

課題名 (タイトル) :

電子顕微鏡による単粒子解析

利用者氏名 : ○竹本 千重、横山 武司、加茂 友美、長内 隆

所属 : ライフサイエンス技術基盤研究センター 構造・合成生物学部門
タンパク質機能・構造研究チーム

<p>1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係</p> <p>生命科学の分野において、生体高分子の複合体の構造情報を得ることは、それらの生理的機能や制御機構を知る上で重要であり、電子顕微鏡解析は、そのための主要な手法のひとつである。近年、新たな検出器の開発により、著しく感度と分解能が向上すると共に、試料調製からデータ収集において、飛躍的なハイスループット化が実現されつつある。次は、いかに迅速にデータ解析を行って、精度の高い構造を得るかが重要な課題となってきた。当グループにおいても、クライオ電子顕微鏡を使って測定を始めている。得られたデータをローカル PC (8core, 2cpu, 2台)で計算させると、10分の1のテストスケール計算でさえ60時間かかってしまい、計算環境の改善は必須要件となっている。今後、高分解能構造解析が迅速に行える環境を実現するために、まずは、RICCの計算ノードに必要なソフトのインストールし、解析手順を含めて検討を行いたい。</p>	<p>が保有する PC(E5-2470v2*2,64GB)での速度比較を行った。</p> <p>3. 結果</p> <p>HOKUSAI 向けのコンパイルを行い、完成したバイナリを使って、リボソーム (テストデータ) の 2D-Classification を行った。</p> <p>PC: MPI10 プロセス、1プロセスあたり 4 スレッドの合計 40core を使用して、9 時間で演算が完了 (HT 有効)</p> <p>HOKUSAI: MPI16 プロセス、1プロセスあたり 4 スレッドの合計 64core(2 ノード)で計算して、24 時間オーバーの時間切れで終了</p>
<p>2. 具体的な利用内容、計算方法</p> <p>クライオ電顕で撮影した画像から対象試料の粒子を切り出して、その粒子をアライメントして立体粒子に作り上げるために、解析ソフト Relion を主に使用している。まず、このプログラムを HOKUSAI に移植して、より迅速な解析が行えるのか検討を行った。このプログラムは MPI と pthread を用いた Hybrid 並列を採用していて、GNU-Linux 向けに開発されており、無料で利用できるが、HOKUSAI への最適化はユーザー作業となっている。適用したバージョンは Relion-1.3 である。配布されている「HOKUSAI_GreatWave_Users_Guid_ja.pdf」を参考にコンパイルを実施した。さらに、当研究室</p>	<p>4. 今後の計画・展望</p> <p>今回整備した環境における処理速度の問題は、使用したプログラムが HOKUSAI に最適化されていないのが原因である。しかし、当研究グループには、プログラムを最適化する要員が不在なので、根本的な改善は見込めない。ただ、簡易利用でも 1024 コアまで使用可能なので、多数のコアを利用することによって、PC よりも早く計算が完了する可能性はあり得る。当研究室にも計算機の増設を行っているが、データ測定が立て込んで、処理能力が足りない場合には、HOKUSAI を利用する予定である。</p>