Université Louis Pasteur

MAGISTERE DE CHIMIE-BIOLOGIE

Deuxième année

Examen d'informatique
25 mai 1990

Durée deux heures. Trois questions parmi **??**, **??**, **??** *et* **??** *sont optionnelles.*

1. Ecrire le sous-programme `lecture_atomes(Tnom,Tsym,Tcoo,n)` qui doit:
   - demander à l'utilisateur quel est le nom du fichier contenant les noms et symboles des atomes ainsi que leurs coordonnées.
   - ouvrir ce fichier,
   - lire, à raison d'un atome par ligne, les informations suivantes:
     - le nom de l'atome (max 20 caractères, par ex. res145_O3')
     - son symbole chimique (2 caractères, par ex; C, Na, Fe, etc.)
     - les 3 coordonnées tridimensionnelles (x,y,z)

     et les ranger dans des tableaux. On ne connait pas, à priori, le nombre `n` d'atomes du fichier, on supposera qu'il n'y en a jamais plus de 1000.
   - fermer le fichier.

   Ecrire *précisément* toutes les déclarations et instructions.

2. Ecrire un programme qui teste si toutes les distances interatomiques sont supérieures à un certain seuil `s` donné par l'utilisateur.

3. En supposant que la molécule est un acide nucléique et que les atomes sont stockés dans l'ordre des résidus, écrire un programme qui crée un fichier contenant les ordres de tracé obtenus en reliant les atomes de phosphore (symbole P). Les sous-programmes graphiques `newgraph, position, line` et `endgraph` sont disponibles.

4. Si les 20 caratères associés au nom de l'atome sont tels que les 6 premiers représentent le numéro du résidu (de "res001" à "res999"), écrire un programme qui ne dessine que la portion de la molécule définie par une zone contiguë dont les limites sont données par l'utilisateur du programme (programmer les questions-réponses nécessaires).

5. Soient `a,b,c` trois atomes (en fait 3 vecteurs `real a(3), b(3), c(3)`) de $\mathbb{R}^3$. Calculer l'angle de valence en `b`. Ecrire le sous-programme `real function valence(a,b,c)` en se servant des routines de la librairie ci-jointe.

6. On voudrait créer un nouveau fichier contenant la même molécule ayant subie une rotation de 30° autour de l'axe Oz. Expliquer ce qu'il convient de faire puis écrire le programme.

7. Que trouve-t-on dans la *Protein Data Bank*, comment y accède-t-on? Que contient la base de données *UWGCG*.

8. Qu'est ce qu'un logiciel de traitement de texte? En donner une définition qui ne soit pas qu'une suite d'exemples, ... il n'est pas nécessaire de parler de TEX.

   L'utilisateur doit transmettre des ordres de mise en page à la machine. Quelles sont les méthodes utilisées par les logiciels présents sur le marché? Donner les avantages et inconvénients de chacunes d'elles.