

H1 Task2 - 文件处理与git使用

H2 文件处理

学习利用python进行文本文件的读取与写入。

掌握四种基础的文件模式("w", "a", "b", "r")。

可以参考 <https://www.liaoxuefeng.com/wiki/1016959663602400/1017607179232640> 等优质博客和内容。

H2 git学习与使用

学习使用版本管理工具git并利用其管理你的代码。

掌握`git init`、`git add`、`git status`、`git commit -m`等git命令。

学习创建远程仓库并关联本地和远程仓库，push你的本地代码到远程仓库。

参考: <https://www.liaoxuefeng.com/wiki/896043488029600>

备注: git在windows上的安装,除了可以使用博客里推荐的安装方式之外,还可以安装cmdr (<https://cmdr.net/>) 等包含了git的工具。

H2 可选: 了解代码格式规范

了解PEP8或者black等代码格式规范,如果可行,可以尝试安装相关的代码格式化插件规范和整理你的代码。

可参考相关的官方文档或 <https://muzing.top/posts/a29e4743/>

H2 检查

H3 代码功能要求

随Task2说明一同分发的还有一个rmsd.xvg文件,其中包含两列数据,一列是时间,一列是rmsd数据。

要求自行编写代码,读取rmsd.xvg文件中的这两列数据;其中时间数据保存到列表变量`time_list`中,rmsd数据保存到列表变量`rmsd_list`中;还需要解析文件中的xaxis和yaxis(也即`Time (ps)`和`RMSD (nm)`);最后将所有数据存到csv文件中,要求第一行是xaxis和yaxis,后面每行是数据;具体保存的格式如下所示:

```
1 Time (ps), RMSD (nm)
2 0          0.0004986
3 10         0.0620434
4 .....
```

你编写的代码，需要包含必要的注释！

H3 代码提交方式

要求用git初始化你的本地仓库，然后在github（或者gitee、gitlab）上建立你的远程仓库，并关联本地仓库和远程仓库。

然后在本地仓库里编写和测试你的代码，在完成要求的功能之后，将你的本地仓库push到远程。

最终提交的，是你的远程仓库的链接。我拿着链接去你的仓库里看代码就可以了。