

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。最近、解析プログラムが GPU に対応し始めており、研究室のローカルマシンにも GPU を搭載した。今後、クライオ電子顕微鏡による高分解能構造解析が迅速に行える環境を整備するために、HOKUSAI の計算ノードにも必要なソフトのインストールを行い、解析手順を含めて検討を行いたい。</p>	<ul style="list-style-type: none"><li>・ HOKUSAI の GPU ノード K20X (メモリ 6GB, 単精度 3.95 TFLOPS, 倍精度 1.31 TFLOPS)</li><li>・ 研究室側の GPU ノード GTX 1080 (メモリ 8GB, 単精度 8.2 TFLOPS, 倍精度 0.25 TFLOPS)</li></ul> <p>HOKUSAI 向けのコンパイルを行い、バイナリの作成に成功した。しかし、簡易利用では HOKUSAI の計算リソースは一度のジョブで使用できる GPU が 2 枚までという制限があり、RELION2 の GPU を使用する部分は単精度演算で計算を行うため、現状では研究室側の計算環境がより好ましい状態となっている。</p> <p><a href="https://elifesciences.org/content/5/e18722">https://elifesciences.org/content/5/e18722</a></p>
<p>2. 具体的な利用内容、計算方法</p> <p>電子顕微鏡による構造解析は、撮影した画像から対象試料の粒子像を多数切り出して、その粒子をアライメントして立体構造を構築するという作業を行う。まず、画像処理のメインのプログラムであり GPU が使用可能になった RELION2 を HOKUSAI の GPU ノード (30 台) に実装した。</p> <p>3. 結果</p> <p>研究室側では GPU が 4 枚搭載されたマシンを 3 台、2 枚搭載マシンを 2 台準備した。研究室側と HOKUSAI それぞれの GPU の性能は以下の通りである。</p>	<p>4. 今後の計画・展望</p> <p>現在使用している RELION2 は単精度に特化して GPU を利用しているため、高価な GPU ではなく市販品の GPU カードでも遜色なく利用できる。そのため研究チームの予算で GPU カードを多数購入しているのが現状である。</p> <p>しかし、最終的な「電顕像」に原子座標を割り当てる計算(MDFF)には、倍精度計算に特化した HOKUSAI に搭載されている高価な GPU が必要に なる。</p> <p><a href="http://www.ks.uiuc.edu/Research/mdff/">http://www.ks.uiuc.edu/Research/mdff/</a></p> <p>また、当研究室でも計算機の増設を行っているが、ユーザーと取得データが増えて、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>