# Windows

Установка на Windows довольна проста, так как большая часть необходимых программ может быть скачана в виде .exe фвйлов.

На Windows в первую очередь необходимо установить Python. На сайте Python.org в разделе Downloads можно скачать необходимую версию Python. Через .exe файл легко установить Python просто следуя инструкциям.

Я предпочитаю менеджер пакетов pip. Для его установки не нужно ничего предпринимать. Он установится вместе с Python.

Чуть позже мы разберём установку Anaconda. Сейчас я хочу уделить внимание установке PyCharm – это среда разработки (IDE – integrated development environment). Плюс такого программного обеспечения в том, что гораздо легче писать код, также среда разработки подсказывает какие функции можно использовать и каким образом с ними работать. Со средой разработки код можно писать гораздо быстрее, хотя при желании, для разработки достаточно простого текстового редактора типа блокнота (NotePad).

Для установки PyCharm достаточно всего лишь перейти на сайт jetbrains (разработчик) и скачать необходимый .exe файл: jetbrains.com/pycharm/download

Есть специальная версия PyCharm, заточенная на использование вместе с Anaconda, но можно скачать и «обычную» версию. Она ничем не хуже, а чем-то даже и лучше.

Для установки достаточно следовать инструкциям .exe – установщика.

Почти готово. Но нам нужно ещё прописать путь к интерпретатору. Итак, запустите установленный PyCharm. После выбора настроек создайте первый проект, пусть он будет называться test1 или любым другим именем по вкусу. На самом верху окна PyCharm есть вкладка View -> Appearance -> Toolbox. Нажмите на слово «Toolbox», чтобы появилась галочка. Теперь чуть ниже появится значок в виде гаечного ключа. Нажмите на него. Найдите название проекта, нажмите на него, выберите Project Interpreter. Нам будет необходимо указать путь к тому месту, где находится Python. Это можно сделать с помощью небольшой хитрости. Откройте приложение командная строка. Введите в ней следующее:

* pip -V

Командная строка выведет не только версию pip, но и покажет нам, где находится Python. Например, вы можете получить такой вывод:

* pip 20.0.2 from c:\users\username\appdata\local\programs\python\python38\lib\site-pacckages\pip (python 3.8)

Вернёмся к PyCharm, в выпадающем списке выбираем Show All, нажимаем, если в списке (который только что открылся) пусто, нажимаем на +. Прописываем путь c:\users\username\appdata\local\programs\python\python38\python.exe Жмём OK, можем работать, но есть одно «но». Иногда NumPy, SciPy, Pandas, MatPlotLib и другие пакеты могут так просто не установиться. Прежде, чем установить NumPy, мы сделаем кое-что ещё. Вернёмся к Project Interpreter и снова нажмём плюс. В новом окошке Available Packages появится список того, что можно установить. В окошке поиска можно вводить название нужного пакета. Чтобы NumPy работал корректно, стоит установить cython, wheel, flask. После этого устанавливаем NumPy, затем Pandas и MatPlotLib.

Некоторые из пакетов устанавливаются только с pip, другие – только с conda (менеджер пакетов Anaconda). Такое встречается крайне редко, и такие пакеты обычно очень профессиональные, узкоспецифичные и с ними работает очень небольшое количество людей. Например, пакет RDKit для химинформатики, устанавливается только с помощью conda. Иногда, в случае работы с бетами и гаммами всё встаёт крайне криво, тогда пакеты ставят вручную.

Установим Anaconda на Windows. Для этого нам необходимо перейти на сайт: anaconda.com/distribution внизу страницы есть ссылки на скачаивание. Выбираем только то, что для Python 3.X, 2.X больше не поддерживается. Установщик в нашем случае графический, то есть устанавливается всё легко, просто, по инструкции. Из-за несовместимости с некоторыми библиотеками, в пути для установки могут использоваться только символы ASCII, например, путь типа Users\pasha\anaconda3 сработает, а вот путь типа Users\паша\anaconda3 – нет.

После установки в меню теперь есть anaconda navigator, а в командной строке можно посмотреть список всех пакетов, которые установлены вместе с Anaconda.

Для установки новых библиотек/пакетов, нам нужно снова вернуться к настройкам (гаечный ключ, название проекта, интерпретатор и плюсик):

A screenshot of a computer

Description automatically generated

А теперь выбираем необходимый пакет:

A screenshot of a cell phone

Description automatically generated

Устанавливаем библиотеку/пакет. Иногда могут возникнуть ошибки. Изучите отчёт. Может не хватать какого-то компонента. Стоит установить: cython, wheel, flask; они могут быть необходимы для корректной работы NumPy. Изучите отчёт по ошибке, скопируйте его, просмотрите в текстовом редакторе. Скорее всего с такой проблемой кто-то уже сталкивался, решения зачастую можно найти на StackOverFlow. Библиотеки, которые разрабатывают отдельные энтузиасты, обычно имеют либо свою страничку (верхний скрин-шот, справа, текст в синем), либо такую же на github. В случае ошибки, можно спросить автора в соответствующем раз деле.

Почти всё. Теперь посмотрим, как работает Scientific Mode. Я пока только импортировала NumPy, но среда разработки уже предлагает использовать научный режим:

A screenshot of a computer screen

Description automatically generated

См. правый нижний угол. Научный режим позволяет мне посмотреть полученный массив (матрицу) без вывода результата в консоль:

A screenshot of a cell phone

Description automatically generated

А теперь посмотрим то же, но в обычном режиме, в консоли ничего нет:

A screenshot of a computer screen

Description automatically generated

Результат появляется только тогда, когда я добавляю print():

A screenshot of a computer

Description automatically generatedСупер коротко, как установить необходимые библиотеки через терминал. Так как Anaconda, это научный дистрибутив, большая часть необходимого находится уже там, чтобы проверить, что есть, в терминале вводим команду:

* conda list

Скорее всего там уже будут необходимые нам библиотеки: pandas, NumPy, MatPlotlib, но при необходимости установим пакеты так:

* conda install numpy
* conda install pandas
* conda install matplolib

Если используется pip, делаем так:

* pip install pandas numpy matplotlib

При одновременной установке пакетов не разделяем названия запятыми, только пробелами!