Université Louis Pasteur

MAGISTERE DE CHIMIE-BIOLOGIE

Deuxième année

Examen d'informatique
1 juin 1991

Durée deux heures

1. La fonction `real function diedre(a,b,c,d)` calcule l'angle dièdre en degrés formé par les quatre points de $\mathbb{R}^3$. Les arguments sont déclarés

   ```
   real a(3),b(3),c(3),d(3)
   ```

   Le sous-programme `lecturepdb(n,tcoo,tta,tres)` permet d'extraire les `n` coordonnées tridimensionnelles des n atomes (N, C_α, C, N, C_α, C, ...) de la chaîne principale d'une protéine de la *Protein Data Bank.*

   Le tableau `tcoo` est déclaré

   ```
   real tcoo(3,1000)
   ```

   (a) Que signifie le 3 dans la déclaration de `a`?

   (b) Que signifie le 3 dans la déclaration de `tcoo`?

   (c) Que signifie le 1000 dans la déclaration de `tcoo`?

   (d) Ecrire la fonction `real function Kiemediedre(tcoo,K)` qui rend la valeur de l'angle dièdre formé par les atomes `K, K+1, K+2, K+3` (on supposera $1 \leq \texttt{K} \leq \texttt{n} - 3$).

2. On suppose qu'un sous programme `omegas(n,tcoo,tomega)` calcule les $\texttt{n}/3 - 1$ angles ω des $\texttt{n}/3$ résidus.

(a) Que fait le sous-programme `pasplat(m,tomega)`?

(b) Que signifient les variables `z` et `p`. Comment faut-il les déclarer.

(c) Ecrire un sous-programme qui imprime le pourcentage d'angles ω nuls (en supposant qu'ils sont tous soit nuls soit égaux à 180°).

3. Maintenant `tcoo` contient **tous** les atomes d'une molécule (et non pas seulement la chaîne principale) et ce sans **aucun ordre** précis. Le tableau `tta` contient les symboles chimiques de tous les atomes de la molécule.

   (a) Quels calculs faut-il effectuer pour pouvoir dessiner sur un écran la molécule en la représentant par ses liaisons covalentes.

   (b) Estimer le temps nécessaire au calcul de l'image d'une molécule de 100 atomes, 1000 atomes, 10000 atomes. Ne pas tenir compte de l'affichage ni de la lecture du fichier.

4. Les ordinateurs `muscat` et `turing` sont connectés sur le réseau OSIRIS sous protocole DECNET. L'utilisateur `dupont` connecté sur le vax `muscat` veut copier le fichier `synthetase.seq` du répertoire `[tintin.bio]` situé sur le disque `turing$dua0:`. Il a aussi accès à la machine `turing` par le mot de passe "`coucou`".

   (a) Quelle est la commande DCL qui lui permet de copier ce fichier?

   (b) Comment peut-il obtenir la liste de tous les fichiers "`*.seq`" de `tintin`?

   (c) Comment peut-il transférer ces fichiers de `turing` vers `muscat` sans réseau.

   (d) Combien de temps faut-il au minimum pour copier par réseau l'ensemble de la *Protein Data Bank* (200 000 blocs de 512 octets)?

```
subroutine pasplat(m,tomega)

implicit none

integer m
real    tomega(333)
integer i
....... ...


do i=1,m
         z= -5.le.tomega(i).and.tomega(i).le.  5
         p=175.le.tomega(i).and.tomega(i).le.185
         if (.not.z.and.not.p) then
                  write(6,*)'en v''la un qu''est pas bon...'
                  write(6,*)'c''est le ',i
         end if
end do

return
end
```