

RELION



- - Opis
 - Verzije
 - Službena dokumentacija
 - Primjer
 - GPU

Opis

RELION (REgularized LIkelihood Optimization) je aplikacija za obradu i analizu krioelektronskih mikroskopija (engl. cryo-EM) makromolekula. Cryo-EM je tehnika koja omogućuje određivanje trodimenzionalnih struktura bioloških makromolekula pomoću elektronskih mikroskopa.

Verzije

Verzija	modul	C/C++ kompajler	FFT knjižnice	Podrška	Supek	Padobran
4.0.1	scientific/ relion/4.0.1- cuda	GNU (8.5.0)	FFTW	GPU + CPU	✓	✗

Primjer

GPU

✓ Grafički procesor definira se PBS opcijom **ngpus**, koja će u okolinu izvesti varijablu **CUDA_VISIBLE_DEVICES**, a čija će vrijednost biti UUID grafičkog procesora koji Vam je sustav dodijelio.

✓ Vrijednost **OMP_NUM_THREADS** preuzet će se iz zaglavlja skripte, odnosno po definiranju **ncpus** varijable.

U primjeru niže, aplikacija će se pokrenuti s jednim grafičkim procesorom i četiri CPU jezgre.

PBS skripta

```
#PBS -q gpu
#PBS -l select=1:ngpus=1:ncpus=4

module load "scientific/relion/4.0.1-cuda"

cd ${PBS_O_WORKDIR}

rm -rf out && mkdir out

relion_refine --gpu --j ${OMP_NUM_THREADS} --i
Particles/shiny_2sets.star --o out/
```

✓ *Benchmarking* set podataka za RELION možete preuzeti koristeći:

```
wget "ftp://ftp.mrc-lmb.cam.ac.uk/pub/scheres/relion_benchmark.tar.gz"
```

Službena dokumentacija

- <https://relion.readthedocs.io/en/latest/>