

分布推定アルゴリズムによる単粒子解析投影パラメーター決定 Determination of projection parameters in single particle analysis using Estimation of Distribution Algorithms

馬水信弥^{1,2}、安永卓生¹

¹九州工業大学、²株式会社システムインフロンティア
Nobuya Mamizu^{1,2}, Takuo Yasunaga¹

¹Kyushu Institute of Technology, 680-4 Kawazu Iizuka Fukuoka 820-8502, Japan

²SYSTEM IN FRONTIER INC., Shinsuzuharu bldg.4F 2-8-3 Akebono-cho Tachikawa Tokyo 190-0012, Japan

本研究では単粒子解析三次元再構成における、電子顕微鏡像からそれぞれ切り出された粒子毎の投影パラメーターの決定方法を提案する。三次元再構成のためのモデル式は RELION[1]を踏襲し、パラメーター探索のための事前確率計算に分布推定(EDAs)を適用した。パラメーター推定の探索空間をグリッド化することなく、収束段階に従って探索の密度と範囲を確率モデルにより適応的に変化させることで解の大局的探索から最終的な収束のための局所探索までを一貫して行った。

既知の三次元モデルデータから生成したシミュレーション投影像を用い、初期モデルありなし両方のケースについて提案手法を適用し評価を行った。いずれについても正解パラメーターへの収束と元の三次元構造の復元を確認した[Fig. 1]。今後、実際の電子顕微鏡画像に対しても本手法の評価を行う。

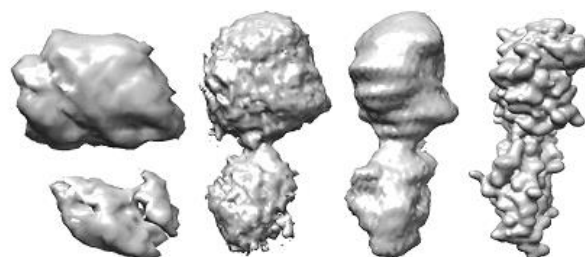


Fig.1. *Denovo* model reconstruction was gradually processed by increasing the number of 32, 128, 512, and 2000 simulation 2D images, respectively.

[1] Sjors H.W. Scheres, Journal of Structural Biology Vol. 180, Issue 3, page 519-530. (2012).