OWE 3a: Python II







Geavanceerde concepten in Python en programmeren voor bio-informatica toepassingen



Opzet OWE 3a

	Onderwerp	Theorie	Opgaven
Les			
1	Review Python IPseudocodeFlowchartsDocumenteren en Testen	H18 SowP*	Afvinkopdracht 1
2	 Graphs Strings	MatPlotLib tutorial H9 More about Strings	Afvinkopdracht 2
3	Datastructuren:DictionariesSets	H10 Dictionaries and Sets	Afvinkopdracht 3
4	 Text and Language Processing Regular Expressions 	H7 DiP**	Afvinkopdracht 4
5	Object-Oriented Programming	H11 Classes and Object-Oriented Programming H12 Inheritance	Afvinkopdracht 5
6	Recursion	H13 Recursion	Afvinkopdracht 6
7	GUI Programming	H14 GUI Programming	Voorbeeld thematoets

Agenda

- Strings
- Regular Expressions





Waarom Strings?

- In de bio-informatica maken we erg veel gebruik van (tekst)zoekopdrachten
- Deze zoekopdrachten zijn gericht op teksten in wetenschappelijke artikelen
- Of zoekopdrachten op patronen in DNA/RNA en eiwitten





Textmining

- Er is een heel vakgebied wat zich bezig houdt met zoekopdrachten in tekst
- Dit vakgebied textmining onderzoekt bijvoorbeeld of het mogelijk is nieuwe verbanden te vinden door teksten te analyseren



Agenda

- Strings
- Regular Expressions





Strings

- Strings hebben we al veel gebruikt
- Onder andere String manipulatie met de slicing methode:
- "Hello World!"[2:4]



Strings

- Strings hebben zelf methodes, functies die we met de puntnotatie kunnen aanroepen:
- "Hello World!".upper()



String functies

- str.find(substr)
 - Zoeken naar een substring
- str.replace(old, new)
 - Vervanging van een substring
- str.split(delim)
 - Splitsen op basis van een teken
- str.join(seq)
 - Plakken van strings
- str.strip()
 - Verwijderen van spaties





String functies

- str.rstrip()
 - Verwijderen van spaties rechts
- str.upper()
 - Omzetten naar hoofdletters
- str.isupper()
 - Toetsen of een string uit hoofdletters bestaat
- str.isdigit()
 - Toetsen of het cijfers zijn





Samenvatting

- Strings zijn geschikt om korte teksten in op te slaan
- Strings hebben zelf methodes om met Strings te werken





Waarom programmeren?

- http://tedxtalks.ted.com/video/You-Should-Learn-to-Program-Chr
- http://www.tedxsmu.org/talks/christiangenco-you-should-learn-to-programtedxsmu-salon-2012



Agenda

- Strings
- Regular Expressions
 - Wat zijn regular expressions?
 - Regels voor regular expressions
 - Toepassingen





Regular Expressions

- Het zoeken van substrings in strings is mogelijk
- Bijvoorbeeld
- "Hello World!".find("o")
- Maar wat als je zowel Hello World! als Hallo Wereld! zoekt?





Regular Expressions

- Regular Expressions geven je de mogelijkheid om complexe tekstpatronen te zoeken
- In de bio-informatica zijn we heel erg vaak op zoek naar complexe tekstpatronen



This image is a poll's place holder.

Enter slide show mode (F5) to view your live poll.

You can resize this image to resize where your poll will load in slide show mode.

Make sure you've installed the PollEv Presenter app (pollev.com/app) and are connected to the internet!

If you need to duplicate this poll make sure to copy/paste the entire slide (not just the place holder image).



Hello World!

- Om te zoeken op Hello World! En Hallo Wereld kunnen we een regular expression gebruiken
- H[ea]Ilo W[oe]re?Id





Online Regular Expressions

```
/ H[ea]llo W[eo]re?ld!

Your test string

Dag Wereld!
Hello World!
Hi World!
Hallo Wereld!
```





Regular expressions

- Vaak wordt "regular expression" afgekort tot "regexp", "regex", of "re"
- Regular Expressions vind je terug in databases en op bijvoorbeeld Linux systemen





Basis

 De basis van een regular expression is het interpreteren van speciale karakters





Waar?

- Regular expressions zijn te gebruiken in iedere programmeertaal
 - Python
 - Java
 - SQL
- Op ieder system
 - Linux (UNIX)
 - Windows
 - Mac
- In heel veel applicaties





Speciale karakters (1/2)

Karakters in regular expressions

Karakter	Betekenis
. (punt)	Precies een willekeurig teken
* (asterisk)	0, 1 of meer van het voorgaande teken
+ (plus)	1 of meer van het voorgaande teken
? (vraagteken)	Exact 0 of 1 van het voorgaande teken
^ (dakje)	Geeft aan dat het er mee moet beginnen
\$ (dollar)	Geeft aan dat het er mee moet eindigen





Speciale karakters (2/2)

Karakters in regular expressions

Karakter	Betekenis
[]	Aantal tekens Een ^ aan het begin van [^] geeft de inverse
()	Een groep
\	Escape
{m,n}	Minimaal m en maximaal n van het voorgaande teken





Toepassingen van Regular Expressions

- Zoeken van een postcode in een tekst
- Zoeken van een voorkomen op Linux
- Vervangen van tekst in Notepad++





Nederlands postcode







Beschrijvingen doorzoeken





Voorbeelden

Regular Expression	Voorbeeld hits	Geen hit op
H[ea]llo	Hello en Hallo	Hollo
TATA[AT][AT]	TATAAT, TATATT, TATAAA	TATAGC
huis (vier puntjes)	Woonhuis, koophuis, leeghuis	Ziekenhuis
.*huis	Ziekenhuis	Ziekenhuisje
.*huis.*	huismus, Verhuis-service	Huizen
.+huis	Thuis	huis





Voorbeelden

Regular Expression	Voorbeeld hits	Geen hit op
(ATG GTA)	ATG, GTA	ATA
TATA[^AT]	TATAC, TATAG	TATAA
A{2,4}G	AAAAG, AAG	AG
.{2,4}G	CCGCC	AGAA





Voorbeelden

Regular Expression	Voorbeeld hits	Geen hit op
\?	?	A
\\	\	A
[0-9]{2,3}	218, 29, 42, 263	1, A
[a-z]*	hallo	Hallo



Regular Expressions in Python









Overzicht re functies

Functie	Functionaliteit
search	Zoeken naar een overeenkomst
replace	Vervangen van een
split	Splitsen op reguliere expressie





Search

- re.search(pattern, string, flags=0)
 - Pattern is het te zoeken patroon: de reguliere expressie
 - String is de tekst waarin je het patroon wilt vinden
 - Flags heeft een default 0, geef je meestal dus niet mee. Hiermee kun je opties meegeven.





Voorbeeld van search

- import re
- line = "AGGGGCCACATTAATGATGGA GTATAGGAGTA"
- matchObj = re.search(r'.*ATG\.*', line)
- print (matchObj)

- Hiermee zien we of er een hit is of niet
 - Bij geen hit → None
 - Bij wel een hit object referentie
 <_sre.SRE_Match object at 0xb7408db0>





Voorbeeld

```
import re
     lines = ["Bio-informatica studenten van"
     , "de Hogeschool van Arnhem en Nijmegen"
     , "blijken zeer gewilde stagiaires te zijn"
     , "Dat komt onder andere doordat zij zeer"
     , "bedreven zijn in het schrijven van"
     , "Regular Expressions" |
     for line in lines:
         if re.search('[A-H]+', line):
             print (line)
                    >>>
                    Bio-informatica studenten van
                    de Hogeschool van Arnhem en Nijmegen
HAN
                    Dat komt onder andere doordat zij zeer
                    Regular Expressions
```

Replace

re.sub(pattern, repl, string, max=0)



Splitting

 re.split(pattern, string, maxsplit=0,flags=0)

```
import re
sequence = "ATAGGAGATGAGGAGCCAGTAGAGTATGAG" #Sequentie
pattern = '([ATGC]{3})' #Regular expression
print (re.split (pattern, sequence))
```



Groepen

- Met ronde haken geef je aan dat er een groep is die een match heeft
- Deze groepen kun je er uit halen door match.group() uit te vragen

```
def reverse_columns(line):
    match = re.search(r'^\s*(\d+)\s+(\d+)\s*$', line)
    if not match:
        return line
    return match.group(2) + ' ' + match.group(1)
```



Regular Expressions in de biologische sequenties







Splitsen in codons

- import re
- sequence = "AGAGATGAGGAGCCAGT"*100
- pattern = "([ATGC]{3})"
- print (re.split (pattern, sequence))





Sequenties voorspellen structuur en functie van genen

- Een van de bekendste genen is p53
- Dit gen kent een geconserveerde regio: MCNSSCMGGMNRR
- Als deze substring in je eiwit voorkomt is het aannemelijk dat het p53 is of een verwant eiwit





Zoeken van een string

- site in sequence weten we of de substring erin voorkomt
- sequence.find(site) retourneert de positie van de substring
- sequence.count(site) retourneert het aantal voorkomens van de substring



Zit p53 in de sequentie?

```
>>> p53 = "MCNSSCMGGMNRR"

>>> protein = "SEFTTVLYNFMCNSSCMGGMNRRPILTIIS"

>>> protein.find(p53)

10

>>> protein[10:10+len(p53)]
'MCNSSCMGGMNRR'

>>>
`
```





P53 heeft echter varianten

- Na verder onderzoek ontdek je dat p53 in meerder varianten voorkomt
- Hoe beschrijf je dit patroon?

MCNSSC**M**GGMNRR

of

MCNSSC**V**GGMNRR





PROSITE

- PROSITE is een database met eiwit patronen
- http://au.expasy.org/prosite/
- P53:
 - http://prosite.expasy.org/PDOC00301
- Signaturen:

http://prosite.expasy.org/cgibin/prosite/prosite-searchful?SEARCH=signature





Patterns op expasy

http://prosite.expasy.org/PDOC00032

Antennapedia: pattern





Antennapedia

 Wild type Drosophilla melanogaster links met antennapedia rechts (Bron: http://en.wikipedia.org/wiki/Drosophila_melanogaster 14-feb-2014)









Zoek ANTENNAPEDIA

Zie je het patroon [LIVMFE][FY]PWM[KRQTA]?

```
MDPDCFAMSS YQFVNSLASC YPQQMNPQQN HPGAGNSSAG GSGGGAGGSG GVVPSGGTNG GQGSAGAATP GANDYFPAAA AYTPNLYPNT PQPTTPIRRL ADREIRIWWT TRSCSRSDCS CSSSSNSNSS NMPMQRQSCC QQQQQLAQQQ HPQQQQQQQQ ANISCKYAND PVTPGGSGGG GVSGSNNNNN SANSNNNNSQ SLASPQDLST RDISPKLSPS SVVESVARSL NKGVLGGSLA AAAAAAGLNN NHSGSGVSGG PGNVNVPMHS PGGGDSDSES DSGNEAGSSQ NSGNGKKNPP QIYPWMKRVH LGTSTVNANG ETKRQRTSYT RYQTLELEKE FHFNRYLTRR RRIEIAHALC LTERQIKIWF QNRRMKWKKE HKMASMNIVP YHMGPYGHPY HQFDIHPSQF AHLSA
```

Daarom hebben we computers!



Regular Expressions in het kort









Regular Expressions



Computer (20) Geschiedenis en politiek (1) TAAL Engelse boeken (20)

PRIJS

Tot € 10 (2)

Tot € 20 (6)

Tot € 30 (13)

➤ Meer

Duitse boeken (2)

HAN



Engels - Paperback | 2006

This thorough tutorial teaches you the complete regular expression syntax. Detailed examples and descriptions of how regular... Meer



Regular Expressions

Regular Expressions

Computing, String (computer science), FormalLlanguage, Compiler-compiler, Specification (technical standard), Text Editor, Programming

http://www.bol.com/nl/s/boeken/zoekresultaten/Ntt/regular+expressions/N/8299/search/true/search/Type/qck/sc/books all/index.html? requestid=73778 2-maart-2013



Voorbeeld opgave

- Gegeven is '[LG].{4,5}[FYW]' als regular expression. Dit betreft een patroon dat voorkomt in een humaan proteïne. Op welke peptide zal dit patroon een hit leveren?
- a. LALALCY
- b. LFYFLAL
- c. LALALCG
- d. LFYYLAL





Voorbeeld opgave

- Gegeven is '[^L].{4,5}[FYW]' als regular expression. Dit betreft een patroon dat voorkomt in een humaan proteïne. Op welke peptide zal dit patroon een hit leveren?
- a. LLAALALCY
- b. LAFYFLALW
- c. LAALALCG
- d. LAFYYLAL





Voorbeeld opgave

- Gegeven is '(ACA|CAF).{4}[^C]{2}' als regular expression. Dit betreft een patroon dat voorkomt in een humaan proteïne. Op welke peptide zal dit patroon een hit leveren?
- a. CACAALALCY
- b. CAFYFLALWA
- c. CACACACCGC
- d. ACAFYYLALCA



Hoeveel zinnen?

```
import re
lines = ["Bio-informatica studenten van"
, "de Hogeschool van Arnhem en Nijmegen"
, "blijken zeer gewilde stagiaires te zijn"
, "Dat komt onder andere doordat zij zeer"
, "bedreven zijn in het schrijven van"
, "Regular Expressions"]
```

```
for line in lines:

if re.search('[x]+', line):

print (line)
```

Hoeveel zinnen?

```
import re
lines = ["Bio-informatica studenten van"
, "de Hogeschool van Arnhem en Nijmegen"
, "blijken zeer gewilde stagiaires te zijn"
, "Dat komt onder andere doordat zij zeer"
, "bedreven zijn in het schrijven van"
, "Regular Expressions"]
```

```
for line in lines:

if re.search('[C-H]+', line):

print (line)
```

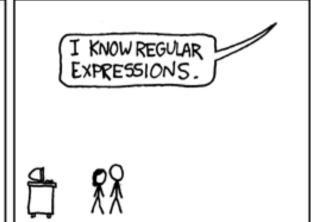
jmegen

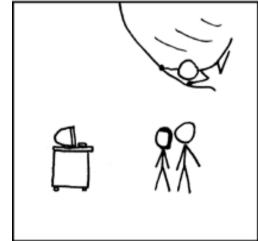
WHENEVER I LEARN A
NEW SKILL I CONCOCT
ELABORATE FANTASY
SCENARIOS WHERE IT
LETS ME SAVE THE DAY.

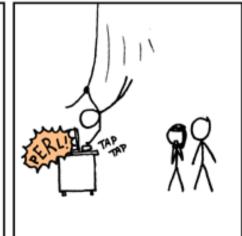


















Samengevat

- Regular Expressions zijn zeer krachtig
- Ze voorkomen dat je onnodig complexe programmeeropdrachten geeft
- Regular Expressions zijn in veel programma's te gebruiken en in vrijwel alle programmeertalen en databases





In deze uitgave is géén auteursrechtelijk beschermd werk opgenomen

HOGESCHOOL VAN ARNHEM EN NIJMEGEN

