

**РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ ИМ. М.В. КЕЛДЫША
ИНСТИТУТ МАТЕМАТИЧЕСКИХ ПРОБЛЕМ БИОЛОГИИ**

**ПРОГРАММА
IX МЕЖДУНАРОДНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ
«МАТЕМАТИЧЕСКАЯ БИОЛОГИЯ И БИОИНФОРМАТИКА»
17-19 октября 2022 г., Пущино**

Техническую поддержку конференции осуществляет ООО «ИнтраБио»

© ФИЦ «Институт прикладной математики имени М.В.Келдыша РАН»

© Институт математических проблем биологии РАН

17 октября, понедельник

9.00 – 10.00 Регистрация участников (ауд. 219, ИМПБ РАН)

Открытие конференции (конференц-зал, ИМПБ РАН)

10.00 – 10.20 Открытие мероприятия.

10.20 – 10.55 **Лахно Виктор Дмитриевич** (г. Пуцзино, ИМПБ РАН – филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН) 50-летие Института математических проблем биологии РАН

10.55 – 11.20 *Перерыв на кофе*

Утреннее заседание, пленарные доклады¹(конференц-зал, ИМПБ РАН)

Председатель сессии Устинин Михаил Николаевич

Начало заседания в 11.20

11.20 – 11.50 **Лунин Владимир Юрьевич** (г. Пуцзино, ИМПБ РАН – филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН) ИМПБ РАН 50 лет. Лаборатория кристаллографии макромолекул

11.50 – 12.20 **Балабаев Николай Кириллович** (г. Пуцзино, ИМПБ РАН – филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН) ИМПБ РАН 50 лет. Лаборатория молекулярной динамики

12.20 – 12.50 **Назипова Нафиса Наилевна** (г. Пуцзино, ИМПБ РАН – филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН) ИМПБ РАН 50 лет. Лаборатория биоинформатики

12.50 – 13.20 **Махортых Сергей Александрович** (г. Пуцзино, ИМПБ РАН – филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН) ИМПБ РАН 50 лет. Лаборатория обработки данных

13.20 – 15.00 *Перерыв на обед*

Дневное заседание, пленарные доклады²(конференц-зал, ИМПБ РАН)

Председатель сессии Лахно Виктор Дмитриевич

Начало заседания в 15.00

15.00 – 15.30 **Устинин Михаил Николаевич** (г. Пуцзино, ИМПБ РАН – филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН) ИМПБ РАН 50 лет. Отдел перспективных информационных технологий

15.30 – 16.00 **Быстров Владимир Сергеевич** (г. Пуцзино, ИМПБ РАН – филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН) ИМПБ РАН 50 лет. Группа компьютерного моделирования наноструктур и биосистем

16.00 – 16.30 **Флоринский Игорь Васильевич** (г. Пуцзино, ИМПБ РАН – филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН) ИМПБ РАН 50 лет. Группа геоморфометрического моделирования

16.30 – 17.00 **Ханина Лариса Геннадьевна** (г. Пуцзино, ИМПБ РАН – филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН) ИМПБ РАН 50 лет. Лаборатория вычислительной экологии

17.00 – 21.00 *Приветственный коктейль (холл 2-го этажа, ИМПБ РАН)*

¹ Продолжительность пленарного доклада – 30 минут

² Продолжительность пленарного доклада – 30 минут

18 октября, вторник

9.00 – 10.00 Регистрация участников (ауд. 219, ИМПБ РАН)

Утреннее заседание, пленарные доклады (конференц-зал, ИМПБ РАН)

Председатель сессии Устинин Михаил Николаевич

Начало заседания в 10.00

10.00 – 10.35 Фрисман Ефим Яковлевич, Кулаков М.П. Переход от локальной би- и квадростабильности к пространственно-временной неоднородности. (г. Биробиджан, ИКАРП ДВО РАН)

10.35 – 11.10 Масловская Анна Геннадьевна, Саруханян С.К., Куттлер К. Реакционно-диффузионный подход в моделировании процессов бактериальной коммуникации. (г. Благовещенск, АмГУ)

11.10 – 11.45 Мазуров Михаил Ефимович. Современные теории сознания, материалистическая макроскопическая. (г. Москва, РЭУ)

11.45 – 12.00 *Перерыв*

12.00 – 12.35 Оксана Валериановна Галзитская, Мачулин А.В., Дерюшева Е.И., Панфилов А.В., Сурин А.А., Кравченко С.В., Глякина А.В., Гришин С.Ю. Биоинформатическое исследование семейства бактериальных рибосомных белков S1: особенности структурной организации, амилоидогенные области в S1 доменах, эволюция бактериальных отделов, создание новых антибактериальных пептидов. (г. Пущино, ИБ РАН)

12.35 – 13.10 Быстров Владимир Сергеевич, Парамонова Е.В., Лихачев И.В., Филиппов С.В., Быстрова А.В., Авакян Л.А., Толчина Д.Б., Макарова С.В., Исаев Д.Д., Булина Н.В. Моделирование и компьютерные исследования свойств гидроксипатита. (г. Пущино, ИМПБ РАН – филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН)

13.10 – 13.45 Дедкова А.А., Флоринский Игорь Васильевич. Геоморфометрическое моделирование нанорельефа по данным атомно-силовой микроскопии (г. Пущино, ИМПБ РАН – филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН)

13.45 – 15.00 *Перерыв на обед*

Секция А «Популяционное моделирование» (конференц-зал, ИМПБ РАН)

Председатель секции Фрисман Ефим Яковлевич

Начало заседания в 15.00

15.00 – 15.20 Лелеков Александр Сергеевич, Ширяев А.В. Динамика макромолекулярного состава культуры микроводорослей в условиях естественного освещения. Модель. (г. Севастополь, ФИЦ ИнБЮМ РАН)

15.20 – 15.40 Неверова Галина Петровна, Жданова О.Л. Математическое моделирование сценариев развития планктонного сообщества в процессе эволюции. (г. Владивосток, ИАПУ ДВО РАН)

15.40 – 16.00 Жданова Оксана Леонидовна, Фрисман Е.Я. О роли естественного отбора в генетической дивергенции миграционно-связанных популяций: сопоставление результатов эксперимента и математического моделирования. (г. Владивосток, ИАПУ ДВО РАН)

16.00 – 16.20

16.20 – 16.40 *Перерыв на кофе*

Дневное заседание, секционные доклады

Секция А «Математические модели наноструктур и биомолекул. Математические основы нанобиоэлектроники» (конференц-зал, ИМПБ РАН)

Председатель секции Лахно Виктор Дмитриевич

Начало заседания в 15.00

16.40 – 17.00 Коршунова Алевтина Николаевна, Лахно В.Д. Проявление элементов блоховских осцилляций полярона в процессе его равномерного движения по цепочке. (г. Пуццино, ИМПБ РАН - филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН)

17.00 – 17.20 Лихачев Илья Вячеславович, Быстров В.С., Балабаев Н.К. Поиск температуры выпаривания ионов ОН из гидроксипатита. (г. Пуццино, ИМПБ РАН – филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН)

17.40 – 18.00 Фиалко Надежда Сергеевна, Ольшевец М.М., Лахно В.Д. Разрушение полярона при разных способах моделирования термостата. (г. Пуццино, ИМПБ РАН – филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН)

18.00 – 18.20 Быстров Владимир Сергеевич, Парамонова Е.В., Зеленовский П.С., Фридкин В.М., Tie Lin, Hong Shen, Xiangjian Meng. Фотоэлектронные свойства дифенилаланиновых пептидных нанотрубок. (г. Пуццино, ИМПБ РАН – филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН)

18.20 – 18.40 Шигаев Алексей Сергеевич, Лихачёв И.В., Лахно В.Д. Анализ свойств локусов многопараметрического пространства квантово-классической модели фотоизомеризации родопсина. (г. Пуццино, ИМПБ РАН - филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН)

Дневное заседание, секционные доклады

Секция Б «Биоинформатика и компьютерная биомедицина» (ауд. 306, ИМПБ РАН)

Председатель секции

Начало заседания в 15.00

15.00 – 15.20 Чалей Мария Борисовна, Кутыркин В.А. Идентификация таксономической принадлежности вирусов с помощью таргетного анализа вирусного генома. (г. Москва, ИМПБ РАН - филиал ИПМ им. М.В.Келдыша РАН)

15.20 – 15.40 Белинская Дарья Александровна, Шестакова Н.Н. Взаимодействие трициклических антидепрессантов с NMDA-рецептором по данным компьютерного моделирования. (г. Санкт-Петербург, ИЭФБ РАН)

15.40 – 16.00 Руднев Владимир Ремович, Никольский К.С., Петровский Д.В., Куликова Людмила Ивановна, Кайшева А.Л., Ефимов А.В. Исследование стабильности структурных мотивов типа 3β -уголок (г. Пуццино, ИМПБ РАН - филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН)

16.00 – 16.20 Яковлева Татьяна Александровна. Анализ фармакологических данных с использованием методов математического моделирования. (г. Москва, M&S Decisions)

16.20 – 16.40 *Перерыв на кофе*

16.40 – 17.00 Богатырев Михаил Юрьевич, Шестака Т.В. Мультимодальная кластеризация в анализе данных осложнений инфаркта миокарда. (г. Тула, ТулГУ)

17.00 – 17.20 Кудряшова Наталия Олеговна, Жигач А.Н., Жуденков К.В., Глущенко Н.Н. Particle diameter, phase composition, surface area and film thickness of copper nanoparticles as predictors of antibacterial activity, toxicity, and wound healing potential. (г. Москва, ФИЦ ХФ РАН)

17.20 – 17.40 Кулеш Виктория Сергеевна. Обзор подходов к математическому описанию динамики клеток тимуса. (г. Москва, Сеченовский университет)

17.40 – 18.00

18.00 – 18.20

Постерная сессия (стендовые доклады)

18.20 – 19.30

Третьякова Анна Вадимовна, Герасимова Е.О., Крылов П.А., Новочадов В.В. Филогенетический анализ белка лубрицина и сурфактант-ассоциированных белков В и С. (г. Волгоград, ФГАОУ ВО ВолГУ)

Герасимова Елена Олеговна, Третьякова А.В., Крылов П.А. Биоинформационный анализ структурно-функциональных свойств белков поверхностной зоны суставного хряща и белков сурфактанта. (г. Волгоград, ФГАОУ ВО ВолГУ)

Delgado Curiel Esteban, Deriabina A., Vazquez G. D., Prutskij T., Gonzalez E., Poltev V. Optical properties of Luteolin: DFT study. (Puebla, BUAP)

Романов Михаил Сергеевич, Мастеров В.Б. Анализ эффективности воспроизводства белоплечего орлана на Сахалине с помощью обобщённых линейных смешанных моделей (GLMM). (Пушино, ИМПБ РАН - филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН)

Полосин Виталий Германович. Статистический подход к решению обратной задачи электрокардиографии. (Пенза, Пензенский государственный университет)

Москаленко Андрей Витальевич, Махортых С.А. К вопросу о спектральном анализе регуляции основного ритма сердца. (Пушино, ИМПБ РАН - филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН)

Мачулин Андрей Валериевич. Биоинформатический анализ нового бактериоцина III класса из *L. fermentum* 3872. (Пушино, ФИЦ ПНБЦИ ИБФМ РАН)

Sarkar Aditya Kumar, Sarkar Anwesha, Lahiri Ansuman Contribution of half-site spacing in bZIP-DNA recognition. (Kolkata, CU, India)

Левченко Ирина Николаевна, Володяев И.В., Владимиров Г.К. Изучение механизма реакций, катализируемых комплексом цитохрома с с кардиолипином. (Пермь, РНИМУ)

Pal Rupak, Mishra Sweta, Lahiri Ansuman. On the Conformational Preferences of 2-Selenouridine and its Derivatives. (Kolkata, CU, India)

Левченко Ирина Николаевна, Володяев И.В., Владимиров Г.К. Математическое моделирование квантовых выходов активированной кумарином С-525 хемилюминесценции под действием комплекса цитохрома с с кардиолипином. (Пермь, РНИМУ)

Панюков Валерий Васильевич. Длинные прямые повторы в бактериальных хромосомах (Пушино, ИМПБ РАН - филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН)

Дерюшева Евгения Игоревна. Биоинформатический поиск и формирование панели лигандов сывороточного альбумина, модулирующих его взаимодействие с Аβ-пептидом. (Пушино, ФИЦ ПНБЦИ ИБП РАН)

Немашкалова Екатерина Леонидовна, Шевелёва М.П., Дерюшева Е.И. Фактор роста эндотелия сосудов (VEGF-A165): ассоциация с заболеваниями, моделирование структуры и сравнение с экспериментальными данными. (Пушино, ИБП РАН)

Фурлетова Евгения Игоревна. Минимизация автомата Ахо-Корасик. Приложение к вычислению P-значения вхождений образцов. (Пушино, ИМПБ РАН - филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН)

19 октября, среда

9.00 – 10.00 Регистрация участников (ауд. 219, ИМПБ РАН)

Утреннее заседание, секционные доклады (конференц-зал, ИМПБ РАН)

Секция А «Вычислительная экология» (конференц-зал, ИМПБ РАН)

Начало заседания в 10.00

10.00 – 10.25 Портнов Алексей Михайлович, Иванова Н.В., Шашков М.П. Опыт использования нейронной сети DeepForest для детектирования деревьев в широколиственном лесу. (г. Пущино, ИФХиБПП РАН)

10.25 – 10.50 Ханина Лариса Геннадьевна, Волобуев С.В., Смирнов В.Э., Тутукина М.Н., Шелякин П.В., Бобровский М.В. Разнообразие сообществ грибов и бактерий и динамика физико-химических свойств древесины широколиственных видов деревьев и ели европейской в ходе деструкции после массового ветровала. (ИМПБ РАН - филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН; БИН РАН; ЦЭПЛ РАН; ИППИ РАН; Сколтех; ИБК РАН; ИОГен РАН; ИФХиБПП РАН)

10.50 – 11.15 Ханина Лариса Геннадьевна, Бобровский М.В., Смирнов В.Э., Иващенко К.В., Журавлева А.И., Жмайлов И.В. Влияние массового ветровала в широколиственном лесу на свойства песчаных и суглинистых почв. (г. Пущино, ИМПБ РАН - филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН)

11.15 – 11.40 Белотелов Николай Вадимович, Бровко А.В. Модель конкуренции двух популяций с учетом их структурности. (г. Москва, ВЦ РАН им. А.А. Дородницына)

11.40 – 12.00 *Перерыв на кофе*

12.00 – 12.15 *Заккрытие конференции*