

基于冷冻电镜投影图片分类 与定向问题的研究

王霞

摘要

本文旨在研究基于冷冻电镜技术生物大分子投影图像的分类与定向问题, 现有的分类和定向算法均分为有参考模板和无参考模板两大类, 本文从这些角度分别给出了自己的算法.

在无参考分类方面, 针对 cryo-EM 问题中的随机方向上的投影数据, 基于傅里叶变换平移和旋转性质, 提出了加权的傅里叶平移和旋转不变量 (FTTR-不变量), 通过我们的实验可以看出权重在高噪声时的重要作用, 引入了次类概念, 提出了基于 FTTR-不变量的 ϵ -分类法. 算法中实现了自适应去噪, 自适应计算 ϵ , 整个过程完全自适应, 该算法以比当今最好算法 (CL2D) 快成百上千倍的速度, 达到了同它相近甚至更好的效果. 该算法实现了 openmpi 的多线程并行.

在无参考定向方面, 本文提出了基于等价线的定向算法, 该算法先通过分类算法、最近距离投影图像平均去噪、给投影面打分等策略选出主要代表元投影, 计算主要代表元投影的方向, 然后通过几个主要代表元计算其他投影面方向. 算法复杂度同投影个数之间只有线性复杂度.

在有参考分类定向方面, 本文提出了基于 FTTR-不变量的投影匹配分类定向算法, 强调了用待定向的投影图像确定高斯滤波 σ , 确定出的高斯滤波要同样作用到模板投影数据上, 最大程度上减小了不同信噪比对相关性结果的影响.

在分类和定向过程中, 遇到最大问题是噪声, 本文给出了针对电镜数据特殊的去噪算法.

为了验证本文所有算法的可行性, 在算法提出之后均给出了相应的数值实验, 所有实验在 Fedora 10 平台上使用 C/C++ 程序完成. 本文的 FTTR-分类算法已被整合到比较成熟的冷冻电镜软件 xmipp 中.