

ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ ИМ. М.В. КЕЛДЫША РАН
ИНСТИТУТ МАТЕМАТИЧЕСКИХ ПРОБЛЕМ БИОЛОГИИ РАН

KELDYSH INSTITUTE OF APPLIED MATHEMATICS, RUSSIAN ACADEMY OF SCIENCES
INSTITUTE OF MATHEMATICAL PROBLEMS OF BIOLOGY, RUSSIAN ACADEMY OF SCIENCES



**ДОКЛАДЫ МЕЖДУНАРОДНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ
«МАТЕМАТИЧЕСКАЯ БИОЛОГИЯ И БИОИНФОРМАТИКА»**

Том 8

**PROCEEDINGS OF THE INTERNATIONAL CONFERENCE
“MATHEMATICAL BIOLOGY AND BIOINFORMATICS”**

Volume 8

**Под редакцией В.Д.Лахно
Edited by V.D. Lakhno**

Пушино – 2020
Pushchino – 2020

УДК 52-17:51-76
ББК 28в6
МЗ4

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.
Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пушкино: ИМПБ РАН, 2020.

В сборнике представлены доклады VIII Международной конференции «Математическая биология и биоинформатика», проведенной Институтом математических проблем биологии РАН в г. Пушкино Московской области 12-19 октября 2020 г.

Proceedings of the International Conference “Mathematical Biology and Bioinformatics”. Ed. V.D. Lakhno. Vol. 8. Pushchino: IMPB RAS, 2020.

The collection presents the reports of the VIII International Conference "Mathematical Biology and Bioinformatics" held by the Institute of Mathematical Problems of Biology, Russian Academy of Sciences in Pushchino, Moscow Region, October 12–19, 2020.

Оргкомитет:

Лахно В.Д.
Устинин М.Н.
Махортых С.А.
Александров А.А.
Арсеньев А.С.
Васин А.А.
Ильин В.А.
Козлов Н.Н.
Коротков Е.В.
Марков А.В.
Миронов А.А.
Назипова Н.Н.
Ризниченко Г.Ю.
Романюха А.А.
Самсонова М.Г.
Туманян В.Г.
Фрисман Е.Я.
Шабанов Б.М.
Шайтан К.В.

Organizing Committee:

Lakhno, V.D.
Ustinin, M.N.
Makhortykh, S.A.
Aleksandrov, A.A.
Arseniev, A.S.
Vasin, A.A.
Ilyin, V.A.
Kozlov, N.N.
Korotkov, E.V.
Markov, A.V.
Mironov, A.A.
Nazipova, N.N.
Riznichenko, G.Yu.
Romanyukha, A.A.
Samsonova, M.G.
Tumanyan, V.G.
Frisman, E.J.
Shabanov, B.M.
Shaytan, K.V.

Редакционная группа:

Махортых С.А., к.ф.-м.н.
Назипова Н.Н., к.ф.-м.н.
Якушева А.А.
Махортых Е.С.

ОГЛАВЛЕНИЕ

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ НАНОБИОЭЛЕКТРОНИКИ

[Моделирование переноса заряда в нуклеотидных фрагментах вида GA...AGGG](#)

Фиалко Н.С., Лахно В.Д.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуцино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e1. doi: [10.17537/icmbb20.7](https://doi.org/10.17537/icmbb20.7)

[Искусственная нормировка при моделировании переноса заряда в молекулярных цепочках](#)

Зайцев А.Ю., Ольшевец М.М., Фиалко Н.С., Яковлев В.В., Лахно В.Д.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуцино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e2. doi: [10.17537/icmbb20.8](https://doi.org/10.17537/icmbb20.8)

[Равномерное движение и блоховские осцилляции полярона в однородной молекулярной полинуклеотидной цепочке в постоянном электрическом поле на основе модели Пейрарда – Бишоп – Холстейна](#)

Коршунова А.Н., Лахно В.Д.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуцино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e3. doi: [10.17537/icmbb20.10](https://doi.org/10.17537/icmbb20.10)

[Особенности моделирования движения заряда в PolyG / PolyC цепочке ДНК в постоянном электрическом поле на основе модели Пейрарда – Бишоп – Холстейна](#)

Коршунова А.Н., Лахно В.Д.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуцино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e4. doi: [10.17537/icmbb20.11](https://doi.org/10.17537/icmbb20.11)

[Расчет теплоемкости цепочек Peyrard-Bishop-Dauxois методом Монте-Карло](#)

Теплухин А.В.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуцино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e5. doi: [10.17537/icmbb20.13](https://doi.org/10.17537/icmbb20.13)

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ БИОФИЗИКА

[Численный анализ деформации фиброзного кольца митрального клапана](#)

Клышников К.Ю., Онищенко П.С., Коков А.Н., Евтушенко А.В., Овчаренко Е.А.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуцино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e6. doi: [10.17537/icmbb20.5](https://doi.org/10.17537/icmbb20.5)

[Концепция автоматизированного функционального проектирования протезов клапанов сердца](#)

Онищенко П.С., Клышников К.Ю., Резвова М.А., Овчаренко Е.А.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуцино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e7. doi: [10.17537/icmbb20.16](https://doi.org/10.17537/icmbb20.16)

[Простой эмпирический подход к моделированию электронного переноса между белковыми переносчиками в растворе](#)

Хрущев С.С., Федоров В.А., Коваленко И.Б., Ризниченко Г.Ю.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуцино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e8. doi: [10.17537/icmbb20.20](https://doi.org/10.17537/icmbb20.20)

[Структура катион- и лиганд-связывающих центров натрий-кальциевого обменника человека по данным гомологичного моделирования](#)

Шестакова Н.Н., Белинская Д.А.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуцино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e9. doi: [10.17537/icmbb20.2](https://doi.org/10.17537/icmbb20.2)

Влияние внутримолекулярных дисульфидных связей бычьего сывороточного альбумина на его связывающую и псевдоэстеразную активность по данным компьютерного моделирования

Белинская Д.А., Баталова А.А., Гончаров Н.В.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуцино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e10. doi: [10.17537/icmbb20.4](https://doi.org/10.17537/icmbb20.4)

Анализ формы конца микротрубочки

Александрова В.В., Анисимов М.Н., Мустяца В.В., Гудимчук Н.Б.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуцино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e11. doi: [10.17537/icmbb20.21](https://doi.org/10.17537/icmbb20.21)

Моделирование движения кинетохорного комплекса NDC80 по микротрубочке

Лопанская Ю.Н., Холина Е.Г., Федоров В.А., Коваленко И.Б., Гудимчук Н.Б.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуцино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e12. doi: [10.17537/icmbb20.22](https://doi.org/10.17537/icmbb20.22)

Изучение фибриллообразования амилоидогенных участков рибосомных белков S1

Дерюшева Е.И., Мачулин А.В., Селиванова О.М., Гришин С.Ю., Глякина А.В., Сурин А.К., Галзитская О.В.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуцино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e13. doi: [10.17537/icmbb20.19](https://doi.org/10.17537/icmbb20.19)

Реакция детоксификации NO в геме усеченного гемоглобина N туберкулезной палочки с точки зрения многоконфигурационной теории самосогласованного поля

Симон К.В., Тулуб А.В.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуцино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e14. doi: [10.17537/icmbb20.1](https://doi.org/10.17537/icmbb20.1)

О влиянии метилирования на структуру и динамику ДНК

Саркар А.К., Лахири А.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуцино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e15. doi: [10.17537/icmbb20.24](https://doi.org/10.17537/icmbb20.24)

Математическое и численное моделирование энергетической эволюции простейшей клетки с инфинитным числом связей

Молдаванов А.В.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуцино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e16. doi: [10.17537/icmbb20.15](https://doi.org/10.17537/icmbb20.15)

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ОБРАБОТКИ И АНАЛИЗА БИОЛОГИЧЕСКИХ ДАННЫХ

In silico идентификация потенциальных ингибиторов основной протеазы SARS-CoV-2 методами виртуального скрининга, докинга, квантовой химии и молекулярной динамики

Андрианов А.М., Корноушенко Ю.В., Карпенко А.Д., Босько И.П., Тузиков А.В.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуцино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e17. doi: [10.17537/icmbb20.9](https://doi.org/10.17537/icmbb20.9)

Операторный логарифм и вариационные методы в линейных обратных задачах

Дроздовский С.А.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуцино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e18. doi: [10.17537/icmbb20.14](https://doi.org/10.17537/icmbb20.14)

Математическая обработка и компьютерный анализ данных численного моделирования радиотермометрических медицинских обследований

Поляков М.В., Астахов А.С.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуцино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e19. doi: [10.17537/icmbb20.23](https://doi.org/10.17537/icmbb20.23)

Численный анализ терапевтического потенциала р53-зависимых микроРНК на основе лабораторных данных и минимальных математических моделей

Сенотрусова С.Д., Воропаева О.Ф.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуцзино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e20. doi: [10.17537/icmbb20.18](https://doi.org/10.17537/icmbb20.18)

БИОИНФОРМАТИКА

Методы кластеризации в исследовании экспрессии генов

Богатырев М.Ю.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуцзино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e21. doi: [10.17537/icmbb20.27](https://doi.org/10.17537/icmbb20.27)

Применение методов глубокого обучения и молекулярного моделирования для идентификации потенциальных ингибиторов проникновения ВИЧ-1

Николаев Г.И., Шульдов Н.А., Босько И.П., Анищенко А.И., Тузиков А.В., Андрианов А.М.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуцзино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e22. doi: [10.17537/icmbb20.6](https://doi.org/10.17537/icmbb20.6)

Быстрый метод распознавания вида флавивируса при секвенировании его генома

Чалей М.Б., Тюлько Ж.С., Кутыркин В.А.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуцзино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e23. doi: [10.17537/icmbb20.12](https://doi.org/10.17537/icmbb20.12)

Развитие базы данных двухспиральных мотивов белковых молекул и вычислительные сервисы для их анализа

Руднев В.Р., Тихонов Д.А., Куликова Л.И., Кайшева А.Л.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуцзино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e24. doi: [10.17537/icmbb20.32](https://doi.org/10.17537/icmbb20.32)

Анализ структуры белковых молекул с посттрансляционными модификациями при онкопатологии

Тихонов Д.А., Куликова Л.И., Копылов А.Т., Руднев В.Р., Кайшева А.Л.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуцзино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e25. doi: [10.17537/icmbb20.33](https://doi.org/10.17537/icmbb20.33)

Общность популяции гена *denV* у фагов подсемейства *Tevenvirinae* – продукт интенсивного горизонтального переноса генов

Карманова А.Н., Назипова Н.Н., Зимин А.А.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуцзино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e26. doi: [10.17537/icmbb20.28](https://doi.org/10.17537/icmbb20.28)

Across-bulged мотив – новый третичный мотив РНК, содержащий А-минор взаимодействия

Баулин Е.Ф., Фахранурова Л.И.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуцзино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e27. doi: [10.17537/icmbb20.3](https://doi.org/10.17537/icmbb20.3)

Обнаружение в геномах высших организмов сильно размытых мегасателлитных повторов

Назипова Н.Н., Тюльбашева Г.Э., Теплухина Е.И.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуцзино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e28. doi: [10.17537/icmbb20.36](https://doi.org/10.17537/icmbb20.36)

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ БИОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И СТРУКТУР БИОМОЛЕКУЛ

Разработка модели взаимодействия белка EB1 с микротрубочкой

Анисимов М.Н., Александрова В.В., Саранцева М.Ю., Гудимчук Н.Б.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуцзино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e29. doi: [10.17537/icmbb20.17](https://doi.org/10.17537/icmbb20.17)

Исследование взаимодействия микротрубочки и паклитаксела *in vitro* и *in silico*

Вовченко М.А., Александрова В.В., Мустяца В.В., Гудимчук Н.Б.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуццино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e31. doi: [10.17537/icmbb20.30](https://doi.org/10.17537/icmbb20.30)

Многомерный статистический анализ пространственных структур ДНК в интерфейсах комплексов семейства гомеодоменов - ДНК: спиральные параметры

Полозов Р.В., Грохлина Т.И., Панченко Л.А., Иванов В.В.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуццино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e32. doi: [10.17537/icmbb20.25](https://doi.org/10.17537/icmbb20.25)

ПОПУЛЯЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Демографическая микросимуляционная модель для долгосрочной эволюции синтетических популяций в Санкт-Петербурге

Арзамасцев С.А., Леоненко В.Н.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуццино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e33. doi: [10.17537/icmbb20.29](https://doi.org/10.17537/icmbb20.29)

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ЭКОЛОГИЯ

Применение вейбулловской модели к оценке продолжительности жизни и темпов старения белоплечего орлана

Романов М.С., Мастеров В.Б.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуццино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e34. doi: [10.17537/icmbb20.35](https://doi.org/10.17537/icmbb20.35)

Сравнение величин эффектов в линейных моделях при анализе почвенных характеристик на массовом ветровале в широколиственном лесу

Ханина Л.Г., Бобровский М.В., Смирнов В.Э., Иващенко К.В., Журавлева А.И., Жмайлов И.В.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуццино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e35. doi: [10.17537/icmbb20.34](https://doi.org/10.17537/icmbb20.34)

Оценка качества автоматического детектирования деревьев по материалам аэрофотосъёмки с помощью квадрокоптера

Иванова Н.В., Шашков М.П., Шанин В.Н., Грабарник П.Я.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 8. Пуццино: ИМПБ РАН, 2020. Статья № e36. doi: [10.17537/icmbb20.31](https://doi.org/10.17537/icmbb20.31)