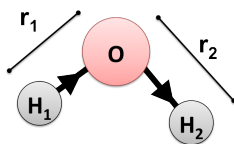


Licence Sciences et Technologies – Mention Chimie – L3
Algorithmique et Programmation – Examen de Travaux Pratiques

Durée : 1 heure.

Remarques : Il est recommandé de respecter les notations imposées dans le texte. Toutes les fonctions devront comporter des paramètres. Aucun document écrit n'est autorisé.

Mode de vibration de la molécule d'eau : La simulation par dynamique moléculaire d'une molécule d'eau dans le vide peut permettre de visualiser les vibrations des liaisons O-H au cours du temps. On choisit de s'intéresser au mode normal de stretching antisymétrique :



En simulant l'évolution des positions des atomes au cours du temps, ce comportement peut être observé par comparaison des longueurs des liaisons O-H₁ et O-H₂, notées respectivement r_1 et r_2 . Les coordonnées de la molécule à un temps t_i sont appelées une configuration.

On souhaite réaliser un programme en langage C permettant de calculer ces longueurs et de les stocker dans un fichier nommé `DISTANCES.txt`. Ce calcul se fait à partir des positions des atomes au cours du temps disponibles dans le fichier d'entrée `POSITIONS.txt` sous le format suivant :

POSITIONS.txt			
x	y	z	
-5.5799E+00	2.5909E+01	2.8163E+01	Position de l'Atome d'Oxygène
-5.4389E+00	2.6097E+01	2.7191E+01	Position de l'Atome d'Hydrogène 1
-5.1509E+00	2.5028E+01	2.8381E+01	Position de l'Atome d'Hydrogène 2
-5.6056E+00	2.5843E+01	2.8104E+01	Position de l'Atome d'Oxygène
-4.7604E+00	2.5799E+01	2.7565E+01	Position de l'Atome d'Hydrogène 1
-5.4209E+00	2.6378E+01	2.8929E+01	Position de l'Atome d'Hydrogène 2
.	.	.	
.	.	.	
.	.	.	
-5.6065E+00	2.5900E+01	2.8116E+01	Position de l'Atome d'Oxygène
-4.7994E+00	2.6096E+01	2.7556E+01	Position de l'Atome d'Hydrogène 1
-5.3687E+00	2.5171E+01	2.8762E+01	Position de l'Atome d'Hydrogène 2

Question 1 : Écrire une fonction `dist (x1, y1, z1, x2, y2, z2)` qui calcule la distance entre deux atomes 1 et 2 dont les coordonnées sont données en paramètre. L'expression d'une distance entre deux points dans un espace à trois dimensions est appelée ci-dessous :

$$r = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2} \quad (1)$$

Question 2 : Écrire une fonction `enregistrement (T1, T2, N)` qui écrit dans le fichier `DISTANCES.txt` les éléments de type float de deux tableaux T1 et T2 de même dimension N. L'écriture se fera sur deux colonnes séparées par un espace.

Question 3 : Écriture du programme principal :

- Ce programme utilisera les variables `xO, yO, zO, xH1, yH1, zH1, xH2, yH2` et `zH2` pour identifier les coordonnées des atomes.
- Les coordonnées des atomes seront lues dans le fichier `POSITIONS.txt` contenant 100 configurations.
- Pour chaque configuration les positions des 3 atomes (O, H1, H2) sont lues et les distances r_1 et r_2 calculées sont stockées dans deux tableaux R1 et R2.
- On écrit ensuite les distances calculées dans le fichier `DISTANCES.txt`

Vous pouvez vérifier votre programme en analysant les résultats contenus dans le fichier écrit par votre programme. Lancez `gnuplot` puis exécutez la commande suivante :

```
load 'script_h2o.gp'
```