

УДК 532

Интернет-магазин

MATHESS

<http://shop.rcd.ru>

- физика
- математика
- биология
- техника

Компьютеры и суперкомпьютеры в биологии / Под редакцией В. Д. Лахно и М. Н. Устинина. — Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2002, 528 стр.

Книга посвящена применению компьютеров и суперкомпьютеров в молекулярной биологии, биофизике, экологии и медицине. Коллектив авторов книги — исследователи, обладающие уникальным опытом суперкомпьютерных вычислений в биологических задачах. Материал книги содержится в 2-х частях: «Структура и физические свойства ДНК и белков, перенос заряда в ДНК, реакционный центр фотосинтеза» (часть 1) и «Биоинформатика, компьютерная экология и медицина» (часть 2).

Исключительно широкий охват проблем и строгий стиль изложения помогут исследователям из других областей точных наук, а также аспирантам и студентам старших курсов естественнонаучных специальностей включиться в решение актуальных задач современной биологии.

ISBN 5-93972-188-5

© Институт компьютерных исследований, 2002

<http://rcd.ru>

Оглавление

ЧАСТЬ I. СТРУКТУРА И ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДНК И БЕЛКОВ, ПЕРЕНОС ЗАРЯДА В ДНК, РЕАКЦИОННЫЙ ЦЕНТР ФОТОСИНТЕЗА	13
Предисловие к первой части	15
 ГЛАВА 1. <i>В.Д.Лахно.</i> Вычислительные задачи компьютерной биологии	18
1.1. Введение	18
1.2. Задачи компьютерной биологии	18
1.3. Первичные структуры	20
1.4. Рентгеноструктурный анализ белков	24
1.5. Фолдинг белков	26
1.6. Моделирование структуры и динамики макромолекул	27
1.7. Прикладные задачи компьютерной биологии	29
Литература	33
 ГЛАВА 2. <i>А.А.Зимин, В.Д.Лахно, Н.Н.Назипова.</i> Биологические макромолекулы: структура, формы и функции	35
2.1. Введение	35
2.2. Нуклеиновые кислоты (ДНК и РНК)	35
2.3. Белки	40
2.4. Пространственные структуры молекул биополимеров и методы их исследования	44
2.5. Методы определения первичных структур молекул ДНК, РНК и белков	47
Литература	53

ГЛАВА 3. В. Ю. Лунин. Определение пространственной структуры биологических макромолекул	55
3.1. Введение	55
3.1.1. Основы рентгеноструктурного анализа	55
3.1.2. Современные проблемы макромолекулярной кристаллографии	58
3.1.3. Основные стадии рентгеноструктурного анализа	59
3.1.4. Различные уровни описания структуры белковых молекул	60
3.1.5. Основные этапы расшифровки структуры по данным рентгеновского рассеяния	62
3.1.6. Как «увидеть» функцию трех переменных	65
3.1.7. Фазовая проблема рентгеноструктурного анализа	67
3.2. Фазовая проблема	70
3.2.1. Терминология и обозначения	72
3.2.2. Дополнительная информация об исследуемом объекте	75
3.3. Прямое определение фаз при низком разрешении	86
3.3.1. Основные определения	87
3.3.2. Процедура <i>ab-initio</i> определения фаз	88
3.3.3. Использование гистограмм синтезов Фурье	91
3.3.4. Определение фаз на основе свойств связности	96
3.3.5. Определение фаз на основе максимизации правдоподобия	101
3.3.6. Использование псевдо-моделей	103
3.3.7. Комбинация методов. Определение низкоугловых фаз для рибосомальной частицы T50S	106
3.3.8. Определение структуры частицы липопротеина низкой плотности (LDL)	107
3.4. Методы модификации электронной плотности	108
3.4.1. Запись ограничений в виде функционального уравнения	109
3.4.2. Уравнения для структурных факторов	111
3.4.3. Итерационная процедура уточнения значений фаз	112
3.4.4. Определение значений фаз как проблема минимизации	113
3.5. <i>Н. Л. Лунина. Использование метода FAM</i>	114
3.5.1. Основные положения	114
3.5.2. Описание FAM-метода и результаты его тестирования	117
Литература	130

ГЛАВА 4. В. Д. Лахно. Динамика переноса дырки в нуклеотидных последовательностях	137
4.1. Введение	137
4.2. Квантово-механическая модель	139
4.3. Параметры модели	143
4.4. Перенос дырки из состояния, близкого к релаксированному	146
4.5. Перенос дырки из нерелаксированного состояния	155
4.6. Сравнение теории с экспериментом	157
4.7. Осциллирующая природа переноса заряда в ДНК	161
4.8. Обобщение модели	164
4.9. Сравнение с другими подходами	165
4.10. Перспективы развития теории	167
Литература	167
ГЛАВА 5. В. Д. Лахно, Н. С. Фиалко. Перенос заряда в ДНК на большое расстояние	172
5.1. Введение	172
5.2. Математическая модель	174
5.3. Некоторые частные случаи	176
5.4. Рассматриваемая система	179
5.5. Стоячая уединенная волна	181
5.6. Движущийся солитон	182
5.7. Моделирование переноса в однородной цепочке	184
5.8. Моделирование донора и акцептора	186
5.9. Обсуждение результатов	191
Литература	193
ГЛАВА 6. В. Д. Лахно. Моделирование первичных процессов переноса заряда в реакционном центре фотосинтеза	195
6.1. Введение	195
6.2. Первичные процессы переноса в фотореакционном центре фотосинтеза	196
6.3. Математическая модель	197
6.4. Параметры электронного переноса	199
6.5. Результаты численных расчетов	200
6.6. Возможности более детального учета структурных и динамических свойств фотореакционного центра	202
6.7. Дальнейшие обсуждения и сравнение с другими подходами	205

6.8. Заключительные замечания	206
Литература	206

ГЛАВА 7. Д. А. Тихонов. Метод интегральных уравнений теории жидкости для изучения гидратации макромолекул	209
7.1. Введение	209
7.2. Уравнения RISM для исследования сольватации (гидратации) макромолекул	211
7.3. Численная схема	213
7.4. Дальнейшие приближения в методе RISM, делающие его более эффективным в вычислительном отношении	221
7.5. Алгоритм решения уравнений RISM методом Ньютона–Крылова	222
7.6. Результаты расчетов	225
7.7. Заключение	229
Приложение. Нестационарные итерационные методы решения СЛАУ «Методы подпространств Крылова»	230
Литература	233

ГЛАВА 8. А. В. Теплухин, Ю. С. Лемешева. Изучение строения водной оболочки двуспиральных фрагментов В-ДНК <i>poly(dA):poly(dT)</i> с помощью моделирования на параллельных вычислительных системах	234
8.1. Введение	234
8.2. Состояние проблемы	235
8.3. Методы и алгоритмы для компьютерных экспериментов	236
8.4. Результаты исследований	237
Литература	239

Цветные иллюстрации

ЧАСТЬ II. БИОИНФОРМАТИКА, КОМПЬЮТЕРНАЯ ЭКОЛОГИЯ И МЕДИЦИНА	241
---	------------

Предисловие ко второй части	243
--	------------

ГЛАВА 1. Ю. Е. Елькин. Волны возбуждения в биологических системах и кинематический подход к их изучению	247
--	------------

1.1.	Введение: автоколебания и автоволны в природе	247
1.2.	Автоволновые образы на плоскости и работа сердца	250
1.2.1.	Пейсмейкер	250
1.2.2.	Два пейсмейкера	250
1.2.3.	Спиральная волна	251
1.3.	О математических методах исследования автоволн	253
1.4.	Кинематический подход	255
1.4.1.	Геометрическое описание волн возбуждения	255
1.4.2.	О точном решении стационарных кинематических уравнений	260
1.4.3.	Некоторые результаты применения геометрических методов	263
1.4.4.	Сравнение альтернативных геометрических подходов	265
1.4.5.	О распространении обобщенной кинематики на трехмерный случай	268
1.5.	Заключение	269
	Литература	270

ГЛАВА 2. А. Р. Сковорода. Ранняя неинвазивная диагностика тканевых аномалий как задача вычислительной математики	274
2.1. Введение	274
2.2. Основные соотношения, механические характеристики и экспериментальные данные	275
2.3. Реконструкция модуля сдвига объекта исследования по данным о его деформированном состоянии	283
2.4. Заключительные замечания	292

А. Н. Клишко. Методы количественной оценки упругих характеристик мягких биологических тканей	294
2.5. Оценка упругих свойств тканей методом вдавливания штампа, на основе тестирования послеоперационных образцов	294
2.6. Резонансный метод определения модуля сдвига упругого слоя	299
2.6.1. Задача о динамическом равновесии пластинки, нагруженной осесимметричными периодическими внешними силами	299
2.6.2. Задача о динамическом равновесии упругого слоя при осесимметричном нагружении одной из его границ	301

2.6.3. Определение резонансных частот тонкой пластинки, лежащей на упругом слое и нагруженной периодической внешней силой	309
Литература	313

ГЛАВА 3. М. Н. Устинин, С. А. Махортых, А. М. Молчанов, М. М. Ольшовец, А. Н. Панкратов, Н. М. Панкратова, В. И. Сухарев, В. В. Сычев. Задачи анализа данных магнитной энцефалографии	327
3.1. Введение	327
3.2. Моделирование биомангнитной активности мозга	331
3.3. Решение прямых и обратных задач магнитной энцефалографии	338
3.3.1. Решение обратной задачи	339
3.3.2. Процедура подгонки момента	340
3.3.3. Подгонка амплитуды диполя	341
3.4. Исследование динамических характеристик данных МЭГ	342
3.4.1. Вычисление корреляционной размерности сигнала	342
3.4.2. Алгоритм вычисления размерности аттрактора	345
3.5. Заключение	347
Литература	348

ГЛАВА 4. Л. Г. Ханина, А. С. Комаров, В. Э. Смирнов, М. В. Бобровский, И. Е. Сизов, Е. М. Глухова. Вычислительная экология	350
4.1. Введение. Вычислительная экология: определение, основные задачи	350
4.2. Базы данных	351
4.3. Динамическое моделирование	356
4.3.1. Методологические аспекты создания имитационных моделей сложных систем	356
4.3.2. Моделирование лесных экосистем	359
4.3.3. Математическая демография растений	365
4.4. Многомерный анализ экологических данных	371
4.4.1. Основные методы многомерного анализа экологических данных	371
4.4.2. Классификация описаний растительности	372
4.4.3. Выделение функциональных групп видов	374
4.5. Пространственный анализ экологических данных	376
4.5.1. Основные методы пространственного анализа экологических данных	376

4.5.2. Применение ГИС-технологий для оценки биоразнообразия растительности	379
4.6. Визуализация	381
4.7. Заключение	383
Литература	383
 ГЛАВА 5. <i>Н. Н. Назипова, М. Н. Устинин. Решение задач расшифровки генетической информации, заложенной в биологических последовательностях</i>	
5.1. Введение	392
5.2. Выделение на протяженной генетической последовательности белок-кодирующих областей	396
5.2.1. Постановка задачи	396
5.2.2. Методы распознавания кодирующих участков, использующие статистические характеристики кодирующих участков геномов	397
5.2.3. Меры кодирования	401
5.2.4. Эффективность мер кодирования	412
5.2.5. Математические методы распознавания генов, используемые в современных программах	413
5.3. Приписывание функции генам	416
5.4. Заключение	419
Литература	422
 ГЛАВА 6. <i>Т. В. Астахова, Н. В. Олейникова, М. А. Ройтберг. Сравнительный анализ информационных биополимеров</i>	
6.1. Введение. Развитие методов анализа биополимеров	433
6.2. Другой подход к проблеме выравнивания аминокислотных последовательностей. Парето-оптимальные выравнивания	439
6.3. Распознавание белок-кодирующих областей в последовательностях ДНК — важная задача анализа биологических последовательностей	442
6.4. Современные задачи сравнительного анализа биологических последовательностей, предпосылки для применения параллельных вычислений	447
6.5. Исследование достоверности выравнивания аминокислотных последовательностей	449
6.5.1. Источник структурно адекватных выравниваний	449

6.5.2. Мера сходства последовательностей	450
6.5.3. Мера сходства выравниваний. Понятие «острова» . . .	451
6.5.4. Зависимость степени сходства структурного и последовательностного выравнивания от степени сходства исследуемых белков	452
6.5.5. Детальное изучение выравниваний. Угаданные «острова»	453
Литература	455

ГЛАВА 7. М. Н. Устинин, И. А. Никонов, М. М. Ольшеев. Цифровая диагностика и телемедицина	458
7.1. Введение	458
7.2. Цифровая рентгенография	459
7.3. Программное обеспечение цифровой рентгеновской приставки	462
7.4. Основные операции обработки цифровых рентгеновских снимков	465
7.5. Аппроксимация цифровых рентгеновских снимков в базах всплесков	470
Литература	474

ГЛАВА 8. С. В. Филиппов, Е. В. Соболев. Использование технологий профессиональной компьютерной графики для визуализации результатов научных исследований	476
8.1. Введение	476
8.2. Композинг	477
8.2.1. Adobe After Effects®	478
8.2.2. Discreet Combustion®	486
8.3. 3D-моделирование и анимация	490
8.4. Рендеринг	495
8.5. Заключение	496
Литература	497

Глоссарий	498
----------------------------	------------