

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 9

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

Volume 9

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

Пушино – 2022
Pushchino – 2022

УДК 52-17:51-76
ББК 28в6
МЗ4

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.
Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пушкино: ИМПБ РАН, 2022.

В сборнике представлены доклады IX Международной конференции «Математическая биология и биоинформатика», проведенной Институтом математических проблем биологии РАН в г. Пушкино Московской области 17-19 октября 2022 г.

Proceedings of the International Conference “Mathematical Biology and Bioinformatics”. Ed.
V.D. Lakhno. Vol. 9. Pushchino: IMPB RAS, 2022.

The collection presents the reports of the IX International Conference "Mathematical Biology and Bioinformatics" held by the Institute of Mathematical Problems of Biology, Russian Academy of Sciences in Pushchino, Moscow Region, October 17–19, 2022.

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:

Назипова Н.Н., к.ф.-м.н.
Якушева А.А.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ИМПБ РАН 50 лет. Лаборатория квантово-механических систем

Лахно В.Д.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пущино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e1. doi: [10.17537/icmbb22.34](https://doi.org/10.17537/icmbb22.34)

ИМПБ РАН 50 лет. Лаборатория кристаллографии макромолекул

Лунин В.Ю.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пущино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e2. doi: [10.17537/icmbb22.37](https://doi.org/10.17537/icmbb22.37)

ИМПБ РАН 50 лет. Лаборатория молекулярной динамики

Балабаев Н.К.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пущино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e3. doi: [10.17537/icmbb22.36](https://doi.org/10.17537/icmbb22.36)

ИМПБ РАН 50 лет. Лаборатория биоинформатики

Назипова Н.Н.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пущино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e4. doi: [10.17537/icmbb22.35](https://doi.org/10.17537/icmbb22.35)

ИМПБ РАН 50 лет. Лаборатория обработки данных

Махортых С.А.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пущино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e5. doi: [10.17537/icmbb22.55](https://doi.org/10.17537/icmbb22.55)

ИМПБ РАН 50 лет. Группа компьютерного моделирования наноструктур и биосистем

Быстров В.С.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пущино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e6. doi: [10.17537/icmbb22.39](https://doi.org/10.17537/icmbb22.39)

ИМПБ РАН 50 лет. Группа геоморфометрического моделирования

Флоринский И.В.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пущино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e7. doi: [10.17537/icmbb22.33](https://doi.org/10.17537/icmbb22.33)

ИМПБ РАН 50 лет. Лаборатория вычислительной экологии

Ханина Л.Г., Иванова Н.В., Шашков М.П., Смирнов В.Э., Романов М.С., Шанин В.Н., Фролов П.В., Глухова Е.М., Бобровский М.В.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пущино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e8. doi: [10.17537/icmbb22.38](https://doi.org/10.17537/icmbb22.38)

ПОПУЛЯЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Переход от локальной би- и квадроустойчивости к пространственно-временной неоднородности

Фрисман Е.Я., Кулаков М.П.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пущино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e9. doi: [10.17537/icmbb22.4](https://doi.org/10.17537/icmbb22.4)

Стохастический алгоритм в реакционно-диффузионной модели процессов коммуникации эволюционирующих бактерий

Масловская А.Г., Саруханян С.К., Куттлер К.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пущино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e10. doi: [10.17537/icmbb22.49](https://doi.org/10.17537/icmbb22.49)

Динамика макромолекулярного состава культуры микроводорослей в условиях естественного освещения. Модель

Лелеков А.С., Ширяев А.В.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуцино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e11. doi: [10.17537/icmbb22.5](https://doi.org/10.17537/icmbb22.5)

Математическое моделирование сценариев развития планктонного сообщества в процессе эволюции

Неверова Г.П., Жданова О.Л.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуцино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e12. doi: [10.17537/icmbb22.8](https://doi.org/10.17537/icmbb22.8)

О роли естественного отбора в генетической дивергенции миграционно-связанных популяций: сопоставление результатов эксперимента и математического моделирования

Жданова О.Л., Фрисман Е.Я.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуцино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e13. doi: [10.17537/icmbb22.8](https://doi.org/10.17537/icmbb22.8)

Модель конкуренции двух популяций с учетом их структурности

Белотелов Н.В., Бровко А.В.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуцино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e14. doi: [10.17537/icmbb22.29](https://doi.org/10.17537/icmbb22.29)

**МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ НАНОСТРУКТУР И БИОМОЛЕКУЛ.
МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ НАНОБИОЭЛЕКТРОНИКИ**

Проявление элементов блоховских осцилляций полярона в процессе его равномерного движения по цепочке

Коршунова А.Н., Лахно В.Д.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуцино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e15. doi: [10.17537/icmbb22.9](https://doi.org/10.17537/icmbb22.9)

Поиск температуры выпаривания ионов ОН из гидроксипатита

Лихачев И.В., Балабаев Н.К., Быстров В.С.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуцино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e16. doi: [10.17537/icmbb22.11](https://doi.org/10.17537/icmbb22.11)

Разрушение полярона при разных способах моделирования термостата

Фиалко Н.С., Ольшевец М.М., Лахно В.Д.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуцино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e17. doi: [10.17537/icmbb22.16](https://doi.org/10.17537/icmbb22.16)

Фотоэлектронные свойства дифенилаланиновых пептидных нанотрубок

Быстров В.С., Парамонова Е.В., Зеленовский П.С., Фридкин В.М., Lin T., Shen H., Meng X.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуцино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e18. doi: [10.17537/icmbb22.24](https://doi.org/10.17537/icmbb22.24)

Моделирование и компьютерные исследования свойств гидроксипатита

Быстров В.С., 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.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуцино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e19. doi: [10.17537/icmbb22.25](https://doi.org/10.17537/icmbb22.25)

Анализ свойств локусов многопараметрического пространства квантово-классической модели фотоизомеризации родопсина

Шигаев А.С., Лихачёв И.В., Лахно В.Д.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуцино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e20. doi: [10.17537/icmbb22.56](https://doi.org/10.17537/icmbb22.56)

О конформационных предпочтениях 2-селенуридина и его производных

Pal R., Mishra S., Lahiri A.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуцзино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e21. doi: [10.17537/icmbb22.20](https://doi.org/10.17537/icmbb22.20)

Вклад полусайтового интервала в распознавание bZIP-ДНК

Sarkar A.K., Sarkar A., Lahiri A.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуцзино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e22. doi: [10.17537/icmbb22.17](https://doi.org/10.17537/icmbb22.17)

Методы расчёта хиральности вторичных и надвторичных структур белков

Сидорова А.Э., Луценко А.О., Шпигун Д.К.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуцзино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e23. doi: [10.17537/icmbb22.32](https://doi.org/10.17537/icmbb22.32)

БИОИНФОРМАТИКА И КОМПЬЮТЕРНАЯ БИОМЕДИЦИНА

Биоинформатическое исследование семейства бактериальных рибосомных белков S1: особенности структурной организации, амилоидогенные области в S1 доменах, эволюция бактериальных отделов, создание новых антибактериальных пептидов

Галзитская О.В., Мачулин А.В., Дерюшева Е.И., Панфилов А.В., Сурин А.А., Кравченко С.В., Глякина А.В., Гришин С.Ю.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуцзино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e24. doi: [10.17537/icmbb22.14](https://doi.org/10.17537/icmbb22.14)

Идентификация таксономической принадлежности вирусов с помощью таргетного анализа вирусного генома

Чалей М.Б., Кутыркин В.А.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуцзино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e25. doi: [10.17537/icmbb22.3](https://doi.org/10.17537/icmbb22.3)

Взаимодействие трициклических антидепрессантов с NMDA-рецептором по данным компьютерного моделирования

Белинская Д.А., Шестакова Н.Н.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуцзино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e26. doi: [10.17537/icmbb22.6](https://doi.org/10.17537/icmbb22.6)

Исследование стабильности структурных мотивов типа 3β-уголок

Руднев В.Р., Никольский К.С., Петровский Д.В., Куликова Л.И., Кайшева А.Л., Ефимов А.В.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуцзино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e27. doi: [10.17537/icmbb22.30](https://doi.org/10.17537/icmbb22.30)

Филогенетический анализ белка лубрицина и сурфактант-ассоциированных белков В и С

Третьякова А.В., Герасимова Е.О., Крылов П.А., Новочадов В.В.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуцзино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e28. doi: [10.17537/icmbb22.18](https://doi.org/10.17537/icmbb22.18)

Биоинформационный анализ структурно-функциональных свойств белков поверхностной зоны суставного хряща и белков сурфактанта

Герасимова Е.О., Третьякова А.В., Крылов П.А.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуцзино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e29. doi: [10.17537/icmbb22.21](https://doi.org/10.17537/icmbb22.21)

Биоинформатический анализ нового бактериоцина III класса из *L. fermentum* 3872

Мачулин А.В., Дерюшева Е.И., Абрамов В.М., Косарев И.В., Карлышев А.В.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуцзино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e30. doi: [10.17537/icmbb22.15](https://doi.org/10.17537/icmbb22.15)

Изучение механизма реакций, катализируемых комплексом цитохрома С с кардиолипином

Левченко И.Н., Владимиров Г.К., Володяев И.В.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуцзино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e31. doi: [10.17537/icmbb22.19](https://doi.org/10.17537/icmbb22.19)

Математическое моделирование квантовых выходов активированной кумарином С-525 хемилюминесценции под действием комплекса цито-хрома С с кардиолипином

Левченко И.Н., Володяев И.В., Владимиров Г.К., Боярченков А.С.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуццино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e32. doi: [10.17537/icmbb22.22](https://doi.org/10.17537/icmbb22.22)

Длинные прямые повторы в бактериальных хромосомах

Панюков В.В., Озолин О.Н., Киселев С.С.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуццино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e33. doi: [10.17537/icmbb22.46](https://doi.org/10.17537/icmbb22.46)

Биоинформатический поиск и формирование панели лигандов сывороточного альбумина, модулирующих его взаимодействие с Аβ-пептидом

Дерюшева Е.И., Немашкалова Е.Л., Шевелёва М.П., Литус Е.А.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуццино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e34. doi: [10.17537/icmbb22.1](https://doi.org/10.17537/icmbb22.1)

Оптические свойства лютеолина: исследование методом DFT

Дельгадо Е., Дерябина А.С., Васкес Г.Д., Пруцких Т., Гонсалес Е., Полтев В.И.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуццино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e35. doi: [10.17537/icmbb22.27](https://doi.org/10.17537/icmbb22.27)

Минимизация автомата Ахо-Корасик. Приложение к вычислению P-значения вхождений образцов

Фурлетова Е.И.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуццино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e36. doi: [10.17537/icmbb22.54](https://doi.org/10.17537/icmbb22.54)

МЕТОДЫ ОБРАБОТКИ БИМЕДИЦИНСКИХ ДАННЫХ

Диаметр частиц, фазовый состав, площадь поверхности и толщина пленки наночастиц меди как предикторы антибактериальной активности

Кудряшова Н.О., Жигач А.Н., Жуденков К.В., Глущенко Н.Н.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуццино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e37. doi: [10.17537/icmbb22.52](https://doi.org/10.17537/icmbb22.52)

Фактор роста эндотелия сосудов (VEGF-A₁₆₅): ассоциация с заболеваниями, моделирование структуры и сравнение с экспериментальными данными

Немашкалова Е.Л., Шевелёва М.П., Дерюшева Е.И.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуццино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e38. doi: [10.17537/icmbb22.2](https://doi.org/10.17537/icmbb22.2)

Анализ фармакологических данных с использованием методов математического моделирования

Яковлева Т.А.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуццино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e39. doi: [10.17537/icmbb22.51](https://doi.org/10.17537/icmbb22.51)

Мультимодальная кластеризация в анализе данных осложнений инфаркта миокарда

Богатырев М.Ю., Шестака Т.В.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуццино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e40. doi: [10.17537/icmbb22.45](https://doi.org/10.17537/icmbb22.45)

К вопросу о спектральном анализе регуляции основного ритма сердца

Москаленко А.В., Махортых С.А.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуццино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e41. doi: [10.17537/icmbb22.13](https://doi.org/10.17537/icmbb22.13)

Статистический подход к решению обратной задачи электрокардиографии

Полосин В.Г.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуццино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e42. doi: [10.17537/icmbb22.10](https://doi.org/10.17537/icmbb22.10)

Обзор подходов к математическому описанию динамики клеток тимуса

Кулеш В.С.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуцино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e43. doi: [10.17537/icmbb22.53](https://doi.org/10.17537/icmbb22.53)

Современные теории сознания, материалистическая и макроскопическая

Мазуров М.Е.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуцино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e44. doi: [10.17537/icmbb22.7](https://doi.org/10.17537/icmbb22.7)

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ЭКОЛОГИЯ

Опыт использования нейронной сети DeepForest для детектирования деревьев в широколиственном лесу

Портнов А.М., Иванова Н.В., Шашков М.П.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуцино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e45. doi: [10.17537/icmbb22.12](https://doi.org/10.17537/icmbb22.12)

Влияние массового ветровала в широколиственном лесу на свойства песчаных и суглинистых почв

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 9. Пуцино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e46. doi: [10.17537/icmbb22.50](https://doi.org/10.17537/icmbb22.50)

Разнообразие сообществ грибов и бактерий и динамика физико-химических свойств древесины широколиственных видов деревьев и ели европейской в ходе деструкции после массового ветровала

Ханина Л.Г., Волобуев С.В., Смирнов В.Э., Тутукина М.Н., Шелякин П.В., Бобровский М.В.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуцино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e47. doi: [10.17537/icmbb22.48](https://doi.org/10.17537/icmbb22.48)

Анализ эффективности воспроизводства белоплечего орлана на Сахалине с помощью обобщённых линейных смешанных моделей (GLMM)

Романов М.С., Мастеров В.Б.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуцино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e48. doi: [10.17537/icmbb22.47](https://doi.org/10.17537/icmbb22.47)

МЕТОДЫ ГЕОМОРФОМЕТРИИ

Геоморфометрическое моделирование нанорельефа по данным атомно-силовой микроскопии

Дедкова А.А., Флоринский И.В.

Доклады Международной конференции “Математическая биология и биоинформатика”.

Под ред. В.Д. Лахно. Том 9. Пуцино: ИМПБ РАН, 2022. Статья № e49. doi: [10.17537/icmbb22.26](https://doi.org/10.17537/icmbb22.26)