents/code/tutorials main ✘
rdkit > git push origin main
Enumerating objects: 9, done.
Counting objects: 100% (9/9), done.
Delta compression using up to 4 threads
Compressing objects: 100% (5/5), done.
Writing objects: 100% (5/5), 484 bytes | 121.00 KiB/s, done.
Total 5 (delta 3), reused 0 (delta 0), pack-reused 0
remote: Resolving deltas: 100% (3/3), completed with 3 local objects.
To https://github.com/TeddyGlass/tutorials.git
  560c287..64e3165  main -> main
```

VScodeをインストールする

- ・[公式サイト](#)からダウンロードしてインストール

Vscodeの説明



Vscodeの説明

The screenshot shows the VS Code interface with a dark theme. A dashed red box highlights the central workspace area.

Top Bar: Code, ファイル, 編集, 選択, 表示, 移動, 実行, ターミナル, ウィンドウ, ヘルプ.

Title Bar: chapter1.ipynb – tutorials

Left Sidebar: エクスプローラー (File Explorer), 開いているエディター (Open Editors), TUTORIALS (notebook), chapter1.ipynb, water_solubility.csv, water_solubility.txt, .gitignore, README.md.

Central Area:

- Section Header:** RDkitで分子構造を描写する
- Section Header:** ライブラリをインポートする
- Text:** **import**とは?: ライブラリを使えるようにするおまじないのことです。Pythonでは基本的にゼロから全てのプログラムを作ることはしません。実際は、ある程度まとまった便利な処理を少ないコードで実行できる「ライブラリ」というものを使用することで開発効率を上げていきます。
- Note:** 注(?) ライブラリ(もしくはパッケージともいう)とは便利な処理をまとめたプログラムファイルのことを指します
- Code:** import urllib.request as req # ネットからデータをダウンロードするときに使うライブラリ
import pandas as pd # テーブルデータの処理に使うライブラリ
from rdkit import Chem # 分子をPythonで扱うときに必要なライブラリ
from rdkit.Chem import Draw # 分子を画像として描写するときに必要なライブラリ
- Status:** [1] ✓ 2.5s Python

Bottom Bar: 問題 12, 出力, ターミナル, デバッグ コンソール, JUPYTER, zsh, +, ×.

Terminal Output:

```
~/Documents/code/tutorials main $  
rdkit > git push origin main  
Enumerating objects: 9, done.  
Counting objects: 100% (9/9), done.  
Delta compression using up to 4 threads  
Compressing objects: 100% (5/5), done.  
Writing objects: 100% (5/5), 484 bytes | 121.00 KiB/s, done.  
Total 5 (delta 3), reused 0 (delta 0), pack-reused 0  
remote: Resolving deltas: 100% (3/3), completed with 3 local objects.  
To https://github.com/TeddyGlass/tutorials.git  
 560c287..64e3165 main -> main
```

Vscodeの説明

The screenshot shows the VS Code interface with the following components:

- Left Sidebar:** Shows the file tree with a folder named "TUTORIALS" containing "notebook" and "chapter1.ipynb".
- Top Bar:** Shows the menu bar (Code, ファイル, 編集, 選択, 表示, 移動, 実行, ターミナル, ウィンドウ, ヘルプ) and various status icons.
- Central Area:** A Jupyter notebook cell titled "RDkitで分子構造を描写する" (Describing molecular structures with RDkit). The cell content is: "ライブラリをインポートする".

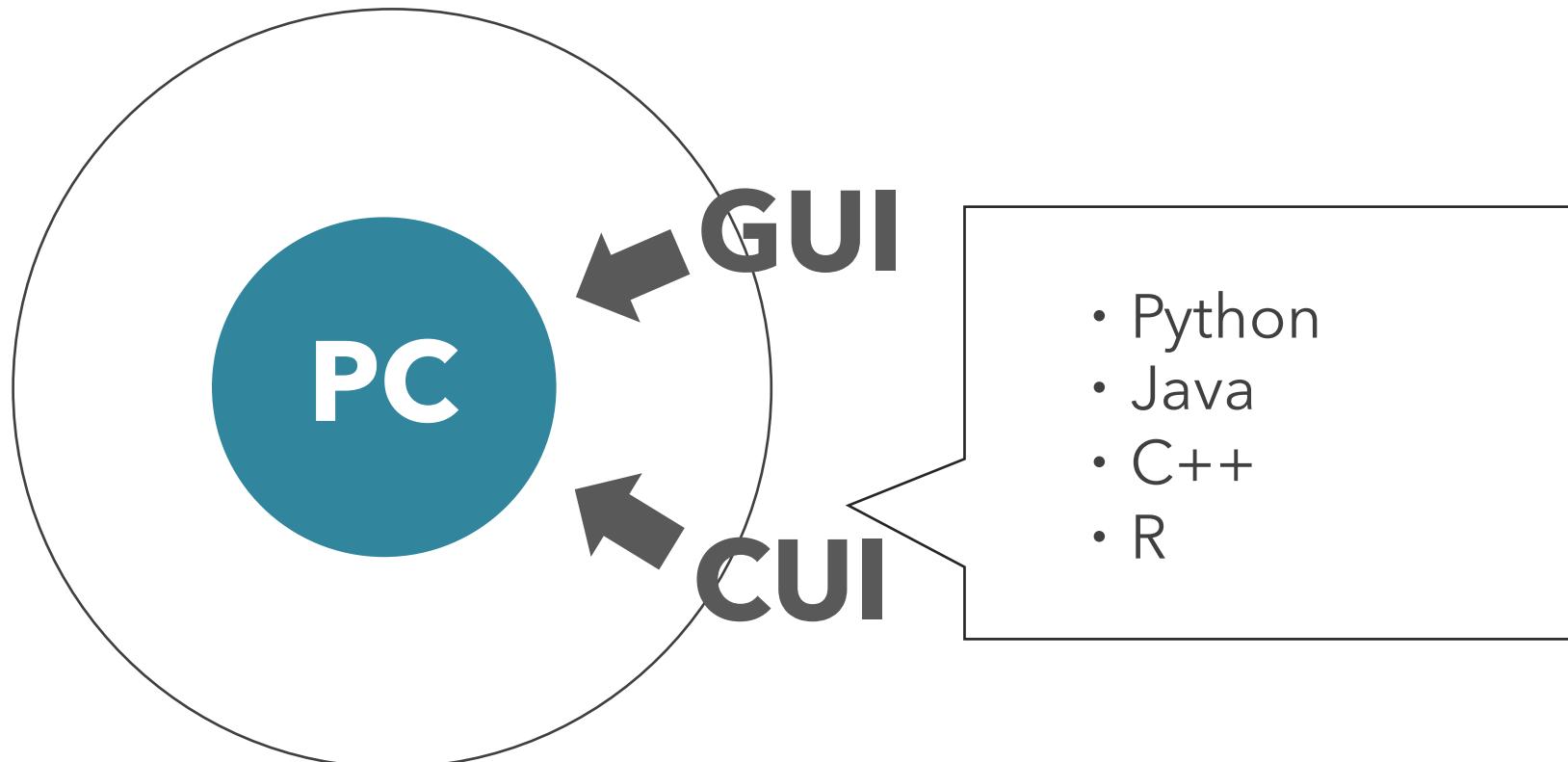
Text: importとは?: ライブラリを使えるようにするおまじないのことです。Pythonでは基本的にゼロから全てのプログラムを作ることはしません。実際は、ある程度まとまった便利な処理を少ないコードで実行できる「ライブラリ」というものを使用することで開発効率を上げていきます。

Note: ライブラリ(もしくはパッケージともいう)とは便利な処理をまとめたプログラムファイルのことを指します

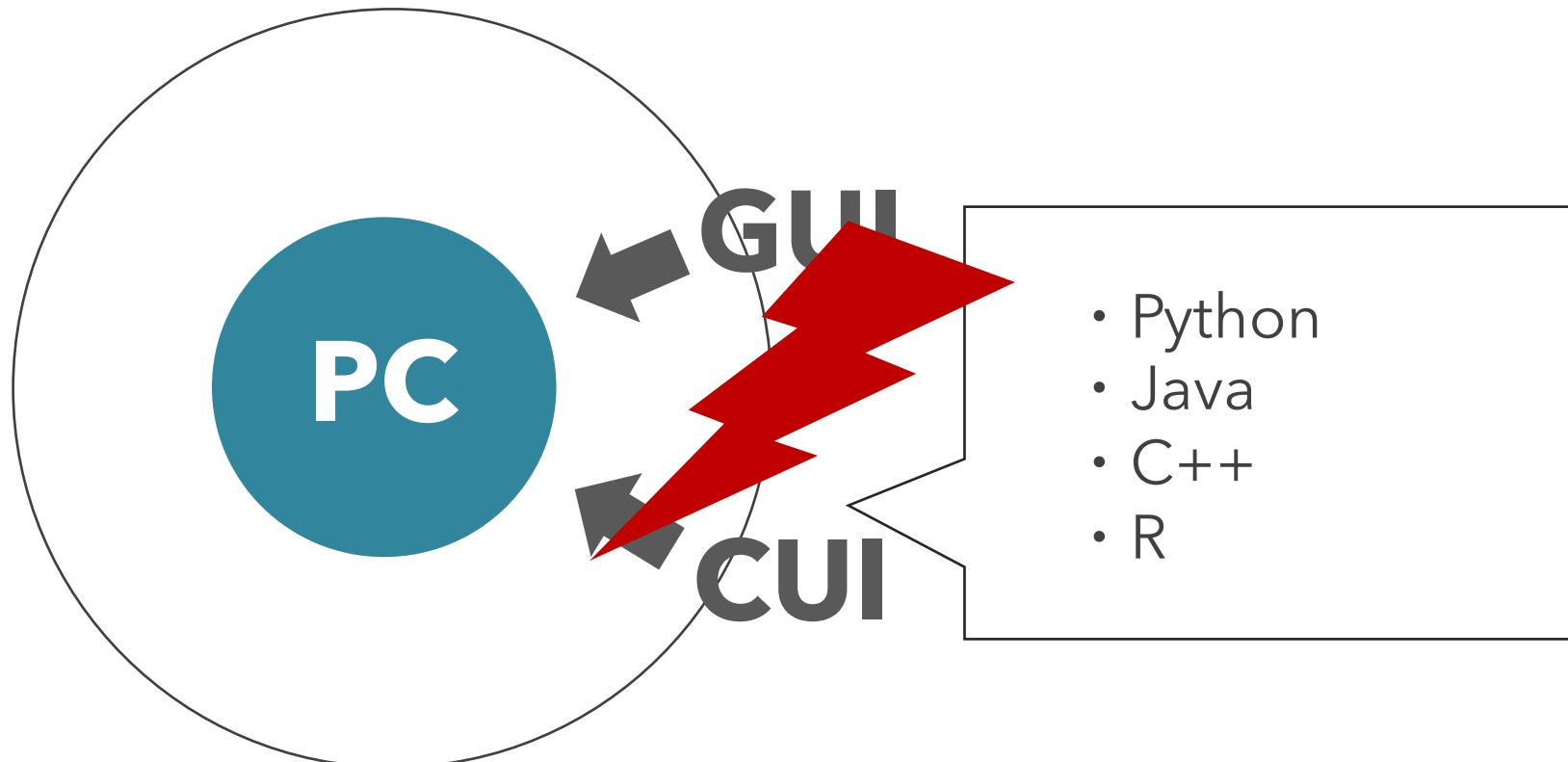
```
import urllib.request as req # ネットからデータをダウンロードするときに使うライブラリ
import pandas as pd # テーブルデータの処理に使うライブラリ
from rdkit import Chem # 分子をPythonで扱うときに必要なライブラリ
from rdkit.Chem import Draw # 分子を画像として描写するときに必要なライブラリ
```
- Bottom Area:** A terminal window titled "ターミナル" (Terminal) showing command-line output:

```
~/Documents/code/tutorials main $ git push origin main
rdkit > git push origin main
Enumerating objects: 9, done.
Counting objects: 100% (9/9), done.
Delta compression using up to 4 threads
Compressing objects: 100% (5/5), done.
Writing objects: 100% (5/5), 484 bytes | 121.00 KiB/s, done.
Total 5 (delta 3), reused 0 (delta 0), pack-reused 0
remote: Resolving deltas: 100% (3/3), completed with 3 local objects.
To https://github.com/TeddyGlass/tutorials.git
```

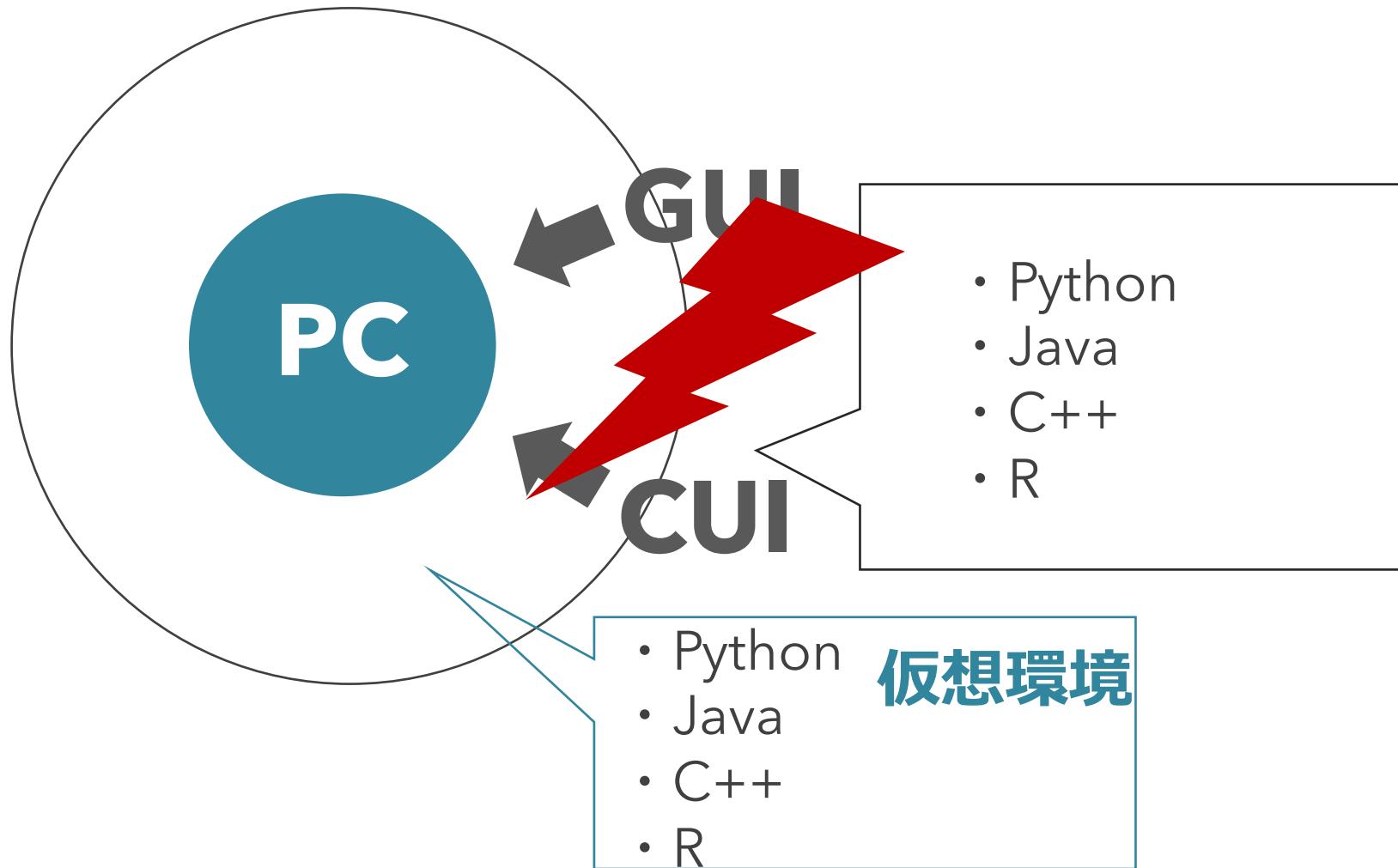
仮想環境とは？



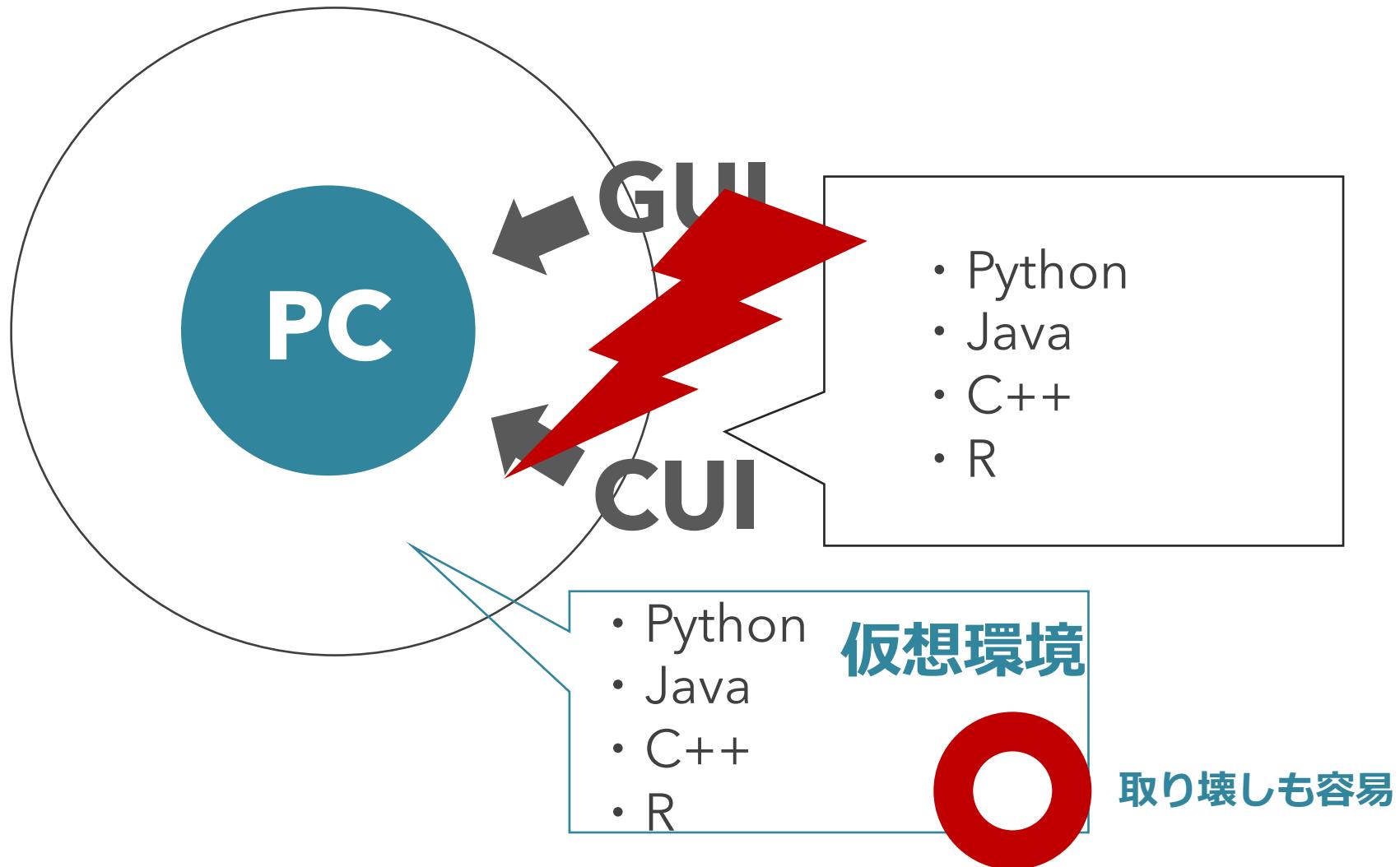
仮想環境とは？



仮想環境とは？



仮想環境とは？



Pythonの環境を整える

- Minicondaをインストールする
 - MinicondaとはAnacondaの軽量版
 - [Miniconda公式サイト](#)にアクセスする
 - Linux版のminicondaのリンクをコピーする

cd ~
でホームディレクトリに移る

```
wget  
https://docs.conda.io/en/latest/miniconda.html#:~:text=Python%203.9,-Miniconda3%20Linux%2064%2Dbit,-73.1%20MiB
```

bash Miniconda~~~.sh

Pythonの環境を整える

- conda コマンドを使えるようにする
 - cd ~
 - code .
 - .zshrcファイルを編集する
 - export PATH="/home/[user_name]/miniconda3/condabin:\$PATH"
 - source ~/.zshrc

Minicondaの使い方: 基本

- 仮想環境を作る

```
conda create -n env_name python=3.xx
```

- 仮想環境に入る(アクティベートする)

```
conda activate env_name
```



A screenshot of a terminal window showing the activation of a conda environment. The terminal is located in a folder named 'Seminer'. The command 'source activate rdkit' is entered, and the output shows the environment name 'rdkit' prepended to the prompt. A white arrow points from the text '仮想環境の名前が表示される' (The name of the virtual environment is displayed) to the 'rdkit' prefix in the terminal output.

```
~/Documents/Research/Seminer
[> source activate rdkit
~/Documents/Research/Seminer
rdkit > █ ← 仮想環境の名前が表示される
```

Minicondaの使い方: 基本

- 仮想環境を壊す

```
conda remove -n env_name --all
```

ライブラリについて

- ライブラリとは？

便利な処理をひとまとめにしたプログラム集のこと

ライブラリについて

- ライブラリとは？

便利な処理をひとまとめにしたプログラム集のこと

座標から直線の長さを算出するプログラム

Ax = 1
Ay = 2

長いし面倒臭い

Bx = 3
By = 4

$$d^2 = (Bx - Ax)^2 + (By - By)^2$$

ライブラリについて

- ・ライブラリとは？

便利な処理をひとまとめにしたプログラム集のこと

座標から直線の長さを算出するプログラム

Ax = 1
Ay = 2

Bx = 3
By = 4

$$d^2 = (Bx - Ax)^2 + (By - By)^2$$

長いし面倒臭い



distance([Ax, Ay], [Bx, By])

•
•
•

GitHubに登録しよう

仮想環境にライブラリをインストールする

- rdkit (化学情報学系ライブラリ) のインストール
仮想環境内で以下のコマンドを打つ

```
conda install -c conda-forge rdkit
```

「-」はオプションという
コマンド実行時の細かい設定を指定できる
condaコマンドで-cを設定すると,
ライブラリのダウンロード先を指定できる

仮想環境にライブラリをインストールする

・インストールコマンドの調べ方

1. conda install ~~でGoogle検索してみる
2. anaconda.orgのサイトに飛んでコマンドをコピペ

Google search results for "conda install numpy". The first result is from Anaconda.org, which provides the command: `conda install -c anaconda numpy`. Other results include links to NumPy documentation and installation guides.

Search bar: conda install numpy

Results:

- <https://anaconda.org> › anaconda › numpy
- Numpy :: Anaconda.org**
To install this package with conda run: `conda install -c anaconda numpy`. Description. NumPy is the fundamental package needed for scientific computing with ...
- <https://anaconda.org> › conda-forge › numpy
- Numpy - :: Anaconda.org**
To install this package with conda run one of the following: `conda install -c conda-forge numpy` `conda install -c conda-forge/label/cf202003 numpy`
- <https://numpy.org> › install
- Installing NumPy**
NumPy can be installed with `conda`, with `pip`, with a package manager on macOS and Linux, or from source. For more detailed instructions, consult our Python ...
- People also ask**:
 - How install NumPy package in Anaconda?
 - How do I download NumPy using conda?
 - Does conda include NumPy?
 - How do I install NumPy?

anaconda.org Documentation page for NumPy.

URL: <https://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/>

Downloads: 3207774 total downloads

Last upload: 2 days and 1 minute ago

Installers

conda install

linux-ppc64le	v1.22.3
osx-arm64	v1.22.3
linux-64	v1.22.3
win-32	v1.22.3
linux-aarch64	v1.22.3
linux-s390x	v1.22.3
osx-64	v1.22.3
linux-32	v1.15.4
win-64	v1.22.3

To install this package with conda run:
`conda install -c anaconda numpy`

Description

NumPy is the fundamental package needed for scientific computing with Python.

RDkitでPythonコードを書いてみる

1. Vscodeを起動する
2. 適当に.ipynbファイルを作成する
3. VscodeのPython extensionとJupyter extensionを有効化する
4. .ipynbを開いて「shift」+「Enter」を押すとカーネル選択を迫られる
5. さっき作った仮想環境を選択
6. 以下の文を打つ→「shift」+「Enter」

```
from rdkit import Chem  
  
mol = Chem.MolFromSmiles("CCC")  
mol
```