

Рис. 6. Конформация активного центра, благоприятствующая образованию водородной связи между His117 и атомом кислорода ингибитора

Предложенный механизм реакции может быть не единственным. Полученная кристаллографическая структура является лишь одной из возможных конформаций белка, в то время как основные группы активного центра могут принимать различные конформации. Методы молекулярной динамики позволяют проследить возможные изменения в конфигурации активного сайта и выделить наиболее вероятные варианты. Так, имидазольное кольцо His117 может менять свою ориентацию в пространстве, и образовывать водородную связь с атомом кислорода ингибитора (рис. 5). При этом основной принцип осуществления каталитического гидролиза ФОС в активном центре

модифицированной БХЭ остается прежним, но это позволяет расширить ряд возможных направленных мутаций для ускорения гидролиза.

Работа выполняется при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 10-03-00085) и Российской академии наук (программа № 9 Отделения химии и наук о материалах РАН).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Nachon F. et al. X-ray crystallographic snapshots of reaction intermediates in the G117H mutant of human butyrylcholinesterase, a nerve agent target engineered into a catalytic bioscavenger. *Biochem. J.* 2011, 434(1): pp. 73-82.

Применение параллельных технологий к моделированию динамики и сейсмичности литосферы



11 Применение параллельных технологий к моделированию динамики и сейсмичности литосферы

Задача изучения землетрясений на основе статистического анализа существующих каталогов чрезвычайно затруднена ввиду недостатка надежных данных наблюдений. Поэтому моделирование процессов, происходящих в земной коре, играет важную роль в исследовании характера реального сейсмического потока и в выявлении «предвестников» сильных событий.

В Институте математики и механики УрО РАН (г. Екатеринбург) в сотрудничестве с Международным институтом теории прогноза землетрясений и математической геофизики РАН (г. Москва) был создан пакет программ, ориентированный на многопроцессорную технику, для численного моделирования динамики и сейсмичности земной коры на основе сферической блоковой модели. Данный подход к моделированию опирается на представление тектонических плит в виде системы абсолютно жестких блоков на сфере. В каждый момент времени система находится в состоянии квазистатического равновесия; при этом модельным событием является резкий сброс напряжений, возникающих на разломах, разделяющих блоки, под действием внешних сил. Основными результатами моделирования служат искусственный каталог землетрясений, в котором событие характеризуется моментом времени, координатами эпицентра, глубиной и магнитудой, а также характеристики взаимодействия элементов блоковой структуры (напряжения, силы, смещения на разломах и границе литосфера/мантия). Сферическая блоковая модель, являющаяся достаточно ресурсоемкой при расчетах на последовательных ЭВМ, допускает эффективное применение параллельных технологий, что обеспечивает использование в расчетах реальных геофизических и сейсмических данных.

АВТОРЫ:

Л.А. Мельникова – гл. программист, Ин-т математики и механики УрО РАН, г. Екатеринбург;
e-mail: meln@imm.uran.ru,

В.Л. Розенберг – канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотрудник, Ин-т математики и механики УрО РАН, г. Екатеринбург;
e-mail: rozen@imm.uran.ru

А.А. Соловьев – чл.-корр. РАН, директор Международного ин-та теории прогноза землетрясений и математической геофизики РАН;
e-mail: soloviev@mitp.ru

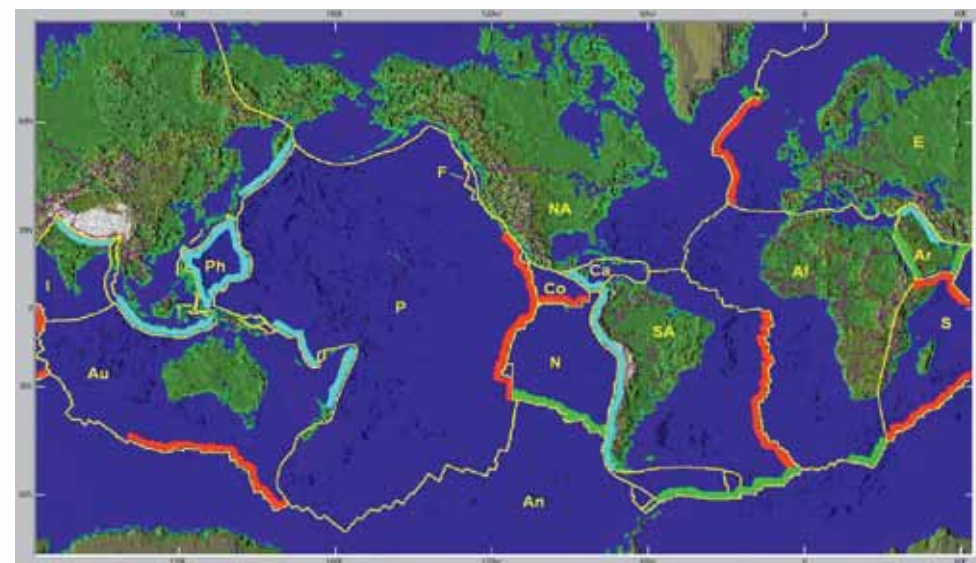


Рис. 1.

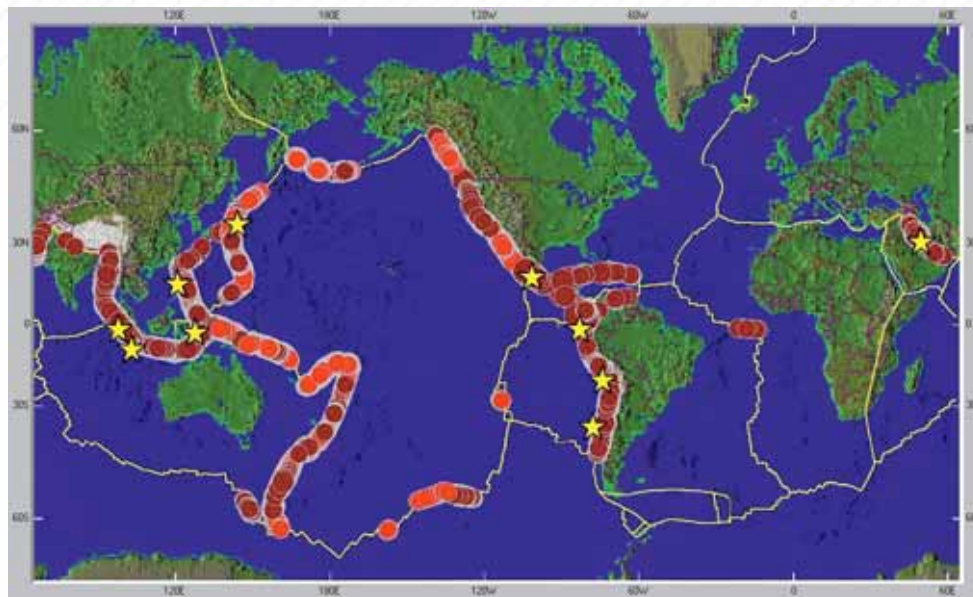


Рис. 2.

На рисунках приведены результаты моделирования (рис. 1) типов границ тектонических плит (дивергентные границы (зоны растяжения) выделены красным цветом, конвергентные (зоны сжатия) — голубым, трансформные (зоны сдвига) — зеленым) и пространственного распределения (рис. 2) эпицентров сильных землетрясений (поверхностные события (глубина до 50 км) показаны коричневыми кругами, более глубокие (от 50 км до 100 км) — красными; отдельно отмечена десятка сильнейших модельных событий). Все модельные данные достаточно хорошо согласуются с реальными. Полученные результаты предполагается использовать как для изучения глобального и регионального сейсмического риска, так и для дальнейшего развития модели.

Моделирование прохождения частиц через вещество на многопроцессорных суперкомпьютерах

