

ALPS チュートリアル: Python

CMSI 神戸ハンズオン

ALPS Collaboration
<http://alps.comp-phys.org/>

ALPS

- 1 データ型
- 2 制御フロー
- 3 関数
- 4 モジュール
- 5 ファイルの読み書き
- 6 参考サイト

基本的なデータ型

- **数値**: int, (long), float, complex
- **文字列**: 'hello,python'
- **list**: a = [1, 2, 3]
- **tuple**: b = (1, 2, 3)
- **dictionary**: c = {'apple': 100, 'orange': 200, 'pear': 300}
- **set**: set(1, 2, 3)
- **bool**: True, False
- **array**: numpy array([1,2,3])

数値

- int, long
 - python3 では int,long は int に統合された
 - python2x と python3x では整数同士の演算で計算結果が違う:
python2: $-1/2 = -1$, python3: $-1/2 = -0.5$
- float は倍精度のみ
- complex
 - 'j' もしくは 'J' で虚数部を表す $2 + 3j$
 - 実部 $\text{real}(2+3j) = 2$, 虚部 $\text{imag}(2+3j) = 3$

文字列

```
>>> s = 'hello, world'    # 文字列の定義
>>> s.split(',')
>>> ['hello,', 'world']
>>> s.split(',')[0] + ',' + 'Haruhiko'    # 文字列の
結合
>>> 'hello, Haruhiko'
>>> ','.join(s.split(',')[0], 'Haruhiko') #
>>> 'hello, Haruhiko'
```

- シングルクォートとダブルクォートの振る舞いは同じ（シェルでは違いますね）
- 複数行の文字列は `'''...'''` もしくは `"""..."""` で囲む
- 文字列のスライス: `s[1:3] = 'el'`
- 文字列の分割 (`split`) と結合 (`+`, `join`)

list, tuple

```
>>>a = [1,2,3,4,5] # list
>>>a[0]          # インデックスは 0 スタート
1                # 要素 1 個だけなら返り値はスカラー
>>>a[2:4]        # 2<=,<4 番目のの要素が返される。
[3,4]           # 複数の要素なら返り値はリスト。
>>>b = (1,2,3,4,5) # tuple
>>>b[1:]         # ':' の値を省くこともできる
(2, 3, 4, 5)
```

- ここではリストの要素として数値のみを扱ったが、python オブジェクトなら何でも リストの要素として扱える

list のメソッド

```
>>>a.reverse() # 要素の並びを逆にする
>>>a           # a そのものが変更されるので注意!
[5, 4, 3, 2, 1]
>>>a.pop()    # リストの最後尾の要素を取り出す.
1            # 戻り値は取り出された要素
>>>a
[5, 4, 3, 2]
>>>a.sort()
>>>a
[2, 3, 4, 5]
```

- ここではリストの要素として数値のみを扱ったが、python オブジェクトなら何でも リストの要素として扱える

list と tuple の違う点

```
>>>b = (1) # これは tuple にならない!
>>>type(b)
int # 整数扱いになる
>>>b = (1,) # 要素 1 個の tuple を定義する
>>>type(b)
tuple # これはちゃんと tuple になっている
>>>a = [1] # これは list
>>>type(a)
list
```

list と tuple の違う点

```
>>>b += (2, 3, 3) # 要素を付け加えることはできる
>>>b
(1, 2, 3, 3)
>>>b[3] = 5      # 要素を変更することはできない
Traceback (most recent call last):
  File "<stdin>", line 1, in <module>
TypeError: 'tuple' object does not support item
      assignment
```

- 要素 1 個の場合の扱いが違う
- tuple の要素の値は変更できない.
- tuple は辞書のキーに登録できる. list は不可.

list のコピー

浅いコピーと深いコピーの 2 種類ある

- 浅いコピーではオブジェクトのアドレスをコピーする
- 深いコピーではオブジェクトの値をコピーする

b		a	
アドレス	値	アドレス	値
0x6aff5bfff128	0x7fff5bffa08	0x7fff5bffa08	101

b		a	
アドレス	値	アドレス	値
0x6aff5bfff128	101	0x7fff5bffa08	101

```
>>>a = [101, 102, 103]
>>>b = a      # アドレスをコピー
>>>a[1] = 333
>>>print a, b
[101, 333, 103] [101, 333, 103]
>>>b = a[:]   # 値をコピー
>>>a[1] = 444
>>>print a, b
[101, 444, 103] [101, 333, 103]
```

ネストされた list のコピー

浅いコピーになってしまう例

```
>>>a = [1, [2, 3]]
>>>b = a[:]
>>>a[0] = 4
>>>a[1][0] = 5
>>>print a, b
[4, [5, 3]] [1, [5, 3]]
>>>
```

深いコピー

```
>>>import copy
>>>a = [1, [2, 3]]
>>>b = copy.deepcopy(a)
>>>a[0] = 101
>>>a[1][0] = 102
>>>print a, b
[101, [102, 3]] [1, [2, 3]]
```

- ネストされているとスライス ':' で返されるのがアドレスになってしまう
- ネストされた list で深いコピーをするには copy モジュールの deepcopy を使う

辞書型の使い方

```
>>>dic = {'key0': 0, 'key1': 1}    # key:value の組を登録
>>>dic['key2'] = 2                # key2:2 を登録
>>>dic.keys()                    # 辞書に登録されている全ての key
['key2', 'key1', 'key0']
>>>dic.values()                 # 全ての val
[2, 1, 0]
>>>dic.items()                 # 全ての key:val の組を表示
[('key2', 2), ('key1', 1), ('key0', 0)]
>>>del dic['key0']              # 辞書から key を削除
>>>dic.items()
[('key2', 2), ('key1', 1)]
```

- 辞書の要素はソートされていない。登録順なども関係ない。

if-elif-else 文の使い方

if-elif-else で条件分岐を作れる。

```
>>> if a > 0:
>>>     print '0'
>>> elif a == 0:
>>>     print '1'
>>> else:
>>>     print '2'
>>>
>>>
```

三項演算子

```
>>> val = val1 if cond1 else val2
```

for 文の使い方

```
>>>for i in ('a', 'b', 'c', 'd'):
>>>     print i,      # コンマで改行を抑制している
a b c d
```

アンパック代入と enumerate()

```
>>>for i,j in enumerate(('a', 'b', 'c', 'd')):
>>>     print i, j
0 a
1 b
...
```

アンパック代入は python で使える一般的なテクニックです。

```
>>>i,j,k = ['a', 'b', 'c']
```

while 文の使い方

```
a = 0
while a in range(10):
    a += 1
    if a < 3:
        continue
    elif a == 8:
        break
    print a
```

- カレントディレクトリに上の内容で `exWhile.py` というファイルを作って `import` してみましょう
- "val in シークエンス:" というフレーズは `while` だけでなく `if`, `for` など至る所で使えます
- `continue`, `break` も同じく `if`, `for` などでも使えます

関数

```
>>> def f(x, y):  
>>>     ...z = x * y # 空白 4 つのインデント!  
>>>     ...for i in [1, 2, 3]:  
>>>         ...    z += i  
>>>     ...return z  
>>>  
>>> f(2,3)  
12
```

- `def 関数名 (変数,...):` で関数が定義できます
- Python ではインデント (空白 4 つ) によりスコープを制御します

Python プログラムの階層構造

- プログラムファイルのディレクトリ構成 == 名前空間
- モジュール
 - 1 つの "hoge.py" ファイルが 1 つのモジュール
- パッケージ

ファイルの階層構造

```
pyalps/  
alea.py  
dataset.py
```



モジュールの階層構造

```
pyalps.alea.class.method  
pyalps.dataset.class.method
```

モジュールの読み込み

```
>>> import fff as f      # 別名をつけてインポート
>>> f.ggg(x, y)
...
>>> from fff import *   # fff 以下のすべてをインポート
>>> ggg(x, y)           # 名前空間 fff が外れる
...
>>> from fff import ggg as g # ggg のみを指定してインポート
>>> g(x, y)
```

- fff モジュール中の ggg 関数を呼び出しています。
- 呼び出し方により名前空間の階層が変わっています。

ファイルの読み書き

ファイルから 1 行ごとにデータを読み込む方法

入力データ (dat.txt)

```
for line in open('dat.txt', 'r'):
    items = line.split(' ')
    print items[0], float(items[1])
```

```
a 3.432
b 1.42
c 2.159
```

- open で dat.txt ファイルを readonly で読み込む
- 読み込んだファイルを 1 行毎に処理する。読み込まれた行は 1 つの文字列として扱われるので区切り文字（今の場合空白）で分割している。
- 読み込んだ文字列を浮動小数点にキャストしている。

上の例では for 文の終了とともにファイルは自動で閉じられる。しかし、一般的には

- `f = open('dat.txt', 'r')` として読み込んだ場合、ファイルを読み終えたら `f.close()` で閉じなければならない。

参考サイト

- 科学技術計算のために python を始めよう
<http://www.ike-dyn.ritsumei.ac.jp/~uchida/scipy-lecture-notes/intro/index.html>
- 初心者のはまりどころ
<http://webtech-walker.com/archive/2010/10/13191417.html>
- Doug Hellmann **さん** <http://doughellmann.com>
 - 標準モジュールなどの使い方が例とともに書いてあり分かりやすい