

Úlohy - část 1

1. Vytvořte program který který od uživatele vyžádá souřadnice dvou 3-dimenzionálních vektorů a spočítá jejich vektorový součin. Výsledek vypíše na obrazovku. Pro reprezentaci vektorů použijte struktury.

1 bod

Úlohy - část 2

2. Upravte program z předchozího cvičení (úloha 2 ze cvičení 5) tak, aby využíval struktury. Struktura bude obsahovat PDB kód komplexu a dvě hodnoty energií. Pro načítání hodnot ze souboru použijte pole těchto struktur. Do výstupního souboru bude zapsán PDB kód a hodnoty energií (opět s obráceným pořadím řádků).

Program navíc rozdělte do následujících samostatných funkcí:

- ♦ funkce pro otevření vstupního souboru a načtení hodnot
- ♦ funkce pro otevření výstupního souboru a zápisu hodnot energií
- ♦ funkce `main()`

Řetězcové proměnné obsahující jména souborů definujte ve funkci `main()` jako lokální proměnné a předejte je příslušným funkcím jako argumenty.

Funkce pro čtení a zápis souboru budou vracet hodnotu typu `int`. V případě úspěchu vrátí 0 a při neúspěchu 1. Ve funkci `main()` pak bude testována návratová hodnota těchto funkcí a v případě, že vrátí 1, bude celý program ukončen a vrátí hodnotu 1.

2 body

Úlohy – část 3

3. Vytvořte program, který načte zjednodušený PDB soubor *crambin_simple.pdb* (nacházející se v adresáři */home/tootea/C2160/data*) do pole vhodných struktur. Tento soubor obsahuje informace o molekule proteinu *crambin*. Potom program zapíše data do jiného souboru tak, aby formát dat byl přibližně stejný jako v načítaném PDB souboru (nemusí být přesně stejně formátovaný). Použijte podobný přístup jako v úloze 2. **3 body**

ATOM	748	CG	TYR	44	11.895	12.742	14.274	C
------	-----	----	-----	----	--------	--------	--------	---

Každý řádek zjednodušeného PDB souboru se skládá z následujících položek:

1. Název záznamu – řetězec max. 6 znaků (zde **ATOM**)
2. Číslo atomu – celé kladné číslo (zde **748**)
3. Název atomu – řetězec max. 4 znaky (zde **CG**)
4. Zkratka názvu rezidua (tj. aminokyseliny) – řetězec max. 3 znaky (zde **TYR**)
5. Číslo rezidua – celé kladné číslo (zde **44**)
6. Kartézské souřadnice x, y a z udávající pozici atomu v prostoru v Angstromech – tři desetinná čísla (zde **11.895 12.742 14.274**)
7. Zkratka jména prvku – řetězec max. 2 znaky (zde uhlík **C**)

Úlohy - část 4

4. Do programu z úlohy 3 přidejte funkci, která analyzuje načtené pole struktur a vypíše celkový počet atomů a počet atomů jednotlivých prvků (H, C, N, O, S). **nepovinná, 2 body**