

GroELの20枚の電顕画像 のRelion3.1による解析

蛋白質研究所 川端 猛

2020/02/28

使用したデータ

2020/02/17にTalosで計測したGroELのデータ

以下のディレクトリからダウンロード可能

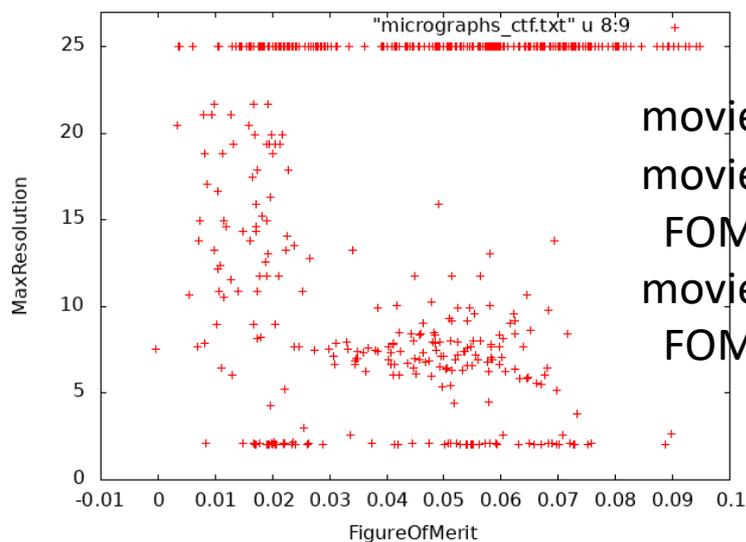
ftp://empiar.pdbj.org/pub/empiar/workshop/GroEL_20200217/

>> Parameters <<

Talos 50 e/A**2 73 kV 16 frames 1.4 angstrom/pix Cs 2.7 4096x4096x16frames

※元はmrc形式であったのを、`relicon_convert_to_tiff`でtif形式に変換。サイズは70%ほど。

※500個の動画画像にMotionCorrection, CTFfindをかけ、FigureOfMeritとMaxResolutionの値で選択したデータセットも作成



movie/ :全500個のtifファイル [178 GB]

movie159/ :

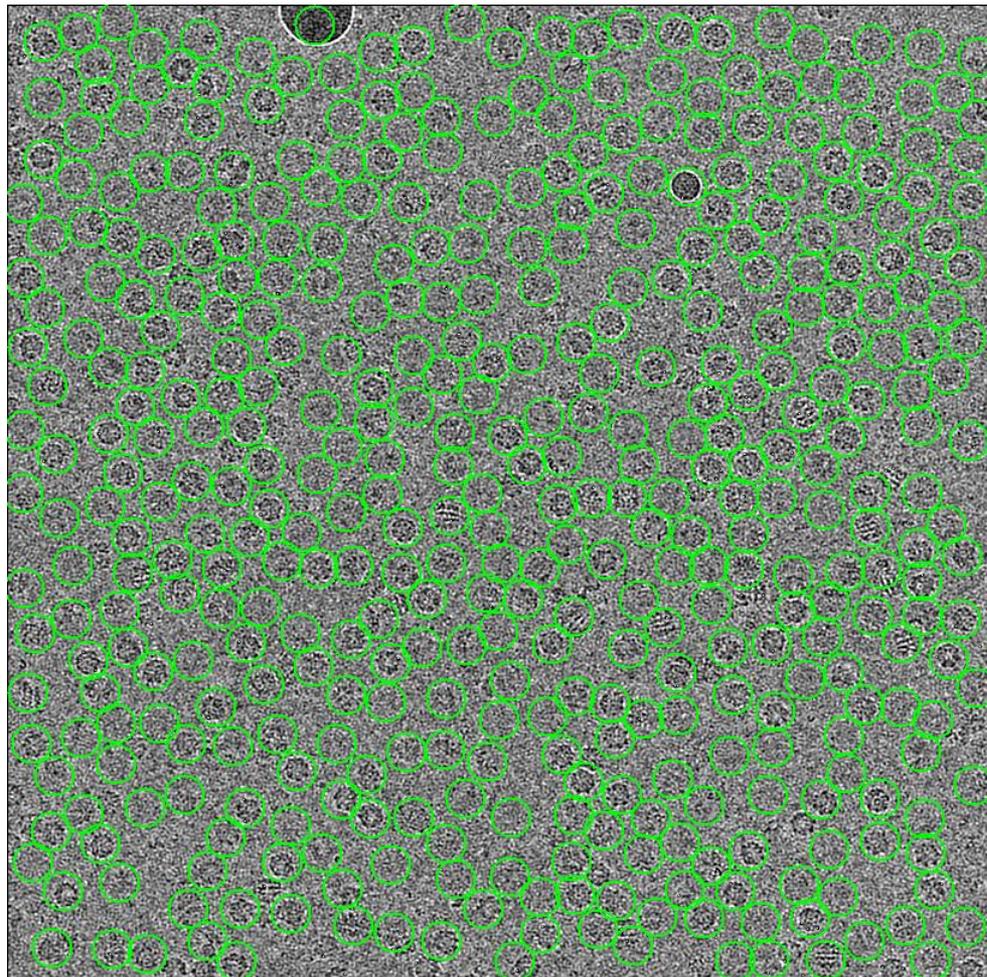
FOM>0.0かつ最大分解能<25 Å の159個のtifファイル [57 GB]

movie20/ :

FOM>0.03かつ、分解能が低い順に20個のtifファイル[7 GB]

試験解析をmovie20/の20個のtifファイルで行った。

Picking



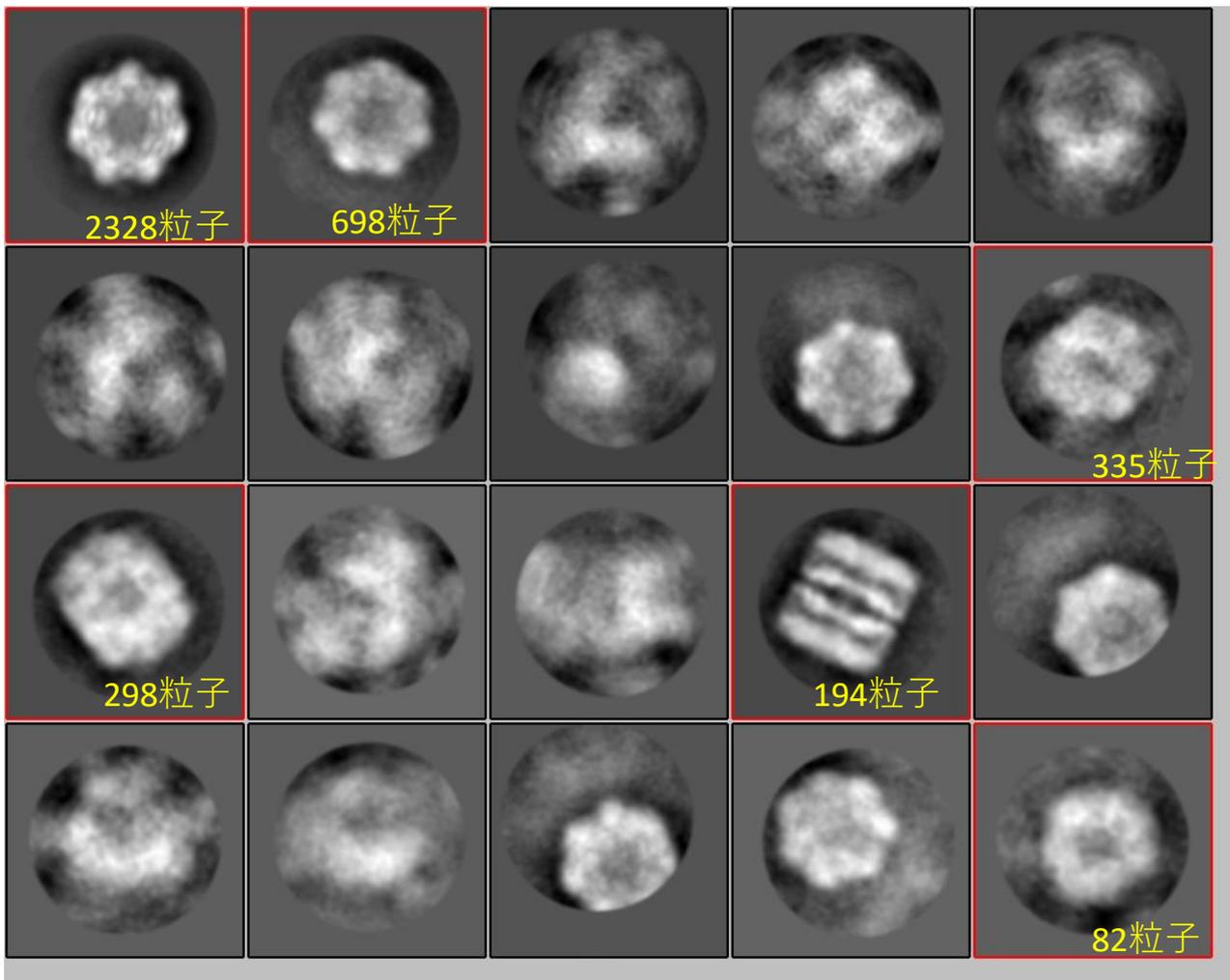
Manual pickから
マスクの直径を 220 \AA ぐらいに見積もる

LoG_basedのAutopickManual pickから
minDiameter: 200 \AA , maxDiameter: 240 \AA
で実行

各画像あたり424個程度、全20枚で
8483個の粒子を抽出

Class2D

計算時間:4GPUで81分



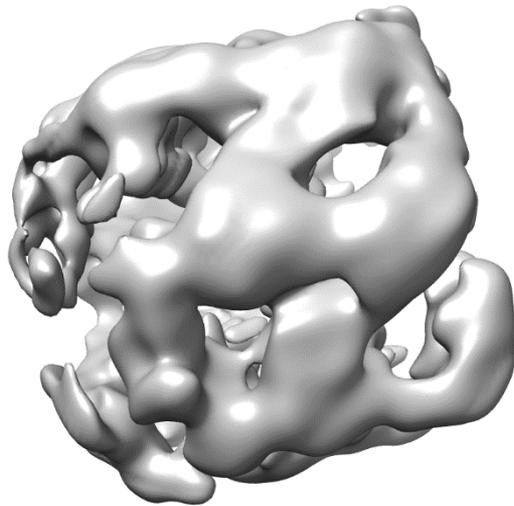
粒子画像のサイズは
200 pixel (280 Å)に設定して
Extract

8483粒子のClass2Dを、ク
ラス数20,マスク直径
220 Åで実行
(4GPUで81分)

6クラスのみを選択
3935粒子となる。

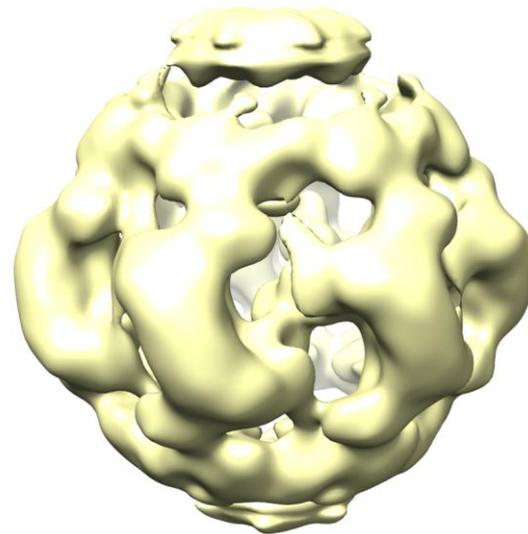
InitialModel

SGDで作成。GPU 4 枚使用



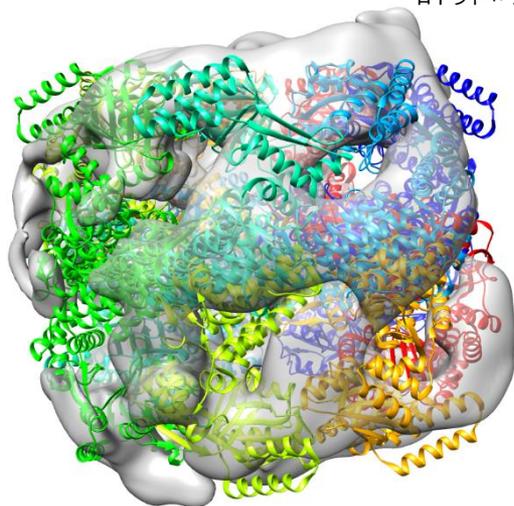
Symmetry=C1

計算時間：2時間17分

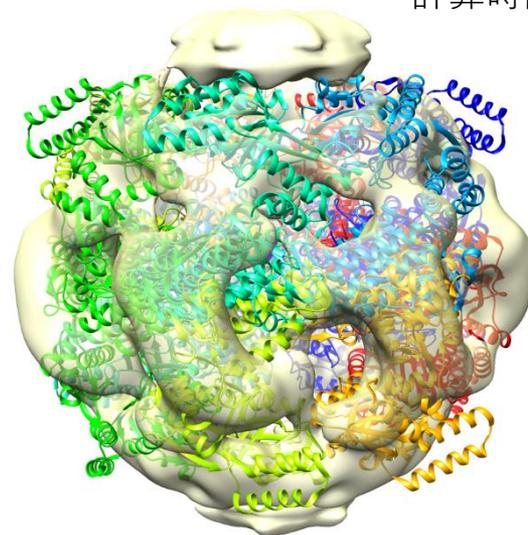


Symmetry=D7

計算時間：4時間17分



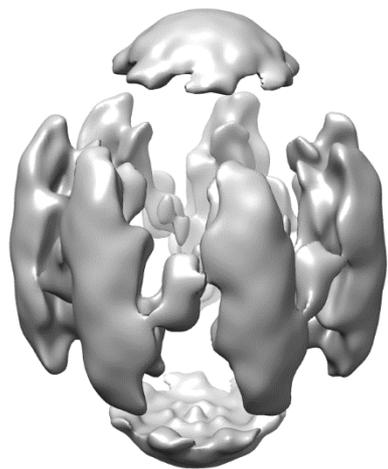
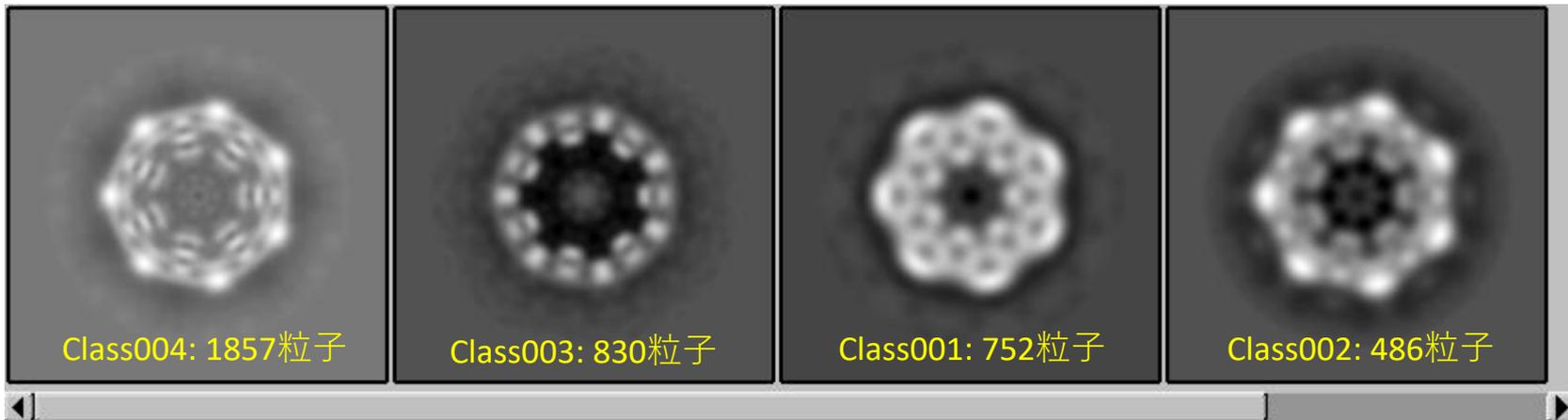
PDB_ID:1ss8_1
を重ねた場合



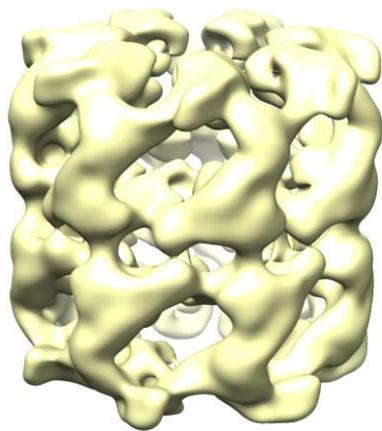
Class3D

D7の対称性のInitialModelをreferenceに使用

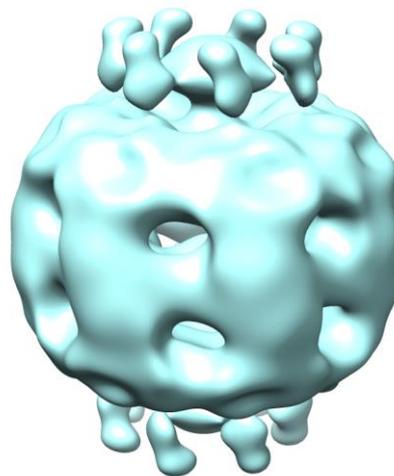
計算時間：4GPUで1時間7分



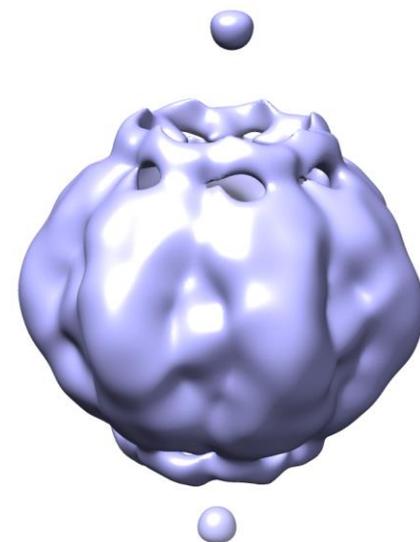
Class004: 1857粒子



Class003: 830粒子

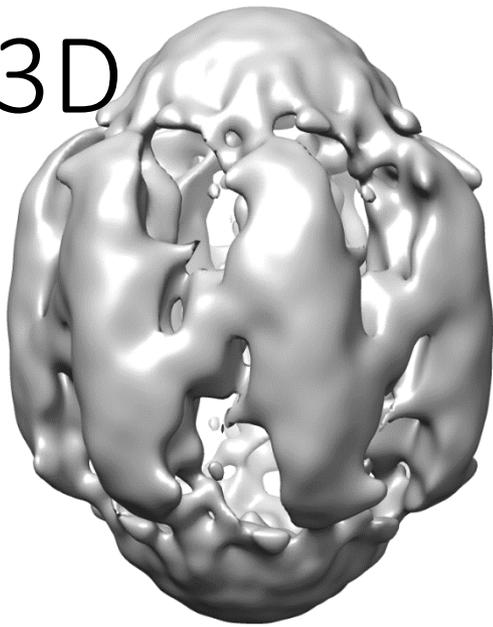


Class001: 752粒子

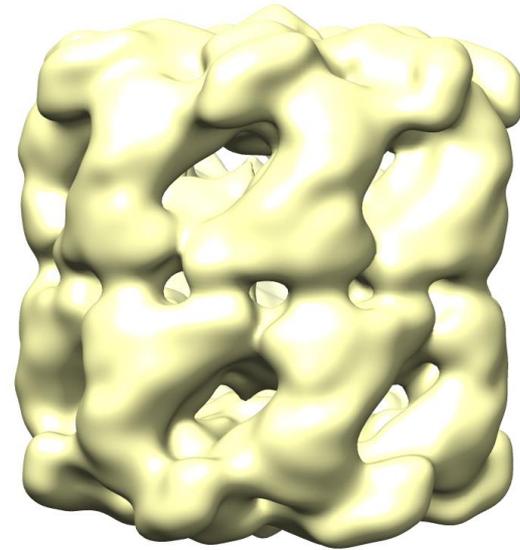


Class002: 486粒子

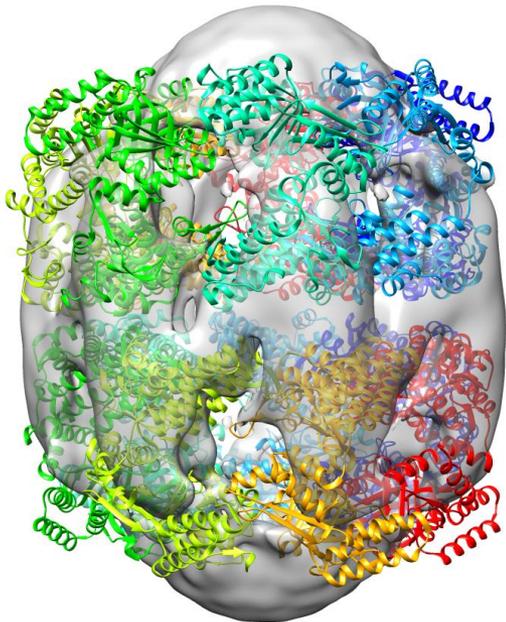
Class3D



Class004: 1857粒子



Class003: 830粒子



PDB_ID:1ss8_1
を重ねた場合

