

isSPA 使用手册

版本：1.1.2

作者：程静、程渊溟

日期：2024 年 11 月 14 日

1. 使用 RELION 进行 Import 和 CTF estimation 任务，生成 micrograph_ctf.star 文件。

2. 对输入照片进行压缩，并储存到一个文件夹中，同时将.star 文件转换为 isSPA 可读的.lst 文件。以 bin2 为例：

```
preprocess.py micrographs/ 2 1.36 CtfFind/job002/micrographs_ctf.star
```

3. 根据需要，调整三维模板的像素尺寸：

```
relicon_image_handler --i 3D_template.mrc --o 3D_template_rescaled.mrc --angpix  
1.36 --rescale_angpix 2.72
```

4. 利用 EMAN2 脚本生成三维模型的二维投影：

```
e2project3d.py 3D_template.mrc --outfile=projections_5.hdf --  
orientgen=eman:delta=5:inc_mirror=1 --sym=c1 --compressbits=0 --verbose=2 >  
eman2_c1_delta5_mirror.txt
```

5. 将 EMAN2 输出的.txt 文件转换为.lst 文件（输出文件名为“原文件名+.lst”）：

```
euler_angles_txt_to_lst.py eman2_c1_delta5_mirror.txt
```

6. 修改配置文件 config，并运行

```
isSPA config
```

7. 去掉重复挑选的颗粒（以中心间距为 4 个像素、角度间距为 8 度为例），并将.lst 文件转换为 RELION-3.0 可以识别的.star 文件：

```
postprocess.py Output_6p0.lst 20 4 8 2 1.36 micrographs/
```

8. （可选）转换为 RELION-3.1（及以上版本）可以识别的格式：

```
relicon30_to_31.py Output_6p0_merge.star
```

9. 使用 RELION 图形界面查看挑选结果：

`display_detected_targets.py`

`CtfFind/job002/micrographs_ctf.star`

`Output_6p0_merge_31.star test micrographs`

10. 使用 RELION 从照片中提取颗粒 (Particle extraction)

11. 调整模板的尺寸 (RELION-5 可以自动调整)

`relion_image_handler --i 3D_template.mrc --o 3D_template_rescaled.mrc --
new_box 180`

12. 三维分类