

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное учреждение  
высшего профессионального образования  
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"  
Институт фундаментальной медицины и биологии



**УТВЕРЖДАЮ**

Проректор  
по образовательной деятельности КФУ  
Проф. Минзарипов Р.Г.

"\_\_" \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

**Программа дисциплины**

Основы функционального программирования для решения задач биоинформатики♦ Б1.В.ОД.4

Направление подготовки: 06.04.01 - Биология

Профиль подготовки: Биоинформатика

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

**Автор(ы):**

Изотова Е.Д.

**Рецензент(ы):**

Акберова Н.И.

**СОГЛАСОВАНО:**

Заведующий(ая) кафедрой: Алимova Ф. К.

Протокол заседания кафедры No \_\_\_\_ от "\_\_\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Учебно-методическая комиссия Института фундаментальной медицины и биологии:

Протокол заседания УМК No \_\_\_\_ от "\_\_\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Регистрационный No

Казань  
2016

## **Содержание**

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) ассистент, б/с Изотова Е.Д. Кафедра биохимии и биотехнологии отделение биологии и биотехнологии , EkDIzotova@kpfu.ru

### 1. Цели освоения дисциплины

- 1) ознакомление с возможностями языка программирования Python;
- 2) овладение базисными структурными и функциональными основами построения и разработки программ;
- 3) применение полученных навыков программирования для решения научных задач.

### 2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б1.В.ОД.4 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 06.04.01 Биология и относится к обязательные дисциплины. Осваивается на 1 курсе, 1 семестр.

Данная учебная дисциплина включена в раздел " М2.В.1 Профессиональный" основной образовательной программы 020400.68 Биология и относится к вариативной части. Осваивается на 1 курсе, 1 семестр.

Данная учебная дисциплина включена в раздел " М1.В.1.2 Общенаучный" основной образовательной программы 020400.68 Биология и относится к вариативной части. Осваивается на 1 курсе, 1 семестра.

Общенаучный цикл М1.В.1.2 Проводится на 1 курсе 1 семестре. В начале курса студент должен иметь достаточные знания в области математики, биохимии, биофизики, молекулярной биологии в объеме программы бакалавриата биологии.

### 3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-6 (общекультурные компетенции)	способен самостоятельно приобретать информацию с помощью информационных технологий и использовать в практической деятельности новые знания и умения, в том числе в новых областях знаний, непосредственно не связанных со сферой деятельности.
ПК-3 (профессиональные компетенции)	самостоятельно анализирует имеющуюся информацию, выявляет фундаментальные проблемы, ставит задачу и выполняет полевые, лабораторные биологические исследования для решения конкретных задач по специализации с использованием современной аппаратуры и вычислительных средств, демонстрирует ответственность за качество работ и научную достоверность результатов
ПК-6 (профессиональные компетенции)	творчески применяет современные компьютерные технологии при сборе, обработке, анализе и передаче биологической информации

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

Простые (int, float, str, bool, char) и составные типы данных (список, кортеж, словарь, множество) и их комбинации; конвертация типов; подключение модулей и использование их

функций; создание и использование переменных, определение и вызов функций; логические операторы; таблицы истинности для двоичных логических выражений; логическое выражение (if.. elif...else); оперировать с графическими трехмерными объектами, используя модуль visual; генерация списков, использование операторов к спискам, вызов и использование встроенных методов списков; создание и использование кортежей; создание и использование словарей;

изменять список данных с использованием встроенных операций (map, filter) или используя процедуру генерации списка; работа с файлами: создание, чтение, сохранение, запись в файл; случайные числа, используя модуль random; операторы цикла: while, for; построение графиков с использованием модуля matplotlib.

2. должен уметь:

Работать с текстовыми файлами, извлекать информацию, систематизировать, обобщать, визуально представлять полученные результаты (графически или с использованием трехмерных объектов).

3. должен владеть:

методами и основными подходами для автоматизации и представления научных задач.

Навыки использования вычислительных методов и уметь использовать эти методы в планировании и осуществлении вычислительных экспериментов.

#### 4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) 72 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 1 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

#### 4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

##### Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Введение в основы программирование, знакомство с языком Python, установка на платформе Linux, типы данных, простые арифметические операции	1	1	1	2	0	устный опрос

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
2.	Тема 2. Переменные, задания и использование переменных	1	2	0	2	0	контрольная работа
3.	Тема 3. Логические типы данных, логические операторы. Таблицы истинности для двоичных логических выражений	1	3	1	2	0	контрольная работа
4.	Тема 4. Конструкция условия (if..elif..else)	1	4	1	2	0	контрольная работа
5.	Тема 5. Функция. Определение, вызов, структура, документация	1	5	1	2	0	контрольная работа
6.	Тема 6. Создание, сохранение и запуск программы на Python в среде IDLE	1	6	0	2	0	контрольная работа
7.	Тема 7. Работа с визуальными объектами	1	7	1	1	0	контрольная работа
8.	Тема 8. Работа с визуальными объектами	1	8	1	1	0	контрольная работа
9.	Тема 9. Преобразование одного списка в другой, генератор списков	1	9	0	1	0	контрольная работа
10.	Тема 10. Работа с текстовыми файлами: открытие, закрытие, чтение и запись.	1	10	1	1	0	контрольная работа
11.	Тема 11. Случайные и псевдослучайные числа	1	11	1	0	0	контрольная работа
12.	Тема 12. Операторы цикла: for, while	1	12	1	1	0	контрольная работа
13.	Тема 13. Графическое представление данных (линейные графики, гистограммы, круговая диаграмма)	1	13	1	1	0	творческое задание

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
·	Тема . Итоговая форма контроля	1		0	0	0	зачет
	Итого			10	18	0	

## 4.2 Содержание дисциплины

### Тема 1. Введение в основы программирование, знакомство с языком Python, установка на платформе Linux, типы данных, простые арифметические операции

#### **лекционное занятие (1 часа(ов)):**

Введение в основы программирование, знакомство с языком Python, установка на платформе Linux, типы данных, простые арифметические операции Предмет курса. Краткая история разработки языка программирования Python. Особенности и свойства языка программирования Python. Знакомство с рабочей платформой и установка среды разработки IDLE для Windows и для Linux. Базовые типы данных: int, float, string. Описание примеры, особенности. Одинарные, двойные, тройные кавычки, особенности синтаксиса и применения. Простые арифметические действия с базовыми типами данных, математические операторы: сложение, вычитание, деление, умножение, возведение в степень, остаток от деления, конкатинация. Изменение типов данных. Порядок выполнения операций.

#### **практическое занятие (2 часа(ов)):**

Решение практических примеров.

### Тема 2. Переменные, задания и использование переменных

#### **практическое занятие (2 часа(ов)):**

Понятие переменных, задание и использование переменной, оператор присвоения, ячейка памяти. Решение практических примеров

### Тема 3. Логические типы данных, логические операторы. Таблицы истинности для двоичных логических выражений

#### **лекционное занятие (1 часа(ов)):**

Логические типы данных, логические операторы. Таблицы истинности для двоичных логических выражений Логический тип данных (bool), возможные значения. Особенности типа для языка программирования Python. Логические операторы: строгое неравенство, нестрогое неравенство. Приоритет выполнения операций при одновременном вхождении в выражение логических и арифметических операторов. Таблицы истинности для двоичных логических выражений и/или/но.

#### **практическое занятие (2 часа(ов)):**

Решение практических примеров.

### Тема 4. Конструкция условия (if..elif..else)

#### **лекционное занятие (1 часа(ов)):**

Условия использования конструкции if..elif..else. Обязательные и необязательные ветки условия. Смысловая нагрузка выравнивания выражений. Вложенность конструкций условия. Обход исключений.

#### **практическое занятие (2 часа(ов)):**

Решение практических примеров.

### Тема 5. Функция. Определение, вызов, структура, документация

#### **лекционное занятие (1 часа(ов)):**

Целесообразность использование функций при написании кода. Понятие функция, определение, вызов. Структура конструкции для определения функции. Объявление, тело функции, входные параметры, возвращение результата выполнения. Свойство функции ? документация: задание, использование.

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Решение практических примеров.

**Тема 6. Создание, сохранение и запуск программы на Python в среде IDLE**

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Необходимость применения среды разработки IDLE, процедура создания, сохранения программы на Python в среде IDLE. Общие правила задания имени программы, переменным и функциям. Комментирование кода, физические и логические строки кода, явное объединение строк.

**Тема 7. Работа с визуальными объектами**

**лекционное занятие (1 часа(ов)):**

Модуль visual: установка, вызов в основном коде программы. Представление рабочего окна отрисовки графических изображений: навигация, расположение осей координат. Создание и настройка примитивов: сфера, цилиндр, параллелипипед, конус.

**практическое занятие (1 часа(ов)):**

Решение практических примеров.

**Тема 8. Работа с визуальными объектами**

**лекционное занятие (1 часа(ов)):**

Комбинация данных фигур. Свойства примитивных объектов: цвет, размер, положение в пространстве, вектор направления. Понятие передачи цвета. Тип RGB

**практическое занятие (1 часа(ов)):**

Решение практических примеров.

**Тема 9. Преобразование одного списка в другой, генератор списков**

**практическое занятие (1 часа(ов)):**

Генерация списка и кортежа. List Comprehension. Результат применения конструкций преобразования. Применение встроенных функций: filter, map.

**Тема 10. Работа с текстовыми файлами: открытие, закрытие, чтение и запись.**

**лекционное занятие (1 часа(ов)):**

Открытие файла, используя функцию open. Обязательные входные параметры. Режимы открытия файла. Кодировка. Чтение файла: построчно, полнотекстовое прочтение, целиком -список строк. Значение аргументов при построчном прочтении файла. Запись в файл: построчно, на вход подается список строк. Использование специальных символов. Закрытие файла. Особенности использования каждого режима прочтения файла.

**практическое занятие (1 часа(ов)):**

Решение практических примеров.

**Тема 11. Случайные и псевдослучайные числа**

**лекционное занятие (1 часа(ов)):**

Ценность применения случайных чисел в науке и техники. Случайные, псевдослучайные числа, источники истинных случайных чисел, свойства псевдослучайных чисел. Сложность применения псевдослучайных чисел. Модуль random. Алгоритмы получения несбалансированных последовательностей псевдослучайных чисел, при равновероятном выпадении каждого элемента из множества. Встроенные методы генерации псевдослучайных чисел. Генерация повторяющейся последовательности псевдослучайных чисел.

**Тема 12. Операторы цикла: for, while**

**лекционное занятие (1 часа(ов)):**

Целесообразность применения циклов при написании кода. Универсальность оператора цикла ? while. Особенность цикла ? for. Структура, синтаксис, объявление цикла, тело цикла, счетчик, ветвь else. Операторы цикла: continue, break. Вложенные циклы.

**практическое занятие (1 часа(ов)):**

Решение практических примеров.

**Тема 13. Графическое представление данных (линейные графики, гистограммы, круговая диаграмма)**



### лекционное занятие (1 часа(ов)):

Знакомство с модулем Matplotlib. Установка и подключение модуля к коду рабочей программы. Создание Точечного и линейного графика, гистограммы, круговой диаграммы. Настройки: цветовая настройка, настройка штриховых маркеров, изменение формата шкалы осей, подпись осей, название графика, добавление дополнительной разметки, добавление легенды, расположение легенды, добавление нескольких ветвей. Отрисовка, сохранение готового графика.

### практическое занятие (1 часа(ов)):

Решение практических примеров.

## 4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Введение в основы программирование, знакомство с языком Python, установка на платформе Linux, типы данных, простые арифметические операции	1	1	подготовка к устному опросу	2	устный опрос
2.	Тема 2. Переменные, задания и использование переменных	1	2	подготовка к контрольной работе	2	контрольная работа
3.	Тема 3. Логические типы данных, логические операторы. Таблицы истинности для двоичных логических выражений	1	3	подготовка к контрольной работе	4	контрольная работа
4.	Тема 4. Конструкция условия (if..elif..else)	1	4	подготовка к контрольной работе	4	контрольная работа
5.	Тема 5. Функция. Определение, вызов, структура, документация	1	5	подготовка к контрольной работе	4	контрольная работа
6.	Тема 6. Создание, сохранение и запуск программы на Python в среде IDLE	1	6	подготовка к контрольной работе	2	контрольная работа
7.	Тема 7. Работа с визуальными объектами	1	7	подготовка к контрольной работе	2	контрольная работа
8.	Тема 8. Работа с визуальными объектами	1	8	подготовка к контрольной работе	4	контрольная работа



N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
9.	Тема 9. Преобразование одного списка в другой, генератор списков	1	9	подготовка к контрольной работе	4	контрольная работа
10.	Тема 10. Работа с текстовыми файлами: открытие, закрытие, чтение и запись.	1	10	подготовка к контрольной работе	3	контрольная работа
11.	Тема 11. Случайные и псевдослучайные числа	1	11	подготовка к контрольной работе	3	контрольная работа
12.	Тема 12. Операторы цикла: for, while	1	12	подготовка к контрольной работе	4	контрольная работа
13.	Тема 13. Графическое представление данных (линейные графики, гистограммы, круговая диаграмма)	1	13	подготовка к творческому заданию	6	творческое задание
	Итого				44	

## 5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

При освоении дисциплины предусматривается широкое использование активных и интерактивных форм приобретения новых знаний. В обязательном порядке должен быть обеспечен доступ студентов в Интернет. В курсе запланирована активная работа в компьютерном классе.

## 6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

### Тема 1. Введение в основы программирование, знакомство с языком Python, установка на платформе Linux, типы данных, простые арифметические операции

устный опрос , примерные вопросы:

Особенности языка программирования Python? Основная философия языка программирования Python? Какие по сложности бывают типы данных? Как преобразовать один тип данных в другой? Какой процедурой узнать тип используемых данных? Перечислите арифметические операции с примерами. В каких кавычках представлен тип String? Приведите примеры использование тройных кавычек Какой приоритет выполнения арифметических операций для Python?

### Тема 2. Переменные, задания и использование переменных

контрольная работа , примерные вопросы:

Напротив значений или выражений укажите пипы к которым они или их результат относится:  
`""678.0""00""2"" 7892 98.7 float(5)>2.0`

### Тема 3. Логические типы данных, логические операторы. Таблицы истинности для двоичных логических выражений

контрольная работа , примерные вопросы:

Контрольная работа, вопросы изадания: Сформулируйте правила создания имени переменной. Как выглядит процедура объявления переменной? Как можно объявить несколько переменных одной строкой? Определите переменные :  $a=14$  ;  $b=-5$  ;  $c=45.8$  ;  $d=(a*b)/c$  ;  $\pi = 3.14$  . Используя определенные переменные выполните операции:  $(a-1/2d)/(b*b*d)$   $d/c-b/d*57$   
 $((c+b)-(28b/a))^0.5)^2$   $a^2+b^3+23*d^2*a$

#### Тема 4. Конструкция условия (if..elif..else)

контрольная работа , примерные вопросы:

Перечислите логические операторы Какие значения могут принимать логические типы данных Особенность представления логических типов для Python В чем особенности строгого и не строгого равенств, приведите примеры. Таблица истинности для оператора and Таблица истинности для оператора or Таблица истинности для оператора not Напротив каждого выражения укажите к какому типу данных он относится:  $4+1>6$  ;  $34-17==15+2$   $4>4$   $4==5$   $4>=4$   $true==true$   $false==true$   $false==false$   $2**0.5*45>7$  or  $True$   $54/(3-8)>= -47$  or  $98-1==96+1$   $True$  and  $False$   $False$  or  $54==54$   $((38/2=9)$  and  $4**2==16)$  or  $56>=41$   $(not(True)$  and  $True)$  or  $False$

#### Тема 5. Функция. Определение, вызов, структура, документация

контрольная работа , примерные вопросы:

Определите функцию возведения в квадрат любого числа Определите функцию для определения куба любого числа Определите функцию возведение заданного числа в степень самого заданного числа Определите функцию расчета площади круга Определите функцию периметра прямоугольника Создайте функцию вычисляющую сумму квадратов двух произвольных чисел. Проверьте с конкретными значениями. Создайте функцию округления числа: если дробная часть числа меньше 0.5, округляем в меньшую сторону, если равно и больше округляем в большую сторону. Проверьте с конкретными значениями. На основе вашего расписания занятий создайте функцию вывода занятий при запросе для недели (mo,tu,we,fr,sa,su), если занятий нет по расписанию, то программа выведет фразу: ?Сегодня занятий нет!?

#### Тема 6. Создание, сохранение и запуск программы на Python в среде IDLE

контрольная работа , примерные вопросы:

Установка и запуск среды IDLE Особенности среды разработки IDLE Сформулируйте правила задания имени файла с расширением \*.py Логические и физические строки. Приведите пример превращения одной длинной строки в несколько физических строк Как закоментировать фрагмент кода ?

#### Тема 7. Работа с визуальными объектами

контрольная работа , примерные вопросы:

Чем визуально отличаются список и кортеж? Какая структура словаря, какие составные ?компаненты?? Какая структура данных работает быстрее и почему? Отличаются ли значения длины списка и последний нумерованный элемент этого списка, если да то на какое число? У вас имеется список  $li=[1,2,3,4,5,6,7]$ . Выполните следующие действия: получите 4-ый элемент этого списка: получите нулевой элемент; получите последний элемент, используя отрицательные индексы и встроенный метод списка ? получение длины.

#### Тема 8. Работа с визуальными объектами

контрольная работа , примерные вопросы:

У вас имеется список  $li=[1,2,3,4,5,6,7]$ , получите срез списка со второго индекса по пятый. Какими списками можно соединить два списка:  $li=[1,2,3]$  и  $li1=[4,5,6]$ ? Какой процедурой добавить элемент к концу списка? Как получить, добавить и изменить элемент словаря? У какой структуры данных нельзя изменить количество элементов после создания Задайте в явном виде список из 10 элементов - произвольных чисел, присвойте ему имя, напишите операцию подсчета суммы всех элементов в этом списке Создайте словарь для атома водорода (атомный номер ? 1, буквенный тип ? H, ковалентный радиус ? 32пм) и кислорода (атомный номер ? 8, буквенный тип ? O, ковалентный радиус ? 73пм) Определите функцию расчета ковалентной связи для O и H, O и O, H и H  $R(AB)=R(A)+R(B)$

#### Тема 9. Преобразование одного списка в другой, генератор списков

контрольная работа , примерные вопросы:

Используя процедуру генерации списка, создайте список с 1 до 100, элементы отличаются друг от друга на 5 единиц. Создайте список, каждый элемент которого есть отношение элемента списка задания 3 на сумму всех элементов списка. Какие два способа нам известны поэлементного применения функции к списку. Приведите схематичные примеры. Определите функцию возведения в квадрат произвольного числа и примените ее к списку, полученному в задании 3.

### **Тема 10. Работа с текстовыми файлами: открытие, закрытие, чтение и запись.**

контрольная работа , примерные вопросы:

Какие схема операций для чтения информации из файла? Какие способы вам известны для прочтения файла? Какой тип данных вы получаете после прочтения файла используя процедуру `readlines()`? У вас имеется следующий список: `li=['пчела?', 'бабочка?', 'кузнечик?']`. Сохраните этот список в файл, чтобы каждый элемент был на отдельной строке. После прочтения у вас имеется следующая строка `"a=4 b=8 c=10"`. Определите функцию сложения числовых элементов в этой строке.

### **Тема 11. Случайные и псевдослучайные числа**

контрольная работа , примерные вопросы:

Чем отличаются случайные числа от псевдослучайных чисел? Источники истинных случайных чисел. Какими свойствами должны обладать псевдослучайные числа? В чем сложность применения истинных случайных чисел? Какой параметр используется системой по умолчанию для генерации последовательности псевдослучайных чисел? Сгенерируйте список из случайных целых чисел в диапазоне `[0:10]`, длиной 10 элементов? Напишите процедуру получения повторяющейся последовательности псевдослучайных целых чисел. В диапазоне `[0:10]`, длина последовательности 20 элементов. Опишите способы получения несбалансированных последовательностей случайных элементов. В общих чертах.

### **Тема 12. Операторы цикла: for, while**

контрольная работа , примерные вопросы:

Для чего используются циклы? С какими объектами работает (по каким объектам проходит) цикл `for`? Какой цикл быстрее: `for` или `while`? Ниже приведена процедура изменения каждого элемента текущего списка `li` на 5, используя цикл `while`. Измените код, используя цикл `for`. `li=[4,5,2,1,7,5,3]` `while i<len(li): li[i]=li[i]*5 i=i+1` У вас имеется список `li`, напишите процедуру получения строки из всех элементов списка, разделенных символом пробела. `li=[2,5,0,9,7,1,4,2]` У вас имеется некий список целых чисел `li`, возведите в квадрат только четные числа списка `li`. Выведите на экран таблицу умножения Пифагора, сохраняя структуру квадрата. Для этого используйте команду вывода `print(значение, end='символ окончания')`. Используйте вложенный цикл.

### **Тема 13. Графическое представление данных (линейные графики, гистограммы, круговая диаграмма)**

творческое задание , примерные вопросы:

Контрольная работа, вопросы и задания: Какую библиотеку мы использовали для представления значений в виде графиков? Какая процедура построения графика? Какие минимальные входные параметры необходимы для построения линейного графика? Постройте график функции квадрата. Добавьте к нему функцию куба этого же числа. Настройте представление этих графиков, используя тип маркировки, подписи осей и самого графика, создание и расположение легенды.

### **Тема . Итоговая форма контроля**

Примерные вопросы к зачету:

Чтение входного файла молекулы в формате `xyz`, отрисовка структуры программы, представление каждого атома в виде сферы, сохраняя пропорции и принятые условные обозначения.

Отрисовки входного файла молекулы в формате `xyz`, представление ее шаро-стержневой моделью. Прорисовываются ковалентные связи, исходя из расстояния между атомами и их типами.

Ориентация двух молекул относительно выделенных в них центров.

Растворение молекулы в кубе воды с указанием места расположения структуры в кубе воды.

Структура молекулы и куб воды представлены входными файлами в формате хуз.

Постройте график изменения энергии молекулярной системы в ходе оптимизации в программе PCgamess. Для работы используйте out файл.

Постройте графики изменения расстояний между заданными списком парами атомов в ходе оптимизации атомами в программе PCgamess. Для работы используйте out файл.

Из группы файлов, оптимизаций разных конформаций одной молекулы, постройте гистограмму, отражающую энергии глобальных минимумов рассчитанных конформаций. В программе PCgamess. Для работы используйте out файл.

Осуществите программный перенос одного фрагмента молекулы, относительно другой по заданному вектору, для каждого шага перемещения создайте входной (input) файл расчета энергии в точки для PC-Gamess, и \*.bat файл для массового запуска на расчет энергий.

Полученные энергии отобразите графически.

Осуществите программное вращение одного фрагмента молекулы, относительно друго на 360 градусов, с шагом вращения в 5 градусов. Для каждого шага поворота создайте входной (input) файл расчета энергии в точки для PC-Gamess, и \*.bat файл для массового запуска на расчет энергий. Полученные энергии отобразите графически. Для удобства используйте полярную систему координат.

Осуществите программное вращение фрагмента молекулы, относительно своей (выбранной оси) в двумерной плоскости на 360 градусов, с шагом вращения в 5 градусов. Для каждого шага

поворота создайте входной (input) файл расчета энергии в точки для PC-Gamess, и \*.bat файл для массового запуска на расчет энергий. Полученные энергии отобразите графически. Для удобства используйте полярную систему координат.

Гистограммой представьте энергию структур, полученных путем случайным образом отклонения каждого атома молекулы от 0 до 1,5 ангстрем, полученных случайным образом, по каждой оси. Сгенерируйте 100 структур. Для каждой структуры создайте входной (input) файл

расчета энергии в точки для PC-Gamess, и \*.bat файл для массового запуска на расчет энергий.

Вопросы и упражнения текущего контроля теоретической подготовки:

Какие типы данных вам известно на сегодняшний день и как они выглядят (какие значения могут принимать)?

Создайте конструкцию, определяющую знак используемого числа и выводящее фразу число "положительное число", если оно положительное или "отрицательное число", если оно отрицательное.

Создайте конструкцию определения четного или не четного числа, используя оператор "%".

Определите функцию возведения в квадрат любого числа

Определите функцию расчета площади круга

Определите функцию периметра прямоугольника

Определите функцию для определения куба любого числа

Напротив значений или выражений укажите пипы к которым они относятся или их результат:

"678.0"00"2" ; -7892 ; 98.7 ; float(5)>2.0

Перечислите арифметические операторы

Перечислите логические операторы

Какая минимальная обязательная длина конструкции условия (if \_\_elif\_\_else). Приведите пример.

Создайте функцию вычисляющую сумму квадратов двух произвольных чисел. Проверьте с конкретными значениями.

Создайте функцию округления числа: если дробная часть числа меньше 0.5, округляем в меньшую сторону, если равно и больше округляем в большую сторону. Проверьте с конкретными значениями.

Создадим функцию комплементарности азотистых оснований ДНК, А-Т, Г-Ц. На входе буквенное обозначение нуклеотида, на выходе комплементарных ему.

Создадим функцию расчета молекулярной массы ( $M_r$ ) молекулы, состоящая из атомов: С, Н, О,

N, S.  $M_r(C)=6$ ;  $M_r(H)=1$ ;  $M_r(O)=8$ ;  $M_r(S)=16$ ; К примеру  $M_r(H_2O)=2*1+8=10$

На входе последовательно будет задано количество атомов каждого типа, если оно будет отсутствовать, то значение на вход будет равно нулю. Проверьте работу вашей функции, с такими молекулами:

- Вода ( $H_2O$ )
- Сероводород ( $H_2S$ )
- Бензол ( $C_6H_6$ )
- Глюкоза ( $C_6H_{12}O_6$ )
- Глицин ( $C_2H_5NO_2$ )
- 10 молекул воды
- Олигопептид из 20 аминокислоты: 30% глицин и 70% цистеин ( $C_3H_7NO_2S$ )

На основе вашего расписания занятий создайте функцию вывода занятий при запросе для недели, если занятий нет по рассмисанию, то программа выведет фразу: "Сегодня занятий нет!"

Используя известные примитивы, постройте оси декартовой системы координат: ось x, ось y, ось z. Центр координат в позиции = (0,0,0). Каждая ось расположена перпендикулярна к остальным. Длина каждой оси 8 единиц.

В нашей системе построим молекулу "воды". Технические параметры: Угол  $\text{HON}=90$  градусов (вместо 104), длина связи  $\text{OH}=0.96$  ангстрем. "Атом" кислорода ? красного цвета, с радиусом 0.3, "атом" водорода ? белый с радиусом 0.1. Каждому "атому" присвойте переменную.

Как закоментировать фрагмент кода

Приведите пример превращения одной длинной строки в несколько физических строк

Сформулируйте правила задания имени файла с расширением \*.py

Использование тройных кавычек, с примерами.

Перечислите основные свойства объекта cylinder при его создании. Что они означают.

Если у вас имеется  $sp1 = \text{sphere}(\text{pos}=(0,0,0), \text{radius}=1)$ , расположенная в начале координат. Как

перенести координаты центра сферы на 10 единиц по оси x.

Создайте словарь для атома водорода (атомный номер ? 1, буквенный тип ? H, ковалентный радиус ? 32пм) и кислорода (атомный номер ? 8, буквенный тип ? O, ковалентный радиус ? 73пм)

Определите функцию расчета ковалентной связи для O и H, O и O, H и H  $R(AB)=R(A)+R(B)$

Проверьте для всех трех вариантов, сравните с литературными данными

Создайте список элементов 0 до 100, шаг 3, присвойте его переменной lis1 . Работаем с lis1

Создайте список, каждый элемент которого есть квадрат числа предыдущего списка

Создайте список, каждый элемент которого есть площадь круга, учитывая, что на вход v подан

список радиусов. \*\*



Измените левую часть выражения, оформив функцию вычисления площади круга, по входному параметру (радиус)

Получите список, состоящий из элементов, меньше 50

Для этого оформите функцию (назовите ее fun1) с условием и как в задачи \*\* вызовите ее.

Обратите внимание [None, 5, None, None, None, 8, 9, None, 10]

У какой структуры данных нельзя изменить количество элементов после создания

Задайте в явном виде список из 10 элементов- произвольных чисел, присвойте ему имя, напишите операцию подсчета суммы всех элементов в этом списке

Используя процедуру генерации списка, создайте список с 1 до 100, элементы отличаются друг от друга на 5 единиц \*

Создайте список каждый элемент которого есть отношение элемента списка задания \* на сумму всех элементов списка

Какие два способа нам известно поэлементного применения функции к списку. Приведите схематичные примеры.

Определите функцию возведения в квадрат произвольного числа и примените ее к списку, полученному в задании \*.

Чем отличаются случайные числа от псевдослучайных чисел

Источники истинных случайных чисел

В чем сложны? Какими свойствами должны обладать псевдослучайные числа для применения истинных случайных чисел

Какой параметр используется системой по умолчанию для генерации последовательности псевдослучайных чисел

Сгенерируйте список из случайных целых чисел в диапазоне [0:10], длиной 10 элементов

Напишите процедуру получения повторяющейся последовательности псевдослучайных целых чисел, в диапазоне [0:10], длиной 20 элементов.

Опишите способы получения несбалансированных последовательностей случайных элементов (общие принципы)

## 7.1. Основная литература:

Основы научного программирования на примере языка Python/Изотова Е.Д. - Казань, 2015.- 42 с. Режим доступа: [http://libweb.kpfu.ru/ebooks/01-IFMB/01\\_12\\_000877.pdf](http://libweb.kpfu.ru/ebooks/01-IFMB/01_12_000877.pdf)

Основы параллельного программирования: учебное пособие/Богачев К.Ю. - Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013.-342 с. Режим доступа: <http://e.lanbook.com/view/book/42626/>

Основы программирования/ Окулов С.М.- Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012.-336 с. Режим доступа: <http://e.lanbook.com/view/book/8783/>

Андрианова, А.А. Практикум по курсу "Алгоритмизация и программирование" [Текст: электронный ресурс] : [учебное пособие] / Андрианова А. А., Мухтарова Т. М. ; Казан. гос. ун-т, Фак. вычисл. математики и кибернетики .? (Казань : Казанский федеральный университет, 2009) .Ч. 2 [Текст: электронный ресурс] / А. А. Андрианова, Л. Н. Исмагилов, Т. М. Мухтарова .? Электронные данные (1 файл: 1,8 Мб) .? (Казань : Казанский федеральный университет, 2013) .? Загл. с экрана .? Для 1-го года обучения .? Документ является электронной копией оригинала: Практикум по курсу "Алгоритмизация и программирование": [учебное пособие]. Ч. 2

/ А. А. Андрианова, Т. М. Мухтарова. -- Казань: [Изд-во Казан. гос. ун-та], 2008. -- Фондодержатель Научная библиотека Казанского федерального университета .? Режим доступа: открытый.

## 7.2. Дополнительная литература:

Гвоздева В. А. Базовые и прикладные информационные технологии: Учебник / В.А. Гвоздева. - М.: ИД ФОРУМ: НИЦ ИНФРА-М, 2014. - 384 с. Режим доступа:

<http://znanium.com/bookread.php?book=428860>

Мешалкин В. П. Основы информатизации и математического моделирования экологических систем: Учебное пособие / В.П. Мешалкин, О.Б. Бутусов, А.Г. Гнаук. - М.: ИНФРА-М, 2010. - 357 с.: <http://znanium.com/bookread.php?book=184099>

## 7.3. Интернет-ресурсы:

Matplotlib documentation - <http://matplotlib.org/>

Python documentation, tutorials and guides are constantly evolving - <https://www.python.org/doc/>

Vpython 3D Programming for Ordinary Mortals - <http://vpython.org/>

викиучебник - <http://ru.wikibooks.org/wiki/Python>

учебник по Python - <http://pythonworld.ru/samouchitel-python>

## 8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Основы функционального программирования для решения задач биоинформатики" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Компьютерный класс, представляющий собой рабочее место преподавателя и не менее 15 рабочих мест студентов, включающих компьютерный стол, стул, персональный компьютер, лицензионное программное обеспечение. Каждый компьютер имеет широкополосный доступ в сеть Интернет. Все компьютеры подключены к корпоративной компьютерной сети КФУ и находятся в едином домене.

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 10 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя,



включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы

подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические

занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Компьютерный класс, представляющий собой рабочее место преподавателя и не менее 15 рабочих мест студентов, включающих компьютерный стол, стул, персональный компьютер, лицензионное программное обеспечение. Каждый компьютер имеет широкополосный доступ в сеть Интернет. Все компьютеры подключены к корпоративной компьютерной сети КФУ и находятся в едином домене.

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 10 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя,

включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы

подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические

занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Компьютерный класс, представляющий собой рабочее место преподавателя и не менее 15 рабочих мест студентов, включающих компьютерный стол, стул, персональный компьютер, лицензионное программное обеспечение. Каждый компьютер имеет широкополосный доступ в сеть Интернет. Все компьютеры подключены к корпоративной компьютерной сети КФУ и находятся в едином домене.

Компьютерный класс с выходом в Интернет, доступ к вычислительным кластерам.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 06.04.01 "Биология" и магистерской программе Биоинформатика .

Автор(ы):

Изотова Е.Д. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Рецензент(ы):

Акберова Н.И. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.