

Úlohy - část 1

1. Rozšiřte program pro načítání PDB souboru (cv. 8, úloha 1) tak, že do něj implementujete funkci, která bude obsahovat pole residuí, tj. pole struktur RESIDUE (velikost pole zvolte 2000). Struktura RESIDUE bude obsahovat dvě celočíselné proměnné (např. *first_atom* a *last_atom*). Těmto proměnným přiřadte index prvního a posledního atomu residua. Do struktury RESIDUE dále přidejte proměnné obsahující číslo residua (jak je uvedeno v PDB souboru) a název residua. Na konci funkce vypíše seznam residuí, pro každé residuum vypíše číslo a název residua a index prvního a posledního atomu residua (Začátek by měl vypadat jako ve žlutém rámečku níže). Pro testování použijte soubor *crambin_noal.pdb* nacházející se v adresáři */home/tootea/C2160/data/* **3 body**

```
Residuum: 1 THR, atomy: 0 - 14
Residuum: 2 THR, atomy: 15 - 27
Residuum: 3 CYS, atomy: 28 - 37
Residuum: 4 CYS, atomy: 38 - 47
Residuum: 5 PRO, atomy: 48 - 61
. . . .
```

Úlohy - část 2

2. Do programu z předchozí úlohy implementujte funkci která spočítá pro každé residuum geometrický střed jeho atomů a vypíše tuto hodnotu na obrazovku (společně se jménem a číslem residua). Funkci dále modifikujte tak, aby se pro výpočet použily pouze nevodíkové atomy. Začátek výpisu (pro nevodíkové atomy) bude vypadat tak, jak je uvedeno ve žlutém rámečku.

2 body

```
Residuum 1 THR, stred: 17.14, 12.94, 4.90
Residuum 2 THR, stred: 13.78, 10.69, 5.66
Residuum 3 CYS, stred: 13.46, 11.24, 9.80
Residuum 4 CYS, stred: 10.83, 8.46, 11.34
Residuum 5 PRO, stred: 8.85, 8.91, 14.73
```

3. Do programu z předchozí úlohy implementujte funkci, která vyhledá pro každé residuum atomy, které tvoří peptidovou páteř proteinu (jmenují se " N ", " CA ", " C ", " O ", je třeba respektovat mezery v názvech). Pro každé residuum vypíše čísla těchto atomů (tak, jak jsou uvedena v PDB souboru) společně se jménem a číslem residua. **2 body**

Úlohy - část 3

4. Do předchozího programu přidejte funkci, která vyhledá všechny dvojice residuů, jejichž vzdálenost C-alpha (tj. CA) atomů je větší než 5 a zároveň menší než 8 Å.
nepovinná, 3 body
5. Do předchozího programu přidejte funkci, která načte konfigurační soubor uvedený níže (ve žlutém rámečku). Jméno konfiguračního souboru bude specifikováno na příkazovém řádku. Řádky v souboru mohou být uvedeny v libovolném pořadí. Program nejdříve načte konfigurační soubor a pak načte PDB soubor, přičemž jako jméno PDB souboru se použije jméno uvedené na řádku INPUT_FILE. Ze souboru se načte také seznam residuů uvedený v RESIDUE_LIST (čísla odpovídají hodnotám uvedeným v PDB souboru!). Do výstupního PDB souboru se zapíše pouze ta residua, která jsou uvedena v tomto seznamu.
nepovinná, 2 body

```
INPUT_FILE=/home/username/data/filename.pdb
WINDOW_SIZE = 300, 500
DISTANCE = 3.5
RESIDUE_LIST=3,4,7 ,15,16, 17,30, 34,40,45
```