

BENVENUTI!

IDONEITA' INFORMATICA PRATICA (CdL Farmacia, UniTS, A.A.2015/2016)

Sara Fortuna

sara.fortuna@uniud.it oppure fortuna@sissa.it

dal 2 maggio al 17 giugno (7+7 lezioni da 2h + 1 recupero)

TEORIA: martedì 11-13 (aula 1, ed.C1)

PRATICA: martedì' 14-16 cognomi A-C

16-18 cognomi D-N

18-20 cognomi P-Z

Aula 1

Ed. H2

RECUPERO LEZIONE PRATICA: lunedì' prossimo (9 maggio)

APC&O

Informatica

Concetti e sperimentazioni

seconda edizione

Maria Rita Laganà
Marco Righi
Francesco Romani



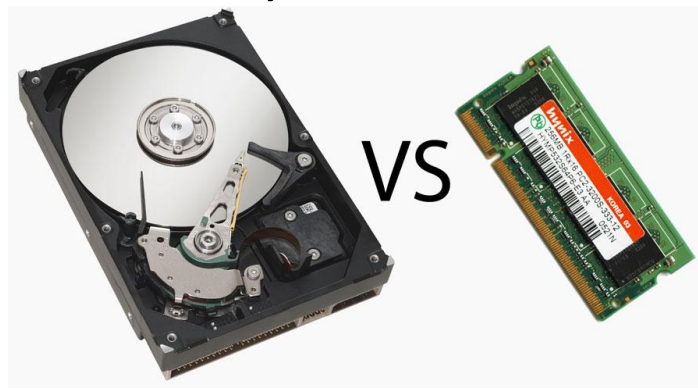
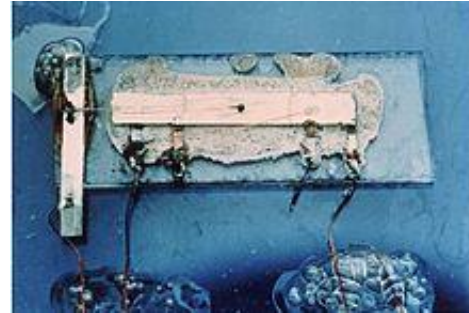
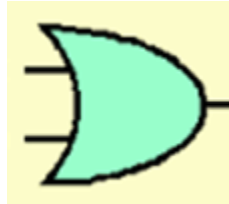
MAGGIOLI
EDITORE

Appunti ,Slides,
e Materiale Online
(manuali ECDL e
esami precedenti)

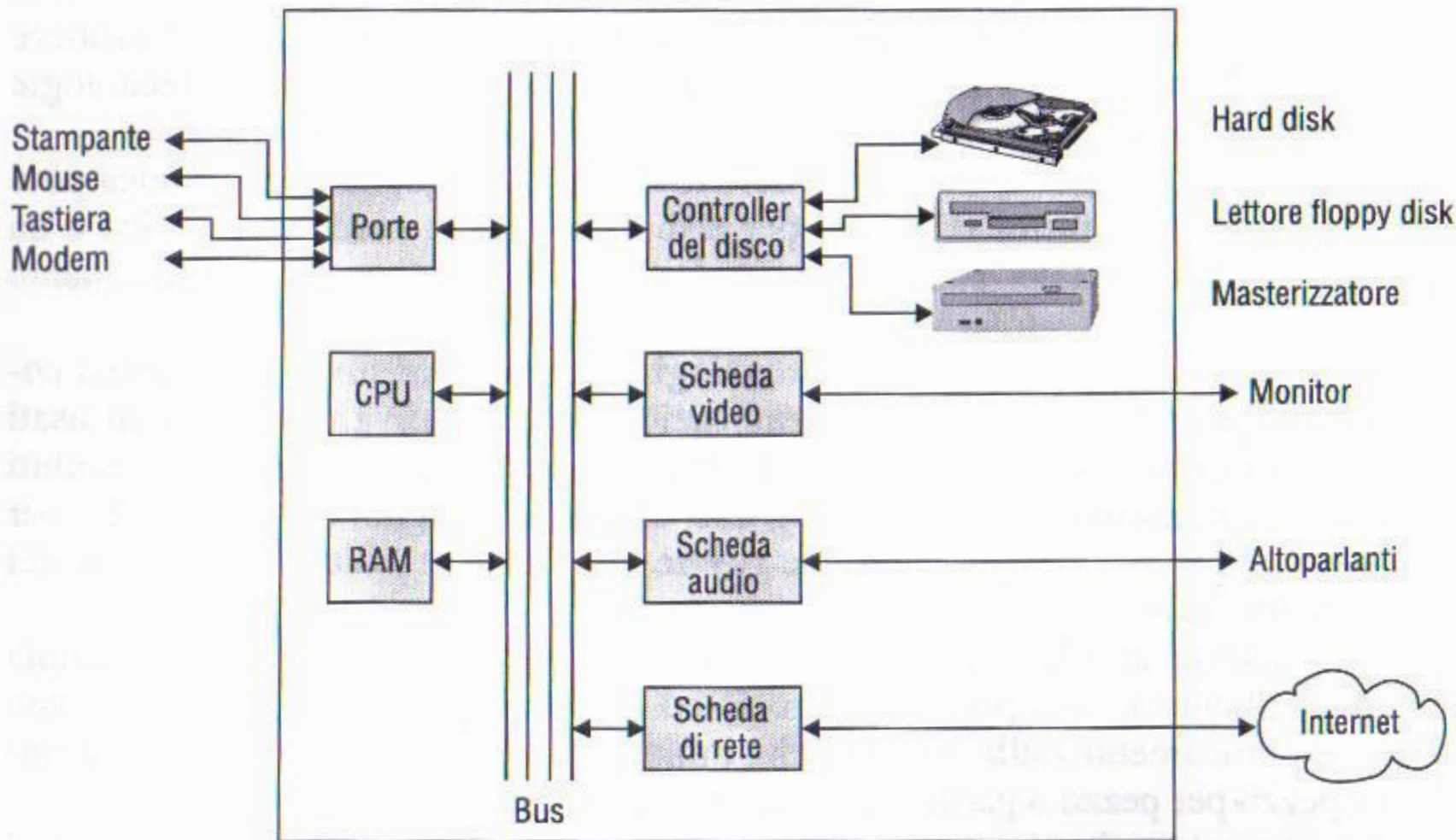
Tutti i downloads su:
www.sarafortuna.eu

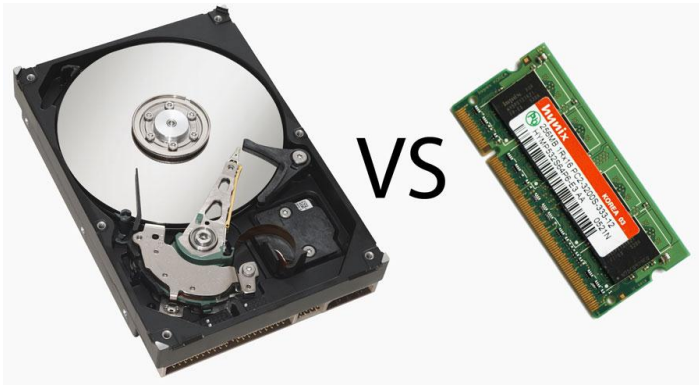
Ricapitolando:

- Transistors
- Circuiti integrati
- Microprocessori (o CPU)
- Legge di Moore
- Funzione della CPU
- Scheda Madre, scheda video, scheda di rete
- Memorie RAM e HD



La struttura hardware di un PC



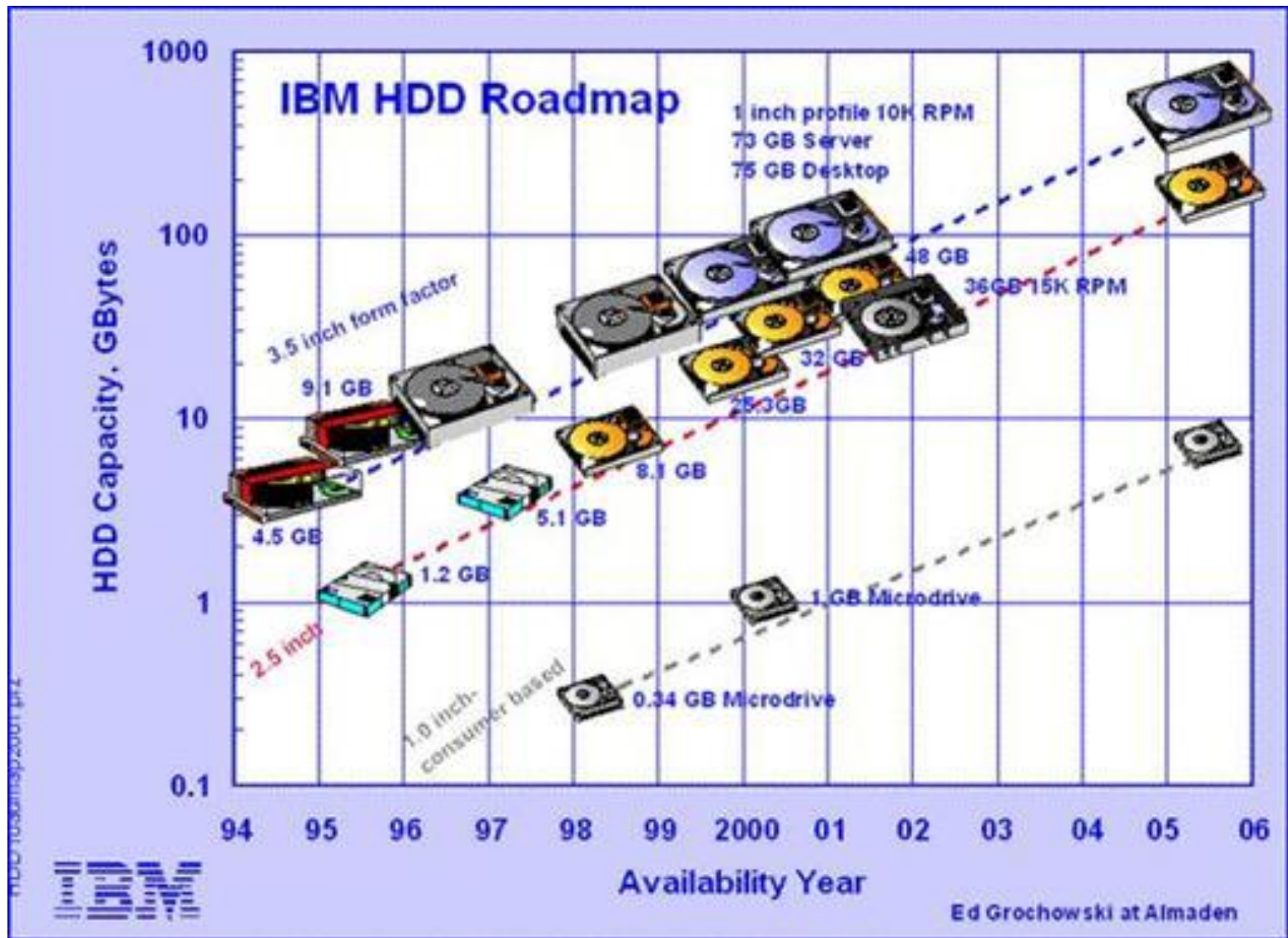


Memorie

HD/USB/SD	RAM
<ul style="list-style-type: none">• conserva i dati• è lento (Mbps)	<ul style="list-style-type: none">• carica i dati• è veloce (Gb/s)

Quando lavoriamo al PC
i dati vengono recuperati dall'HD e caricati in RAM
per permetterne l'accesso e l'elaborazione veloce!

Legge di Moore e capacità degli HD



Award Medallion BIOS v6.0, An Energy Star Ally
Copyright (C) 1984-2001, Award Software, Inc.



ASUS P4T533-C ACPI BIOS Revision 1007 Beta 001

Intel(R) Pentium(R) 4 2800 MHz Processor
Memory Test : 262144K OK

Award Plug and Play BIOS Extension v1.0A
Initialize Plug and Play Cards...
PNP Init Completed

Detecting Primary Master ... MAXTOR 6L040J2
Detecting Primary Slave ... ASUS CD-S520/A
Detecting Secondary Master... Skip
Detecting Secondary Slave ... None_

Press DEL to enter SETUP, Alt-F2 to enter EZ flash utility

IL BIOS è un programma che:

- Cerca gli HD
- Copia il sistema operativo dall'HD alla RAM

Ovvero esegue il BOOT caricando il sistema operativo prescelto dalla locazione scelta (HD, DVD, USB)

Linguaggi di Programmazione

Per esempio:

- Matlab
- HTML

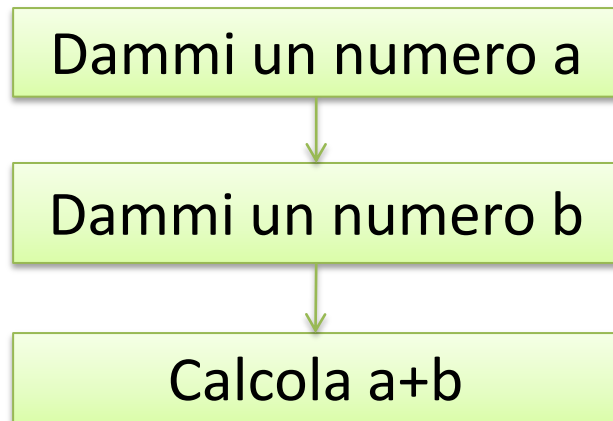
I linguaggi di programmazione servono a codificare nel software le azioni che il calcolatore dovrà svolgere.

Queste azioni sono strutturate in un algoritmo.

Algoritmo

- Un algoritmo è una sequenza di passi discreti non ambigui che porta alla soluzione di un problema.

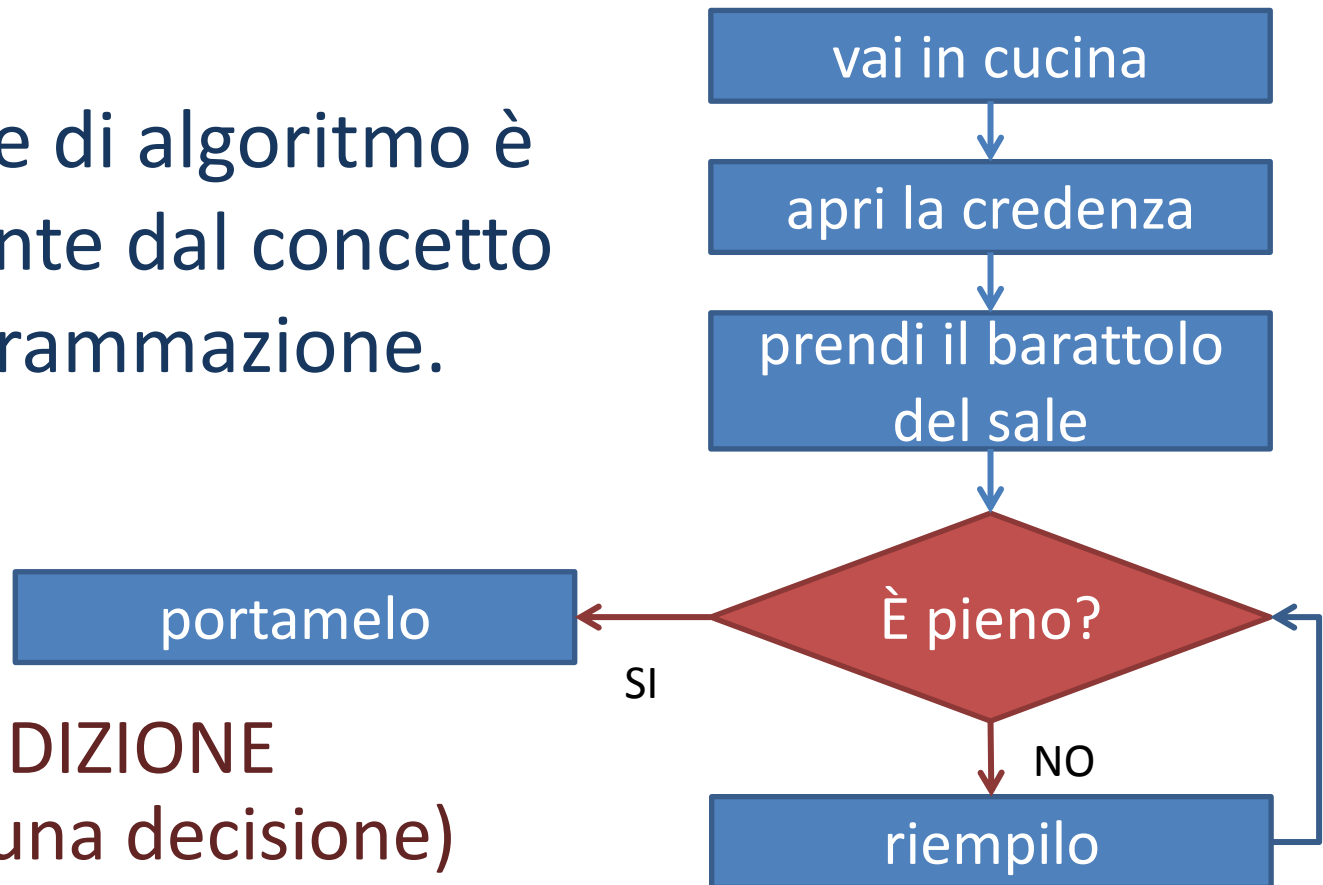
La nozione di algoritmo è indipendente dal concetto di programmazione.



Algoritmo

- Un algoritmo è una sequenza di passi discreti non ambigui che porta alla soluzione di un problema.

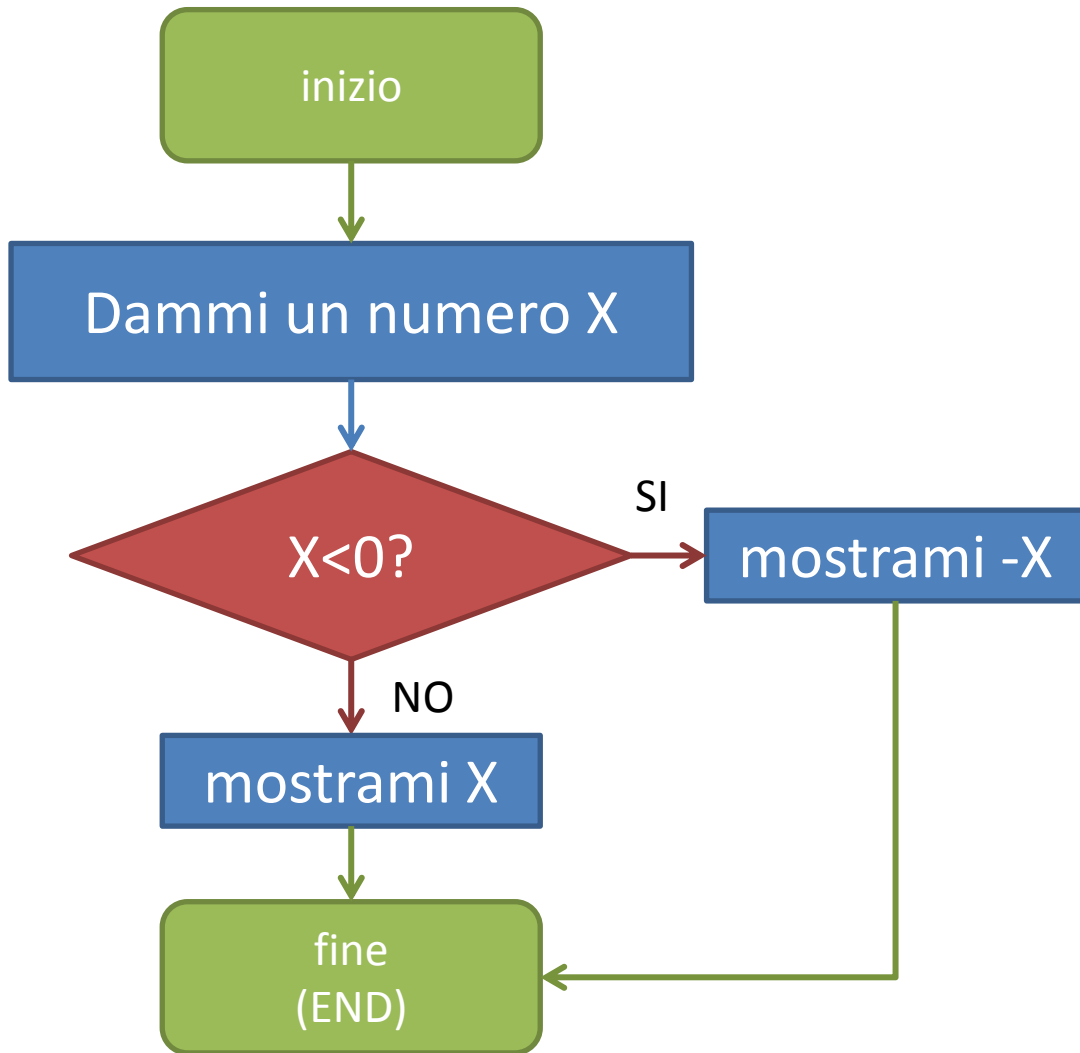
La nozione di algoritmo è indipendente dal concetto di programmazione.



CONDIZIONE

(richiede una decisione)

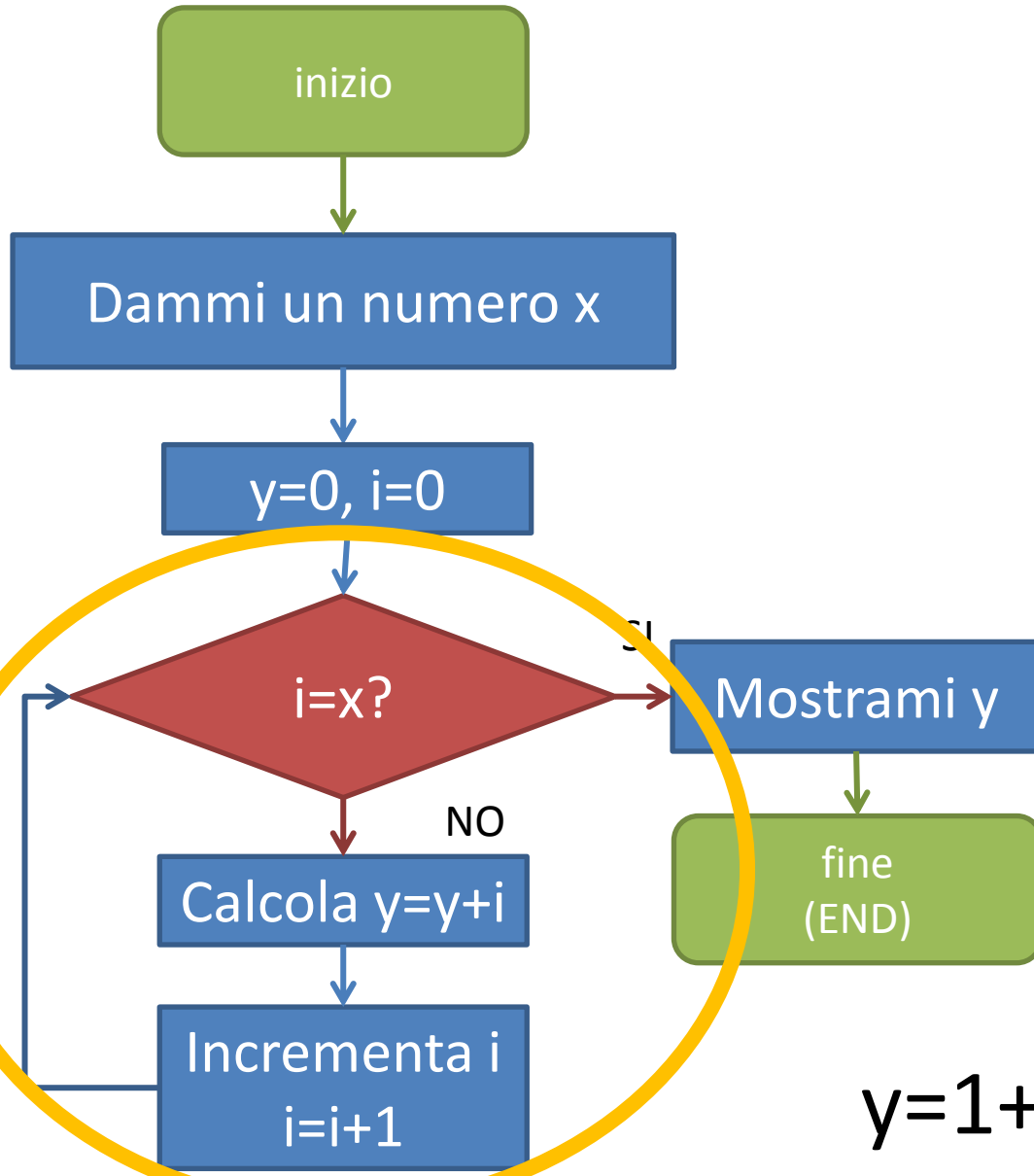
Algoritmo per il modulo di X



Programma in
Matlab/Octave

```
function modulo (X)
    if (X<0)
        disp(-X);
    else
        disp(X);
    endif;
end
```

Algoritmo per la sommatoria

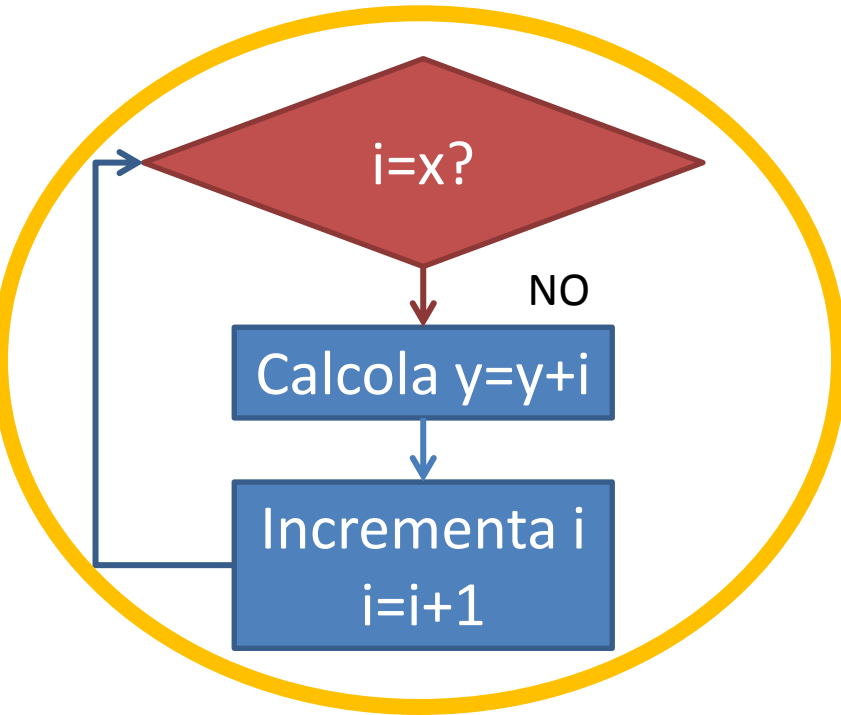


Programma in
Matlab/Octave

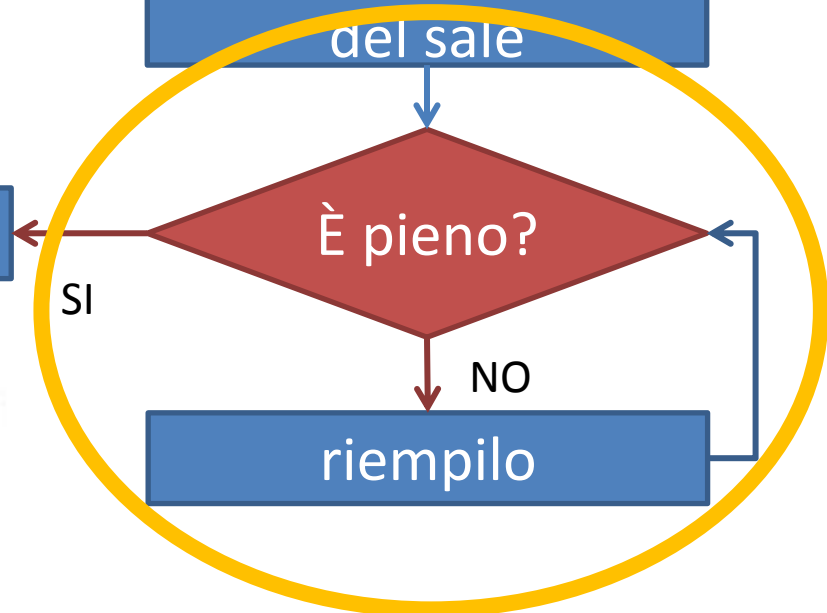
```
function y=somma(x)
    y=0
    for i in 0:1:x
        y=y+i
    end
    disp(y)
end
```

$$y=1+2+3+4+5+\dots+x$$

LOOP



portamelo



Interpreti e compilatori

```
function modulo (X)
    if (X<0)
        disp(-X);
    else
        disp(X);
    endif;
end
```



サウ

- **INTERPRETE:** è un'applicazione capace di eseguire direttamente un programma scritto in un determinato linguaggio
- **COMPILATORE:** è un'applicazione capace di tradurre un programma in un'altro linguaggio (tipicamente il linguaggio macchina)

Interpreti e compilatori

- **INTERPRETE:** è un'applicazione capace di eseguire direttamente un programma scritto in un determinato linguaggio
- **COMPILATORE:** è un'applicazione capace di tradurre un programma in un'altro linguaggio (tipicamente il linguaggio macchina)

LEEEEEENTOOO
ma permette di usare lo stesso programma su qualunque macchina su cui sia installato l'interprete (anche da web!)

VELOCE (e costoso)
ma permette di usare lo stesso programma su qualunque macchina che utilizzi lo stesso linguaggio macchina

Per scrivere ed eseguire un programma

- Scegliere un linguaggio di programmazione
- Avere un computer
- Avere disponibile sul computer un interprete (o un compilatore) per quel linguaggio
- Schematizzare il programma su carta
- Scrivere il programma (compilarlo) ed eseguirlo
- Valutarne il risultato
- Cercare l'errore (con abilità e pazienza)
- Correggere il programma
- Eseguirlo e ripetere gli ultimi 4 passaggi finchè non si ottiene il risultato voluto

Per scrivere ed eseguire un programma

- Scegliere un linguaggio di programmazione
- Avere un computer
- Avere disponibile sul computer un interprete (o un compilatore) per quel linguaggio
- Schematizzare il programma su carta
- Scrivere il programma (compilarlo) ed eseguirlo
- Valutarne il risultato
- Cercare l'errore (con abilità e pazienza)
- Correggere il programma
- Eseguirlo e ripetere gli ultimi 4 passaggi finchè non si ottiene il risultato voluto

DEBUG

Linguaggi di Programmazione

- BASIC
- COBOL (bancomat)
- FORTRAN (calcolo scientifico!)
- PASCAL
- C/C++
- Java
- C#

BASIC

Beginner's All Purpose Symbolic Instruction Code

Anni '70-'80: gli Home Computers!

- Commodore



- Spectrum



- Amiga



- MSX



BASIC

Beginner's All Purpose Symbolic Instruction Code

```
REM  PROGRAMMA  PER  LA  SOMMA  DI  2  NUMERI
10  INPUT  A
20  INPUT  B
30  LET   S = A + B
40  PRINT  S
50  END
```

Grazie al largo uso negli home computer degli anni '70-'80 è resuscitato. Si è evoluto in Visual Basic!

.. negli anni '60 non esistevano i caratteri maiuscoli ...

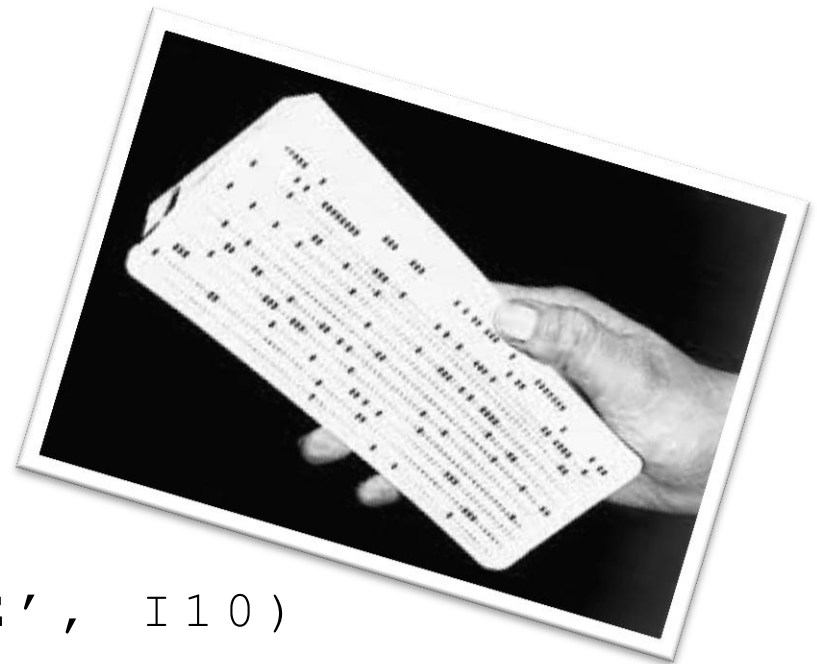
Negli anni '70 divenne obsoleto e sostituito da:

- COBOL (applicazioni commerciali – bancomat!)
- FORTRAN (programmi scientifici)

FORTRAN

FORmula TRANslation

```
C  
C PROGRAMMA PER LA SOMMA DI 2 NUMERI  
C  
  
    READ (5,100)  A  
    READ (5,100)  B  
    S = A + B  
    WRITE (6,200) E  
    STOP  
100  FORMAT (I5)  
200  FORMAT  
    * (14HILRISULTATO E', I10)  
    END
```



Utilizzato ancora oggi, e affiancato da C/C++

C

```
int main() {  
    int A=0, B=0, B=0;  
    scanf ("%i", &a);  
    scanf ("%i", &b);  
    S=A+B;  
    printf («IL RISULTATO E' %i«, s);  
    return 0;  
}
```

Il C è svincolato dalla struttura a schede

C++

```
#include <iostream>
using namespace std;

int main() {
    int A, B, S;
    cin>>a>>b;

    S=A+B;

    cout<<"IL RISULTATO E' " <<s<<endl;
    return 0;
}
```

Microsoft usa C#

Java

```
Import java.io.*;
Class Somma{
    public static void main(String args[]){
        int A=0, B=0;
        try{
            BufferedReader br= new BufferedReader(
                new InputStreamReader(System.in));
            a=Integer.parseInt(br.readLine());
            b=Integer.parseInt(br.readLine());
        } catch (Exception e){
            System.out.println("errore in lettura");
        }
        int S=A+B;
        System.out.println("IL RISULTATO E' " +S);
    }
}
```

Java viene detto «rindondante».


```
Import java.io.*;
Class Somma{
public static void main(String args[]){
    int A=0, B=0;
    try{
        BufferedReader br= new BufferedReader(
            new InputStreamReader(System.in));
        a=Integer.parseInt(br.readLine());
        b=Integer.parseInt(br.readLine());
    } catch (Exception e){
        System.out.println("errore in lettura");
    }
    int S=A+B;
    System.out.println("IL RISULTATO E' " +S);
}
}
```

Sebbene Java sia rindondante»,
gira su qualunque macchina perchè i suoi compilatori
non producono un codice in linguaggio macchina, ma
in *BYTECODE* che può essere letto da un interprete
detto VIRTUAL MACHINE
(JVM = Java Virtual Machine)

Linguaggi di Programmazione

- BASIC
- COBOL (bancomat)
- FORTRAN (calcolo scientifico!)
- PASCAL
- C/C++
- Java
- C#

Questi sono linguaggi GENERAL PURPOSE, in quanto si prestano ad ogni tipo di applicazione informatica.

Noi a lezione vedremo:

- Matlab/Octave (calcolo scientifico)
- HTML/CSS (pagine web)

Matlab/Octave

- Operazioni

`a*b, a+b, a/b, a-b`

- Funzioni

`sin(x), cos(x), ln(x), sqrt(x),
power(x,y), plot(x,y)`

`function ... end`

- Controllo di struttura

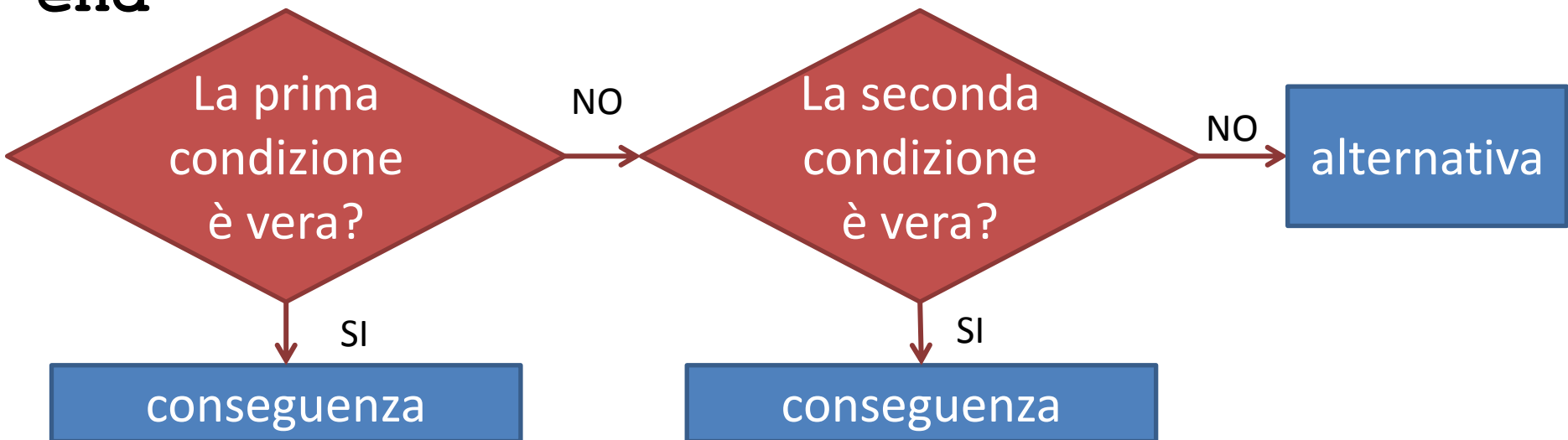
`if .. elseif .. end`

`while ... end`

`for ... end`

if .. elseif .. else.. end

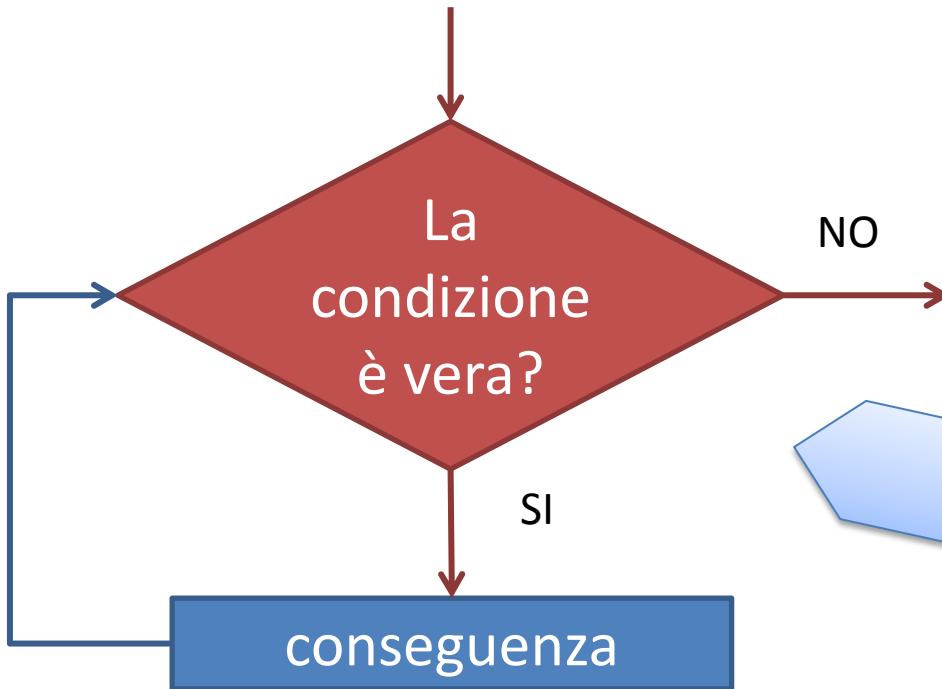
```
if (condizione booleana)
    (conseguenza)
elseif (condizione booleana)
    (conseguenza)
else
    (alternativa)
end
```



while .. end

```
while (condizione booleana)  
    conseguenza;  
end
```

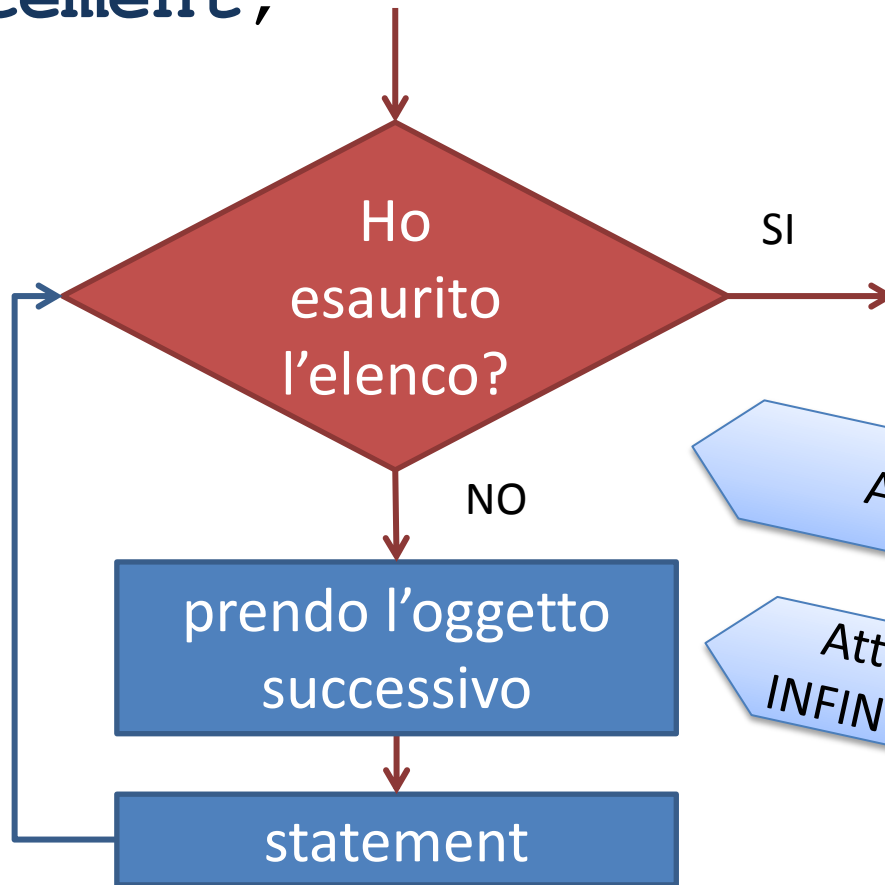
STATEMENT (o DICHIARAZIONE)



ALGORITMO RICORSIVO

for .. end

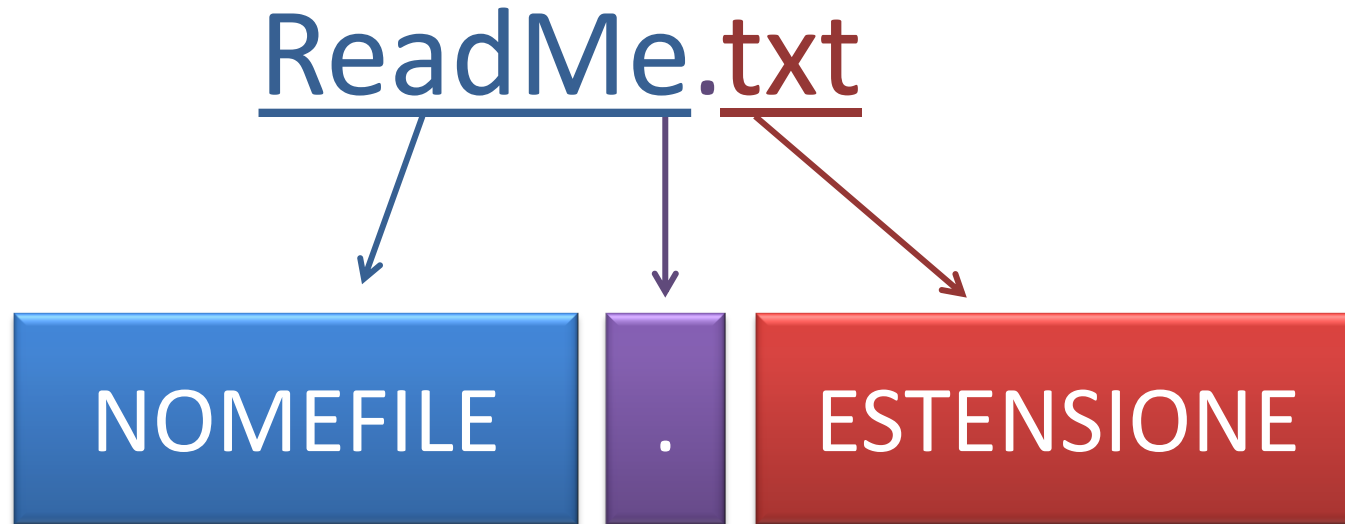
```
for OGGETTO_IN_UN_ELENCO  
  statement;  
end
```



ALGORITMO RICORSIVO

Attenzione a non creare LOOP
INFINITI (fanno surriscaldare il PC)

Identificazione dei FILES



di fantasia, ma
meglio se
rappresentativo
del contenuto

mi dice con che, o per
quale, applicazione è stato
creato il file
(tipicamente 3 o 4 lettere)

Esempio di estensioni

- *.doc *.docx MS Word (*.odt Ooffice Write)
- *.xls *.xlsx MS Excel (*.odf Ooffice Calc)
- *.ppt *.pptx MS Power Point (*.odp Ooffice Impress)
- *.txt testo non formattato
- *.htm *.html pagine web
- *.cpp files C++
- *.png *.jpg *.jpeg *.gif immagini
- *.mp3 *.wav audio
- *.mp4 *.avi *.dvx *.divx *.mkv *.vob *.mpg *.mpeg video
- *.pdb *.xyz coordinate molecolari

Formato file *xyz

numero di atomi

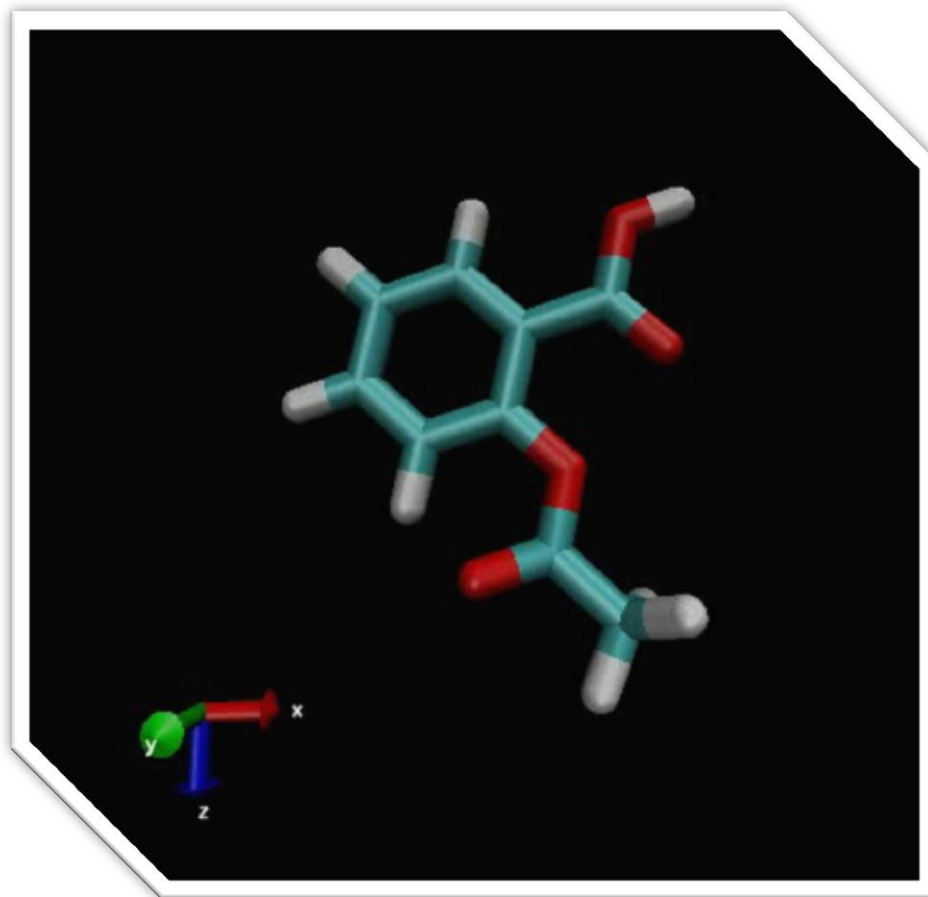
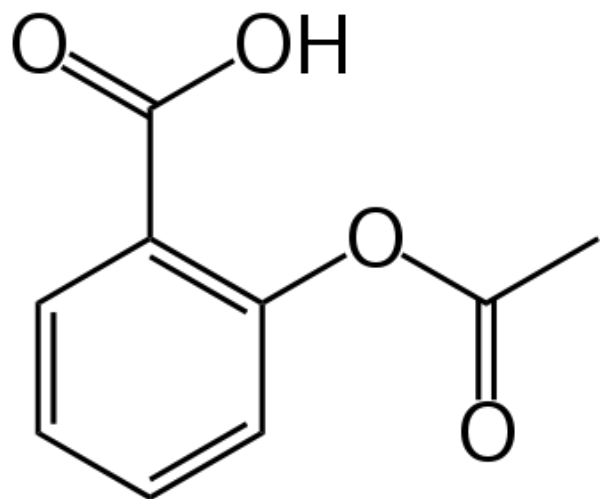
descrizione

```
5  
methane molecule (in ångströms)  
C 0.000000 0.000000 0.000000  
H 0.000000 0.000000 1.089000  
H 1.026719 0.000000 -0.363000  
H -0.513360 -0.889165 -0.363000  
H -0.513360 0.889165 -0.363000
```

tipo di atomi

coordinate x,y,z

Rappresentazione Molecole



2D: «Molecule Editor»

- ChemDraw (a pagamento!) – ISIS Draw

- PubChem online molecule editor:

<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/edit2/index.html>

The screenshot shows the PubChem online molecule editor interface. At the top, there is a toolbar with buttons for 'New', 'Undo', 'Copy', 'Paste', 'Delete', and 'Query', along with various drawing tools. Below the toolbar is a periodic table of elements. At the bottom, there are buttons for 'Export' (GIF Image), 'Hydrogen' (Keep AsIs), and 'Import' (Sfoggia... CHEMBL25.mol).

PubChem online molecule editor

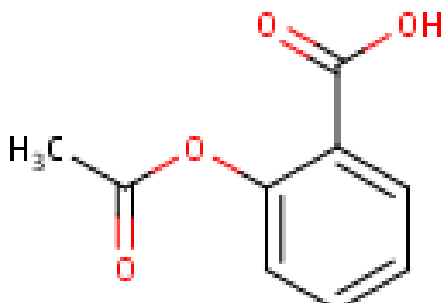
The screenshot shows the PubChem online molecule editor interface. At the top, there are dropdown menus for 'Broadband' and 'SMILES'. Below these are several buttons: 'New', 'Undo', 'Clear', 'Style', 'Delete', 'Query', and various drawing tools. A green box highlights the drawing tools section, which includes a toolbar with icons for drawing lines, polygons, and rings, and a periodic table of elements. Below the periodic table, there are buttons for 'Export', 'GIF Image', and 'Done'. A blue box highlights the 'Import' button and the file name 'CHEMBL25.mol'. A green box highlights the 'Export' button and the 'GIF Image' dropdown menu. The 'Hydrogen' button and 'Keep AsIs' dropdown are also visible.

- Permette di disegnare strutture molecolari
- Permette di esportare i file come immagine (*png o *gif, *svg, *pdf, ..)
- Permette di importare file *.mol (scaricati da database come <http://www.drugbank.ca> oppure <https://www.ebi.ac.uk/chembl/>)

Dove trovare i *.mol

- <http://www.drugbank.ca>

Structure



MOL SDF PDB SMILES InChI View Structure

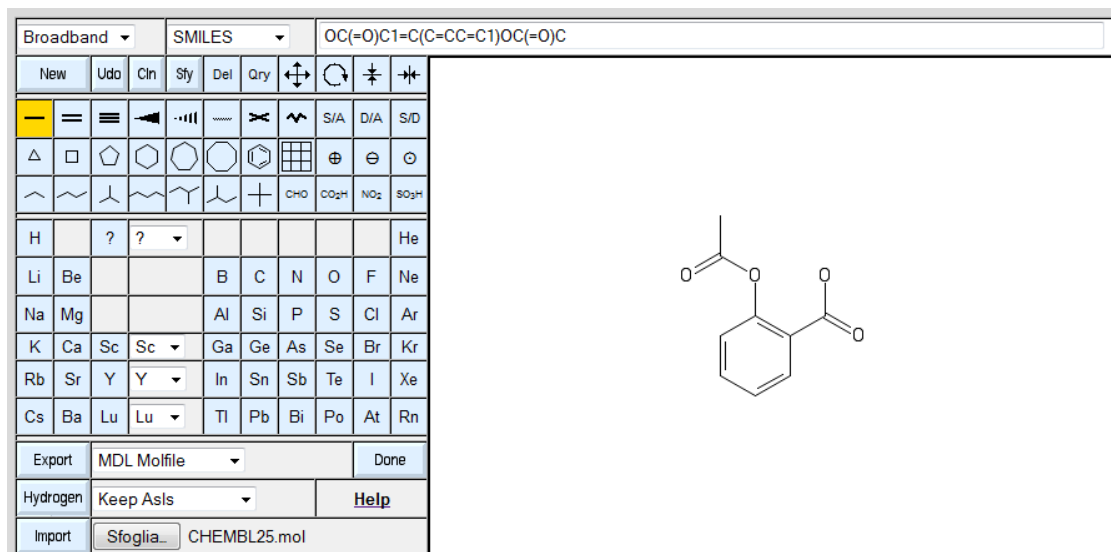
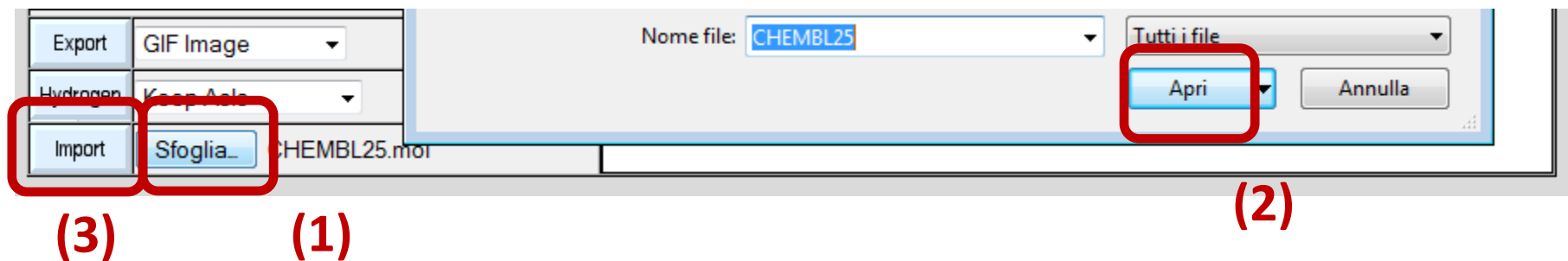
- <https://www.ebi.ac.uk/chembl/>

Compound Representations

Molfile	Download MolFile
Canonical SMILES	<chem>CC(=O)Oc1ccccc1C(=O)O</chem>
Standard InChI	InChI=1S/C9H8O4/c1-6(10)13-8-5-3-2-4-7(8)9(11)12/h2-5H,1H3,(... Download InChI
Standard InChI Key	BSYNRYMUTXBXSQ-UHFFFAOYSA-N

Importare file *.mol

- Per importare i file scaricati:



Per esportare file immagine

(2)

Export PNG Image

Apertura di sketcher.png

È stato scelto di aprire:

sketcher.png
tipo: XML Document (881 byte)
da: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>

Che cosa deve fare Firefox con questo file?

Aprirlo con Visualizzatore foto di Windows (predefinita)

Salva file

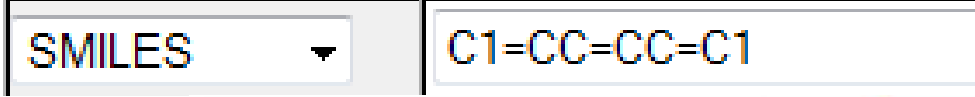


Da ora in avanti esegui questa azione per tutti i file di questo tipo.

OK Annulla

(3)

(1) Selezionare il tipo di file

SMILES

- PUBChem: 
 - www.drugbank.ca 
 - ChEMBL 
- Simplified Molecular Input Line Entry Specification (SMILES):
include la connettività ma non le coordinate, esempio:

Nome	Formula	SMILES String
Methane	CH ₄	C
Ethanol	C ₂ H ₆ O	CCO
Benzene	C ₆ H ₆	C1=CC=CC=C1 or c1ccccc1
Ethylene	C ₂ H ₄	C=C

Formato file *xyz

numero di atomi

descrizione

```
5  
methane molecule (in ångströms)  
C 0.000000 0.000000 0.000000  
H 0.000000 0.000000 1.089000  
H 1.026719 0.000000 -0.363000  
H -0.513360 -0.889165 -0.363000  
H -0.513360 0.889165 -0.363000
```

tipo di atomi

coordinate x,y,z

- Su questa struttura di dati si basano tutte i tipi di file più evoluti

Formato file *.pdb

```
HEADER      EXTRACELLULAR MATRIX                22-JAN-98   1A3I
TITLE      X-RAY CRYSTALLOGRAPHIC DETERMINATION OF A COLLAGEN-LIKE
TITLE      2 PEPTIDE WITH THE REPEATING SEQUENCE (PRO-PRO-GLY)
...
EXPDTA     X-RAY DIFFRACTION
AUTHOR     R.Z.KRAMER, L.VITAGLIANO, J.BELLA, R.BERISIO, L.MAZZARELLA,
AUTHOR     2 B.BRODSKY, A.ZAGARI, H.M.BERMAN
...
REMARK 350 BIOMOLECULE: 1
REMARK 350 APPLY THE FOLLOWING TO CHAINS: A, B, C
REMARK 350   BIOMT1   1  1.000000  0.000000  0.000000          0.00000
REMARK 350   BIOMT2   1  0.000000  1.000000  0.000000          0.00000
...
SEQRES     1 A       9  PRO PRO GLY PRO PRO GLY PRO PRO GLY
SEQRES     1 B       6  PRO PRO GLY PRO PRO GLY
SEQRES     1 C       6  PRO PRO GLY PRO PRO GLY
...
ATOM       1  N      PRO A   1          8.316  21.206  21.530  1.00 17.44      N
ATOM       2  CA     PRO A   1          7.608  20.729  20.336  1.00 17.44      C
ATOM       3  C      PRO A   1          8.487  20.707  19.092  1.00 17.44      C
ATOM       4  O      PRO A   1          9.466  21.457  19.005  1.00 17.44      O
ATOM       5  CB     PRO A   1          6.460  21.723  20.211  1.00 22.26      C
...
HETATM    130  C      ACY     401         3.682  22.541  11.236  1.00 21.19      C
HETATM    131  O      ACY     401         2.807  23.097  10.553  1.00 21.19      O
HETATM    132  OXT   ACY     401         4.306  23.101  12.291  1.00 21.19      O
...
```

Coordinate degli atomi nel file *.pdb

ATOM	1	N	PRO	A	1	8.316	21.206	21.530	1.00	17.44	N
ATOM	2	CA	PRO	A	1	7.608	20.729	20.336	1.00	17.44	C
ATOM	3	C	PRO	A	1	8.487	20.707	19.092	1.00	17.44	C
ATOM	4	O	PRO	A	1	9.466	21.457	19.005	1.00	17.44	O
ATOM	5	CB	PRO	A	1	6.460	21.723	20.211	1.00	22.26	C

tipo di atomi

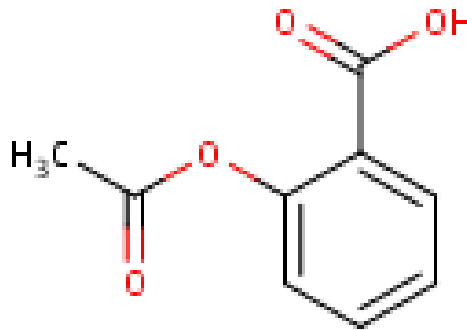
coordinate x,y,x

- **Numero progressivo,**
- **Tipo di atomo,**
- **Aminoacido a cui appartiene,**
- **Catena a cui appartiene,**
- **Numero progressivo dell'aminoacido**

Dove trovare i *pdb

- <http://www.drugbank.ca>

Structure



MOL

SDF

PDB

SMILES

InChI

View Structure

- PROTEIN DATA BANK <http://www.rcsb.org>

Search

Advanced

Browse

Everything


Author

Macromolecule

Sequence

Ligand



 aspirin










[Search History](#) (1), [Previous Results](#) (27)

1OXR



Aspirin induces its Anti-inflammatory effects through its specific binding to Phospholipase A2: Crystal structure of the complex formed between Phospholipase A2 and Aspirin at 1.9A resolution

Authors: Singh, R.K. , Ethayathulla, A.S. , Jabeen, T. , Sharma, S. , Kaur, P. , Srinivasan, A. , Singh, T.P. 

Release: 2004-04-27

Experiment: X-RAY DIFFRACTION with **Residue Count** 119
resolution of 1.93 Å

Compound: 1 Polymer [[Display Full Polymer Details](#) | [Display for All Results](#)]
2 Ligands [[Display Full Ligand Details](#) | [Display for All Results](#)]

Citation: **Aspirin induces its anti-inflammatory effects through its specific binding to phospholipase A2: crystal structure of the complex formed between phospholipase A2 and aspirin at 1.9 angstroms resolution.**
(2005) J.Drug Target. **13**: 113-119 [[Display Full Abstract](#) | [Display for All Results](#)]

Search Hit: Title: **Aspirin** induces its Anti-inflammatory effects through its specific binding to Phospholipase A2: Crystal structure of the complex formed between Phospholipase A2 and **Aspirin** at 1.9A resolution

HTML

HyperText Markup Language

«è il linguaggio di markup solitamente usato per la formattazione e impaginazione di documenti ipertestuali disponibili nel World Wide Web sotto forma di pagine web»

«L'HTML è un *linguaggio di formattazione* che descrive le modalità di impaginazione o visualizzazione grafica del contenuto, testuale e non, di una pagina web attraverso *tag di formattazione.*»

(fonte: WIKIPEDIA)

Documento HTML

`<!DOCTYPE html PUBLIC "-//W3C//DTD XHTML 1.0>`

DTD

`<html>`

`<head>`

Header

(informazioni di servizio)

`</head>`

`<body>`

Body

(contenuti visualizzati dal browser)

`</body>`

`</html>`

TAG

