

Посвящается 60-летию
Объединенного Института Ядерных Исследований

XXIII Международная Конференция

**МАТЕМАТИКА
КОМПЬЮТЕР
ОБРАЗОВАНИЕ**

Симпозиум с международным участием

**Биофизика сложных систем
Молекулярное моделирование
Системная биология**

Организаторы:

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
Объединенный институт ядерных исследований (г.Дубна),
Международный университет природы, общества, человека «Дубна»,
Пушинский центр биологических исследований РАН,
Институт биофизики клетки РАН,
Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН,
Научный совет РАН по биологической физике,
Институт прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН,
Межрегиональная общественная организация «Женщины в науке и образовании»,
Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта РАН,
Фонд поддержки научно-проектной деятельности студентов, аспирантов и молодых ученых
«Национальное интеллектуальное развитие».
при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 16-04-20005 Г).

Программа



Дубна, 25 – 30 января 2016 г.

Пленарные и секционные заседания проводятся в здании Лаборатории Информационных Технологий (ЛИТ) Объединенного института ядерных исследований (ОИЯИ).

Пленарные заседания проводятся в Конференц-зале (5 этаж).

Оргкомитет работает в холле Конференц-зала.

Стендовые сессии проводятся в холле 4-го этажа.

Заседания проекта ФОРЭС проводятся в библиотеке им. Д.И.Блохинцева (ул. Блохинцева, 13/7).

Внимание!

Пронос фото- и видеоаппаратуры на территорию ОИЯИ строго запрещён.

Выход с территории ОИЯИ строго до 22 часов.

Руководители секций:

S1 Математические теории

Александр Владимирович Коганов, Николай Алексеевич Митин

S2 Вычислительные методы и математическое моделирование

*Алексей Иванович Лобанов, Владимир Ефимович Карпов,
Сергей Васильевич Сидоров, Александр Васильевич Шаповалов,
Андрей Юрьевич Трифионов, Алексей Михайлович Нестеренко*

S3 Анализ сложных биологических систем. Эксперимент и модели

*Андрей Борисович Рубин, Николай Вадимович Белотелов,
Владислав Михайлович Комаров, Татьяна Юрьевна Плюснина,
Андрей Александрович Полежаев, Анатолий Александрович Сорокин*

S4.1 Математические методы в экономике (Экономфизика)

*Дмитрий Сергеевич Чернавский, Анатолий Викторович Шатров,
Юрий Леонидович Словохотов, Ольга Евгеньевна Пыркина*

S4.2 Анализ и моделирование экономических и социальных процессов

*Александр Евгеньевич Варшавский, Наталья Анатольевна Винокурова,
Екатерина Владимировна Кочеткова*

S5 Естественно-научное и гуманитарное образование

*Елена Владимировна Борисова, Владимир Ильич Заляпин,
Надежда Васильевна Аммосова, Жозеф Михайлович Работ,
Леонид Яковлевич Шляпочник*

S6 Музей в современном мире

Татьяна Петровна Гончарова

W1 Молекулярное моделирование

Мария Григорьевна Хренова, Илья Борисович Коваленко

W2 Системная биология

Анатолий Александрович Сорокин, Татьяна Юрьевна Плюснина

Расписание работы секций:

25 января, понедельник					E1 (ауд. 407)
13.00					
14.00	Пленарное заседание (Конференц-зал)				
19.00	R1 (Конференц-зал)				
26 января, вторник					
10.00	Пленарное заседание (Конференц-зал)				
10.45				S5 ФОРΟΣ (ул. Блохитцева)	
11.30	W1+W2+S1+S2+S3 Стенды				
14.30	S1+R4 (ауд. 310)	W2+S2+S3 (ауд. 437) Устные доклады	S4 Стенды	S5+E10 (ауд. 413)	E9 (ауд. 407)
17.00			R6 (Конференц-зал)		E5+E6 (ауд. 406.2)
19.00	Лекция (Конференц-зал)				
27 января, среда					
9.00	S1 (ауд. 310)	W1+S2+S3 (Конференц-зал) Устные доклады	S4 (ауд. 406.1)	S5 Стенды	E9 (ауд. 407)
10.00					E2 (ауд. 406.2)
11.30	Пленарное заседание (Конференц-зал)				
14.30	Пленарное заседание (Конференц-зал)				
16.00	S1 (ауд. 310)	W1+S2+S3 (Конференц-зал) Устные доклады	S4 (ауд. 406.1)	S5 (ауд. 413)	E3 (ауд. 406.2)
18.00					
19.00	S6 (Конференц-зал)				
28 января, четверг					
9.00	S1 (ауд. 310)	S2 (ауд. 437)	S3 (Конференц-зал) Устные доклады	S4 (ауд. 406.1)	S5 (ауд. 413)
10.00					E9 (ауд. 407)
11.30	Пленарное заседание (Конференц-зал)				
15.00	Экспертиза	R3 (Конференц-зал)		S5+E11 (ауд. 437)	E7 (ауд. 406.2)
29 января, пятница					
9.00	S1 (ауд. 310)	S2 (ауд. 437)	S3 (Конференц-зал) Устные доклады	S4 (ауд. 406.1)	S5 (ауд. 413)
10.00					E9 (ауд. 407)
12.00	Пленарное заседание (Конференц-зал)				
15.00	Пленарное заседание (Конференц-зал)				
16.00	R5 (Конференц-зал)				

Возможны изменения в программе! Следите за объявлениями на стенде.

25 января, понедельник

10.00 – 14.00 Заезд участников

13.00 – 19.00 Регистрация участников в холле Конференц-зала

13.00 Мастер класс

13.00 «Питон для решения биологических задач: базовые сведения о языке Python». ЛИТ ОИЯИ, ауд. 407 **E1**
Ведущие – *Иван Витальевич Озеров, Филипп Сергеевич Орехов, Владимир Андреевич Федоров*

14.00 Пленарное заседание. ЛИТ ОИЯИ, Конференц-зал Председатель – *Галина Юрьевна Ризниченко*

14.00 Открытие конференции

14.10 – 14.50 *Григорий Владимирович Трубников* (член-корр. РАН, вице-директор ОИЯИ) Научная программа ОИЯИ. Проект NISA

14.50 – 15.20 *Владимир Васильевич Кореньков* (директор лаборатории информационных технологий ОИЯИ) Тенденции развития распределённых вычислений и больших данных

15.20 – 15.40 *Евгения Наумовна Черемисина* (директор Института системного анализа и управления Университета «Дубна») Инновационные принципы ИТ-образования в Университете «Дубна»

15.40 – 16.00 Перерыв

16.00 – 16.20 *Станислав Владиславович Пакуляк* (Директор Учебного центра ОИЯИ) Образовательная программа ОИЯИ

16.20 – 16.50 *Красавин Евгений Александрович* (член-корр РАН, Директор Лаборатории радиационной биологии ОИЯИ) Радиационный барьер при пилотируемых полётах в дальний космос

16.50 – 17.30 *Андрей Борисович Рубин* (член-корр. РАН, Председатель Совета по биофизике РАН, зав. каф. биофизики биологического ф-та Московского государственного университета им. М.В.Ломоносова)
Биофизика. Проблемы развития

17.30 – 18.00 *Галина Юрьевна Ризниченко* (Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова) «Математика. Компьютер. Образование». Конференции и сборники научных трудов. Журнал «Компьютерные исследования и моделирование». Программа XXIII Конференции

18.00 – 18.15. Объявление о работе секций

18.15 – 19.00 Ужин-фуршет

19.00 Круглый стол. ЛИТ ОИЯИ, Конференц-зал

19.00 – 21.00 Культурное пространство России: книги, журналы, конференции **R1**

26 января, вторник

10.00	Пленарное заседание. ЛИТ ОИЯИ, Конференц-зал Председатель – <i>Александр Васильевич Шаповалов</i>	
10.00 – 10.30	<i>Владимир Михайлович Тихомиров</i> (Механико-математический ф-т Московского государственного университета им. М.В.Ломоносова) Математическое образование (цели, концепции, структура и содержание)	
10.30 – 11.00	<i>Дмитрий Сергеевич Чернавский,</i> <i>Ольга Дмитриевна Чернавская</i> (Физический институт им. Лебедева РАН, Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова) Современные течения в когнитологии	
11.00 – 11.30	Перерыв. Кофе	
12.00 – 12.30	<i>Александр Евгеньевич Варшавский</i> (Центральный экономико-математический институт РАН) Некоторые социально-экономические и политические угрозы чрезмерного неравенства	
12.30 – 13.00	<i>Вениамин Наумович Лившиц</i> (Центральный экономико-математический институт РАН), <i>Станислав Аврорович Панов</i> (Университет «Дубна») Неравенство в России и его последствия	
11.30	Работа по секциям	
11.30 – 13.30	Стендовая сессия	W1+W2+S1+S2+S3
10.45	Проект ФОРΟΣ Руководители проекта – <i>Елена Александровна Солодова,</i> <i>Елена Владимировна Борисова,</i> <i>Валентина Александровна Харитонова,</i> <i>Петр Дмитриевич Ширков.</i> Выступление участников проекта – директоров школ, учителей и школьников. <i>Библиотека им. Д.И.Блохинцова (ул. Блохинцова, 13/7)</i>	

13.30 – 14.30 Перерыв. Обед

26 января, вторник (вечер)

14.30		Работа по секциям
14.30 – 19.00	Системная биология <i>ЛИТ ОИЯИ, ауд. 437</i>	W2+S2+S3
14.30 – 16.30	Заседание, посвященное памяти Дмитрия Алексеевича Силаева. <i>ЛИТ ОИЯИ, ауд. 310</i>	R4
14.30 – 16.30	Стендовая сессия	S4
16.30 – 17.00	Перерыв. Кофе	
17.00 – 19.00	Круглый стол «Экспериментальная экономика» Ведущий – <i>Анатолий Николаевич Козырев</i> (Центральный экономико-математический институт РАН) <i>ЛИТ ОИЯИ, Конференц-зал</i>	R6
15.00		Мастер классы
15.00 – 18.00	«Распределенные вычисления». Занятие 1 Ведущие – <i>Группа по гетерогенным вычислениям HybriLIT</i> <i>ЛИТ ОИЯИ, ауд. 407</i>	E9
15.00 – 18.00	«Расчет и анализ нормальных мод белковых структур. Анализ консервативности и коэволюции аминокислотных позиций в белках». Ведущий – <i>Филипп Сергеевич Орехов</i> <i>ЛИТ ОИЯИ, ауд. 406.2</i>	E5+E6
15.00 – 17.00	«Преподавание геометрии в системе дистанционного обучения СУНЦ МГУ на примере некоторых задач для учащихся 8-го класса» Ведущая – <i>Елена Вячеславовна Шивринская</i> <i>ЛИТ ОИЯИ, ауд. 413</i>	S5+E10
19.00		Лекция . ЛИТ ОИЯИ, Конференц-зал
19.00– 20.00	<i>Григорий Михайлович Полотовский</i> (Нижегородский государственный университет) Не математики о математиках	

27 января, среда

9.00	Работа по секциям	
9.00 – 11.00	Устные доклады	S1, S4
9.00 – 11.00	Молекулярное моделирование <i>ЛИТ ОИЯИ, Конференц-зал</i>	W1+S2+S3
9.00 – 11.00	Стендовая сессия	S5
10.00	Мастер классы	
10.00 – 13.30	«Распределенные вычисления». Занятие 2 Ведущие – <i>Группа по гетерогенным вычислениям HybriLIT</i> <i>ЛИТ ОИЯИ, ауд. 407</i>	E9
10.00 – 13.30	«Интегрирование уравнений в частных производных типа реакция-диффузия при помощи python/numru» Ведущий – <i>Алексей Михайлович Нестеренко</i> <i>ЛИТ ОИЯИ, ауд. 406.2</i>	E2

11.00-11.30 Перерыв. Кофе

11.30	Пленарное заседание. ЛИТ ОИЯИ, Конференц-зал Председатель – <i>Александр Берлиевич Медвинский</i>	
11.30 – 12.00	<i>Богданов Александр Владимирович</i> (Санкт-Петербургский государственный университет) Проблемы физико-математического образования с точки зрения специалиста по вычислительным наукам	
12.00 – 12.30	<i>Роман Гербертович Ефремов</i> (Институт биоорганической химии им. М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН) Клеточные мембраны как стохастические динамические системы: от атомистического моделирования – к рациональному конструированию новых мембранных материалов	
12.30 – 13.00	<i>Дмитрий Олегович Логофет</i> (Институт физики атмосферы РАН, Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова) Модель как инструмент познания. Поучительная история про матрицы и графы. Продолжение	

13.30-14.30 Перерыв. Обед

27 января, среда (вечер)

14.30	Пленарное заседание. ЛИТ ОИЯИ, Конференц-зал Председатель – <i>Галина Владимировна Лебедева</i>
14.30 – 15.00	<i>Владимир Леонидович Натяганов</i> (Механико-математический ф-т Московского государственного университета им. М.В.Ломоносова) Критические параллели планеты, астрономический хронограф сейсмичности и опасные геофизические эксперименты
15.00 – 15.30	<i>Андрей Кимович Цатурян</i> (Институт механики Московского государственного университета им. М.В.Ломоносова) Механизмы работы и регуляции актин-миозинового мотора поперечно-полосатых мышц.

15.30-16.00 Перерыв. Кофе

16.00	Работа по секциям	
16.00 – 19.00	Устные доклады	S1, S4, S5
16.00 – 19.00	Молекулярное моделирование <i>ЛИТ ОИЯИ, Конференц-зал</i>	W1+S2+S3
18.00– 21.00	Круглый стол «Архитектура, городское планирование и биофизика». Ведущий – <i>Рустам Анварович Исмаилов</i> <i>ЛИТ ОИЯИ, ауд. 437</i>	R7
19.00– 21.00	Круглый стол «Дискуссионные проблемы естествознания». Ведущие – <i>Александр Владимирович Коганов, Татьяна Юрьевна Плюснина</i> <i>ЛИТ ОИЯИ, ауд. 407</i>	R2
19.00– 21.00	Музей в современном мире Ведущая – <i>Татьяна Петровна Гончарова</i> <i>ЛИТ ОИЯИ, Конференц-зал</i>	S6
16.00	Мастер класс	
16.00 – 19.00	«Алгоритмы кластеризации сложных данных на примере анализа биологических изображений» Ведущий – <i>Иван Витальевич Озеров</i> <i>ЛИТ ОИЯИ, ауд. 406.2</i>	E3

28 января, четверг

9.00	Работа по секциям	
9.00 – 11.00	Устные доклады	S1, S2, S3, S4, S5
10.00	Мастер классы	
10.00 – 13.00	«Распределенные вычисления». Занятие 3 Ведущие – <i>Группа по гетерогенным вычислениям HybriLIT ЛИТ ОИЯИ, ауд. 407</i>	E9
10.00– 13.30	«Основные приемы работы с пакетом PyMOL» Ведущий – <i>Дмитрий Владимирович Зленко ЛИТ ОИЯИ, ауд. 406.2</i>	E4
11.00-11.30 Перерыв. Кофе		
11.30	Пленарное заседание. ЛИТ ОИЯИ, Конференц-зал Председатель – <i>Алексей Иванович Лобанов</i>	
11.30 – 12.00	<i>Сергей Николаевич Дмитриев</i> (Лаборатория ядерных реакций ОИЯИ) Фабрика сверхтяжелых элементов. Проект DRIBS	
12.00 – 12.30	<i>Дмитрий Вадимович Наумов</i> (Лаборатория ядерных проблем ОИЯИ) Нейтринная программа ОИЯИ. Проект «Байкал»	
12.30 – 13.00	<i>Александр Берельевич Медвинский</i> (Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН) Хаос в динамике популяций: математические модели и реальность	
13.30-15.00 Перерыв. Обед		
15.00	Работа по секциям	
15.00 – 17.30	Математические проблемы биологии Ведущий – <i>Нестеренко Алексей Михайлович ЛИТ ОИЯИ, Конференц-зал</i>	R3
15.00	Мастер классы	
15.00– 18.00	«Моделирование пространственной структуры белка по гомологии». Ведущий – <i>Дмитрий Владимирович Зленко ЛИТ ОИЯИ, ауд. 406.2</i>	E7
15.00– 18.00	«Физика на кухне» Ведущий – <i>Иван Алексеевич Ломаченков ЛИТ ОИЯИ, ауд. 437</i>	S5+E11
15.00	Экскурсии	
19.00	Товарищеский ужин. Ресторан «Дубна» (ул. Векслера, 8)	

29 января, пятница

9.00	Работа по секциям	
9.00 – 11.30	Устные доклады	S1, S2, S3, S4, S5

10.00	Мастер классы	
10.00 – 13.00	«Распределенные вычисления». Занятие 4 Ведущие – <i>Группа по гетерогенным вычислениям HybriLIT ЛИТ ОИЯИ, ауд. 407</i>	E9
10.00– 13.30	«Расчет парциальных зарядов и валентных взаимодействий для конструирования механических моделей» Ведущий – <i>Алексей Михайлович Нестеренко ЛИТ ОИЯИ, ауд. 406.2</i>	E8

11.30-12.00 Перерыв. Кофе

12.00	Пленарное заседание. ЛИТ ОИЯИ, Конференц-зал Председатель – <i>Александр Владимирович Коганов</i>	
12.00 – 13.00	<i>Георгий Геннадьевич Малинецкий</i> (Институт прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН) Наука, войны будущего и оружие России	

13.30-15.00 Перерыв. Обед

15.00	Пленарное заседание. ЛИТ ОИЯИ, Конференц-зал Председатель – <i>Галина Юрьевна Ризниченко</i>	
15.00 – 16.00	Отчет секций <i>Вручение призов за лучшие стендовые доклады</i> <ul style="list-style-type: none">• Математические теории• Вычислительные методы и математическое моделирование• Анализ сложных биологических систем. Эксперимент и модель• Социально-экономические исследования• Естественно-научное и гуманитарное образование	

16.00	Работа по секциям	
16.00 – 17.30	Наша история. Наши учителя Ведущая – <i>Наталья Николаевна Ченцова</i> <i>ЛИТ ОИЯИ, Конференц-зал</i>	R5

17.30 Закрытие Конференции

19.00 Концерт в Доме Ученых. Шедевры мировой музыки

30 января, суббота

Разъезд участников

Тематическое совещание W2

Системная биология

26 января, вторник, 14³⁰

Ведущие – *Татьяна Юрьевна Плюснина*

(Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова),

Анатолий Александрович Сорокин (Институт биофизики клетки РАН)

Системная биология – это молодая и быстро развивающаяся отрасль науки, возникшая на рубеже тысячелетия на стыке молекулярной биологии, вычислительной математики, биоинформатики и теории сложных систем.

Приглашённые доклады:

- *Анатолий Александрович Сорокин* (Институт биофизики клетки РАН)
Rule-based моделирование систем внутриклеточной сигнализации
- *Евгений Александрович Метелкин* (Институт системной биологии)
Использование математического моделирования биологических систем для решения актуальных задач современной фармакологии
- *Галина Владимировна Лебедева* (Институт системной биологии)
Глобальный анализ чувствительности в применении к моделям системной фармакологии

Тематическое совещание W1

Молекулярное моделирование

27 января, среда, 9⁰⁰ и 16⁰⁰

Ведущие – *Мария Григорьевна Хренова, Илья Борисович Коваленко*

(Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова)

Исследования с применением методов квантовой химии, молекулярной и броуновской динамики играют важную роль в изучении самых разных объектов. В рамках семинара предполагается обсуждение физических основ молекулярного моделирования и его применения в различных областях науки и техники.

Приглашённые доклады:

- *Андрей Викторович Головин* (Физический факультет Московского государственного университета им. М.В.Ломоносова) Robotic mechanism-based QM/MM maturation of a scavenger antibody mutationally boosts its performance
- *Гудимчук Никита Борисович* (Факультет биоинженерии и биоинформатики Московского государственного университета им. М.В.Ломоносова) Молекулярно-механическая модель динамической микротрубочки
- *Жмуров Артём Андреевич* (Московский физико-технический институт) Изучение наномеханики супервторичных структур методами молекулярного моделирования

Круглый стол R1

Культурное пространство России: книги, журналы, конференции

25 января, понедельник, 19⁰⁰

Ведущая – *Галина Юрьевна Ризниченко*

(Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова)

Представление серии «Биофизика. Математическая биология» издательства РХД. Представление журналов «Компьютерные исследования и моделирование» (*Сергей Сергеевич Хрущев*) и «Математика в высшем образовании» (*Григорий Михайлович Полотовский*).

Юрий Дмитриевич Нечипуренко (Институт молекулярной биологии РАН, Союз Писателей). Книги «Анализ связывания биологически активных соединений с нуклеиновыми кислотами» (в серии «Междисциплинарные вопросы биологии, математики, физики, химии и медицины») и «Сокровищница» (рассказы о хранителях русского языка: Ломоносов, Даль, Афанасьев и Бунин).

Станислав Владиславович Пакуляк (Директор Учебного центра ОИЯИ) 25 лет учебному центру ОИЯИ (К 60-летию ОИЯИ).

Петр Дмитриевич Ширков (Университет «Дубна») О работе с детьми в ОИЯИ.

Круглый стол **R6** **Экспериментальная экономика**

26 января, вторник, 17⁰⁰

Ведущий – *Анатолий Николаевич Козырев*
(Центральный экономико-математический институт РАН)

Фиксированные выступления:

- *Анатолий Николаевич Козырев*
(Центральный экономико-математический институт РАН)
Экспериментальная экономика знаний
 - *Иван Викторович Неволин*
(Центральный экономико-математический институт РАН)
Экспериментальная экономика: от ‘общеизвестных’ фактов к объективным
 - *Андрей Сергеевич Татарников, Наталия Вадимовна Ноакк*
(Центральный экономико-математический институт РАН)
Прогнозирование успеха кинофильмов на основе анализа эмоций
-

S4 Анализ и моделирование социально-экономических процессов

27 января, среда, 16⁰⁰

Ведущие – *Александр Евгеньевич Варшавский, Наталья Анатольевна Винокурова* (Центральный экономико-математический институт РАН)

Приглашённые доклады:

- *Афанасьев Михаил Юрьевич*
(Центральный экономико-математический институт РАН)
Оценка инновационной активности региона с учетом размера пространства инноваций
- *Корнев Александр Константинович*
(Институт народнохозяйственного прогнозирования РАН)
О концепции реиндустриализации отечественной рыночной экономики
- *Варшавский Леонид Евгеньевич*
(Центральный экономико-математический институт РАН)
Методы стабилизации неопределенных систем в экономике

Круглый стол **R7**

Архитектура, городское планирование и биофизика

(междисциплинарное сотрудничество в области архитектуры и городского планирования)

27 января, среда, 18⁰⁰

Ведущий – *Рустам Анварович Исмаилов*

(Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова)

Создание комфортной среды обитания в изменяющихся климатических, экономических и социальных условиях подразумевает мониторинг городских данных, строительство адаптивных архитектурных сооружений, создание интерактивных общественных пространств, обеспечение биосферной совместимости и внедрение системы распределённого производства.

Для осуществления подобных проектов необходимо наладить конструктивный диалог между заинтересованными специалистами – архитекторами, биофизиками, программистами, дизайнерами, математиками и микробиологами

Фиксированные выступления:

- *Мария Яблонина* Вычислительное проектирование и биомиметика
- *Павел Ермаченко* Механизмы формообразования архитектурных сооружений в живой природе
- *Ирина Шаклова* 3D печать иммобилизованной культуры микроводорослей
- *Эдуард Хайман*
- *Екатерина Ларина*
- *Юрий Семёнович Найштут* Современные инженерные знания и архитектурное проектирование
- *Наталья Евгеньевна Беляева* Архитектоника тилакоидных мембран и особенности энергетических потоков
- *Лада Александровна Аникина* Обратная бионика

Круглый стол **R2**

Дискуссионные проблемы естествознания

27 января, среда, 19⁰⁰

Ведущие – *Александр Владимирович Коганов*

(Научно-исследовательский институт системных исследований),

Татьяна Юрьевна Плюснина

(Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова)

Круглый стол посвящен вопросам, находящимся на стыке науки и философии. Его участники предлагают новые научные подходы, выходя за рамки традиционных взглядов, пытаюсь по-новому взглянуть на существующие научные проблемы. Форма проведения заседания – обсуждение стендовых докладов.

S6 Музей в современном мире

27 января, среда, 19⁰⁰

Ведущая – *Татьяна Петровна Гончарова*

(Музей-усадьба Мураново им. Ф.И. Тютчева)

Музей Е.А. Боратынского в Казани – это яркий пример организации, созданной одним человеком. В 1970-е г.г. в Казань приехала преподавательница русского языка и литературы Вера Григорьевна Загвоздкина. Случайно она узнала, что в Казани жил ее любимый поэт Боратынский, а потом – его прямые потомки, дом которых являлся центром культурной жизни не только города, но и губернии. Воодушевленная этим открытием, она как человек энергичный и деятельный на собранном ею материале открывает школьный музей Боратынского и его потомков. Этот школьный музей стал таким значимым событием, что город выделяет ему отдельное помещение – флигель бывшего дома Боратынских (основной дом занимала музыкальная школа), и музей становится государственным учреждением.

Эстафету основательницы принимают ее ученицы и сотрудницы Ирина Завьялова и Елена Скворцова, осуществившие традиции Боратынских в наше время: музей притягателен людям разного возраста, образования и национальности. Вот такой музей будет представлен на нашем «музейном вечере». А завершит и украсит его *Юлия Зиганшина* – одна из лучших исполнительниц русских романсов, лауреат многочисленных конкурсов, заслуженная артистка Татарской республики.

Круглый стол R3

Математические проблемы биологии

28 января, четверг, 15⁰⁰

Ведущий – *Алексей Михайлович Нестеренко*

(Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова)

Современную биологию уже невозможно представить без сложных математических моделей процессов, протекающих в живых системах. Однако разрыв между биологическим и математическим образом мышления по-прежнему огромен. Часто оказывается, что биологи и математики, говоря об одних и тех же вещах, не понимают друг друга, так как понятийные области этих дисциплин мало пересекаются. Круглый стол призван способствовать диалогу между биологией и математикой, его задача – сделать этот диалог взаимно полезным. На Круглом столе будут рассмотрены как задачи, уже нашедшие своё решение на стыке биологии и математики, так и ждущие своего часа ещё нерешённые проблемы. Возможно, у математиков уже есть методы и подходы, пригодные для их решения, но биологи о них не знают. А, может быть, решение нового класса биологических задач подхлестнёт развитие новой ветви математики.

Приглашённые докладчики:

- *Гурский Виталий Валерьевич*; ФТИ им. Иоффе РАН (Санкт-Петербург) Модели генных сетей в раннем развитии *Drosophila melanogaster*
- *Полежаев Андрей Александрович*; ФИАН им. П.Н. Лебедева (Москва) Математическое моделирование процессов самоорганизации в биологических и химических системах
- *Никитин Алексей Антонович*; МГУ им. М.В.Ломоносова, фак-т ВМК, кафедра общей математики (Москва) Об интегро-дифференциальных уравнениях, возникающих в модели стационарных сообществ

Мастер-класс E1

Питон для решения биологических задач: базовые сведения о языке Python

25 января, понедельник, 13⁰⁰

Ведущие – *Иван Озеров* (Федеральный медицинский биофизический центр им. А.И. Бурназяна ФМБА), *Филипп Орехов* (Германия, университет г. Оснабрюк), *Владимир Фёдоров* (Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова)

Мастер-класс по практическому освоению языка программирования Python. Базовые знания по Питону желательны для участия в мастер-классах, проводимых в рамках Конференции. Для участия в мастер-классе нужен ноутбук с установленным питоном. Мы рекомендуем использовать дистрибутив «Конда».

Конда - удобный менеджер пакетов для питона. Он позволяет создавать окружения для разных версий питона/наборов пакетов, тем самым помогая избежать возможные несовместимости/конфликты.

Что важно для нас, Конда устанавливается буквально в один клик на всех трех популярных платформах (Win, Mac, Linux) и поддерживает большинство научных пакетов, а так же включает в себя pip (для установки всего остального).

Конда существует в двух версиях:

- полная (Анаконда) со 100 предустановленными пакетами. Занимает 3 Gb, скачивается отсюда: <http://continuum.io/downloads>;
- минимальная (Миниконда). В этой версии необходимо установить нужные пакеты самому, скачивается она отсюда: <http://conda.pydata.org/miniconda.html>

Инструкция по установке:

1. **Linux/Macos X.** Загрузить подходящую версию миниконды. В окне терминала перейти в папку с загруженным файлом и запустить его: **bash Miniconda-latest-Linux-x86_64.sh** и следовать вопросам установщика. Можно выбирать установки по умолчанию, т.к. в дальнейшем в любой момент их можно будет изменить.

После окончания установки нужно закрыть окно терминала и открыть его заново, чтобы изменения вступили в силу.

Для тестирования установки нужно выполнить в терминале команду **conda list**. Если установка прошла успешно, то появится список установленных пакетов.

Для установки всего стандартного набора пакетов (порядка 100), достаточно выполнить в терминале простую команду **conda install**. (!) Такая установка требует около 3 Гб дискового пространства.

Для поиска дополнительных пакетов (вне зависимости от установки стандартного набора) необходимо выполнить команду `conda search имя_пакета`, а затем, если нужный пакет найден - **`conda install<имя_пакета>`**.

Если нужного пакета не нашлось, то можно повторить поиск по более широкой базе пакетов, используя команду **`pip search <имя_пакета> / pip install <имя_пакета>`** (например, для установки пакета ProDy достаточно просто ввести в терминале команду **`pip install prody`**).

2. **Windows**. Пользователи Windows могут загрузить подходящую версию миниконды со страницы <http://conda.pydata.org/miniconda.html> и запустить загруженный exe файл двойным кликом по нему. Затем необходимо следовать рекомендациям установщика, можно выбирать настройки по умолчанию. По окончании установки, должно открыться новое окно терминала, если это по какой-то причине не произошло, то терминал выбрать меню Пуск - Выполнить, ввести команду **`cmd`** и нажать клавишу Enter.

Дальнейшие шаги по поиску и установке дополнительных пакетов аналогичны описанным выше в разделе для Linux/Macos X.

Мастер-классы E5 и E6

26 января, вторник, 15⁰⁰

Ведущий – *Филипп Орехов* (Германия, университет г. Оснабрюк)

E5 Расчет и анализ нормальных мод белковых структур

Анализ нормальных мод является перспективным и очень эффективным компьютерным методом предсказания масштабных структурных перестроек в биомакромолекулах, исследование которых с применением других методов молекулярного моделирования затруднено. На практическом занятии будут показаны возможности пакета ProDy для расчета, анализа и визуализации нормальных мод белковых молекул.

E6 Анализ консервативности и коэволюции аминокислотных позиций в белках

Передача сигнала между удаленными сайтами в белках (явление аллостерии) происходит по цепочкам (аллостерическим путям) аминокислотных остатков, которые, как показывают исследования, испытывают ряд эволюционных ограничений, как на общую консервативность такого пути, так и на взаимную коэволюцию аминокислотных остатков, составляющих аллостерический путь. На занятии будет показано, как сгенерировать множественное выравнивание для белка и его гомологов, проанализировать коэволюцию аминокислотных позиций и визуализировать результаты.

Мастер-класс E2

Интегрирование уравнений в частных производных типа реакция-диффузия при помощи python/numpy

27 января, среда, 10⁰⁰

Ведущий – *Алексей Михайлович Нестеренко*
(к.ф.-м.н., НИИФХБ им. А.Н. Белозерского МГУ)

Уравнения типа реакция-диффузия относятся к классу краевых задач и для их интегрирования используются нетривиальные алгоритмы. Алгоритмы интегрирования систем дифференциальных уравнений в частных производных хорошо разработаны и изложены в различных статьях и монографиях по вычислительной математике. В настоящем практическом занятии мы последовательно реализуем несколько вариантов метода конечных разностей различной сложности. Все алгоритмы мы будем реализовывать исключительно в матричной форме, поэтому одновременно участники смогут научиться работать с инструментарием линейной алгебры, предоставляемым пакетами numpy/scipy.

Мы начнем с определения шаблона дискретизации одно- и двухмерного лапласианов, научимся применять дискретный фильтр Лапласа к изображениям и визуализировать результаты. Затем мы реализуем чисто-диффузионную явную схему с использованием дискретного шаблона лапласиана. И, наконец, мы реализуем неявную одно- и двухмерную схему для интегрирования реакционно-диффузионной системы с использованием функционала линейной алгебры.

Программа

- Теоретическое введение о различных вариантах решения УрЧП методом конечных разностей: от явной схемы до метода переменных направлений (30 мин)
- Python для расчетов линейной алгебры, работа с матрицами, работа с разреженными матрицами (30 мин)
- Дискретизация лапласиана: применение для Гауссова размытия (30 мин)
- Интегрирование системы реакционно-диффузионных (РД) уравнений в явной схеме с дискретным лапласианом (30 мин)
- Реализация неявной схемы и ее применение (30 мин)

Необходимо знание Python или посещение мастер-класса по базовому Python (E1). При себе необходимо иметь ноутбук с *nix-подобной ОС. Установка python — см. в комментариях к мастерклассу E1. Обязательно иметь установленный набор библиотек scipy.

Для пользователей с Windows: использование Windows не рекомендовано, но и не запрещено. В инструкциях к мастерклассу E1 на странице 15 вы найдете, как установить весь тулчейн для работы с Python на Windows.

Мастер-класс ЕЗ

Алгоритмы кластеризации сложных данных на примере анализа биологических изображений

27 января, среда, 10⁰⁰

Ведущий – *Иван Озеров*

(Федеральный медицинский биофизический центр им. А.И. Бурназяна ФМБА)

В последнее время ученые все чаще сталкиваются с задачами, требующими обработки мало структурированных данных большого объема. Для решения подобных задач, как правило, необходимо найти подходящую систему координат с небольшим числом измерений, позволяющую представить такие данные в наиболее наглядном для исследователя виде. В ходе данного мастер-класса слушатели познакомятся с некоторыми алгоритмами, позволяющими совершать оптимальные преобразования координат с целью распознавания и кластеризации объектов на микроскопических изображениях, используя возможности популярных модулей языка Python.

Мастер-класс E4

Основные приемы работы с пакетом PyMOL (обработка результатов молекулярно-динамических и квантово-химических расчетов)

28 января, четверг, 10⁰⁰

Ведущий – *Дмитрий Зленко*

(Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова)

В рамках мастер класса будут продемонстрированы приемы работы с пакетом PyMol: отображение структур, работа с мышью, выделение, способы отрисовки готовых сцен. Работа со встроенным билдером. Визуализация кристаллографической информации и периодических граничных условий. Модификация исходных сцен: смещение, совмещение, переименования, повороты вокруг двугранных углов, sculpting и др. Написание скриптов, предназначенных для выполнения в среде PyMOL. Для выполнения работы необходимы PyMOL и python. Также необходимо в дополнение ко встроенному в ноутбук тачпаду или стику иметь обычную мышшь (с третьей кнопкой-колёсиком)!

Мастер-класс E7

Моделирование пространственной структуры белка по гомологии

28 января, четверг, 15⁰⁰

Ведущий – *Дмитрий Зленко*

(Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова)

Задача посвящена моделированию пространственной структуры белков по гомологии на примере белков светособирающего аппарата цианобактерий. На первом этапе будет решена задача моделирования укладки белка, в разрешенной кристаллической структуре которого недостает нескольких аминокислотных остатков, с использованием в качестве шаблона самого неполного кристалла или одного из вариантов более полных структур родственных белков (на примере белка ОСР бактерии *Synechocystis* sp). На втором этапе будет проведено моделирование пространственной структуры аллофикоцианинов А и В (из *Synechocystis* sp), с использованием в качестве шаблона набора структур аллофикоцианинов из других бактерий и красных водорослей. Затем будет проведена сборка нативного гетерогаксамера аллофикоцианина *Synechocystis* sp с использованием пакета PyMOL. Для выполнения работы необходимы пакеты python, PyMol и MODELLER.

Мастер-класс E8

Расчет парциальных зарядов и валентных взаимодействий для конструирования механических моделей

29 января, пятница, 10⁰⁰

Ведущий – Алексей Михайлович Нестеренко

(к.ф.-м.н., НИИФХБ им. А.Н. Белозерского МГУ)

Проблема построения молекулярно-динамической модели для соединения *de novo* встает перед всяким исследователем, который намеревается провести молекулярно-динамическое исследование нового соединения. Приходится создавать силовое поле, обосновывать методы его создания и следить за тем, чтобы новое силовое поле не входило в конфликт со старым. Главными параметрами, определение которых влияет на конформационную динамику молекулы, являются потенциал двугранных углов, парциальные заряды и параметры Леннарда-Джонсовских взаимодействий.

На первом этапе мастер-класса мы соберем молекулу и оптимизируем ее геометрию, используя необходимые теоретические понятия для выбора удобного базиса. Затем мы рассчитаем парциальные заряды методом аппроксимации электростатического потенциала точечными зарядами. Близлежащий потенциал вычисляется на поверхности Конноли или CHELPG (виды «обкатки»). После этого мы соберем пробную топологию, где будут парциальные заряды и валентные взаимодействия, и параметры Леннарда-Джонса, но не будет какого-то одного торсионного угла. Назовем эту топологию «недоделанной». Профиль энергии при вращении вокруг этого, пока еще неизвестного, угла мы снимем двумя способами в *ab initio* и в молекулярно-механическом приближении по «недоделанной» топологии. Полученная разница и будет записана нами в окончательное силовое поле.

Программа

- Вводная лекция (40 мин.)
- Оптимизация геометрии *ab initio* в Firefly (30 мин)
- Расчет парциальных зарядов RESP, визуализация (30 мин.)
- Снятие профиля релаксированной энергии при вращении вокруг торсионного угла (30 мин)
- Снятие аналогичного профиля для молекулярно-механической модели (30 мин)

Рекомендуется посещение мастер-класса по PyMOL. При себе необходимо иметь ноутбук с *nix-подобной ОС. Обязательно должны быть заранее установлены следующие программы: MDAnalysis, openbabel, openssh-server (для запуска Firefly на себе), PyMOL, gabedit. Должна быть программа для рисования графиков — здесь не будет ничего сложного, подойдет и OpenOffice.calc.

Для пользователей с Windows: использование Windows не рекомендовано. Для желающих будут созданы аккаунты на нашем лабораторном *nix-сервере, чтобы запускать программы удаленно через ssh-клиент. Вам необходимо иметь на локальной машине Putty, WinScp, PyMOL, gabedit и программу для рисования графиков (подойдет и Excel).

Мастер-класс Е9

Технологии параллельного программирования для вычислительных систем с гибридной архитектурой

26 января, вторник – 29 января, пятница

Ведущие – группа по гетерогенным вычислениям HybriLIT (ЛИТ ОИЯИ)

Рассматриваются вопросы создания эффективных приложений для проведения расчетов на гетерогенных вычислительных системах, содержащих многоядерные CPU, графические процессоры (GPUs) и сопроцессоры Intel Xeon Phi.

Лекции и практическая часть:

- Технология параллельного программирования *OpenMP*;
- Технология параллельного программирования *MPI*;
- Технология параллельного программирования *CUDA*;
- Технология параллельного программирования *OpenCL*;
- Гибридная технология *OpenMP+CUDA* для multi-GPU вычислений;
- Разработка приложений для архитектуры Intel Xeon Phi: технология *OpenMP*.

Практическая часть проходит на гетерогенном вычислительном кластере *HybriLIT* ЛИТ ОИЯИ.

26 января (вторник)

15.00-16.00 *Дмитрий Подгайный* и *Оксана Стрельцова*. Введение в технологии параллельного программирования на гибридных архитектурах

16.00-16.30 *Михаил Матвеев*. Практическое занятие: работа на кластере HybriLIT

16.30-18.00 *Елена Земляная*. Лекция и практическое занятие: Технология параллельного программирования OpenMP

27 января (среда)

10.00-11.00 *Татьяна Сапожникова*. Лекция и практическое занятие: Технология параллельного программирования MPI

11.30-13.30 *Оксана Стрельцова* и *Максим Зуев*. Лекция и практическое занятие: Технология параллельного программирования CUDA (часть 1)

28 января (четверг)

10.00-11.00 *Оксана Стрельцова* и *Максим Зуев*. Лекция и практическое занятие: Технология параллельного программирования CUDA (часть 2)

11.30-13.30 *Александр Айриян*. Лекция и практическое занятие: Технология параллельного программирования OpenCL

29 января (пятница)

10.00-11.00 *Дмитрий Подгайный* и *Оксана Стрельцова*. Практическое занятие по технологиям параллельного программирования: на примере решения конкретной физической задачи будут рассмотрены основные шаги разработки параллельных приложений с использованием технологий: MPI, OpenMP и CUDA, OpenMP+CUDA.

11.30-13.30 Практическое занятие по технологиям параллельного программирования: сравнительный анализ эффективности GPU, многоядерных процессоров и сопроцессоров Intel Xeon Phi (*Айриян А., Александров Е., Беляков Д., Заикина Т., Земляная Е., Зрелов П., Зуев М., Сапожникова Т., Стрельцова О., Торосян Ш.*)

XXIV конференция
МАТЕМАТИКА. КОМПЬЮТЕР. ОБРАЗОВАНИЕ
состоится в г. Пущино 23-28 января 2017 г.

Е-mail: mce@mce.su

Информация, регистрация и прием тезисов на сайте: www.mce.su