

課題4：蛋白質の構造解析

実験ノート

1. 本日より（宿題の説明）

プログラム prot2 を使って、比較的長い HP 列に対し、高い HH コンタクトを持つ埋め込みを求める。この際、前回の演習で得られたパラメータ設定に関する知見を利用するとよいだろう。

2. プログラムの説明

概要

プログラム prot2 は、前回の prot1 と本質的に同じである。ただ、長い HP 列を、いくつかの部分列に切って探索できるようになっている。

たとえば、長さ 100 の HP 列に対し（前回と同様、ファイル hp.dat に入れておく）、最初から 30 個分の列の最適配置を決め、その先、さらに 30 個、そして残り 40 個、といった具合に配置を伸ばしていくことができる。

その際、目標点の座標を設定した場合には、その目標点へ到達するように、そうでない場合には、ただ単に最も HH コンタクトの高くなるように配置される（人が、目標点をうまくガイドすることにより、効率良く探索できる可能性がある。）

なお、各探索ごとに探索パラメータ（search parameter）を変更することもできる。

3. プログラムの使い方

● 準備

1. ディレクトリ kadai4 へ移動。
2. ~owatanab/pub/kadai4 の下から prot2 をコピー。

● 実行方法

まず、適当な HP 列を入れたファイル hp.dat を作る。あとは、単に

```
[自分のプロンプト] ./prot2
```

とやればパラメータ等を聞いてくるので、それを入力すれば探索を開始する。