

Тридцатая международная конференция

**МАТЕМАТИКА
КОМПЬЮТЕР
ОБРАЗОВАНИЕ**

Симпозиум с международным участием

**Биофизика сложных систем
Вычислительная и системная биология
Молекулярное моделирование**

Под редакцией

Г.Ю. Ризниченко и А.Б. Рубина

Тезисы

Выпуск 30



Москва ♦ Ижевск

2023

ТРИДЦАТАЯ МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
МАТЕМАТИКА \diamond КОМПЬЮТЕР \diamond ОБРАЗОВАНИЕ

Пуццо, 23–27 января 2023 г.

XIV ОБЩЕРОССИЙСКИЙ СИМПОЗИУМ С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ

БИОФИЗИКА СЛОЖНЫХ СИСТЕМ
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ И СИСТЕМНАЯ БИОЛОГИЯ. МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Организаторы Конференции:

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Пушкинский центр биологических исследований РАН, Институт биологии клетки РАН, Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН, Объединенный институт ядерных исследований (ОИЯИ, г.Дубна), Государственный университет «Дубна», Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгарда РАН, Институт прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН, Национальный комитет российских биофизиков РАН, Межрегиональная общественная организация «Женщины в науке и образовании».

Международный Научный Комитет:

Н.В. Аммосова, Н.В. Белотелов, С.В. Беспалова, Е.В. Борисова, А.Р. Бражке, А.Е. Варшавский, Н.А. Винокурова, Н.Д. Гернет, Т.П. Гончарова, Н.Г. Есипова, Р.Г. Ефремов, Г.Р. Иванцкий, В.И. Залыпин, В.Е. Карлов, И.Б. Коваленко, И.Б. Коваленко, В.М. Комаров, В.В. Кореньков, В.Д. Лахно, А.И. Лобанов, Е.И. Маевский, Г.Г. Малинецкий, В.А. Матвеев, Н.А. Митин, А.М. Нестеренко, Т.Ю. Плюснина, А.А. Полежаев, Д.Э. Постнов, О.Е. Пыркина, Ж.М. Раббот, Г.Ю. Ризниченко, А.Б. Рубин, М.Ю. Сидорова, П.Н. Сорокин, Е.А. Солодова, Т.А. Стриж, Ю.Ю. Тарасевич, Г.В. Трубиников, В.Г. Туманян, Л.А. Уварова, М.Н. Устинин, Д.В. Фурсаев, П.В. Фурсова, М.Г. Хренова, Е.Н. Черемисина, С.В. Чернышенко, А.И. Чуличков, А.К. Шайтан, А.В. Шаповалов, А.В. Шатров, Г.Н. Яковенко, Л.В. Якушевич, W. Ebeling, R. Pose.

Оргкомитет:

Галина Юрьевна Ризниченко – Председатель Оргкомитета МКО, профессор Московского государственного университета, председатель правления Межрегиональной общественной организации «Женщины в науке и образовании» (г. Москва);

Андрей Борисович Рубин – Председатель Оргкомитета Симпозиума «Биофизика сложных систем: вычислительная биология и молекулярное моделирование», академик РАН, профессор, зав. кафедрой биофизики биологического факультета Московского государственного университета (г. Москва);

Владислав Михайлович Комаров – Сопредседатель Оргкомитета МКО, Институт биологии клетки РАН (г. Пуццо);
Ответственный секретарь – *Юлия Алексеевна Чистякова, Полина Викторовна Фурсова, Сергей Сергеевич Хрущёв*;
А.М. Абатурова, Е.П. Васюченко, Т.П. Гончарова, Е.В. Кочеткова, Л.Н. Краснопольская, И.Б. Коваленко, Ю.Д. Нечипуренко, Т.Ю. Плюснина, А.Д. Силаев, В.А. Федоров, Е.Г. Холина.

Адрес Оргкомитета: 119234, Москва, Ленинские Горы, д. 1, стр. 12, МГУ имени М.В.Ломоносова, Биологический ф-т, кафедра биофизики, тел.: (495) 939-02-89, факс: (495) 939-11-15,
E-mail: mce@mce.su, сайт: www.mce.su.

Секции

- S1. Математические теории
- S2. Вычислительные методы и математическое моделирование
- S3. Анализ сложных биологических систем. Эксперимент и модели
- S4. Социально-экономические исследования
- S5. Гуманитарное и естественно-научное образование
- S6. Музей в современном мире
- S7. Русский научный язык

ISBN 978-5-4344-1000-7

© Межрегиональная общественная организация «Женщины в Науке и Образовании», 2023

Дорогие коллеги и друзья!

Мы приветствуем Ваше участие в XXX Международной конференции «Математика. Компьютер. Образование», XIV Общероссийском симпозиуме «Биофизика сложных систем» и VI Общероссийском семинаре «Русский научный язык».

Традиционно наши конференции проходят ежегодно в подмосковных наукоградах – Дубне (Университет «Дубна» и Объединенный институт ядерных исследований) и Пущино (Центр биологических исследований), в 2022 – очередь Дубны. К сожалению, из-за пандемии COVID-19 мы провели МКО-XXVIII (Пущино) и МКО-XXIX (Дубна) в дистанционном формате, конференцию МКО-XXX мы тоже проводим в дистанционном формате.

Конференции «Математика. Компьютер. Образование» являются междисциплинарными и научно-образовательными, за прошедшие годы в них приняли участие тысячи ученых, профессоров и преподавателей вузов, школьных учителей, студентов, аспирантов, старших школьников, деятелей науки и культуры, представителей администрации. По представленным на наших конференциях результатам защищены сотни кандидатских и десятки докторских диссертаций.

По материалам каждой конференции мы печатаем сборник тезисов, который проходит научное рецензирование. После конференции выходит сборник статей, отобранных по материалам докладов на секции «Анализ и моделирование в экономике и социологии». Избранные статьи по материалам конференции, тематика которых связана с математическим моделированием в разных областях знания, после прохождения рецензирования печатаются в журнале «Компьютерные исследования и математическое моделирование». Журнал выходит с 2009 года, шесть номеров в год, включен в список ВАК, публикационные базы РИНЦ и Scopus, представлен в открытом доступе на сайте <http://crm.ics.org.ru/>.

Программа XXX конференции – традиционная: пленарные доклады, лекции, круглые столы, секционные заседания, стендовые доклады, которые также проходят в дистанционном формате.

К глубокому нашему сожалению, за прошедший год от нас ушли неперенные участники наших конференций МКО, талантливые ученые, профессора Жозеф Михайлович Раббот, Владимир Владимирович Смолянинов и Юрий Михайлович Романовский. Мемориальные статьи о них открывают этот сборник

Мы благодарим всех участников – авторов тезисов, руководителей секций за отбор и рецензирование тезисов, Сергея Сергеевича Хрущева за подготовку сборника, издательство РХД за многолетнее сотрудничество по публикации тезисов и трудов МКО и изданию журнала «Компьютерные исследования и моделирование», а также Анну Витальевну Бобылеву за подготовку к публикации на сайте Конференции видеоматериалов докладов.

Мы благодарим всех участников конференции МКО-XXX за интересные доклады, плодотворные дискуссии, и за то, что несмотря на дистанционный формат, нам удалось сохранить атмосферу дружеского общения, которая была, и, надеемся, всегда будет отличительной чертой наших конференций независимо от того, проходят они в Пушкино, в Дубне, или on-line.

Следующей зимой (22–27 января 2024 года) мы встретимся в очном формате на конференции МКО-XXXI в наукограде Дубна на берегу Волги.

Председатель Оргкомитета
Профессор Московского государственного университета
имени М.В.Ломоносова
Председатель Правления
Межрегиональной Общественной организации
«Женщины в науке и образовании»

Галина Юрьевна Ризниченко

СОДЕРЖАНИЕ

Памяти Жозефа Михайловича Раббота	6
Памяти Владимира Владимировича Смолянинова	8
Памяти Юрия Михайловича Романовского	10

ПРОГРАММА КОНФЕРЕНЦИИ

Пленарные заседания	13
S1+S2. Вычислительные методы и математическое моделирование	18
S3. Анализ сложных биологических систем: эксперимент и модели	21
S4. Социально-экономические исследования	29
S5. Гуманитарное и естественно-научное образование	31
S6. Музей в современном мире	33
S7+R1. Культурное пространство России. Русский научный язык	34

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

S1. Математические теории	37
S2. Вычислительные методы и математическое моделирование	43
S3. Анализ сложных биологических систем: эксперимент и модели	77
W1. Вычислительная и системная биология	77
W2. Молекулярное моделирование	97
W3. Медицинская и радиационная биофизика	129
W4. Моделирование, визуализация и анализ данных в исследовании когнитивных систем	145
S4. Социально-экономические исследования	153
Анализ и моделирование социально-экономических процессов	153
Математические методы в экономике и социологии (эконофизика и социофизика)	171
S5. Гуманитарное и естественно-научное образование	185
S6. Музей в современном мире	201
S7+R1. Культурное пространство России. Русский научный язык	209
Авторский указатель	221



Жозеф Михайлович Раббот

7 марта 1943 – 22 ноября 2022

22 ноября 2022 года не стало Жозефа Михайловича Раббота, одного из ярких специалистов в области математического образования в нашей стране. Деятельность Жозефа Михайловича была исключительно разносторонней. Он преподавал в школе и вузе, вел маткружки в МГУ, читал по всей стране лекции для школьников и учителей, писал книги, многочисленные статьи и учебные пособия по математике, активно работал в журнале «Квант» с момента его создания, организовывал различные математические олимпиады, на протяжении двенадцати лет работал в жюри Всесоюзной математической олимпиады.

В 1966 году организатор и руководитель Всесоюзной заочной математической школы (ВЗМШ, впоследствии Всероссийская заочная многопредметная школа), один из крупнейших математиков XX века И. М. Гельфанд пригласил талантливого выпускника мехмата МГУ, опытного руководителя университетского студенческого кружка Женю Раббота преподавать в свою школу. На протяжении полувека Жозеф Михайлович работал заместителем директора ВЗМШ, многие годы руководил ее математическим отделением.

ВЗМШ – уникальное учреждение, ее замечательные преподаватели работали по переписке по почте с увлеченными математикой и физикой детьми из самых отдаленных мест нашей страны. Этой работой и руководил Ж.М.Раббот. Личный контакт со столичными математиками, их вниманием и поддержка имели колоссальное значение для школьника из далекой глубинки и влияли на выбор будущей профессии. Тысячи и тысячи специалистов в самых разных областях науки и ее приложений благодарны Жозефу Михайловичу Рабботу за то, что много лет назад они получали от него по почте сначала задания и пособия, затем рецензии на их работы, слова поддержки, приглашение приехать в Москву.

Многие годы Жозеф Михайлович был активным участником конференции «Математика. Компьютер. Образование», одним из руководителей секции «Гуманитарное и естественнонаучное образование».

По материалам журнала «Квант», 2022, номер 11, 41.



Владимир Владимирович Смолянинов

3 сентября 1936 – 9 февраля 2022

Владимир Владимирович Смолянинов последние годы тяжело и изнурительно болел и скончался 9 февраля в Москве с диагнозом коронавирус. Владимир Владимирович – огромный талант, замечательный человек и прекрасное сердце родился 03 сентября 1936 в г. Грозном, в семье инженеров-нефтяников. Дед по линии отца – священник, был расстрелян. Отец после окончания нефтяного института стал инженером, руководящим работником и редактором грозненской газеты «Гудок». Мать была инженером-технологом по крекингу, химиком. В 37-м отец был арестован, находился в заключении около семи месяцев, впоследствии вернулся к работе. До 42-го года семья проживала в Грозном, затем отца перевели на Урал в Бугуруслан, затем в Среднюю Азию в Коканд, а в 1948 году – в Ташкент. Там Володя обучался в музыкальной школе, ходил в авиамодельный и радиокружок. В 1952 г. семья переехала в Москву.

После окончания школы Володя поступил в Московский физико-технический институт, где организовал кружок радиолюбителей. Во время обучения на радиотехническом факультете, работал в лаборатории Центрального аэрологического института, где приобрел опыт экспериментально-научного подхода. После окончания ФизТеха, с апреля 1961 г. – младший научный сотрудник Института биофизики АН СССР. С 1967 г. младший научный сотрудник Института проблем передачи информации. В 1972 г. защитил кандидатскую диссертацию. С 1986 г. – доктор физико-математических наук, работал завлабораторией количественных методов в биологии Института иммунологии МЗ СССР. С 1988 г по 2018 г. заведующий Вычислительным центром, впоследствии главный научный сотрудник, завлабораторией биомеханических систем Института машиноведения им. А.А. Благонравова РАН. С 2018 г. – главный научный сотрудник Института теоретической и экспериментальной биофизики РАН.

Владимир Владимирович всегда интересовался общебиологическими проблемами, с исключительной чёткостью ставил и решал задачи механики, биологии, теории управления и биофизики. Физик по образованию, он легко транслировал знания между представителями совершенно различных научных направлений: биологами и математиками.

Он является автором множества статей и известной монографии «Математические модели биологических тканей» /М., Наука, 1980/.

В наших сердцах навсегда останется память о прекрасном светлом человеке и талантливом Учёном, который для многих коллег был эталоном научной честности и бескомпромиссного отстаивания Научной Истины и в годы застоя, и в лихие 90-е, и в нынешние, не поддающиеся простому описанию времена.



Юрий Михайлович Романовский

31 октября 1929 – 23 августа 2022

23-го августа 2022 года на 93-ем году ушёл из жизни заслуженный профессор МГУ имени М.В.Ломоносова Юрий Михайлович Романовский.

Вся жизнь Юрия Михайловича связана с физическим факультетом МГУ, который он окончил в 1952 г. Общий стаж его педагогической работы на физическом факультете составлял 55 лет. С 1983 г. он профессор кафедры общей физики и волновых процессов. Ю.М. Романовский – соавтор более трехсот пятидесяти научных работ, среди которых одиннадцать монографий. Среди научных результатов, полученных им в молодые годы, можно выделить определение условий потери устойчивости колебательных систем с флуктуирующими параметрами и создание теории синхронизации распределенных колебательных систем в приложениях к химии и биологии. В его кандидатской диссертации «Полет самолета с упругими крыльями в турбулентной атмосфере» (1961 г.) выполнено моделирование поведения несущих плоскостей самолёта при скоростях, близких к критической. Созданная им совместно с коллегами уникальная система наведения подводных ракет стала известной широкому кругу читателей лишь благодаря книге «Советская военная мощь от Сталина до Горбачева» (А.В. Минаев и др. – ред., Москва, 1999), снявшей завесу секретности с научных разработок тех лет.

С 1965 г. Ю.М. Романовский активно занимался математическим моделированием биологических процессов. Он известен в России и за ее пределами как один из основателей современной математической биофизики. Им развита теория распределенных автоколебательных систем с диффузионными связями в приложении к проблемам автоволновых процессов в химических и биохимических реакциях в живых клетках, в частности, теория автоволновых течений протоплазмы в клетках, обладающих амебодной подвижностью.

Ю.М. Романовский инициировал развитие и применение лазерных методов к исследованию биологической подвижности на молекулярном и клеточном уровнях. Им, его учениками и сотрудниками удалось экспериментально исследовать нестационарные колебательные и автоволновые процессы в живых клетках. Полученные результаты стали основой для построения серии математических моделей автоволновой внутриклеточной подвижности. Ю.М. Романовским были созданы и экспериментально изучены математические модели реакции живых клеток на световые и тепловые воздействия. Совместно с учениками им выполнен большой цикл работ по исследованию бегущих биопотенциалов, инициируемых локальным воздействием электромагнитного излучения на листья зеленых растений. Впервые, в широком диапазоне от ультрафиолета до миллиметровых волн было изучено воздействие излучения на генерацию распространяющихся в растениях электрических импульсов.

Ю.М. Романовский внес существенный вклад в разработку концепции «беломашина», предложенной группой российских ученых и ставшей за последние годы общепринятой в мировом научном сообществе.

Используя методы квантовой механики и молекулярной динамики, Юрий Михайлович смог описать влияние движения по выделенным степеням свободы белковых молекул на соответствующую функциональную активность и, тем самым, внес большой вклад в выявление взаимосвязи «структура–функция» биологических макромолекул.

В последние годы тематика научной работы Ю.М. Романовского была связана с созданием математических моделей функционирования молекулярных наномашин (молекул ферментов). Предложенные им оригинальные подходы позволили провести расчеты их эффективности, а новые математические модели дали возможность исследовать элементарные стадии каталитических реакций с участием молекул ферментов.

Ю.М. Романовский являлся одним из основателей и бессменных руководителей общемосковского семинара «Синергетика. Самоорганизация и неравновесные процессы в физике, химии и биологии», получившего большую известность в нашей стране и за рубежом. Он вел активную педагогическую работу, читая курсы лекций «Автоволновые процессы», «Лазерная спектроскопия и математические модели биомолекул». Созданный им инновационный курс «Эконофизика» распространяет принципы теории динамических систем на мир экономики. Под его руководством успешно защитили дипломные работы более ста выпускников физического факультета, механико-математического факультета и факультета вычислительной математики и кибернетики. Двадцать восемь его учеников стали кандидатами, пять – докторами наук, а один – действительным членом российской академии наук.

Ю.М. Романовский являлся членом диссертационного совета при МГУ, членом совета по биофизике РАН, членом редколлегий журналов «Прикладная нелинейная

динамика» (серия «Известия ВУЗ-ов»), «Компьютерные исследования и моделирование», ежегодника «Modern problems of statistical physics» (Малаховский сборник), членом редакционного совета серии «Биофизика. Математическая биология», издаваемой Ижевским институтом компьютерных исследований.

Ю.М. Романовский принимал самое деятельное участие в работе программных и организационных комитетов крупнейших российских и международных конгрессов и конференций, среди которых съезды биофизиков России, конгрессы по биомедицинской оптике (BIOS), международные конференции «Математика, компьютер, образование». Он активно участвовал в международном научном сотрудничестве между МГУ и Берлинским университетом имени Гумбольдта и университетом Палермо, читал лекции в Гаванском университете.

Ю.М. Романовский отдавал много сил увековечиванию памяти о выдающихся учёных, многие из которых были его коллегами и друзьями: Р.Л. Стратоновича, Ю.Л. Климонтовича, Богданкевича, Кривченкова, Гришанина, Мякишева и др. Он выступал в качестве автора, составителя и редактора книг воспоминаний о них. Однако самым большим, может быть одним из самых главных трудов его жизни стала не имеющая аналогов книга о более двухстах однокурсниках – выпускниках физического факультета МГУ 1952 года, материалы о которых он собирал многие годы.

Друзья и коллеги Юрия Михайловича, сотрудники кафедры общей физики и волновых процессов физического факультета МГУ, редколлегия и читатели журнала «Компьютерные исследования и моделирование», Оргкомитет и участники конференций «Математика. Компьютер. Образование» скорбят о его кончине и выражают глубокое соболезнование близким. Память о Юрии Михайловиче будет жить в наших сердцах.

Александр Васильевич Приезжев

Галина Юрьевна Ризниченко

Фото – газета «Советский физик»

ПРОГРАММА КОНФЕРЕНЦИИ

23 января, Понедельник

- 15.00–18.00 **Пленарное заседание.** Председатель *Владислав Михайлович Комаров*
Открытие конференции: *Генрих Романович Иваницкий* (Пушино, Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН), *Владислав Михайлович Комаров* (Пушино, Институт биофизики клетки РАН), *Владимир Васильевич Кореньков* (Дубна, Объединенный институт ядерных исследований), *Галина Юрьевна Ризниченко* (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова)
- 15.00–15.10 *Грбарник Павел Яковлевич* (Пушино, ФИЦ ПНЦБИ РАН)
Приветственное слово директора Федерального исследовательского центра «Пушинский научный центр биологических исследований РАН»
- 15.10–15.30 *Ризниченко Галина Юрьевна* (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Биологический ф-т, каф. биофизики, Сектор информатики и биофизики сложных систем)
30 лет Междисциплинарных научно-образовательных конференций «Математика. Компьютер. Образование».
Особенности эволюции конференций МКО. Перспективы развития
- 15.30–16.00 *Комаров Владислав Михайлович* (Пушино, Институт биофизики клетки РАН ФИЦ ПНЦБИ РАН, Лаборатория структуры и динамики биомолекулярных систем) **Конференции МКО в жизни Пушинского центра биологических исследований**
- 16.00–16.10 Перерыв
- 16.10–16.40 *Акатов Владимир Семёнович* (Пушино, Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН)
Успехи современной тканевой инженерии
- 16.40–17.20 *Дагкесаманский Рустам Давудович* (Пушинская радиоастрономическая обсерватория Астрокосмического центра ФИАН)
Нестационарная вселенная
- 17.20–18.00 *Иваницкий Генрих Романович* (Пушино, Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН)
Неопределенность перехода от человека к антроидному роботу
- 18.00–19.00 **Перерыв**
- 19.00 **Круглый стол «Культурное пространство России».**
Книги, журналы, конференции (см. стр. 34).
Ведущие: *Галина Юрьевна Ризниченко, Марина Юрьевна Сидорова, Юрий Дмитриевич Нечипоренко*

24 января, Вторник

Заседания секций

9.00–11.00 **S3/W2** Молекулярное моделирование (см. стр. 21)

9.30–11.00 **S7** Русский научный язык (см. стр. 34)

11.00–11.20 **Перерыв**

11.20–14.00 Пленарное заседание. Председатель *Александр Евгеньевич Варшавский*

11.20–12.00 *Сидорова Марина Юрьевна* (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Филологический факультет) **Возможно ли моделирование естественного языка на машинном носителе?**

12.00–12.40 *Сушко Елена Давидовна*, академик *Макаров Валерий Леонидович*, чл.-корр. *Бахтизин Альберт Рауфович* (Москва, Центральный экономико-математический институт РАН, Лаборатория Компьютерного моделирования социально-экономических процессов) **Агент-ориентированные модели больших социально-экономических систем**

12.40–13.20 *Григорьев Олег Александрович*, *Алексеева Виктория Александровна* (Москва, Российский национальный комитет по защите от неионизирующих излучений) **Развитие электромагнитобиологии, радиобиологии и гигиены неионизирующих излучений за 130 лет: важные итоги и актуальные задачи**

13.20–14.00 *Варшавский Александр Евгеньевич* (Москва, Центральный экономико-математический институт РАН) **Об актуальных проблемах экономического развития**

14.00–15.00 **Перерыв**

Заседания секций

15.00–18.45 **S1+S2** Вычислительные методы и математическое моделирование (см. стр. 18)

15.00–18.45 **S3/W1** Вычислительная и системная биология. Экологическое моделирование (см. стр. 22)

15.00–19.00 **S4** Анализ и моделирование экономических и социальных процессов (см. стр. 29)

19.00 *Иваницкий Генрих Романович* (Пушино, Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН) **Из истории центра биологических исследований Пушино. 60 лет Пушкинскому институту теоретической и экспериментальной биофизики. Здесь рождалась наука об автоволнах в живых системах**

25 января, Среда

Заседания секций

9.00–10.45 **S1+S2** Вычислительные методы и математическое моделирование (см. стр. 20)

9.00–10.45 **S3/W2** Молекулярное моделирование (см. стр. 24)

9.00–10.45 **S5** Гуманитарное и естественно-научное образование (см. стр. 31)

10.45–11.00 **Перерыв**

11.00–14.00 Пленарное заседание. Председатель *Андрей Анатольевич Гриневич*

11.00–11.30 *Романюха Алексей Алексеевич, Новиков Константин Александрович, Санникова Татьяна Евгеньевна* (Москва, Институт вычислительной математики РАН) **Ковид 19 и психические заболевания.**

Расширенная модель эпидемии

11.30–12.00 *Допова Марина Викторовна* (Пушино, Институт биохимии и физиологии микроорганизмов РАН) **О перспективах биотехнологий**

12.00–12.30 *Шарапов Марс Галиевич* (Пушино, Институт биофизики клетки РАН) **Перспективы использования антиоксидантных ферментов в биомедицине**

12.30–13.00 *Симаков Сергей Сергеевич* (Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)) **Персонализированное численное моделирование коронарного кровотока при черескожном коронарном вмешательстве на основе клинических данных**

13.00–13.30 *Оселедец Иван Валерьевич* (Москва, Сколковский институт науки и технологий) **Успехи и проблемы машинного обучения**

13.30–14.00 *Устинин Михаил Николаевич* (Пушино, Институт математических проблем биологии – филиал Института прикладной математики им. М.В.Келдыша) **Реконструкция функциональной структуры человеческого тела по данным многоканальных магнитных измерений**

14.00–15.00 **Перерыв**

Заседания секций

15.00–18.45 **S3/W3** Медицинская и радиационная биофизика (см. стр. 23)

15.00–18.45 **S5** Гуманитарное и естественно-научное образование (см. стр. 30)
Круглый стол «**Какой математике и как учить в цифровую эпоху**».
Ведущие: *Елена Владимировна Борисова* (Научно-исследовательский центр Военной академии ракетных войск стратегического назначения имени Петра Великого), *Владимир Ильич Залятин* (Южно-Уральский Государственный университет)

15.00–18.45 **S6** Музей в современном мире (см. стр. 33)

18.45–19.00 **Перерыв**

19.00 **Мемориальное заседание**, посвященное памяти профессоров Юрия Михайловича Романовского и Владимира Владимировича Смолянинова.
Константин Борисович Асланиди, Фазил Иноятович Атауллаханов, Владимир Григорьевич Буданов, Виктор Аркадьевич Глазунов, Георгий Теодорович Гурия, Виталий Львович Дунин-Барковский, Андрей Александрович Полежаев, Александр Васильевич Приезжев, Татьяна Васильевна Потапова, Галина Юрьевна Ризниченко и другие.

26 января, Четверг

Заседания секций

9.00–10.45 **S1+S2** Вычислительные методы и математическое моделирование (см. стр. 20)

9.00–10.45 **S3/W2** Молекулярное моделирование (см. стр. 26)

10.45–11.00 **Перерыв**

11.00–14.00 Пленарное заседание. Председатель *Алексей Иванович Лобанов*

11.00–12.00 *Шайтан Константин Вольдемарович* (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Биологический факультет) **Физические закономерности пространственной самоорганизации линейных полимеров и биополимеров**

12.00–12.50 *Приезжев Александр Васильевич* (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Физический факультет) **Лазерные пинцеты в биологических исследованиях**

12.50–13.25 *Голубев Василий Иванович* (Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет))

Численное моделирование процесса сейсмической разведки на Арктическом шельфе

13.25–14.00 *Релина Ирина Анатольевна* (Москва, Институт физики атмосферы имени А.М. Обухова РАН) **Современное состояние ледяного покрова Арктики по данным наблюдений и моделирования**

14.00–15.30 **Перерыв**

15.30–16.45 Пленарное заседание. Председатель *Галина Юрьевна Ризниченко*

15.30–16.00 *Шпилько Марина Александровна* (Московский офис международного архитектурного бюро Dyer) **Экосистема наукограда. Градостроительные основы как фундамент будущего**

16.00–16.45 *Полотовский Григорий Михайлович* (Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики – Нижний Новгород», Факультет информатики, математики и компьютерных наук, кафедра фундаментальной математики) **Явление чрезвычайное (к 120-летию со дня рождения А.Н. Колмогорова)**

16.45–17.00 **Перерыв**

17.00 Круглый стол **«Зачем нужна русская литература?»** (см. стр. 35). Ведущий *Марина Юрьевна Сидорова*

27 января, Пятница

- 10.00–13.20 Пленарное заседание. Председатели *Андрей Александрович Полежаев* и *Николай Вадимович Белотелов*
- 10.00–10.30 *Малков Сергей Юрьевич* (Москва, Академия военных наук, ЦП СЯС АВН) **Цивилизации как объект математического моделирования**
- 10.30–11.05 *Малинецкий Георгий Геннадьевич* (Москва, Институт прикладной математики имени М.В.Келдыша) **Как учить? Чему учить? Кого учить?**
- 11.05–11.40 *Устюжанина Елена Владимировна* (Москва, Центральный экономико-математический институт РАН, Отделение макроэкономики и моделирования региональных систем) **Отклоняющееся поведение как социально-экономический феномен**
- 11.40–12.20 *Громов Василий Александрович* (Москва, Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики» (НИУ ВШЭ), Факультет компьютерных наук) **Как заглянуть за горизонт прогноза в нелинейных системах**
- 12.20–13.00 *Смолин Владимир Сергеевич* (Москва, Институт прикладной математики имени М.В.Келдыша РАН) **Дискретное и аналоговое представление знаний в искусственном интеллекте и в образовании**
- 13.00–13.20 *Ермолаев Вячеслав Юрьевич* (Москва, фонд Н.Л. Гумилева) **Результаты и проблемы теории этногенеза Л.М. Гумилева**
- 13.20–14.00 **Перерыв**

Заседания секций

- 14.00–17.00 **S3/W4** Моделирование, визуализация и анализ данных в исследовании когнитивных систем (см. стр. 28)
- 14.00–17.00 **S4** Математические методы в экономике и социологии (экономифизика и социофизика – см. стр. 30)
- 17.00 **Отчет руководителей секций. Общая дискуссия**

Секция S1+S2. Вычислительные методы и математическое моделирование

Руководители: *Алексей Иванович Лобанов, Владимир Ефимович Карпов,
Павел Валентинович Москалев, Александр Васильевич Шаповалов.*

Заседание 1

24 января 2023 года, вторник, 15.00

Секция S1, председатели *Шаповалов А.В., Лобанов А.И.*

Тема – Нелинейные волны и нелинейная диффузия

Гусев Владимир Андреевич (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, физический ф-т, каф. акустики) **Модель модульной нелинейности в задаче распространения нелинейных волн**

Караваева Наталия Игоревна (Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)) **Бикомпактные схемы для HOLO алгоритмов численного решения задач переноса излучения** (Аристова Е.Н., Караваева Н.И.)

Карпов Владимир Ефимович (Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), кафедра информатики и вычислительной математики) **Сегочно-характеристическая разностная схема для решения уравнения Хопфа на основе двух различных дивергентных форм** (Карпов В.Е., Лобанов А.И.)

Конов Денис Сергеевич (Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)) **Математическое моделирование механической нагрузки на ледовую структуру под тепловым воздействием** (Конов Д.С., Муратов М.В., Гусева Е.К., Петров И.Б.)

Александров Илья Игоревич (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, физический ф-т, кафедра квантовой статистики и теории поля) **Свойства PSI-уравнения Власова** (Александров И.И., Полякова Р.В.)

Кулагин Антон Евгеньевич (Томский политехнический университет, Отделение электронной инженерии) **Аналитическое описание диффузии в однопараметрическом двумерном клеточном автомате с окрестностью Марголуса** (Кулагин А.Е., Шаповалов А.В.)

Трайтак Сергей Дмитриевич (Москва, Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова, Отдел строения вещества) **Применение дробных производных для изучения диффузионно-контролируемых реакций с памятью**

Синюков Сергей Александрович (Томский государственный университет, кафедра теоретической физики физического факультета) **Численные и асимптотические решения нелокальной кинетической модели оптической активной среды** (Синюков С.А., Кулагин А.Е., Шаповалов А.В.)

Заседание 2

24 января 2023 года, вторник, 17.20

Стендовая сессия

- Заятин Владимир Ильич* (Челябинск, Южно-Уральский государственный университет, институт естественных и точных наук, кафедра математического анализа и методики преподавания математики) **Вероятность и специальные функции математической физики**
- Гурьянова Ирина Эдуардовна* (Москва, ФГОБУ ВПО «Финансовый университет при Правительстве Российской Федерации», Департамент математики) **О существовании решений интегральных уравнений Вольтерра в обобщенной трактовке с непрерывным ядром**
- Харитонова Светлана Владимировна* (Оренбургский государственный университет, кафедра геометрии и компьютерных наук) **Конгармонические аналоги тождеств Грея нормальных ICACs-многообразий** (Рустанов А.Р, Харитонова С.В.)
- Иваненко Григорий Алексеевич* (Екатеринбург, Институт естественных наук, Уральский федеральный университет) **Индукцированные шумом переходы в модели термохимического реактора** (Башкирцева И.А., Иваненко Г.А., Клабукова Ю.В.)
- Исаков Константин Андреевич* (Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, Факультет вычислительных систем (ФВС) Кафедра компьютерных систем в управлении и проектировании (КСУП)) **Моделирование элемента технологического процесса получения диоксида титана методом компонентных цепей** (Ганджа Т.В., Исаков К.А.)
- Мартинович Елизавета Николаевна* (Сочи, НТУ «СИРИУС», университет) **Автоматизация процесса аудита для анализа документов** (Мартинович Е.Н., Попов Е.В., Шуткин А.С.)
- Муратов Дмитрий Александрович* (Москва, Российский университет дружбы народов, Институт физических исследований и технологий (ИФИТ)) **Использование модели Максвелла Гарнетта для расчёта спектров пропускания плёнок из композитных материалов с наночастицами различной формы**
- Полякова Римма Васильевна* (Дубна, Объединенный институт ядерных исследований, ЛИТ) **Параллельный алгоритм вычисления функции Вигнера для квантовой системы с полиномиальным потенциалом** (Перепелкин Е.Е., Полякова Р.В., Садовников Б.И., Иноземцева Н.Г., Бураков Е.В., Сысоев П.Н., Садовникова М.Б.)
- Попов Евгений Анатольевич* (Воронежский государственный университет, Кафедра физики полупроводников и микроэлектроники) **Программный комплекс для проведения исследований методом импедансной спектроскопии** (Попов Е.А., Захаров И.А., Потанина Д.С., Богатиков Е.В., Бормонтов Е.Н.)
- Пустовалов Артем Владимирович* (Москва, Российский университет дружбы народов) **Расчёт дисперсионных характеристик градиентных оптических волноводов на основе лазерных стёкол**
- Шаравин Вадим Сергеевич* (Ярославский государственный университет имени П. Г. Демидова) **Надежное обнаружение и отслеживание линий электропередач на базе беспилотных летательных аппаратов в реальном времени**

Заседание 3

25 января 2023 года, среда, 9.00

Секция **S2**, председатель *Москалев П.В.*

Тема – **Нейронные сети, распознавание образов, обработка данных и стохастические модели**

Заворотнюк Денис (Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)) **Shapley-значение как мера качества масс-спектрометрических данных** (Заворотнюк Д., Сорокин А., Пеков С., Елиферов В., Бочаров К., Николаев Е., Попов И.)

Коваленко Алексей Сергеевич (Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет) **Генерация набора данных с реалистичным шумом для обучения шумодавляющих сетей** (Коваленко А.С., Демяненко Я.М.)

Колитиченко Александр Павлович (Екатеринбург, Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Институт естественных наук и математики) **Самоорганизация в стохастических моделях динамики популяций: метод функций стохастической чувствительности** (Колитиченко А.П., Ряшко Л.Б.)

Медведев Дмитрий Юрьевич (Москва, МИРЭА – Российский Технологический Университет) **Моделирование связи между структурой и физико-химическими свойствами углеводородов на основе спектральной теории графов** (Медведев Д.Ю., Скворцова М.И., Соломонова Е.В.)

Михайличенко Алексей Андреевич (Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, Научно-исследовательский технологический центр нейротехнологий (НИТЦ нейротехнологий)) **Автоматическая диагностика остеоартрита коленного сустава по рентгенограмме при помощи сверточных нейронных сетей**

Шишкин Артем Павлович (Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, физический ф-т, отдел прикладной математики, кафедра математического моделирования и информатики) **Адаптивная настройка системы управления с нечёткой логикой на основе байесовского вывода** (Шишкин А.П., Репников П.М., Зубюк А.В., Фадеев Е.П.)

Друзь Александр Сергеевич (Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, ИММиКН им. И.И. Воровича) **Обнаружение аномалий в гиперспектральных изображениях**

Заседание 4

26 января 2023 года, четверг, 9.00

Секция **S2**, председатель *Карпов В.Е.*

Афонин Павел Владимирович (Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, физический ф-т, каф. квантовой статистики и теории поля) **Области отрицательных значений функции Вигнера и полюса функции энергии полиномиального осциллятора** (Перепёлкин Е.Е., Полякова Р.В., Бурлаков Е.В., Афонин П.В.)

Найштут Юрий Семенович (Самарский государственный технический университет, Академия строительства и архитектуры, Факультет промышленного и гражданского строительства, Кафедра металлических и деревянных конструкций) **Нелинейный резонанс и прогнозирование потери устойчивости выпуклых пологих оболочек** (Грачев В.А., Найштут Ю.С.)

Шевченко Алексей Владимирович (Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)) **Двумерные сеточно-характеристические схемы для расчёта акустических и упругих волн** (Шевченко А.В., Голубев В.И.)

Секция S3
Анализ сложных биологических систем
Эксперимент и модели

Симпозиум с международным участием
Биофизика сложных систем
Вычислительная и системная биология
Молекулярное моделирование

Заседание 1

24 января 2023 года, вторник, 9.00

Секция **W2** Молекулярное моделирование

Ведущие: *Илья Борисович Коваленко, Мария Григорьевна Хренова, Алексей Константинович Шайтан*

Булавко Егор Сергеевич (Москва, Сколковский институт науки и технологий, Центр наук о жизни) **Изучение механизма ингибирования ДНК-связывающего домена белка PARP-1 солями урана методами молекулярного моделирования** (Булавко Е.С., Иванков Д.Н.)

Князева Анастасия Сергеевна (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, биологический факультет, кафедра биоинженерии) **Исследование пластичности димера гистонов H2A-H2B методом молекулярной динамики** (Князева А.С., Армеев Г.А., Шайтан А.К.)

Зубова Елена Александровна (Москва, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, отдел полимеров и композиционных материалов) **С-А тест для силовых полей ДНК** (Стрельников И.А., Ковалева Н.А., Клинов А.П., Зубова Е.А.)

Костюк Клим (Москва, Институт биоорганической химии им. академиков М. М. Шемякина и Ю. А. Овчинникова РАН) **Влияние холестерина на “мозаичность” поверхности липидного бислоя** (Костюк К.А., Ефремов Р.Г.)

Худобин Роман (Москва, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук) **Анализ локальной подвижности полиимидов** (Худобин Р.В., Мазо М.А., Балабаев Н.К.)

Жулидин Павел Андреевич (Саратовский государственный технический университет, кафедра «Информационная безопасность автоматизированных систем» Математическое моделирование и комплексы программ) **Исследование свойств модифицированного глицина в воде** (Жулидин П.А., Филин П.Д., Пластун И.Л., Яковлев Р.Ю.)

Широсов Валентин Георгиевич (Ижевск, Научно-исследовательский центр "ИКАР")
Проблемы современной биомедфизики, моделирования и пути их решения

Заседание 2

24 января 2023 года, вторник, 15.00

Секция **W1** Вычислительная и системная биология. Экологическое моделирование

Руководители: *Николай Владимович Белотелов, Татьяна Юрьевна Плюснина, Андрей Александрович Полежаев, Галина Юрьевна Ризниченко, Андрей Борисович Рубин*

Приглашённые доклады

Нечипуренко Юрий Дмитриевич (Москва, Институт молекулярной биологии им. В.А.Энгельгардта РАН, Лаборатория ДНК-белковых взаимодействий) **Кооперативное связывание кислорода с гемоглобином: анализ математических моделей** (Нечипуренко Ю.Д., Вашанов Г.А., Лавриненко И.А.)

Ермаков Александр Сергеевич (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, биологический факультет, кафедра эмбриологии) **Рождение морфомеханики**

Устные доклады

Потапова Татьяна Васильевна (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, НИИ физико-химической биологии имени А.Н. Белозерского, отдел математических методов в биологии) **Супермодель для изучения локальных электрических полей — верхушка гифы *Neurospora crassa***

Беляева Наталья Евгеньевна (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, биологический факультет, каф. биофизики, Сектор информатики и биофизики сложных систем) **Модельный анализ сигналов длительной индукции флуоресценции монокультур микроводорослей и цианобактерий с целью фенотипирования образцов** (Беляева Н.Е., Булычев А.А., Клементьев К.Е., Пащенко В.З., Ризниченко Г.Ю., Рубин А.Б.)

Червицов Роман Николаевич (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, биологический факультет, каф. биофизики) **Изучение влияния ионов тяжелых металлов на клетки *Chlorella vulgaris* помощью классификатора «Случайный лес»** (Червицов Р.Н., Плюснина Т.Ю., Хрущев С.С., Тодоренко Д.А.)

Цхай Александр Андреевич (Барнаул, Институт водных и экологических проблем СО РАН, лаборатория гидрологии и геоинформатики, доктор технических наук, профессор) **Модель эвтрофирования Новосибирского водохранилища** (Цхай А.А., Агейков В.Ю.)

Ермаченко Павел Андреевич (Алматы, ТОО Нео-Экологджи) **Цифровая модель водной экосистемы био-прудов доочистки сточных вод** (Ермаченко П.А., Середин Д.С., Беляева Н.Е.)

Стендовые доклады

Хрущев Сергей Сергеевич (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, биологический факультет, каф. биофизики, сектор информатики и биофизики сложных систем) **Дискретная по пространству и времени агентная модель фотосинтетического электронного транспорта** (Хрущев С.С., Плюснина Т.Ю., Маслаков А.С., Ризниченко Г.Ю., Рубин А.Б.)

Хрущев Сергей Сергеевич (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, биологический факультет, каф. биофизики, сектор информатики и биофизики сложных систем) **Анализ переходных процессов в модели фотосистемы 2** (Хрущев С.С., Плюснина Т.Ю., Ризниченко Г.Ю., Рубин А.Б.)

Яковлева Ольга Валентиновна (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, биологический факультет, каф. биофизики, сектор экзобиологии) **Использование замедленной флуоресценции хлорофилла для биотестирования загрязнений** (Маторин Д.Н., Яковлева О.В., Тодоренко Д.А., Маторин Н.А., Алексеев А.А.)

Краснобаева Лариса Александровна (Томский государственный университет, физический ф-т кафедра теоретической физики) **Размерная и безразмерная модели однородной ДНК** (Якушевич Л.В., Краснобаева Л.А.)

Глытов Иван Владимирович (Пушино, Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН, Лаборатория системной организации нейронов) **Особенности распределения пространственной частоты изменения электростатического потенциала вокруг геномной ДНК бактериофага T7 в области промоторов, специфичных для нативной фаговой и хозяйской РНК полимеразы *E.coli*** (Глытов И.В., Осипов А.А.)

Корчагина Вера Михайловна (Пушино, Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН, Лаборатория системной организации нейронов) **Зависимость силы мутантных промоторов гена *gtpB* рибосомальной РНК *E.coli* от параметров электростатического ир-элемента** (Корчагина В.М., Осипов А.А.)

Мустафин Халид Сабирович (Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), факультет общей и прикладной физики, кафедра биофизики) **Уточнение структуры неупорядоченного компонента раствора белковых кристаллов с использованием моделей машинного обучения** (Мустафин Х.С., Гуштин И.Ю.)

Заседание 3

25 января 2023 года, среда, 9.00

Секция **W2** Молекулярное моделирование

Ведущие: *Илья Борисович Коваленко, Мария Григорьевна Хренова, Алексей Константинович Шайтан*

Кривицкая Александра Вячеславовна (Москва, Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии» Российской академии наук, Институт биохимии имени А.Н. Баха) **Механизм реакции ингибирования пенициллин-связывающих белков цефтриаксоном** (Кривицкая А.В., Хренова М.Г.)

Мулашкина Татьяна Игоревна (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический ф-т, кафедра физической химии, лаборатория квантовой химии и молекулярного моделирования) **Влияние заместителей уходящей группы на гидролиз фосфорорганических соединений в активном центре фосфотриэстеразы из *Pseudomonas diminuta*** (Мулашкина Т.И., Кулакова А.М., Хренова М.Г.)

Кулакова Анна Михайловна (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, кафедра физической химии) **Диссоциативный и ассоциативный механизм разрыва Р-О связи нуклеозидфосфатов ферментами: определение типа реакции методами молекулярного моделирования** (Кулакова А.М., Мулашкина Т.И., Хренова М.Г.)

Поляков Игорь Вадимович (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический ф-т, кафедра физической химии) **Квантовохимическое моделирование фотореакции гидратации хромофора флуоресцентного белка Dreiklang** (Поляков И.В., Григоренко Б.Л., Немухин А.В.)

Пьянкина Екатерина Алексеевна (Москва, МИРЭА – Российский Технологический Университет, ИТХТ) **Корреляция противовирусной активности 1,2,4-триазолсодержащих лигандов с их связыванием в аллостерических центрах ACE2, выявленная методом молекулярного докинга** (Пьянкина Е.А., Олейник Е.С., Гребенкина Л.Е., Матвеев А.В.)

Левченко Ирина Николаевна (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, физический ф-т, каф. биофизики) **Математическое моделирование квантовых выходов активированной кумарином C-334 и C-525 хемилюминесценции под действием комплекса цитохрома C с кардиолипином** (Левченко И.Н., Владимиров Г.К., Володяев И.В., Тимофеев В.И.)

Заседание 4

25 января 2023 года, среда, 15.00

Секция **W3** Медицинская и радиационная биофизика

Руководители: *Татьяна Юрьевна Плоснина, Андрей Александрович Полежаев, Галина Юрьевна Ризниченко, Андрей Борисович Рубин*

Приглашённый доклад

Крупянский Юрий Федорович (Москва, Институт химической физики им. Н.Н.Семенова РАН, Отдел строения вещества) **Конденсация ДНК в бактериях** (Крупянский Ю.Ф., Генералова А.А., Коваленко В.В., Лойко Н.Г., Терешкин Э.В., Моисеенко А.В., Терешкина К.Б., Соколова О.С., Попов А.Н.)

Устные доклады

Munkhbaatar Batmunkh (Дубна, Объединенный институт ядерных исследований) **Количественная оценка повреждающего действия космических лучей на клеточные и субклеточные структуры мозга** (Батмунх М., Бугай А.Н., Баярчимэг Л., Лхагва О.)

Глебов Артем Александрович (Дубна, Объединенный институт ядерных исследований, Лаборатория радиационной биологии, сектор математического моделирования радиационно-индуцированных эффектов) **Анализ параметров пролиферации в модели нарушения нейрогенеза у взрослых мышей C57BL/6J после облучения рентгеновскими лучами** (Глебов А.А., Колесникова Е.А., Бугай А.Н.)

Васильева Мария Александровна (Дубна, Объединенный институт ядерных исследований, Лаборатория радиационной биологии) **Математическая модель радиационно-индуцированных повреждений ДНК** (Васильева М.А., Бугай А.Н., Душанов Э.Б.)

Пилинская Дарья Леонидовна (Университет «Дубна», Факультет естественных и инженерных наук, медицинская радиобиология) **Кинетика репарации двунитевых разрывов ДНК при воздействии фотонного излучения** (Пилинская Д.Л., Душанов Э.Б., Батова А.С., Насонова Е.А., Бугай А.Н.)

Батова Анна Сергеевна (Дубна, Объединенный институт ядерных исследований, Лаборатория радиационной биологии) **Влияние коллективного потенциала на нелинейную динамику микротрубочек** (Батова А.С., Бугай А.Н., Ранкович Д, Сивчевич В, Здравкович С.)

Гришечин Андрей Анатольевич (Пушино, Институт биофизики клетки Российской академии наук – обособленное подразделение Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Пушинский научный центр биологических исследований Российской академии наук», Лаборатория клеточной нейробиологии) **Математическое моделирование низкочастотных колебаний в сердечно-сосудистой системе человека**

Салихова Татьяна (Москва, ФГБУ НМИЦ гематологии МЗ РФ) **Математическое моделирование гидродинамической активации тромбоцитов в персонализированных артериовенозных фистулах для гемодиализа** (Салихова Т.Ю., Пушин Д.М., Нестеренко И.В., Бирюкова Л.С., Гурия Г.Т.)

Киселева Диана Геннадьевна (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, биологический факультет, каф. биофизики, сектор информатики и биофизики сложных систем) **Анализ клинических данных по восстановлению сердечной деятельности пациентов, перенесших аортокоронарное шунтирование** (Киселева Д.Г., Плюснина Т.Ю., Лищук А.Н.)

Чистякова Юлия Алексеевна (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, биологический факультет, каф. биофизики) **Моделирование углеводно-липидного обмена адипоцита в условиях различных режимов питания** (Чистякова Ю.А., Плюснина Т.Ю.)

Орлов Юрий Львович (Москва, Первый МГМУ им. И.М.Сеченова, Институт цифровой медицины) **Компьютерная реконструкция генной сети болезни Паркинсона** (Туркина В.А., Вишнякова Е.В., Орунбаева А.А., Соболева Л.П., Бурмистров Н.Д., Крючкова К.Ю., Голубева Е.А., Белова О.В., Орлов Ю.Л.)

Стендовые доклады

Туркина Василиса Алексеевна (Москва, Первый МГМУ им. И.М.Сеченова, Институт цифровой медицины) **Компьютерное исследование ассоциаций заболеваний как обобщение генных сетей на примере опухолей мозга** (Орлов Ю.Л., Красильникова А.А., Булгакова А.В., Майорова А.А., Соколова А.В., Варакина Э.С., Туркина В.А.)

Заседание 5

26 января 2023 года, четверг, 9.00

Секция **W2** Молекулярное моделирование

Ведущие: *Илья Борисович Коваленко, Мария Григорьевна Хренова, Алексей Константинович Шайтан*

Аксенова Светлана (Дубна, Объединенный институт ядерных исследований) **Влияние оксидативного стресса на конформации глутаматных рецепторов** (Аксёнова С.В., Батова А.С., Бугай А.Н., Душанов Э.Б.)

Кузьмин Александр (Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)) **Структура и динамика белка E оболочки коронавируса SARS-CoV-2** (Кузьмин А.С., Гушин И.Ю.)

Холина Екатерина Георгиевна (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, биологический факультет) **Идентификация сайтов связывания катионных фотосенсибилизаторов на вирусной оболочке методом броуновской динамики** (Холина Е.Г., Федоров В.А., Хрущев С.С., Коваленко И.Б., Страховская М.Г., Рубин А.Б.)

Фёдоров Владимир Андреевич (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, биологический факультет) **Роль гидрофобных взаимодействий в процессе формирования комплекса белков пластоцианина и цитохрома c_6 с цитохромом f в цианобактериях и зеленых водорослях** (Федоров В.А., Хрущев С.С., Коваленко И.Б.)

Абатурова Анна Михайловна (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, биологический факультет) **Влияние расстояния между мембранами кристы митохондрии на скорость образования предварительного комплекса цитохрома С и димера III дыхательного комплекса в модели броуновской динамики** (Абатурова А.М., Ризниченко Г.Ю.)

Стендовые доклады

Одинцов Константин Викторович (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический ф-т, кафедра физической химии, лаборатория квантовой химии и молекулярного моделирования) **Моделирование реакций присоединения кислорода во флавин-зависимых монооксигеназах методами квантовой химии** (Одинцов К.В., Григоренко Б.Л., Домрачева Т.М.)

Степанюк Роман Алексеевич (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, кафедра физической химии, НИЛ квантовой химии и молекулярного моделирования) **Молекулярный механизм превращения аденозинтрифосфата (АТФ) в циклический аденозинмонофосфат (сАМР) в активном центре аденилатциклазы** (Степанюк Р.А., Мулашкина Т.И., Хренова М.Г.)

Курьшккина Мария Сергеевна (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет) **Сравнение фотоактивируемых аденилатциклаз из *Beggiatoa* и *Oscillatoria acuminata*** (Курьшккина М.С., Кулакова А.М., Немухин А.В.)

Шарьяфетдинова Александра Сергеевна (Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Группа интегративной биологии на кафедре биоинженерии биологического факультета) **Изучение посттрансляционных модификаций гистонов методом молекулярного моделирования** (Шарьяфетдинова А.С., Армеев Г.А., Князева А.С.)

Васильев Вениамин Андреевич (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Группа интегративной биологии на кафедре биоинженерии биологического факультета) **Разработка программной библиотеки для расчета геометрических параметров ДНК на языке Python** (Васильев В.А., Армеев Г.А.)

Фёдоров Владимир Андреевич (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, биологический факультет) **Исследование влияния таксола на конформационную подвижность белка тубулина методами молекулярной динамики** (Федоров В.А., Холина Е.Г., Гудимчук Н.Б., Коваленко И.Б.)

Ma Xiaochen (Shenzhen, Shenzhen MSU-BIT University, School of Biology) **Docking and machine learning approaches for the annlysis of hev ns5b small molecule binders** (Ma X., Боздаганян М.)

Yang Anqi (Shenzhen, Shenzhen MSU-BIT University) **Prediction of skin permeability coefficient by means of coarse grained molecular dynamics simulations** (Yang A., Боздаганян М.)

Заседание 6

27 января 2023 года, пятница, 14.00

Секция **W4** Моделирование, визуализация и анализ данных в исследовании когнитивных систем

Руководители: *Алексей Рудольфович Браже, Дмитрий Энгелевич Постнов, Галина Юрьевна Ризниченко, Андрей Борисович Рубин*

Браже Алексей Рудольфович (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, биологический факультет) **Открытие секции «Моделирование, визуализация и анализ данных в исследовании когнитивных систем»**

Вейзе Дмитрий Львович (Будапешт, Международное общество междисциплинарного изучения симметрии, Международное консультативное правление)

Периодические структуры на паттернах филологаксиса

Мысин Иван Евгеньевич (Пушино, Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН, Лаборатория системной организации нейронов)

Смена парадигмы в походе к моделированию мозга

Осипов Александр Александрович (Пушино, Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН, Лаборатория системной организации нейронов) **Биоинформатика, нейробиология нового поколения и искусственный интеллект**

Кирсанов Артем (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, биологический факультет) **Эффект норадреналина на астроцитарную кальцевую динамику в модели нейрон-глиальных взаимодействий** (Кирсанов А.В., Вервейко Д.В., Верисокин А.Ю., Браже А.Р., Постнов Д.Э.)

Лагоша Станислав Витальевич (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, биологический факультет, биологический факультет, кафедра биофизики) **Моделирование влияния обратного захвата внесинаптического ГАМК на генерацию гиппокампального тета-ритма** (Лагоша С.В., Кирсанов А.В., Браже А.Р.)

Лукин Павел Олегович (Курский государственный университет)

Управление нейро-астроцитарной активностью в модели комплексного взаимодействия нейроглиотрансмиттеров и норадреналина

(Лукин П.О., Верисокин А.Ю., Вервейко Д.В., Браже А.Р., Постнов Д.Э.)

Коденко Мария Романовна (Москва, Московский государственный технический университет им. Н.Э.Баумана) **Анализ высокоплотностного компонента содержимого брюшной аорты при КТ-ангиографии** (Коденко М.Р., Кульберг Н.С., Самородов А.В.)

Галкин Александр Сергеевич (Associate Professor in Neuroscience, Weill Cornell Medicine, Feil Family Brain and Mind Research Institute, New York, USA) **Quantitative analysis of metabolic profiling of brain sections with MALDI MS Imaging – open questions**

Секция S4. Социально-экономические исследования

Заседание 1

24 января 2023 года, вторник, 15.00

Анализ и моделирование социально-экономических процессов

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

Приглашённые доклады

Афанасьев Михаил Юрьевич (Москва, Центральный экономико-математический институт РАН, Лаборатория прикладной эконометрики) **Индекс экономической сложности и его приложения в задачах диверсификации экономики**

Кудров Александр Владимирович (Москва, Центральный экономико-математический институт РАН) **Связь индекса экономической сложности и ВВП: регионы России**

Варшавский Леонид Евгеньевич (Москва, Центральный экономико-математический институт РАН) **Экономико-математическое исследование эффективности стимулирования развития высокотехнологичных производств**

Устные доклады

Фаркова Наталья Анатольевна (Москва, Дипломатическая академия МИД РФ, кафедра мировой экономики) **О современных моделях и системах раннего предупреждения вооруженных конфликтов**

Комкина Татьяна Анатольевна (Москва, Центральный экономико-математический институт РАН) **Оценка структурных изменений российской экономики на основе анализа данных крупнейших компаний**

Дубинина Марина Геннадьевна (Москва, Центральный экономико-математический институт РАН) **Аuditивное производство в России и за рубежом**

Шитова Юлия Юрьевна (Москва, Российский государственный гуманитарный университет) **Применение VI аналитики в сквозных задачах** (Шитова Ю.Ю., Петров А.С.)

Русанова Ниша Евгеньевна (Москва, Институт социально-экономических проблем народонаселения РАН, Лаборатория исследования здоровья населения и системы здравоохранения) **Новые тенденции регулирования репродуктивного здоровья женщин России**

Васильева Ирина Анатольевна (Москва, Центральный экономико-математический институт РАН) **Господдержка занятости населения**

Гудович Ирина Семеновна (Воронежский государственный университет, математический ф-т, каф. мат. моделирования) **Взгляды студентов-филологов на будущую карьеру, их приоритеты и мотивации** (Винокурова Н.А., Гудович И.С.)

Тарасова Наталия Андреевна (Москва, Центральный экономико-математический институт РАН) **Динамика восприятия рынка труда и занятости в РФ**

Бобкова Ирина Александровна (Москва, Центральный экономико-математический институт РАН) **Качественные результаты трансформации российской образовательной системы**

Дубишина Виктория Васильевна (Москва, Центральный экономико-математический институт РАН, Лаборатория моделирования экономической стабильности (2.03))
Влияние роботизации на изменение численности занятых

Кузнецова Мария (Москва, Центральный экономико-математический институт РАН, Лаборатория моделирования экономической стабильности (2.03))

Анализ развития мобильных чипсетов компаний Qualcomm, Apple и Samsung

Никонова Мария Андреевна (Москва, Центральный экономико-математический институт РАН) **Распространение ИКТ в регионах России как один из факторов снижения цифрового неравенства**

Гусев Алексей Александрович (Москва, Центральный экономико-математический институт РАН) **Сравнительный анализ подходов к оценке экономической сложности регионов**

Ковалева Анастасия Валерьевна (Дубна, Объединенный институт ядерных исследований, Департамент кадров и делопроизводства, отдел труда и заработной платы) **Анализ современного состояния рынка труда в научной сфере**

Заседание 2

27 января 2023 года, пятница, 14.00

Математические методы в экономике и социологии (эконофизика и социофизика)

Руководители: *Ольга Евгеньевна Пыркина, Анатолий Викторович Шатров*

Гисин Владимир Борисович (Москва, Финансовый университет при Правительстве Российской Федерации, департамент математики) **Режимы Минского в двумерной дискретной линейной модели** (Гисин В.Б., Волкова Е.С.)

Заречнев Виктор Андреевич (Кировский государственный медицинский университет, кафедра физики и медицинской информатики) **Визуализация результатов исследований методом главных компонент**

Заречнев Виктор Андреевич (Кировский государственный медицинский университет, кафедра физики и медицинской информатики) **Интерполирование естественным кубическим сплайном**

Заречнев Виктор Андреевич (Кировский государственный медицинский университет, кафедра физики и медицинской информатики) **Итеративные расчеты в Excel**

Заречнев Виктор Андреевич (Кировский государственный медицинский университет, кафедра физики и медицинской информатики) **Обучение перцептрона операции умножения**

Заречнев Виктор Андреевич (Кировский государственный медицинский университет, кафедра физики и медицинской информатики) **Переход от дискретных к непрерывным марковским процессам**

Зеликин Николай Валерьевич (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, механико-математический факультет, кафедра теоретической информатики) **Категорная модель системы управления**

Кривошеев Олег Игоревич (Московский государственный университет экономики, статистики и информатики (МЭСИ), каф. прикладной математики)

Элементарная модель бистабильности рынка труда для индустриальной экономики

Никольский Илья Михайлович (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, ф-г вычислительной математики и кибернетики, кафедра суперкомпьютеров и квантовой информатики) **Средства анализа корреляции между показателями неэффективности экономических агентов и оценками этих показателей в модели стохастической границы** (Фурманов К.К., Никольский И.М.)

Павлецов Макар Михайлович (Екатеринбург, Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина, Институт естественных наук и математики) **Анализ зон мультистабильности стохастической модели взаимодействия двух потребителей** (Павлецов М.М., Перевалова Т.В.)

Стихова Ольга Владимировна (Москва, ФГБОУ ВО «МГТУ «СТАНКИН», кафедра «Прикладная математика») **Вычислительные методы расчета кредитных производных для промышленных компаний**

Секция S5. Гуманитарное и естественно-научное образование

Руководители: *Елена Владимировна Борисова, Надежда Васильевна Аммосова, Владимир Ильич Залятин, Владимир Ефимович Карпов, Полина Викторовна Фурсова.*

Заседание 1

25 января 2023 года, среда, 9.00

Макарова Ольга Викторовна (Ижевск, МАОУ «Гимназия №56») **Сетевое наставничество. Форма: педагог-педагог** (Макарова О.В., Яворская Е.Л.)

Орлова Марина Владимировна (Ижевск, МАОУ «Гимназия № 56»)

Индивидуальный проект как эффективный способ профессионализации старшеклассника гуманитарного профиля (Орлова М.В.)

Лисицкая Евгения Васильевна (Московский губернский колледж искусств)

Методические основы системной интеграции традиционных и цифровых технологий преподавания музыкальной дисциплины (Лисицкая Е.В., Гернет Н.Д.)

Серовайский Семен Яковлевич (Алматы, Казахский национальный университет им. аль-Фараби, кафедра математики)

Контрпримеры в системе преподавания математики

Потапова Татьяна Васильевна (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, НИИ физико-химической биологии имени А.Н. Белозерского, отдел математических методов в биологии)

Помощь вузов в осмысленном озеленении пришкольных участков

Пикуленко Марина Машиловна (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Научно-учебный Музей земледения)

Образование и просвещение в музее земледения МГУ: шаги цифровизации (Пикуленко М.М., Попова Л.В.)

Заседание 2

25 января 2023 года, среда, 15.00

Орлов Юрий Львович (Москва, Первый МГМУ им. И.М.Сеченова, Институт цифровой медицины) **Образовательные аспекты компьютерной реконструкции генных сетей на основе онлайн-инструментов биоинформатики** (Орлов Ю.Л., Туркина В.А., Карпын А.Б., Анашкина А.А., Лебедев Г.С.)

Герцен Татьяна Анатольевна (Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Кафедра прикладной физики)

О проекте цифровой актуализации рабочих программ дисциплин для студентов технического вуза (Герцен Т.А., Любимова Н.Ю., Любимова А.А.)

Липагина Лариса Владимировна (Москва, Финансовый Университет при Правительстве РФ, Департамент математики) **Об особенностях изучения математических дисциплин будущими экономистами в эпоху цифровизации образования**

Пыркина Ольга Евгеньевна (Москва, Финансовый Университет при Правительстве РФ, департамент математики) **Преимущества и проблемы цифрового преподавания математики студентам нематематических специальностей**

Шишов Владимир Александрович (Краснодар, лаборатория Vitrolix)

Построение системы управления обучением на основе интегрированного конструктора тренажёров и предметного языка сценариев

Круглый стол **«Какой математике и как учить в цифровую эпоху»**

25 января 2023 года, среда, 16.30

Ведущие: *Елена Владимировна Борисова* (Научно-исследовательский центр Военной академии ракетных войск стратегического назначения имени Петра Великого), *Владимир Ильич Залатын* (Южно-Уральский Государственный университет)

Стендовые доклады

Зезюля Наталья Викторовна (Москва, Государственное бюджетное общеобразовательное учреждение города Москвы «Школа № 37», Дошкольное отделение) **Исследовательско-творческий проект «Белое облако»** (Зезюля Н.В., Емельянова Е.Н.)

Пустогаров Андрей Александрович (Серпухов, независимый исследователь)

Повлияла ли античность на развитие нашей цивилизации?

Секция S6. Музей в современном мире

Руководители: *Татьяна Петровна Гончарова, Любовь Наумовна Краснополская, Александр Дмитриевич Силаев, Павел Николаевич Сорокин*

Заседание

25 января 2023 года, среда, 15.00

- Сахно Александр Анатольевич* (Московская область, Музей-заповедник Усадьба «Мураново» им. Ф.И. Тютчева) **Дипломатическая служба Ф.И. Тютчева в Мюнхене: успех или неудача**
- Гончарова Татьяна Петровна* (Московская область, Музей-заповедник Усадьба «Мураново» им. Ф.И. Тютчева) **Гений серебряного века о трех гениях золотого века русской литературы. К 100-летию со дня смерти Велемира Хлебникова**
- Иванина Ольга Борисовна* (Московская область, Музей-заповедник Усадьба «Мураново» им. Ф.И. Тютчева) **Аквилон – издательский проект 20-х годов 20-го века**
- Догошина Елена Александровна* (Московская область, Музей-заповедник Усадьба «Мураново» им. Ф.И. Тютчева, Изобразительный фонд)
Учитель и ученик. Скульптор Н.А. Андреев и Ж.А. Лукнич
- Рюмина Ита Андреевна* (Международная Федерация художников ЮНЕСКО, Ассоциация искусствоведов -АИС, Европейская ассоциация психотерапии-ЕАР, Творческий Союз художников России – ТСХР, Общероссийская психотерапевтическая Лига – ОППЛ, Австрийское общество психотерапии - ОКIDS, Международный Институт Интегративной психотерапии «Генезис», Межрегиональная Ассоциация «Женщины в науке и образовании»)
Астрокосмос художника Николая Ивановича Федорова
- Гладышев Михаил Сергеевич* (Мураново, Объединенный мемориально-художественный музей-заповедник «Усадьба «Мураново» им. Ф.И. Тютчева и народных художественных промыслов «Усадьба Лукутиных», Экспозиционно-выставочный отдел) **Русь купеческая Бориса Кустодиева**
- Голубкова Марина Дмитриевна* (Москва, Союз писателей) **Кавказ и его деятели культуры в наследии поэта, прозаика, художника и редактора Дмитрия Голубкова (1930-1972)**
- Ермолаева Елена Олеговна* (Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, физический факультет, кафедра акустики)
**Лев Термен – инженер и музыкант.
К 90-ю физического факультета Московского университета**
- Ефимова Елена Алексеевна* (Москва, Государственное бюджетное профессиональное образовательное учреждение города Москвы «Воробьевы горы», Музей истории детского движения) **Работа Музея истории детского движения ГБПОУ «Воробьевы горы» по увековечиванию памяти сотрудников Московского Дома-Дворца пионеров — участников Великой Отечественной войны**
- Силаев Александр Дмитриевич* (Москва, Государственное бюджетное профессиональное образовательное учреждение города Москвы «Воробьевы горы», Музей истории детского движения) **К биографии моего деда, Лаптева Леонида Михайловича (по документам ЦАМО)**

Секция S7. Русский научный язык

Круглый стол «Культурное пространство России». Книги, журналы, конференции.
23 января 2023 года, понедельник, 19.00

Ведущие: *Галина Юрьевна Ризниченко, Марина Юрьевна Сидорова,
Юрий Дмитриевич Нечипоренко*

Юрий Дмитриевич Нечипоренко (Москва, Институт молекулярной биологии
им. В. А. Энгельгардта, Союз писателей)

Два способа описания реальности: научный и художественный

Представление книги «Горизонты биофизики». Анонс 7-го Съезда биофизиков
России и 10 Съезда Российского фотобиологического общества

Симонова Лариса Алексеевна (Московский областной университет)

80 лет романа Антуана де Сент Экзюпери «Маленький принц»

Карякин Юрий Васильевич (Томский политехнический университет, Отдел
информатизации образования) **О культуре в целом. Генетический срез**

Потапова Татьяна Васильевна (Московский государственный университет имени
М.В.Ломоносова) **Человек и Природа: здесь и сейчас**

и другие...

Виртуальная экскурсия по «Залу коллекции живописи» Дома ученых Пушкино.

Ведет сотрудник Дома Ученых *Жиронкина Ольга Федоровна*

Заседание

24 января 2023 года, вторник, 9.30

Председатель *Марина Юрьевна Сидорова*

Приглашённые доклады

Теркулов Вячеслав Исаевич (Донецкий национальный университет, Кафедра русского
языка) **Базовые понятия социолингвистики: язык и диалект**

Клементьева Алёна Александровна (Московский государственный университет имени
М.В.Ломоносова, филологический факультет)

Представление искусственного интеллекта в научном дискурсе

Николенкова Наталья Владимировна (Московский государственный университет
имени М.В.Ломоносова, филологический факультет)

**О хвостиках, лапках, частичках и цепочках: о некоторых особенностях
формирования языка русской науки в XVIII – начале XIX вв.**

Чернейко Людмила Олеговна (Московский государственный университет имени
М.В.Ломоносова, филологический факультет) **Метод невербального**

семантического дифференциала в изучении ассоциативного поля понятий

Круглый стол «**Зачем нужна русская литература?**»

24 января 2023 года, вторник, 17.00

Ведущий *Марина Юрьевна Сидорова*

Голубков Михаил Михайлович (д.ф.н., проф., зав. кафедрой истории новейшей русской литературы и современного литературного процесса филологического факультета Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова)

Зачем нужна русская литература

Чернейко Людмила Олеговна (д.ф.н., проф., филологический факультет Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова) «**Валентность на интерпретацию» как условие бытия художественного текста**

Сидорова Марина Юрьевна (д.ф.н., проф., филологический факультет Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова)

Лирическая поэзия как территория высших смыслов

Симонова Лариса Алексеевна (ГБУК г. Москвы ОКЦ ЦАО библиотека №7. Культурный центр им. А. де Сент-Экзюпери)

Место и роль литературоведения в системе современного знания

S1

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ТЕОРИИ

МATHEMATICAL THEORIES

Руководители:

*Елена Николаевна Аристова, Владимир Ильич Залятин,
Владимир Ефимович Карпов, Алексей Иванович Лобанов,
Павел Валентинович Москалёв, Павел Николаевич Сорокин,
Александр Васильевич Шаповалов.*

КАК ЗАГЛЯНУТЬ ЗА ГОРИЗОНТ ПРОГНОЗА В НЕЛИНЕЙНЫХ СИСТЕМАХ

Громов В.А.

Национальный исследовательский университет "Высшая школа экономики" (НИУ
ВШЭ)

Концепция непрогнозируемых точек позволила сформулировать новую постановку задачи прогнозирования на много шагов вперёд: в рамках этой постановки предполагается, что алгоритм обладает способностью различать прогнозируемые и непрогнозируемые точки и давать прогноз в прогнозируемых. Было установлено, что для хаотических временных рядов с ростом числа шагов вперёд, на которое необходимо получить прогноз, число непрогнозируемых точек растёт, при этом ошибка в прогнозируемых точках не превышает некоторого порогового значения. Предлагаемый подход к решению задачи многошагового прогнозирования в такой постановке позволили получить прогнозы в некоторых точках за горизонтом прогнозирования.

О СУЩЕСТВОВАНИИ РЕШЕНИЙ ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ВОЛЬТЕРРА В ОБОБЩЕННОЙ ТРАКТОВКЕ С НЕПРЕРЫВНЫМ ЯДРОМ

Гурьянова И.Э.

Финансовый университет при Правительстве РФ
125993, Россия, Москва, Ленинградский просп., 49
IEGuryanova@fa.ru, irinagur@list.ru

Рассматривается уравнение вида

$$x(t) = f(t) + \int_{M(t)} K(t, s, x(s)) d\mu_s, \quad (1)$$

где $t \in \Omega$, Ω – связное локально компактное метрическое пространство; мера $\mu \leq \infty$ определена на борелевских множествах $A \subseteq \Omega$; функции $f: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ и $K: \Omega^2 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ непрерывны; отображение $M: \Omega \rightarrow 2^\Omega$ удовлетворяет системе аксиом, на основе которой обобщается понятие «вольтерровости» интегрального уравнения:

1. $\forall t \in \Omega \Rightarrow M(t)$ компактно, причем для любого открытого $G \subseteq \Omega$, если $G \cap M(t) \neq \emptyset$, то $\mu(G \cap M(t)) > 0$.

2. $\forall t \in \Omega \Rightarrow \lim_{s \rightarrow t} \mu(M(t)\Delta M(s)) = 0$, где Δ – симметрическая разность.

3. $\forall t \in \Omega, s \in M(t) \Rightarrow M(s) \subseteq M(t)$.

4. $\forall t \in \Omega, \exists s \in M(t): M(s) = \emptyset$.

5. $\forall t \in \Omega, \exists \varepsilon > 0$ и M -звездный континуум $A: \rho(t, s) < \varepsilon \Rightarrow M(s) \subseteq A$. При этом множество $A \subseteq \Omega$ называется M -звездным, если $\forall t \in A \Rightarrow M(t) \subseteq A$.

6. Измеримы множество $\Xi := \{(t, s): t \in \Omega, s \in M(t)\} \subseteq \Omega^2$ и, при каждом $t \in \Omega$, – множество $M^*(t) := \{s: t \in M(s)\} \subseteq \Omega$. Для уравнения (1) в работах [1 – 2] получены теоремы существования, единственности и устойчивости решений. В докладе рассматривается уравнение (1) с непрерывным ядром, не удовлетворяющим условию Липшица.

С помощью принципа Шаудера и теоремы Красносельского доказываются теоремы существования решения для интегрального уравнения (1).

Литература

1. Гурьянова И.Э., Мышкис А.Д. О непродолжимых решениях абстрактных интегральных уравнений типа Вольтера // Дифференциальные уравнения. – 1986. – 22, №10. – с. 1786–1789.
2. Гурьянова И.Э., Мышкис А.Д. Асимптотическая эквивалентность и устойчивость абстрактных интегральных уравнений Вольтерра // Дифференциальные и интегральные уравнения. Межвузовский сборник. – Горький, 1988. – с. 48–55.

МОДЕЛЬ МОДУЛЬНОЙ НЕЛИНЕЙНОСТИ В ЗАДАЧЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ ВОЛН

Гусев В.А.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, физический ф-т, каф. Акустики, Россия, 199991, г. Москва, Ленинские горы, Тел.: 8(495)939-29-43, E-mail: vgusev@bk.ru

Исследование волновых полей большой интенсивности обычно связано с решением нелинейных уравнений, обычно не имеющих общего точного решения. Необходимы новые подходы к построению аналитических решений и выявлению их качественных зависимостей от параметров задачи в целях оптимизации и создания полей заданной структуры. Одним из таких подходов является метод модульной нелинейности, состоящий в качественной замене нелинейных слагаемых степенного вида слагаемыми более низкой степени или линейными, но содержащими функцию модуля. Например, квадратичное слагаемое может быть заменено на слагаемое с модулем. При этом качественное поведение в целом сохраняется. Вместо нелинейного уравнения получается система линейных уравнений для интервалов различной полярности, имеющие точные решения. Далее проводится шивка решений, в ходе которой проявляются нелинейные эффекты в виде образования ударного фронта.

Модель модульной нелинейности эффективна в таких конкретных проблемах, как трехмерная задача распространения интенсивных акустических пучков, а также расчет интенсивной поверхностной волны на границе раздела сред. В случае пучков удается в рамках данной модели получить точное разрывное решение на оси пучка [1]. Временной профиль состоит из последовательности узких импульсов большой положительной амплитуды и длительных интервалов малой отрицательной амплитуды. Уменьшение отрицательной амплитуды связано с двумя факторами – нелинейным затуханием на ударном фронте и дифракционным расплыванием. Кроме того, чем уже характерная ширина пучка, тем сильнее проявляются данные эффекты. В случае поверхностной волны удается записать дисперсионное уравнение и построить распределение поля по глубине [2]. В то же время в случае квадратичной нелинейности возможны только приближенные методы учета нелинейных эффектов. Можно ожидать, что подобная модель окажется полезной и в других задачах нелинейной динамики, от классической модели «хищник-жертва» до проблем динамического хаоса.

Работа поддержана грантом РФФИ № 20-02-00493.

Литература.

1. Gusev V.A. Calculation of the field of a high-intensity focused ultrasonic beam using the modular nonlinearity model // 2022 Days on Diffraction (DD), 2022.
2. Гусев В.А. Трансформация акустических волн в слоистых средах с модульной нелинейностью // Труды Всероссийской акустической конференции. СПб.: ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2020. С. 101-105.

ВЕРОЯТНОСТЬ И СПЕЦИАЛЬНЫЕ ФУНКЦИИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Заляпин В.И.

ЮУрГУ, Россия, 454080, Челябинск, пр. Ленина 76, 8(351)2679904, zaliapinv@susu.ru

Введение. В докладе предлагается метод исследования специальных функций математической физики, основанный на их вероятностной интерпретации.

Основная конструкция. Рассмотрим случайное блуждание по целочисленной сети \mathbb{Z}^m в \mathbb{Z}^m , такое, что $\forall x, y \in \mathbb{Z}^m \quad P\{x, y\} = P\{0, y-x\} = \begin{cases} p_i, & y-x = e_i \\ 0, & y-x \neq e_i \end{cases} \quad \sum_{i=1}^m p_i = 1.$

Здесь $\{e_i, i=1, 2, \dots, m\}$ ---- линейно независимые в \mathbb{Z}^m элементы, $p_i > 0$. Если n, k – целые положительные числа, такие, что $n+k=m$, $A = \|a_{ij}\|_{k \times (n+k)}$ – целочисленная матрица, то, полагая $x = y \pmod{A} \Leftrightarrow \exists l \in \mathbb{Z}^k : x - y = l \times A$, рассмотрим Ω_n^k – совокупность классов эквивалентности по введеному сравнению:

$$\Omega_n^k(A) = \{H_x^A, x \in \mathbb{Z}^m\}, \quad H_x^A = \{y \in \mathbb{Z}^m : y = x \pmod{A}\}.$$

Если теперь рандомизовать случайное блуждание пуассоновским процессом с интенсивностью λ , то легко установить, что вероятность за время t попасть в один из классов совокупности Ω_n^k будет даваться соотношением:

$$P\{H_x^A\} = \exp(-\lambda t) \times G_x(t, \lambda).$$

Полагая в последнем соотношении $t\lambda = z$, введем в рассмотрение функции $G_x(z)$, где индекс x – любой представитель класса H_x^A . Функции $G_x(z)$ являются искомым обобщением классических специальных функций и носят название *функций пуассоновского блуждания*.

Примеры.

1. $n=1, k=1, A = \|1, 1\|$ – модифицированные функции Бесселя;
2. $n=1, k=1, A = \|1, -2\|$ – многочлены Эрмита;
3. $n=2, k=1, A = \|1, 1, -1\|$ – многочлены Лагерра;
4. $n=3, k=1, A = \|1, 1, -1, -1\|$ – гипергеометрия, в т.ч. многочлены Якоби, Лагранжа, 4-мерные сферические функции.

Используя хорошо изученные стохастические конструкции, удастся по новому взглянуть на сложные соотношения и формулы теории специальных функций, расшифровать известные соотношения и асимптотики, изучить их свойства.

КОНГАРМОНИЧЕСКИЕ АНАЛОГИ ТОЖДЕСТВ ГРЕЯ НОРМАЛЬНЫХ LCACS-МНОГООБРАЗИЙ

Рустанов А.Р., Харитонов С.В.¹

Московский государственный строительный университет, Институт цифровых технологий и моделирования в строительстве, каф. прикладной математики, Россия, 129337, Москва, ш. Ярославское 26, корп. КМК, E-mail: aligadzhi@yandex.ru

¹Оренбургский государственный университет, каф. геометрии и компьютерных наук, Россия, 460018, просп. Победы 13, E-mail: hcb@yandex.ru

Одним из подклассов конформных преобразований являются конгармонические преобразования. Тензор [2], инвариантный относительно конгармонических преобразований называется тензором конгармонической кривизны и имеет вид: $K(X, Y, Z, W) = R(X, Y, Z, W) - \frac{1}{2n-1}(g(X, W)S(Y, Z) - g(X, Z)S(Y, W) + g(Y, Z)S(X, W) + g(Y, W)S(X, Z))$, где R – тензор римановой кривизны, S – тензор Риччи, g – риманова метрика.

Теорема 1. Нормальное $lcAC_S$ -многообразие [1] является конгармонически плоским многообразием тогда и только тогда, когда на пространстве присоединенной G -структуры $A_{bc}^{ad} = 0$ и $\sigma_{00} = -\left(n + \frac{1}{2}\right) \sigma_0^2$.

Теорема 2. Конгармонически плоское нормальное $lcAC_S$ -многообразие постоянной кривизны является плоским косимплектическим многообразием, т.е. локально эквивалентно произведению плоского Келерова многообразия на вещественную прямую.

Почти контактное метрическое многообразие будем называть многообразием класса CK_i ($i = 1, 2, 3$), если для компонент его тензора конгармонической кривизны верно соответствующее тождество: 1) $g(K(\Phi X, \Phi Y)\Phi Z, \Phi W) = g(K(\Phi^2 X, \Phi^2 Y)\Phi Z, \Phi W)$,

2) $g(K(\Phi X, \Phi Y)\Phi Z, \Phi W) = g(K(\Phi^2 X, \Phi^2 Y)\Phi Z, \Phi W) + g(K(\Phi^2 X, \Phi Y)\Phi^2 Z, \Phi W) + g(K(\Phi^2 X, \Phi Y)\Phi Z, \Phi^2 W)$,

3) $g(K(\Phi X, \Phi Y)\Phi Z, \Phi W) = g(K(\Phi^2 X, \Phi^2 Y)\Phi^2 Z, \Phi^2 W)$, $X, Y, Z, W \in X(M)$.

Теорема 3. Нормальное $lcAC_S$ -многообразие является многообразием классов CK_2 и CK_3 .

Теорема 4. Нормальное $lcAC_S$ -многообразие является многообразием класса CK_1 тогда и только тогда, когда на пространстве присоединенной G -структуры $A_{ae}^{be} = \delta_a^b \left(\left(n + \frac{1}{2}\right) \sigma_0^2 + \sigma_{00} \right)$.

Литература.

1. Z.Olszak. Locally conformal almost cosymplectic manifolds// *Colloq. math.* **57**, 1, 1989. Стр. 73-87.
2. Y.Ishii. On conharmonic transformations// *Tensor.* **7**, 2, 1957. Стр. 73-80.

S2

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ
И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

СOMPUTATIONAL METHODS
AND MATHEMATICAL MODELING

Руководители:

*Елена Николаевна Аристова, Владимир Ильич Залятин,
Владимир Ефимович Карпов, Алексей Иванович Лобанов,
Павел Валентинович Москалёв, Павел Николаевич Сорокин,
Александр Васильевич Шаповалов.*

СВОЙСТВА PSI-УРАВНЕНИЯ ВЛАСОВА

Александров И.И., Полякова Р.В.

Физический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова,

Большинство задач, связанных с расчетом процессов в плазме или её взаимодействии с другими структурами, связаны с численным моделированием хорошо известного уравнения Власова для плазмы.

Как мы знаем, плазма является агрегатным состоянием вещества, в котором совокупность большого числа заряженных частиц находится в непрерывном колебательном движении, а значит в ней происходят процессы, связанные с излучением. Однако при этом в уравнении Власова не учтено влияние радиационного трения.

С помощью результатов предыдущих статей и формализма Дисперсионной цепочки Власова[1] было рассмотрено 3-е уравнение данной цепочки и получен результат, позволяющий по-новому взглянуть на моделирование систем с излучением, а также предложен численный алгоритм (PIC – Particle in Cell) для его реализации.

Литература.

1. Perepelkin E.E., Dispersion Chain of Vlasov equations // J. Stat. Mech.(2022) 013205

МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАЗОВОЙ ДИСПЕРСНОЙ ФАЗЫ В РАБОЧЕМ ПРОСТРАНСТВЕ АЛЮМИНИЕВОГО ЭЛЕКТРОЛИЗЕРА

Анпилов С.В., Савенкова Н.П., Складчиков С.А., Лапонин В.С.

МГУ имени М.В. Ломоносова, Факультет вычислительной математики и кибернетики
119234, ГСП-1, ул. Колмогорова, д. 1, стр. 52, Москва, Россия

В качестве основы использована разработанная ранее математическая модель многоанодного электролизёра основана на системе уравнений Навье–Стокса с применением подхода многофазной смеси [1]. За основу части модели, описывающей электромагнитные поля и распределение токов, взята система уравнений Максвелла. Модель позволяет учитывать форму рабочего пространства ванны, вязкое трение между средами, влияние нестационарного электромагнитного поля и изменяющиеся во времени конфигурации анодов на гидродинамику процесса.

Модель была расширена введением третьей компоненты смеси – дисперсных пузырьков газа [2, 3], моделирование которых позволяет учесть их динамику, в частности - перераспределение электрического сопротивления, что позволило получить более точные результаты при моделировании таких технологических явлений как анодный эффект.

В результате численного моделирования, учитывающего реальные геометрические и технологические параметры ванны, получены поля скоростей в алюминии, электролите, а также распределение сопротивления многофазной среды и токов, построена динамическая граница раздела сред.

Литература.

1. Савенкова Н.П., Анпилов С.В., Кузьмин Р.Н., Проворова О.Г., Пискажова Т.В. Двухфазная 3D модель мгд-явлений алюминиевого электролизёра. – Сборник докладов третьего международного конгресса «Цветные металлы - 2011». Красноярск., – С. 282-286.
2. Chung T.J. Computational Fluid Dynamics, 2nd edition, Cambridge University Press, 2010.
3. Дорохов И.Н., Кафаров В.В., Нигматулин Р.И. Методы механики сплошной среды для описания многофазных многокомпонентных смесей с химическими реакциями и процессами тепло и массопереноса. Прикладная математика и механика. 1975. Т.39, No.3. С. 485-496.

БИКОМПАКТНЫЕ СХЕМЫ ДЛЯ HOLO АЛГОРИТМОВ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ПЕРЕНОСА ИЗЛУЧЕНИЯ

Аристова Е.Н., Караваева Н.И.¹

ИПМ им. М.В. Келдыша РАН 125047, Москва, Миусская пл., д.4

¹МФТИ (НИУ) 141701, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., д. 9

Многогрупповое уравнение переноса излучения совместно с уравнением энергии используется для описания процессов, происходящих при прохождении излучения через вещество (процессы поглощения, излучения и переноса фотонов). Характерной особенностью задач переноса излучения является их большая размерность, так как решение зависит от временных, пространственных, угловых и энергетической переменных. Для эффективного решения задачи могут быть использованы HOLO алгоритмы, ключевой идеей которых является совместное решение кинетических уравнений высокого и низкого порядка (HO - high order и LO - low order). Размерность задачи понижается посредством осреднения уравнений по угловым и энергетической переменным. Организуется совместное решение уравнения переноса для различных групп по энергии, многогрупповой квазидиффузионной системы уравнений и одногрупповой системы уравнений квазидиффузии вместе с уравнением энергии [1]. Уравнение переноса может решаться при помощи бикомпактных схем, предложенных Б.В. Роговым [2]. Схемы для уравнений квазидиффузии были развиты авторами данной работы [3]. Предлагаемые разностные схемы обладают четвертым порядком аппроксимации по пространству и произвольным порядком аппроксимации по времени.

Предложенные схемы для HOLO алгоритмов решения уравнения переноса были исследованы в серии аналитических тестов, а также применены для решения первой задачи Флека.

Литература.

1. Анистратов Д. Ю., Аристова Е. Н., Гольдин В. Я. Нелинейный метод решения задач переноса излучения в среде. Матем. моделирование, 8:12 (1996), 3–28
2. Рогов Б. В., Михайловская М. Н. Бикомпактные схемы четвертого порядка аппроксимации для гиперболических уравнений. ДАН, 2010, т.430, №4, с. 470–474. DOI: 10.1134/S1064562410010400.
3. Аристова Е. Н., Караваева Н. И. Бикомпактные схемы высокого порядка аппроксимации для уравнений квазидиффузии. Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша РАН, 2018, №45, 28 с. DOI: 10.20948/prepr-2018-45.

ИНДУЦИРОВАННЫЕ ШУМОМ ПЕРЕХОДЫ В МОДЕЛИ ТЕРМОХИМИЧЕСКОГО РЕАКТОРА

Башкирцева И.А., Иваненко Г.А., Клабукова Ю.В.

Лаборатория многомасштабного математического моделирования, Уральский федеральный университет, Россия, 620000, Екатеринбург, пр. Ленина 51,
g.ivanenko11@yandex.ru

В данной работе рассматривается нелинейная модель термохимического реактора, описывающая динамику концентрации и температуры реагента в присутствии случайных возмущений. Проведен анализ детерминированной модели и получено параметрическое описание аттракторов и бифуркаций. Обнаружены зоны мультистабильности с сосуществованием равновесных и автоколебательных режимов, получено описание бассейнов притяжения и сепаратрис, их разделяющих. Показано, как случайные возмущения генерируют переходы между сосуществующими аттракторами и формируют триггерные режимы динамики. Исследовано явление стохастического возбуждения, при котором даже малые шумы вызывают большеамплитудные спайковые осцилляции в зоне, где единственным аттрактором является устойчивое равновесие.

Литература.

1. I.A. Bashkirtseva and L.B. Ryashko, “Noise-induced complex oscillatory dynamics in the Zeldovich–Semenov model of a continuous stirred tank reactor”, *Chaos* 31, 013105 (2021)
2. И.А. Башкирцева, Т.В. Рязанова, Л.Б. Ряшко, “Компьютерное моделирование нелинейной динамики. Непрерывные модели. Учебное пособие”, УрФУ, 2017

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Программы развития Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина в соответствии с программой стратегического академического лидерства "Приоритет-2030".

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕМЕНТА ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ ДИОКСИДА ТИТАНА МЕТОДОМ КОМПОНЕНТНЫХ ЦЕПЕЙ

Т.В. Ганджа, К.А. Исаков

Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники,
Россия, 634050, Томск, пр. Ленина 40, Телефон: (3822) 418913, E-mail:

Isakovka95@gmail.com

Технология получения пигментного диоксида титана из ильменитового сырья по фторидной технологии является перспективным направлением для различных сфер деятельности. В настоящее время ведутся работы по реализации данного технологического процесса на АО «Сибирский химических комбинат».

Технологический процесс получения диоксида титана делится на несколько этапов, один из которых заключается в разложении ильменита фторидом аммония. Основным элементом технологической цепочки производства конечного продукта является барабанно-вращающаяся печь, моделирование которой проводится в рамках метода компонентных цепей (МКЦ) [1].

МКЦ предоставляет возможность моделировать объекты с неоднородными векторными связями и позволяет с помощью генератора моделей компонентов [2] сформировать компьютерную модель требуемого объекта. Основанная на МКЦ среда компьютерного моделирования МАРС [3] позволяет проводить вычислительный эксперимент, направленный на многовариантный анализ и параметрический синтез, лежащий в основе решения задач исследования, проектирования и управления технологическим объектом.

В работе рассмотрено моделирование барабанно-вращающейся печи и оптимизация параметров с помощью метода компонентных цепей.

Литература

1. Дмитриев В.М., Арайс Л.А., Шутенков А.В. Автоматизация моделирования промышленных роботов. М.: Машиностроение. 1995. 304 с.
2. Дмитриев В.М., Ганджа Т.В., Коротина Т.Ю. Генератор моделей компонентов с энергетическими связями физически неоднородных цепей на базе интерактивной математической панели // Доклады Томск. гос. ун-та систем управления и радиоэлектроники. 2009. № 2 (20). С. 94–99.
3. МАРС – среда моделирования сложных технических устройств и систем / В.М. Дмитриев и др. Томск: В-Спектр, 2011. 281 с.

НЕЛИНЕЙНЫЙ РЕЗОНАНС И ПРОГНОЗ ПОТЕРИ УСТОЙЧИВОСТИ ВЫПУКЛЫХ ПОЛОГИХ ОБОЛОЧЕК

Грачев В.А., Найштут Ю.С.

Самарский государственный технический университет, Факультет промышленного и гражданского строительства, кафедра металлических и деревянных конструкций, Россия, 443001, г. Самара, ул. Молодогвардейская 194,
Тел.: (846)339-14-94,
E-mail: neustadt99@mail.ru

Задачи потери устойчивости тонких упругих оболочек опять стали актуальными, так как обнаружены новые факты, связанные с разрушением конструкций [1, 2]. Основное противоречие состоит в следующем: предельные силы, при которых наблюдается потеря устойчивости оболочек (в процессе медленного приложения пропорционально увеличивающейся во времени нагрузки), оказываются меньше тех, которые предсказывает теория, отраженная в стандартах США и Европы. Теоретические предсказания до последнего времени основывались на решениях дифференциальных уравнений, предложенных Карманом и Фепплом. Вычисляется "нижнее критическое значение нагрузки", которое считается предельным при эксплуатации. Такой критерий проверен для многих практически важных нагружений, хотя известно, что он не является универсальным [3]. Новые материалы и условия эксплуатации оболочек требуют уточнения теоретических положений. Физико-математический анализ задачи показывает, что возникшие трудности могут быть преодолены, если учесть влияние динамических факторов в уравнениях Кармана-Феппла [4], а также ограничиться изучением перемещений, нормальных к исходной поверхности. Доказывается существование стоячих волн, основываясь на результатах экспериментального деформирования оболочки пробной нагрузкой и анализе возникающего дифференциального уравнения Дурффинга. Полученные сведения могут быть использованы для прогноза потери устойчивости, предлагается эксперимент, позволяющий найти коэффициент запаса несущей способности в условиях эксплуатации оболочки.

Литература.

1. Hilburger M., Developing the Next Generation Shell Buckling Design Factors and Technologies, 53rd AIAA/ASME/ASCE/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics and Materials Conference, Structures, Structural Dynamics, and Materials, 2012 and Co-located Conferences, <https://doi.org/10.2514/6.2012-1686>
2. Lovejoy A., Legley D. C., Hilburger M., Przekop A. Lessons Learned from Large-Scale Aerospace Structural Testing, AIAA SciTech 2021 Forum 11–15 & 19–21 January 2021 VIRTUAL EVENT, <https://doi.org/10.2514/6.2021-1619>
3. Ворович И.И., Математические проблемы нелинейной теории пологих оболочек, — М.: Физматгиз. 1980.
4. Lewicka M., Mora M.G., Pakzad M.R., Shell theories arising as low energy Γ -limit of 3d nonlinear elasticity, *Ann.Sc. Norm. Super. Pisa, Cl. Sci.* (5) 9 (2) (2010) 253–295.

ОБНАРУЖЕНИЕ АНОМАЛИЙ В ГИПЕРСПЕКТРАЛЬНЫХ ИЗОБРАЖЕНИЯХ

Друзь А.С.

Южный федеральный университет, Институт механики, математики и компьютерных наук им И.И. Воровича Россия, 344090, г. Ростов-на-Дону, ул. Мильчакова 8А тел.: +79282791626, e-mail: adruz@sfedu.ru

Под аномалией понимают экземпляры данных, которые значительно отличаются от большинства или показывают неожиданное поведение. Вариационный автокодировщик – разновидность классического автокодировщика; предполагается, что значения в данных в рамках некоего домена могут зависеть от некоего ограниченного набора переменных в скрытом пространстве [1]. Для обнаружения аномалий вариационный автокодировщик обучается на нормальных данных, а затем пытается реконструировать тестовые данные. Аномалии в этом случае могут быть обнаружены как неудачные реконструкции. В работе использована модель полносвёрточного вариационного автокодировщика (FCVAE) для обработки изображений, способная моделировать множество объектов на одном изображении параллельно [2].

Для демонстрации возможностей обнаружения аномалий была выбрана задача сортировки материалов на конвейере на основании фотографии. В качестве материалов был выбран измельчённый бетон различных видов, от которого должны быть отделены прочие материалы (известь, кирпич, пенопласт и т. д.). Так как некоторые посторонние материалы неотличимы от бетона на обычной фотографии, было предложено использовать гиперспектральные изображения. С помощью коротковолновой инфракрасной камеры получено 10 фотографий двух видов бетона и 2 фотографии посторонних материалов. Базовая модель FCVAE обучалась на небольших квадратных участках, извлечённых из 7 фотографий бетона, а еще 3 фотографии бетона и 2 фотографии прочих материалов использовались для тестирования.

Описанная модель достаточно хорошо обнаруживает аномалии данных во всех экспериментах: AUC ROC (площадь под кривой рабочей характеристики приёмника) 83–91%. Использование от 8 до 32 цветовых каналов практически не влияет на точность. Субъективный анализ визуализированных результатов также показывает, что выбранный метод подходит для решения поставленной задачи. Тёмные виды бетона сортируются лучше светлых, а большинство посторонних материалов обнаруживаются как аномалии, за исключением редких экземпляров. Дальнейшие улучшения могут быть достигнуты постобработкой результатов для уточнения аномальных фрагментов.

Литература.

1. Kingma D.P., Welling M. Auto-Encoding Variational Bayes // International Conference on Learning Representations (ICLR), 2014.
2. Друзь А.С. Полносвёрточный вариационный автокодировщик. – Материалы XXIX научной конференции "СИТО – 2022". Ростов-на-Дону; Таганрог: Издательство ЮФУ, 2022. Стр. 103–106.

SHAPLEY-ЗНАЧЕНИЕ КАК МЕРА КАЧЕСТВА МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИХ ДАННЫХ

Заворотнюк Д., Сорокин А., Пеков С.¹, Елиферов В., Бочаров К.², Николаев Е.¹, Попов И.

Московский физико-технический институт, Институтский переулок, д.9,
Долгопрудный, 141701, Россия, +7 (495) 408 45 54, E-mail: info@mipt.ru

¹Сколковский институт науки и технологий, Большой бульвар д.30, стр.1, Москва,
121205, Россия, +7 (495) 280 14 81, E-mail: inbox@skoltech.ru

²Институт энергетических проблем химической физики им. В.Л. Тальрозе при
Федеральном исследовательском центре химической физики им. Н.Н. Семенова,
Ленинский проспект, д. 38, к. 2, Москва, 119334, Россия, +7 (499) 137 82 58

Наличие в выборке низкокачественных данных и данных, соответствующих смешанным случаям, когда содержат линейные комбинации объектов из разных классов, приводит к резкому ухудшению качества полученных предсказаний. Поэтому существует необходимость построения алгоритмов автоматического контроля качества входных данных.

Для решения задачи было предложено использовать алгоритм Shapley [1]. Мы реализовали этот алгоритм на примере масс-спектрометрических данных, полученных с образцов тканей головного мозга человека пациентов с диагнозами глиобластома и патология не опухолевой природы. Для масс-спектрометрии с прямой ионизацией характерны такие особенности, как слабая воспроизводимость молекулярного профиля, нестабильный ионный ток, особенно, когда в ходе проведения эксперимента происходит переключение режима сбора ионов. Это приводит к тому, что даже соседние сканы могут сильно различаться между собой, и сильно влияет на анализ экспериментальных данных.

Для небольшого набора масс-спектрометрических сканов были рассчитаны Shapley-значения, которые в дальнейшем были использованы для построения регрессионной модели и предсказания Shapley-значений для остальных сканов. Результаты показывают, что исключение масс-спектрометрических сканов с низкими Shapley-значениями из анализа повышает точность классификационных моделей и уменьшает время, необходимое для построения моделей.

Работа выполнена в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования (соглашение No 075-00337-20-02, проект No 0714-2020-0006).

Литература

1. Ghorbani, A., & Zou, J. (2019). Data shapley: Equitable valuation of data for machine learning // 36th International Conference on Machine Learning, ICML 2019, 2019-June, 4053–4065.

СЕТЧОНО-ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКАЯ РАЗНОСТНАЯ СХЕМА ДЛЯ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ХОПФА НА ОСНОВЕ ДВУХ РАЗЛИЧНЫХ ДИВЕРГЕНТНЫХ ФОРМ

Карпов В.Е., Лобанов А.И.

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Россия, 141701, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., 9

Построено новое двухпараметрическое семейство разностных схем для численного решения уравнения Хопфа.

Исходная задача заменялась задачей для системы двух дифференциальных уравнений на основе различных дивергентных форм уравнения Хопфа. Потокковые члены выражались в виде линейных комбинаций переменных, входящих в разные дивергентные формы. В отличие от большинства работ, использующих методы неопределенных коэффициентов для построения разностных схем, при таком подходе неопределенные коэффициенты возникают при формулировке дифференциальной задачи. Система уравнений сохраняет гиперболический тип при любых значениях параметров.

Для численной реализации за основу выбрана известная сеточно-характеристическая схема в инвариантах Римана, которая в случае линейного уравнения с постоянными коэффициентами переходит в схему Лакса-Вендроффа.

Проведены расчеты двух тестовых задач – об эволюции гладкого начального условия и формировании разрывного решения и о распространении «ударной волны». По результатам тестовых расчетов подобраны коэффициенты экстраполяции, позволяющие получить хорошее согласие с точным решением.

Исследовался апостериорный порядок сходимости к предельной функции для разрывных решений. При удачно подобранных коэффициентах экстраполяции он незначительно превышает 1 в момент градиентной катастрофы. При распространении сильного разрыва на больших временах порядок сходимости падает до 0.76.

Остается открытым вопрос о постановке оптимизационной задачи, позволяющей выбирать коэффициенты экстраполяции наилучшим образом, возможно, в зависимости от локальных свойств решения. Также открытым пока остается вопрос о создании гибридных разностных схем с переменными коэффициентами экстраполяции в зависимости от гладкости решения.

ГЕНЕРАЦИЯ НАБОРА ДАННЫХ С РЕАЛИСТИЧНЫМ ШУМОМ ДЛЯ ОБУЧЕНИЯ ШУМОДАВЛЯЮЩИХ СЕТЕЙ

Коваленко А.С., Демяненко Я.М.

Южный Федеральный Университет, Россия, 344090, г. Ростов-на-Дону, ул. Мильчакова,
8а, +78632975111, akov@sfnedu.ru

Наряду с подавлением шума на изображениях актуальной проблемой является шумоподавление видео. Но в отличие от изображений, сложно получить выровненные пары с кадрами видео для построения выборки для последующего обучения нейронных сетей. В этой работе предлагается использовать генеративную модель для искусственного зашумления кадров видео. В качестве эталонных изображений без шума рассматриваются кадры видео из набора Set8, рассматриваемого авторами работы [1].

Поскольку в настоящее время нет выровненных наборов данных для решения проблемы шумоподавления видео, исследователям необходимо применить синтетический шум к чистым кадрам видео. Например, авторы подходов [1] для обучения своих моделей добавляют к входным изображениям гауссовский шум с разными сигма-параметрами. Но у этого подхода есть существенный недостаток. При наложении шума на входное изображение физические свойства КМОП-сенсора камеры не учитываются.

Для решения проблемы добавления реалистичного шума к изображению был выбран подход DANet [2], где модель UNet была заменена архитектурой под названием Uformer [3], поскольку она показала более современные результаты. Также этот подход позволит генерировать карты шума для входного изображения. Затем при сложении чистого изображения с предсказанной картой получается изображение с шумом.

Модель Uformer была обучена на наборе данных Smartphone Image Denoising Dataset (SIDD) с применением стратегии обучения из работы DANet. После обучения она достигла значения метрики PSNR 39,4 на тестовом наборе данных SIDD. Оригинальная модель автора демонстрирует результаты PSNR 39,3. Более того, результат модели Uformer дает результаты ближе к реальному распределению шума, чем распределение Гаусса. Обученную модель Uformer можно применять к кадрам видео вместо Гауссова шума для построения обучающей выборки, содержащей шум, близкий к реальному. На основе таких наборов данных можно будет обучать модели для эффективного подавления шума на видео, снятых на камеры с КМОП-сенсором [1].

Литература.

1. Tassano Matias, Delon Julie, Veit Thomas. FastDVDnet: Towards Real-Time Deep Video Denoising Without Flow Estimation // Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR). — 2020. — June.p.
2. Yue Zongsheng, Zhao Qian, Zhang Lei, and Meng Deyu. Dual Adversarial Network: Toward Real-world Noise Removal and Noise Generation // Proceedings of the European Conference on Computer Vision (ECCV). — 2020. — August.
3. Wang Zhendong, Cun Xiaodong, Bao Jianmin, and Liu Jianzhuang. Uformer: A General U-Shaped Transformer for Image Restoration // CoRR. — 2021. — Vol. abs/2106.03106. — arXiv :2106.03106.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКОЙ НАГРУЗКИ НА ЛЕДОВУЮ СТРУКТУРУ ПОД ТЕПЛОВЫМ ВОЗДЕЙСТВИЕМ

Конов Д.С., Муратов М.В., Гусева Е.К., Петров И.Б.

Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет), Россия, 141701, Долгопрудный,
Первомайская улица 3, Тел.: 89629220639, E-mail: konov1999@gmail.com

Для численного решения задач механической устойчивости и прочностного анализа разработано множество методов и пакетов, реализующих их. В данном исследовании затронуты задачи анализа материалов, свойства которых зависят от температуры и подвержены тепловым процессам, включая таяния. Такие структуры могут встречаться, например, в Арктическом регионе России, в районах вечной мерзлоты, или на морском шельфе. Таяние льда или вечной мерзлоты это медленные процессы, поэтому для решения задачи Стефана необходимо использовать абсолютно устойчивые, как следствие, неявные методы [1]. Для механической задачи подойдет сеточно-характеристический метод [2]. Необходимо также учитывать вязкоупругие свойства льда, а его разрушение не может быть описано только лишь критерием Мизеса, так как во льду могут появляться трещины. Для учета вязкоупругости используется модель Максвелла, которая в программе реализована с помощью отдельного корректора.

Итоговая схема вычислений выглядит так: сначала для ледовой структуры вычисляется начальное поле температур. Далее ставится задача Стефана для исследуемого периода, например, годового, учитываются внешние условия, тепловые потоки от оборудования. В отдельные периоды времени ставится задача линейной упругости, решается задача установления. Динамический критерий разрушения учитывает трещины, которые могут влиять на волновую картину. С помощью статического критерия разрушения делаются выводы об устойчивости.

Для ледового острова в Арктике [1] предельная нагрузка на часть верхней поверхности длиной в 5 метров оказывается равной 2.175 МН в январе и 2.125 МН в августе.

Работа выполнена в рамках проекта Российского научного фонда № 21-71-10015.

Литература

1. *Муратов М.В., Конов Д.С., Петров И.Б.* Математическое моделирование воздействия сезонных температурных изменений на искусственный ледовый остров // Доклады конференции “Математика. Компьютер. Образование. 2021”.
2. *Магомедов К. М., Холодов А. С.* Сеточно-характеристические численные методы.

**АНАЛИТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ДИФФУЗИИ В ОДНОПАРАМЕТРИЧЕСКОМ
ДВУМЕРНОМ КЛЕТОЧНОМ АВТОМАТЕ С ОКРЕСТНОСТЬЮ МАРГОЛУСА**

А.Е. Кулагин^{1,2}, А.В. Шаповалов^{3,4}

¹Томский политехнический университет, Россия, 634050, Томск, пр. Ленина, 30,
E-mail: ak8@tpu.ru;

²Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН, Россия, 634055, Томск, пл.
Академика Зуева, 1;

³Томский государственный университет, Россия, 634050, Томск, пл. Новособорная, 1,
Телефон: (3822) 529843, E-mail: shpv@phys.tsu.ru;

⁴Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники,
Россия, 634050, Томск, пр. Ленина 40, Телефон: (3822) 418913.

Клеточные автоматы (КА) являются мощным инструментом для моделирования процессов переноса вещества. Этому способствует то, что они естественным образом описываются с помощью параллельных алгоритмов, которые успешно реализуются на таких современных системах как, например, программируемые логические интегральные схемы (ПЛИС) и графические карты.

Одним из основных механизмов переноса вещества является диффузия. С точки зрения технической реализации наиболее интересны синхронные КА. Простейшим синхронным КА, описывающим диффузию в газах, является КА с окрестностью Марголуса [1]. Хотя численными экспериментами было эмпирически доказано, что данный тип автомата действительно описывает диффузионные процессы, для его применения к моделированию реальных процессов необходимо знать макроскопические характеристики диффузионного процесса, описываемого КА с заданными параметрами.

В нашей работе [2] мы предлагаем точное аналитическое описание процесса диффузии в обобщенном однопараметрическом КА с окрестностью Марголуса, основанное на описании движения одиночной «частицы» в автомате. Задача сведена к двумерной Марковской цепочке, для которой удалось найти точное решение. На основании найденных решений было получено точное значение коэффициента диффузии как в классическом варианте с фиксированной вероятностью поворота блоков, так и в обобщенном случае, когда данная вероятность является параметром КА. Данные результаты уточняют известные численные результаты и обобщают их.

Литература

1. Toffoli T., Margolus N. Cellular Automata Machines: A New Environment for Modeling. – Cambridge: MIT Press, 1987. 259 pages.
2. Kulagin A. E., Shapovalov A. V. Analytical description of the diffusion in a cellular automaton with the Margolus neighbourhood in terms of the two-dimensional Markov chain. – doi.org/10.48550/arXiv.2208.03014.

**ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТОЛКНОВЕНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ
ВЕТРОВЫХ ВОЛН В КОЛЬЦЕВОМ КАНАЛЕ****Лапонин В.С., Складчиков С.А., Анпилов С.В., Савенкова Н.П.**МГУ имени М.В. Ломоносова, факультет ВМК, РФ, 119991, Москва,
Ленинские горы д. 1, стр. 52, +7 (495) 939-52-55, lap@cs.msu.ru

Уединенные ветровые волны исследуются уже давно, например [1-7]. Большинство вопросов до сих пор остаются весьма актуальными. В данный момент не так хорошо изучены как экспериментально, так и теоретически условия образования устойчивых ветровых волн [3] на поверхности жидкости. По этой причине данная работа посвящена изучению столкновению нелинейных волн на поверхности жидкости и образованию вихревых структур у ветровых волн с помощью математического моделирования.

Рассмотрим кольцевой канал с высотой 0.6 м, шириной 0.2 и внутренним радиусом 1 м. В начальный момент времени в канале находится покоящаяся жидкость, занимающая половину объема в установке, оставшийся объем заполнен воздухом. Ветер (со скоростью 4,5 м/с) создается четырьмя вентиляторами, расположенными равномерно над каналом.

Для математического моделирования данного процесса запишем систему уравнений Навье-Стокса в декартовой системе координат, ось oZ которой совпадает осью симметрии кольца. Системы уравнений для воздуха и воды выписываются отдельно [5-7].

Литература.

1. Юэн Г., Лэйк Б. Нелинейная динамика гравитационных волн на глубокой воде. М.: Мир, 1987.
2. Степанянц Ю.А., Фабрикант А.Л. Распространение волн в сдвиговых потоках. Современные проблемы физики. М.: Физматлит, 1996.
3. Р. Кузьмин, В. Лапонин, Н. Савенкова, С. Складчиков Математическое моделирование формирования уединенной волны на поверхности жидкости // *Инженерная физика*. — 2014. — № 8. — С. 19–24.
4. Savenkova N., Laponin V. A numerical method for finding soliton solutions in nonlinear differential equations // *Moscow University Computational Mathematics and Cybernetics*. — 2013. — Vol. 37, no. 2. — P. 49–54.
5. U. Yusupaliyev, N. Savenkova, S. Shuteyev et al. Computer simulation of vortex self-maintenance and amplification // *MOSCOW UNIVERSITY PHYSICS BULLETIN*. — 2013. — Vol. 68, no. 4. — P. 317–319.
6. V. Bychkov, N. Savenkova, S. Anpilov, Y. V. Troshchiev Modeling of vorticle objects created in gatchina discharge // *IEEE Transactions on Plasma Science*. — 2012. — Vol. 40, no. 12. — P. 3158–3161.
7. Шулейкин В. В. Физика моря. М.: Наука. 1968

АВТОМАТИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА АУДИТА ДЛЯ АНАЛИЗА ДОКУМЕНТОВ

Мартиневич Е.Н., Попов Е.В., Шуткин А.С.

Научно-технологический университет "Сириус"

С целью автоматизации работы аудиторских компаний, минимизации человеческого фактора и уменьшения затрат ресурсов, нами был придуман и реализован алгоритм XML графов для анализа документов. Из анализа литературы мы увидели, что таких работ еще не было представлено – полностью инновационная разработка.

В качестве входных данных мы используем подмножество языка разметки XML, потому что отчетность чаще всего представляется именно в таком виде. Сначала производится анализ XML-файлов и составление списков и словарей содержащихся в них тегов, их значений и иерархии. На основании этого составляется текстовый документ с подробным перечнем связей по каждому отдельному элементу.

Далее строится граф первого вида, изображающий связи файлов через отдельные теги, каждый элемент имеет всплывающую подсказку с информацией о расположении данного элемента в текстовом файле. Вершинами графа считаются элементы разметки файла, а ребрами – связь между ними.

На основании выстроенной иерархии производится подсчет весов тегов и их значений, сил взаимодействия файлов друг с другом, создание таблицы связей файлов по полям и значениям. Создается и нормализуется таблица величины связей между файлами, на основании которой производится понижение размерности с помощью метода главных компонент. Полученная кластеризация диагонализуется и высчитывается удаленность первоначального положения от итогового. Затем файлы распределяются по холсту в соответствии с их изначальным положением на диагонали и углом, пропорциональным численной удаленности. В итоге строится граф второго вида визуализируется в трех вариантах: с низкой, средней и высокой степенями детализации.

В результате применения нашей разработки мы получаем:

- relations.txt – текстовый файл, с подробным перечнем связей по каждому отдельному элементу.
- result.csv – таблица связей объектов графа через поля.
- test.svg – граф первого типа. Показывает взаимосвязи XML файлов через общие теги внутри файла и положения описанных элементов в текстовом документе.
- low.png – граф второго типа с низкой степенью детализации, показывающий взаимосвязи XML-файлов друг с другом.
- middle.png – граф второго типа с средней степенью детализации, показывающий взаимосвязи XML-файлов друг с другом.
- high.png – граф второго типа с высокой степенью детализации, показывающий взаимосвязи XML-файлов друг с другом.

МОДЕЛИРОВАНИЕ СВЯЗИ МЕЖДУ СТРУКТУРОЙ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИМИ СВОЙСТВАМИ УГЛЕВОДОРОДОВ НА ОСНОВЕ СПЕКТРАЛЬНОЙ ТЕОРИИ ГРАФОВ

Медведев Д.Ю., Скворцова М.И., Соломонова Е.В.

МИРЭА - Российский технологический университет (Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова), Россия, 119571, г. Москва, пр-т Вернадского, 86
Медведев Дмитрий Юрьевич, e-mail: 18022003-dima@mail.ru Скворцова Мария Ивановна, e-mail: skvorivan@mail.ru Соломонова Екатерина Валерьевна, e-mail: katrin-vaso@yandex.ru

Проблема математического моделирования связи между структурой и свойствами химических соединений – это важнейшая задача современной теоретической и компьютерной химии. Основная цель построения таких моделей – прогнозирование свойств химических соединений непосредственно по их структуре, при помощи полученного уравнения, минуя эксперимент. Наиболее часто в подобных исследованиях молекулы представляют в виде графов, а для количественного описания структуры молекул используют инварианты этих графов. Следует отметить, что при этом возникают проблемы выбора способа построения молекулярных графов, их инвариантов, а также вида уравнения, описывающего связь «структура-свойство», из бесконечного множества возможных вариантов.

В работе показано, что для ряда физико-химических свойств алканов (температуры кипения, молярного объема, молярной рефракции, теплоты парообразования, критической температуры, критического давления, поверхностного натяжения) могут быть построены достаточно точные модели связи «структура-свойство», в которых в качестве молекулярных параметров используются исключительно инварианты спектрального типа, вычисляемые для соответствующих молекулярных графов. Эти инварианты задаются при помощи некоторых симметричных функций от собственных чисел определенных матриц графов. В качестве таких матриц рассмотрены, в частности, матрицы смежности, расстояний, Кирхгофа и др. Для матриц каждого типа построены как линейные, так и нелинейные модели. Установлено, что наилучший результат при таком моделировании дает матрица смежности графа. На основе статистического анализа частот встречаемости различных инвариантов в построенных корреляциях выявлены наиболее «популярные» параметры и предложено качественное объяснение этим фактам. Кроме того, показано, что использование для построения корреляций одновременно всех инвариантов всех рассмотренных матриц позволяет улучшить результаты, получаемые для каждой матрицы отдельно.

Предлагаемый подход к построению корреляций «структура-свойство» допускает обобщение путем расширения перечня как используемых спектральных инвариантов, так и матриц молекулярных графов. Разработанная методика моделирования связи «структура-свойство» может быть применена к органическим соединениям любого класса и любым свойствам, измеряемым количественно.

АВТОМАТИЧЕСКАЯ ДИАГНОСТИКА ОСТЕОАРТРИТА КОЛЕННОГО СУСТАВА ПО РЕНТГЕНОГРАММЕ ПРИ ПОМОЩИ СВЕРТОЧНЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Михайличенко А.А.

Институт математики, механики и компьютерных наук, ЮФУ, Россия, Ростов-на-Дону,
alexey.a.mikh@gmail.com

Остеоартрит коленного сустава (ОА) — одно из самых распространенных заболеваний опорно-двигательного аппарата. В настоящий момент эффективного лечения остеоартрита не существует, поэтому крайне важна ранняя диагностика. Самый распространенный и дешевый неинвазивный способ диагностики остеоартрита — использование рентгеновского излучения, при этом финальный диагноз сильно зависит от опыта и субъективности эксперта. Избавиться от фактора субъективности может помочь разработка автоматических методов.

В ходе исследования задача автоматической диагностики ОА решалась при помощи сверточных нейронных сетей, которые получали на вход изображение коленного сустава. Исследование включало в себя два случая – классификацию остеоартрита по шкале Келлгрена-Лоуренса из 5 классов и бинарную классификацию, целью которой было определить присутствие признаков ОА на рентгенограмме. Для этого был обучен ряд моделей с современными архитектурами (ResNet, Xception, ResNeXt и др.), и выполнено тестирование как одиночных моделей, так и их ансамблей.

Обучение и тестирование классификаторов было выполнено на датасете OAI (The Osteoarthritis Initiative), состоящем из 9557 изображений коленного сустава. В результате экспериментов наилучшая точность классификации ОА по шкале Келлгрена-Лоуренса в 72,28% была получена для ансамбля из трех моделей с архитектурой SE-ResNeXt-50 (архитектура ResNeXt с интегрированными блоками сжатия и возбуждения, или SE-блоками [1]), обученных на разных подмножествах тренировочной выборки. Наилучший результат для бинарного классификатора составил 87,5% для ансамбля из трех моделей SE-Xception (Xception с SE-блоками). В обоих случаях полученная точность классификации остеоартрита превзошла таковую у существующих методов классификации ОА. При этом повышения точности удалось достигнуть во многом за счет использования SE-блоков и ансамблей.

Таким образом, сверточные сети в комплексе с современными архитектурными решениями (вроде блоков сжатия и возбуждения) позволяют эффективно решать задачи по автоматической диагностике остеоартрита коленного сустава. При этом использование ансамблей позволяет получить более качественные результаты за счет усреднения ошибки каждого отдельного классификатора.

Литература

1. Hu J., Shen L., Sun G. Squeeze-and-Excitation Networks // *2018 IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*, 2018, pp. 7132-7141.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МОДЕЛИ МАКСВЕЛЛА ГАРНЕТТА ДЛЯ РАСЧЁТА СПЕКТРОВ ПРОПУСКАНИЯ ПЛЁНОК ИЗ КОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ С НАНОЧАСТИЦАМИ РАЗЛИЧНОЙ ФОРМЫ

Муратов Д.А.

Институт физических исследований и технологий (ИФИТ)
Российский университет дружбы народов (РУДН)
Россия, 117198, Москва, ул. Миклухо-Маклая, 6, +7(495)9550825, koshaaak2000@ya.ru

Исследование оптических свойств композитных сред, содержащих наночастицы – одно из перспективных направлений физики. Данные среды приобретают свойства, недостижимые для обычных материалов. Использование этих свойств возможно при создании сенсоров, пленок и устройств записи и передачи оптической информации. Применение использования композитных сред на основе диоксида титана позволяет использовать его фотокаталитические свойства. При добавлении наночастиц создается оптическая наноструктура со свойствами, отличными от первоначальных свойств диоксида титана. Выбор металлических наночастиц в качестве включений обусловлен наличием поглощающих свойств у получаемых систем. Благодаря управлению оптическими свойствами пленок можно улучшить существующие характеристики. Одним из способов управления свойствами оптических сред является изменение формы применяемых частиц.

В данной работе проведено исследование композитной среды на основе диоксида титана с золотыми наночастицами. Для анализа оптических свойств такого нанокompозита использовалась модель эффективной среды Максвелла Гарнетта с изменяемым фактором деполяризации [1]. В работе представлены выражения для коэффициентов отражения, пропускания и поглощения композитной среды, содержащей золотые наночастицы эллипсоидальной формы с отношениями главных полуосей 1, 2, 4, 8. Объемная концентрация частиц в пленке составляла 1%.

Проведен расчет дисперсионных зависимостей коэффициентов отражения и пропускания пленки на основе диоксида титана с золотыми наночастицами эллипсоидальной формы в зависимости от различных углов падения излучения и соотношения главных осей эллипсоида вращения.

Полученные в работе зависимости коэффициентов отражения и пропускания композитной среды на основе диоксида титана с золотыми наночастицами различной формы показывают, что использование частиц более вытянутой формы приводит к смещению характеристик в коротковолновую область и уменьшению резонансной полосы поглощения.

Расчеты показали, что при увеличении угла падения электромагнитной волны происходит усиление поглощения и его пик сдвигается в сторону больших длин волн.

Литература

1. Головань Л.А., Тимошенко В.Ю., Кашкаров П.К. Оптические свойства композитов на основе пористых систем // *Успехи физических наук.* – 2007. – Т. 177, № 6. – С. 619-638.

ОСОБЕННОСТИ ДИНАМИКИ ПАРАМЕТРОВ ОПТИМИЗАЦИИ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ КОНФИГУРАЦИИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР

Мягков А.С., Токарев Д.А., Коробов Н.А., Назаренко К.М.

Московский Государственный Технологический Университет «СТАНКИН»
Россия, 127055, г. Москва, ул. Вадковский пер. 1,
Тел.: (+7 499)972-95-00
E-mail: cmr.nazy@gmail.com

Оптимизация геометрических конфигураций молекулярных кластеров является итерационным процессом, характеризующимся высокой вычислительной сложностью, снижение которой способствует повышению детальности конформационного поиска и расширению круга исследуемых систем.

С целью снижения расхода процессорного времени, в рамках данной работы продолжено исследование проблемы текущей перспективности заданий оптимизации [1] и выявляются наиболее значимые факторы, влияющие на результат их выполнения. В случае некорректного завершения задания, либо признания его неперспективным следует возобновить итерации, используя в качестве исходных данных точку поверхности потенциальной энергии, соответствующую обнаруженному минимальному значению, либо результату последней итерации.

Показано, что длительность попытки оптимизации влияет на динамику основных показателей сходимости: максимальное и среднеквадратичное межитерационное смещение, а также значения межатомных сил. На основе предыстории значений этих показателей предполагается принимать решение о продолжении обработки вычислительного задания.

Для выборки файлов-выгрузок результатов сегментированного выполнения заданий конформационного поиска молекулярных кластеров атмосферного происхождения нами исследуются последовательности таких показателей итераций как максимальные и среднеквадратичные значения смещений молекулярных структур и значения межатомных сил. В ходе исследования установлены такие свойства наблюдаемых последовательностей как неравномерность и наличие резких скачков значений при повторном запуске вычислений. Динамику значений энергии самосогласованного поля наилучшим образом описывают максимальные и среднеквадратичные значения межатомных сил.

Полученные сведения могут в дальнейшем использоваться при разработке интегральных показателей перспективности заданий конформационного поиска на основе текущих значений энергии и итерационных параметров сходимости.

Литература.

1. Мягков А.С., Коробов Н.А., Марков П.Н., Назаренко Е.С., Назаренко К.М. Оценка перспективности траекторий оптимизации геометрических конфигураций молекулярных структур. // *XXIX Международная конференция Математика. Компьютер. Образование МКО-2022*, Том 29, 2022.

ОБЛАСТИ ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ЗНАЧЕНИЙ ФУНКЦИИ ВИГНЕРА И ПОЛЮСА ФУНКЦИИ ЭНЕРГИИ ПОЛИНОМИАЛЬНОГО ОСЦИЛЛЯТОРА

Перепёлкин Е.Е., Полякова Р.В.¹, Бурлаков Е.В., Афонин П.В.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Физический факультет, Москва, 119991, Россия, pevgeny@mail.ru, ev.burlakov@physics.msu.ru, afonin.pv19@physics.msu.ru

¹Объединенный институт ядерных исследований, Московская область, Москва, 141980, Россия, polykovarv@mail.ru

С развитием техники квантовых вычислений, квантовой связи, криптографии и квантовой информатики становится востребованным математический аппарат функции Вигнера. Функция Вигнера используется как функция квази-вероятностей при описании квантовой системы в фазовом пространстве. Квантовой особенностью функции Вигнера является наличие у нее отрицательных значений в фазовой области. Для простейшей системы – квантовый гармонический осциллятор, выражение для функции Вигнера известно в явном виде. Цель данного исследования — построить выражения для средних энергий с помощью метода нахождения матрицы плотности, и показать наличие полюсов функции энергии в областях, где функция Вигнера принимает отрицательные значения, тем самым обобщив результат, полученный для гармонического осциллятора. Для достижения поставленной цели решаются следующие задачи: доказываются теоремы о виде явных выражений для средних кинематических величин, строятся выражения для средних энергии, используя представления для функции Вигнера через оператор Вейля в базе гармонического осциллятора, полученное в [1].

$$I_{n,k}^{\ell}(x) = \frac{(m\hbar\omega)^{\ell+1/2}}{h\sqrt{\pi}} \times \begin{cases} \sqrt{\frac{2^{3\max(n,k)-\min(n,k)}}{n!k!}} |n-k| \sum_{\lambda=0}^{\min(n,k)} \sum_{s=0}^{\lfloor n-\lambda/2 \rfloor} \sum_{\mu=0}^{\min(n,k)-\lambda+s} C_{\min(n,k)-\lambda+s}^{\mu} \times \\ \frac{(-1)^{\lambda+s} \lambda! |2(\ell+\mu)-1|!!}{2^{\lambda+2s+\ell+\mu+1}} C_k^{\lambda} C_n^{\lambda} C_{|n-k|-\lambda-s}^{\ell+s-1} \bar{x}^{n+k-2(\lambda+\mu)} e^{-\bar{x}^2}, \text{if } n \neq k \\ \sum_{\lambda=0}^n \sum_{s=0}^{\lambda} \frac{(-1)^{\lambda+s}}{\lambda!} 2^{\lambda-\ell-s} C_n^{\lambda} C_s^{\ell} |2(\ell+s)-1|!! \bar{x}^{-2(\lambda+s)} e^{-\bar{x}^2}, \text{if } n = k \end{cases} \quad (1)$$

где C_n^k – число сочетаний и $\frac{1}{s} C_{|n-k|-(s+1)}^{s-1} \Big|_{s=0} = \frac{1}{|n-k|}$; $\bar{x} = kx$

$$\langle \varepsilon_N \rangle_{s,x} = \frac{1}{2m} \frac{\sum_{n,k=0}^{+\infty} \rho_{k,n}^{(s)} I_{n,k}^{\ell}(x)}{\sum_{n,k=0}^{+\infty} \rho_{k,n}^{(s)} I_{n,k}^0(x)} + U_N(x), \text{ где } \rho - \text{матрица плотности} \quad (2)$$

Литература

1. *Perpelkin E.E., Sadovnikov B.I., Inozemtseva N.G., Burlakov E.V., Explicit form for the kernel operator matrix elements in eigenfunction basis of harmonic oscillator, Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2020, №. 023109*

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЙ МЕТОДОМ ИМПЕДАНСНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Попов Е.А., Захаров И.А., Потанина Д.С., Богатиков Е.В., Бормонтов Е.Н.

Воронежский государственный университет, Россия, 394018, г. Воронеж,
Университетская площадь, 1, Тел.: (473)220-84-81, E-mail: me144@phys.vsu.ru

Метод импедансной спектроскопии – эффективный инструмент исследования электрофизических свойств материалов и электрохимических процессов, в частности, процессов ионного переноса в твердых телах. Понимание характера процессов ионного транспорта важно, например, при разработке топливных элементов, аккумуляторов, газочувствительных сенсоров [1].

Для проведения исследований методом импедансной спектроскопии требуется специализированное программное обеспечение, которое позволяет управлять измерительным оборудованием (например, измерителем иммитанса), а также обрабатывать экспериментальные данные. Как правило, поставляемые с измерительным оборудованием программные средства имеют весьма ограниченный функционал, либо ориентированы на проприетарное программное обеспечение, например, LabVIEW. Поэтому разработка открытого универсального программного комплекса для регистрации и обработки данных импедансной спектроскопии – актуальная задача.

Для реализации программного комплекса был выбран язык программирования Python и фреймворк PyQt. Реализованы, во-первых, функции обмена данными с измерительным прибором по интерфейсу RS-232. Для совместимости с различными типами измерительных приборов предусмотрена возможность ручного задания вида управляющих команд. По умолчанию реализована работа с измерителем иммитанса GW Instek LCR-6000. Имеется возможность программирования настроек прибора, выбора режима работы и параметров измерения, приема данных измерений. Также реализованы вывод и сохранение данных в различных форматах. В том числе, возможно построение годографа импеданса. Помимо этого, предусмотрена аппроксимация полученных экспериментальных годографов импеданса кривыми известных теоретических моделей.

Таким образом, разработанное открытое программное обеспечение позволяет эффективно проводить исследования процессов ионного транспорта методом импедансной спектроскопии при использовании различного измерительного оборудования, которое поддерживает управление с помощью команд, передаваемых по интерфейсу RS-232.

Литература

1. *Емельянова Ю.В., Морозова М.В., Михайловская З.А., Буянова Е.С.* Импедансная спектроскопия: теория и применение. – Издательство Уральского университета, 2017. 156 стр.

РАСЧЁТ ДИСПЕРСИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ГРАДИЕНТНЫХ ОПТИЧЕСКИХ ВОЛНОВОДОВ НА ОСНОВЕ ЛАЗЕРНЫХ СТЁКОЛ

Пустовалов А.В.

Российский университет дружбы народов
Россия, 117198, Москва, ул. Миклухо-Маклая, 6, +7(495)9550825, alp3@mail.ru

Градиентные оптические волноводы находят широкое применение в устройствах фотоники, таких как модуляторы переключатели, волноводные лазеры и др. К их достоинствам следует отнести низкие потери, простоту стыковки с оптическим волокном, а в случае волноводных лазеров и локализацию поля в активной среде [1].

Для расчета дисперсионных характеристик и распределений полей волноводных мод часто применяется метод ВКБ. Его достоинством является то, что он позволяет получить решение в аналитической форме. Это упрощает решение как прямой, так и обратной задачи расчета градиентного волновода. Однако он обладает рядом ограничений. А именно: сложность априорной оценки точности вычислений, невозможность расчёта слабозаглублённых структур с быстрым изменением показателя преломления вблизи границы подложка-покровный слой, погрешности вычисления полей волноводных мод в окрестности точек поворота.

В качестве метода, свободного от указанных недостатков предлагается метод стратификации, заключающийся в использовании ступенчатой аппроксимации непрерывного распределения показателя преломления. При этом задача расчёта планарного градиентного волновода сводится к расчёту многослойной структуры.

В данной работе нами применен метод расчета многослойных волноводных структур общего вида, включающих анизотропные и поглощающие слои [2]. Данная методика позволяет рассчитывать волноводы с произвольным распределением показателя преломления, включающим как плавные, так и ступенчатые участки, с поглощением (усилением) и оптической анизотропией одноосного кристалла, с оптической осью, перпендикулярной границам раздела слоёв.

Проведены оценки точности вычисления дисперсионных характеристик методами ВКБ и стратификации для градиентного волновода с экспоненциальным распределением показателя преломления и серии экспериментально изготовленных волноводов в активном стекле ГЛС-6 с близким к гауссову распределением показателя преломления.

Литература.

1. *Jia Y., Chen F.* Compact solid-state waveguide lasers operating in the pulsed regime: a review [Invited] // *Chin. Opt. Lett.* 17 (2019). Стр. 012302.
2. *А. Ю. Агапов, П. М. Житков, В. Г. Фавстов, В. М. Шевцов* Дисперсионные уравнения многослойных планарных оптических волноводов, содержащих анизотропные и поглощающие слои // Письма в ЖТФ, 18:4 (1992). Стр. 24–27.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ НЕФТИ ПО И ПОД ПОВЕРХНОСТЬЮ ВОДЫ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ВИДАХ ТЕХНОГЕННЫХ АВАРИЙ

Савенкова Н.П., Василенко А.В.

Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, ф-т ВМК, каф. ВМ,
Россия, 119991, г. Москва, ул. Ленинские горы д.1, стр. 52, 2-й учебный корпус
mkndrew@mail.ru ann.v.vasilenko@mail.ru

В настоящее время нефтедобывающая и нефтеперерабатывающая промышленности являются одними из ведущих отраслей в России. Нефть используется для изготовления топлива, бензина, пластмассы. Также она является неотъемлемой частью металлургической промышленности, медицины, косметологии и находит широкое применение почти во всех сферах человеческой жизни.

Однако сама деятельность, связанная с добычей, переработкой и транспортировкой нефти представляет сложный, связанный с техногенными авариями процесс. Последствия техногенных аварий наносят огромный вред экосистемам, экономике, социальной жизни общества.

Именно поэтому так важно уметь прогнозировать динамику распространения подобных аварий, предсказывать их последствия, а также путём заблаговременной подготовки средств ликвидации ЧС в местах возможных аварий заранее принимать меры по минимизации возможных экологических ущербов. Математическое моделирование является здесь одним из эффективных инструментов исследования.

В данном докладе рассматривается математическая модель распространения нефти при двух типах техногенных аварий: аварии, сопровождающиеся распространением нефти по поверхности водоёмов, аварии с растеканием нефти со дна водоёма. Проводятся эксперименты для различных типов водоёмов: учитываются волны (на море), течение (на реке) или рассматривается стоячая вода (в озёрах). В дополнении, было рассмотрено влияние ветра на распространяющуюся по водной поверхности нефть. Также был разработан подход, модифицирующий математическую модель для возможности решения задачи распространения нефти под поверхностью водной плёнки.

В результате проведённых численных экспериментов была получена качественно адекватная динамика распространения нефти как на водной поверхности, так и под ней.

РАЗРАБОТКА API-СЕРВИСА И ИНФОРМАЦИОННО-ПОИСКОВОЙ СИСТЕМЫ ДЛЯ ВСТРАИВАНИЯ ПОИСКА НА САЙТАХ

Сидоров С.В., Черкасова В.А.

Астраханский государственный университет им. В. Н. Татищева,
Россия, 414056, Астрахань, ул. Татищева 20а
тел.: +79378296885, email: galserge.sidorov@gmail.com

Астраханский государственный университет, Россия, 414056, Астрахань, ул. Татищева
20а, тел.: +79275886081, email: valyc@mail.ru

В работе представлена разработка поисковой системы для официального портала Астраханского государственного университета <https://asu.edu.ru/>. Актуальность работы обусловлена необходимостью оперативного получения информации пользователями в условиях существования больших объемов данных на сайте. Используемый ранее встраиваемый поиск на сайте от Яндекса не удовлетворял в плане качества и возможности настройки поисковой выдачи. Программные решения для полнотекстового поиска вроде Elasticsearch и Sphinx имеют недостаточно гибкий интерфейс, что не позволяет внедрить их поиск на сайте ввиду особенностей организации данных. Поэтому возникла необходимость в разработке поисковой системы, удовлетворяющей потребностям портала.

Поиск осуществляется на основе индексирования, что позволяет ускорить процесс оценки и извлечения информации, соответствующей запросу пользователя [1].

Индексирование данных может быть реализовано различными методами [1]. Наиболее распространенным является, так называемый, инвертированный индекс, но при использовании данного подхода возникают сложности с ранжированием документов. Результатом данного проекта стала реализация поискового API, использующего TF-IDF для представления связей между документами и терминами в них [2].

Поисковый API разработан на базе фреймворка fastAPI, его прототип используется на сайтах Астраханского государственного университета. Благодаря тому, что поиск реализован как API-сервис, он может обслуживать несколько сайтов, расположенных на разных серверах. При этом процесс индексирования осуществляется непосредственно через базы данных. Таким образом, разработанное решение объединяет в себе особенности двух наиболее распространенных систем Elasticsearch и Sphinx. В дальнейшем планируется доработка интерфейса API (упрощение принципа работы) и реализация функций автодополнения, реферирования текста и исправления ошибок и опечаток в запросах.

Литература

1. Марманис Х, Бабенко Д. Алгоритмы интеллектуального интернета. Передовые методики сбора и обработки данных. – СПб.:Символ-Плюс, 2011. – 480 стр.
2. Speech and Language Processing (3rd ed. draft) [Электронный ресурс] / Dan Jurafsky, James H. Martin. – Режим доступа : <https://web.stanford.edu/~jurafsky/slp3/>, свободный.

ЧИСЛЕННЫЕ И АСИМПТОТИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ НЕЛОКАЛЬНОЙ КИНЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ОПТИЧЕСКОЙ АКТИВНОЙ СРЕДЫ

С.А. Синоков¹, А.Е. Кулагин², А.В. Шаповалов¹

¹Томский государственный университет, Россия, 634050, Томск, пл. Новособорная, 1,
Телефон: (3822) 529843, E-mail: shpv@phys.tsu.ru

²Томский политехнический университет, Россия, 634050, Томск, пр. Ленина, 30,
Телефон: (3822) 418913, E-mail: ack8@tpu.ru

Кинетическое уравнение в модели ионизации активной среды на парах металлов, возбуждаемой электрическим разрядом [1], исследуется методом квазиклассических асимптотик, развитым в [2] для нелокального обобщения кинетического уравнения. Данное уравнение имеет вид

$$\partial_t u(\vec{x}, t) = D_a(t) \Delta u(\vec{x}, t) + a(\vec{x}, t) u(\vec{x}, t) - \kappa u(\vec{x}, t) \int_{R^2} d\vec{y} \int_{R^2} d\vec{z} b(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z}, t) u(\vec{y}, t) u(\vec{z}, t). \quad (1)$$

Функция $b(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z}, t)$, где $\vec{x}, \vec{y}, \vec{z} \in R^2$, представляет плотность вероятности тройной рекомбинации при столкновении иона с двумя электронами, коэффициент амбиполярной диффузии $D_a(t)$ в уравнении (1) задается выражением $D_a(t) = D \bar{D}_a(t)$, где явно выделен асимптотический малый параметр D , κ - параметр нелинейности, $a(\vec{x}, t)$ характеризует кинетический коэффициент процесса ионизации нейтральных атомов.

В работе [3] было построено счетное семейство приближенных решений уравнения (1) в виде главных членов квазиклассических асимптотик относительно малого параметра $D \rightarrow 0$ с точностью $O(D^{3/2})$.

На основе работы [3] численными и аналитическими методами исследованы свойства полученных решений для $b(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z}, t) = b(t) \exp\left[-\frac{(\vec{x}-\vec{y})^2 + (\vec{x}-\vec{z})^2}{2\mu^2}\right]$, $\bar{D}_a(t) = d_1 \exp\left[-\frac{t}{\tau_d}\right]$, $a(\vec{x}, t) = a(t) = A_1 \exp\left[-\frac{t}{\tau_a}\right]$, $b(t) = B_2 + (B_1 - B_2) d_1 \exp\left[-\frac{t}{\tau_b}\right]$ на интервале $[0, T)$.

Проведено сравнение численных решений нелокального кинетического уравнения (1) с асимптотическими решениями. Построена и исследована зависимость невязки асимптотических решений $g(t, \vec{x}, D)$ от изменения малого параметра D .

Литература

1. Torgaev S.N., Kulagin A.E., Evtushenko T.G., Evtushenko G.S. Kinetic modeling of spatio-temporal evolution of the gain in copper vapor active media // Optics Communications. **Vol. 440**, 2019, P. 146–149.
2. Shapovalov A.V., Kulagin A.E. Semiclassical approach to the nonlocal kinetic model of metal vapor active media // Mathematics, **Vol. 9**, 2021, P. 2995.
3. Shapovalov A.V., Kulagin A.E., Siniukov S.A. Family of asymptotic solutions to the two-dimensional kinetic equation with a nonlocal cubic nonlinearity // Symmetry, **Vol. 14**, No 6, 2022, P. 577.

ВЛИЯНИЕ СТЕКЛОВИДНОГО ТЕЛА НА ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ПОТОКОВ ВНУТРИГЛАЗНОЙ ЖИДКОСТИ

Складчиков С.А., Савенкова Н.П., Лапонин В.С., Анпилов С.В.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
факультет вычислительной математики и кибернетики

Интерес к изучению строения СТ обусловлен его ролью в зрительном аппарате человека. Изучением анатомического строения СТ занимались многие исследователи на протяжении сотни лет, однако и по настоящее время данная анатомическая структура признана наиболее малоизученной. Сложная структура СТ не может не влиять на динамику внутриглазной жидкости, роль которой в жизни глаза чрезвычайно многогранна. Предлагается проверить следующую гипотезу: гидродинамические потоки влияют на развитие возрастной глаукомы. Для проверки этой гипотезы используем аппарат математического моделирования как эффективный инструмент исследования сложных динамических процессов. Математическая модель представляет собой трехмерную двухфазную систему уравнений гидродинамики учитывающую сложную геометрию глаза, особенности строения стекловидного тела, температурную составляющую, а также эффект пульсации кровеносных сосудов по стенке глаза.

Литература

1. Алексеев И.Б., Белкин В.Е., Самойленко А.И. и др. Стекловидное тело. Строение, патология и методы хирургического лечения - *Новости глаукомы* – 2015 - №1(33) – с.12-14.
2. Складчиков С.А., Савенкова Н.П., Высикайло Ф.И., Аветисов С.Э., Липатов Д.В., Новодережкин В.В. / 4D-исследование вихревых движений жидкостей внутри глаза // *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Серия «Естественные науки», Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана (М.)*, № 5, с. 73-88
3. Laponin V.S., Skladchikov S.A., Savenkova N.P., Novoderezhkin V.V. / Investigating the causes of glaucoma: mathematical modeling of the hydrodynamics of fluid outflow through schlemm's canal // *Computational Mathematics and Modeling*, издательство *Consultants Bureau (United States)*, том 29, № 2, с. 146-152
4. Vychkov V.L., Anpilov S.V., Savenkova N.P., Stelmashuk V., Hoffer P. / On modeling of "plasmoid" created by electric discharge // *Journal of Physics: Conference Series, IOP Publishing ([Bristol, UK], England)*, том 996, с. 012012-012012

СТАТИСТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ АЛГОРИТМОВ КОНФОРМАЦИОННОГО ПОИСКА

**Токарев Д.А., Назаренко К.М., Коробов Н.А.,
Назаренко Е.С., Марков П.Н., Надыкто А.Б.**

Московский Государственный Технологический Университет «СТАНКИН» Россия,
127055, г. Москва, ул. Вадковский пер. 1; Тел.: (+7 499)972-95-00,
E-mail: cmr.nazy@gmail.com

Целью данной работы является исследование влияния частоты выбора начальных условий и аппроксимации гессиана на эффективность и производительность конформационного поиска.

Расчет матрицы Гессе на первой итерации алгоритма Берни является одной из его ключевых особенностей. Для снижения вычислительной сложности на последующих итерациях оптимизации геометрических конфигураций молекулярных структур гессиан лишь корректируется. Однако неудачный выбор начальной точки приводит к увеличению требуемого числа итераций, и в случае неудачной попытки оптимизации нами производится ее возобновление с минимальной либо последней точки.

Учитывая большое количество изомеров и случайную составляющую алгоритма их оптимизации, нами исследована статистическая значимость различий общего количества итераций в зависимости от предельной допустимой длины попытки.

Для выборок, полученных при конформационном поиске молекулярных структур атмосферного происхождения, были сформулированы статистические гипотезы о равенстве количества итераций. В результате их проверки с использованием непараметрического U-критерия Манна-Уитни нами установлено, что:

1. Алгоритм Берни неустойчив к частому возобновлению оптимизации, слишком короткие попытки оптимизации (менее 50 итераций) приводят к значительному снижению эффективности конформационного поиска.

2. При достаточно длительных попытках оптимизации (55 итераций и более) отсутствует статистически значимые влияния возобновления оптимизации на эффективность и производительность конформационного поиска.

Результаты работы могут применяться для динамической балансировки вычислений, повышения отказоустойчивости и проектирования вычислительных комплексов, решающих задачи молекулярного моделирования.

Работа выполнена при поддержке РФФ, грант № 18-11-00247-П.

ПРИМЕНЕНИЕ ДРОБНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ДИФфуЗИОННО-КОНТРОЛИРУЕМЫХ РЕАКЦИЙ С ПАМЯТЬЮ

Трайтак С.Д.

Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН, ул.
Косыгина 4, 119991, Москва, РФ, E-mail: sergtray@mail.ru

Хорошо известно, что смешанные начально-краевые задачи гиперболической диффузии более адекватно описывают диффузионно-контролируемые процессы на малых временах, чем классические начально-краевые задачи для уравнения диффузии параболического типа.

В докладе рассматривается известная модель Смолуховского, применимая в случае контактных бимолекулярных диффузионно-контролируемых реакций, протекающих в растворах. Данный вид реакций играет важную роль в биофизике и во многих других приложениях.

Мы обобщили классическую теорию Смолуховского, учтя влияние немарковских эффектов памяти на кинетику реакций. Используя метод дифференциальных операторов дробного порядка, основываясь на диффузионном аналоге известной интегродифференциальной модели Каттанео-Вернога, было выведено трехмерное дифференциальное уравнение гиперболической диффузии. Более того, с помощью этого метода в докладе дано простое доказательство классической формулы Райса для нестационарного коэффициента скорости реакции. Рассмотрен также предельный переход от начально-краевой задачи, поставленной для уравнения гиперболической диффузии к соответствующей параболической задаче.

Литература.

1. Rice S.A., Diffusion-limited reactions, Amsterdam: Elsevier, 1985, 400 p.

СОПРОТИВЛЕНИЕ ИОНООБМЕННОЙ МЕМБРАНЫ С ЗАРЯЖЕННЫМ ПОВЕРХНОСТНО МОДИФИЦИРОВАННЫМ СЛОЕМ

Угров В.В., Филиппов А.Н.¹

Финансовый университет при Правительстве Российской Федерации 123995, Москва,
ул. Щербаковская 38, e-mail: yugr@rambler.ru,

¹Губкинский университет 119991 Москва, Ленинский проспект, 65 корп.1

Изучение процессов ионного переноса в поверхностно модифицированных ионообменных мембран очень актуально для дальнейшего развития электромембранных процессов разделения и очистки, производства топливных элементов, систем хранения и преобразования энергии. Поверхностно модифицированная ионообменная мембрана (МИОМ) представляет собой ионообменную мембрану (ИОМ), одна из поверхностей которой покрывается (модифицируется) заряженным слоем из другого ионопроводящего материала.

Цель данной работы состоит в изучении методом математического моделирования влияния плотности зарядов фиксированных групп модифицирующего слоя (МС) и других физико-химических характеристик МИОМ на ее сопротивление.

В работе с учетом ранее полученных результатов в [1-2] методом математического моделирования ионного переноса в электромембранной ячейке с раствором электролита получено аналитическое выражение омического сопротивления МИОМ в зависимости от плотности зарядов фиксированных групп МС.

Установлено, что при увеличении плотности объемного заряда МС сопротивление МИОМ уменьшается, если знаки зарядов фиксированных групп МС и ИОМ одинаковы и возрастает, если они различны. Показано, что при малых концентрациях электролита сопротивление МИОМ заметно увеличивается при уменьшении концентрации электролита. При увеличении концентрации электролита сопротивление МИОМ уменьшается и выходит на плато. Результаты могут быть использованы при прогнозировании свойств новых и модифицированных ионообменных мембран.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований – грант № 20–08–00661.

Литература

1. Филиппов А. Н. // Коллоид. журн. **Т.78**, № 3, 2016. стр. 386–395.
2. Угров В.В., Филиппов А. Н. // Мембраны и мембранные технологии. **Т.4**, № 2, 2022. стр. 127–134.

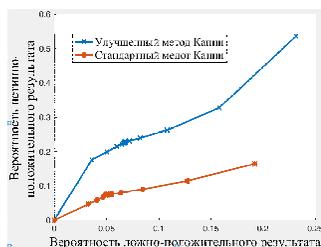
НАДЕЖНОЕ ОБНАРУЖЕНИЕ И ОТСЛЕЖИВАНИЕ ЛИНИЙ ЭЛЕКТРОПЕРЕДАЧ НА БАЗЕ БЕСПИЛОТНЫХ ЛЕТАТЕЛЬНЫХ АППАРАТОВ В РЕАЛЬНОМ ВРЕМЕНИ

В. С. Шаравин

Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова,
Россия, 150003, г. Ярославль, Советская ул., 14
Тел.: 8(910)8293243
E-mail: vadim13test@gmail.com

В настоящее время беспилотные летательные аппараты (БПЛА) широко используются во многих областях. Одной из них является мониторинг и наблюдение за обширными электросетями. Но существующие методы не всегда могут точно определить провода из-за их толщины.

Данная работа была посвящена исследованию различных методов обнаружения края [1]. На основе лучшего из них – метода Канни – был разработан новый алгоритм обнаружения с автоматическим выбором порога. Для этого использовался алгоритм Оцу, который рассчитывает гистограмму интенсивности пикселей на изображении для нахождения адаптивного порога [2]. После этого выполняется операция бинаризации изображения с учетом выбранного порога, что помогает уменьшить шумы.



Проведены эксперименты с использованием проводов различной толщины (7-10 мм) на фоне деревьев и линолеума. Результаты сравнения метода Канни и улучшенного алгоритма приведены на рисунке слева.

Улучшенный алгоритм дает большую вероятность истинно-положительного результата, а значит и более высокую точность, и лучше подходит для работы в режиме реального времени.

Литература.

1. Muthukrishnan R., Radha M. Edge Detection Techniques For Image Segmentation // International Journal of Computer Science & Information Technology. - 2011. - №6. - С. 259-267.
2. Rambabu P., Raju C.N. The Optimal Thresholding Technique for Image Segmentation Using Fuzzy Otsu Method // International Journal of Artificial Intelligence. - 2015. - №5. - С. 81-88.

ДВУМЕРНЫЕ СЕТОЧНО-ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИЕ СХЕМЫ ДЛЯ РАСЧЁТА АКУСТИЧЕСКИХ И УПРУГИХ ВОЛН

Шевченко А.В., Голубев В.И.

Национальный исследовательский университет Физтех

Сеточно-характеристический численный метод успешно применяется для решения линейных гиперболических систем уравнений в частных производных. Такие системы описывают волновые процессы в различных средах; в частности, распространение сейсмических волн в линейно упругих средах. Сеточно-характеристические схемы различных порядков аппроксимации, основанные на характеристическом свойстве линейного уравнения переноса, изначально были предложены для одномерного случая. Однако, поскольку многие задачи, представляющие практическую ценность, являются многомерными, необходимо обобщение метода на случай более высоких размерностей. Оно может быть проведено при помощи операторного расщепления, ограничивающего порядок итоговой многомерной схемы.

В работе были построены двумерные сеточно-характеристические схемы для систем уравнений акустики и линейной упругости на основе схем операторного расщепления повышенного порядка, использующих отрицательные шаги по времени. Численные эксперименты на задачах с гладкими начальными условиями подтвердили достижение теоретически оцененного порядка точности двумерной схемой.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 19-71-10060, <https://rscf.ru/project/19-71-10060/>.

Литература.

1. Голубев В.И., Шевченко А.В. и Петров И.Б. Повышение порядка точности сеточно-характеристического метода для задач двумерной линейной упругости с помощью схем операторного расщепления // Комп. исслед. и моделир., 2022, т. 14, №4, сс. 899-910.

АДАПТИВНАЯ НАСТРОЙКА СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ С НЕЧЁТКОЙ ЛОГИКОЙ НА ОСНОВЕ БАЙЕСОВСКОГО ВЫВОДА

Шишкин А.П., Репников П.М., Зубюк А.В., Фадеев Е.П.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический ф-т, каф. математического моделирования и информатики, Россия, 119234, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 2, Тел.: (495)-939-46-94, факс: (495)-932-88-20, E-mail: zubjuk@physics.msu.ru

Нечёткая логика является известным подходом к математическому моделированию утверждений, выраженных экспертами на словах, и хорошо зарекомендовала себя, в том числе при построении систем управления. Заде предложил метод формализации правил, выраженных в форме «ЕСЛИ-ТО», на основе нечетких множеств [1]. Однако, такие методы управления не являются оптимальными в каком-либо математически определённом смысле, а носят чисто эвристический характер.

В работе представлен новый подход к построению нечеткого контроллера, который позволяет задавать управляющие правила в манере Заде, но осуществляет расчет выходного сигнала контроллера на основе аппарата байесовской теории принятия решений. Это позволяет минимизировать математическое ожидание потерь с сохранением внешней простоты формализации правил, присущей разработкам Заде.

Задача оптимального управления сформулирована как задача байесовского вывода, в рамках которой входной и выходной сигналы системы управления считаются случайными величинами. Основная идея предложенного подхода — восстановить совместное распределение входных и выходных переменных системы управления (необходимого для построения оптимального байесовского вывода) из условных распределений входных и выходных переменных, которые, как и в случае нечёткой логики Заде, задаются экспертом при формализации правил «ЕСЛИ-ТО»

Ранее была продемонстрирована принципиальная применимость предложенного подхода на примере задачи управления разгоном и торможением автомобиля [2]. В рамках этой работы разработанный подход применен для задачи стабилизации обратного маятника. Исследована возможность построения контроллера на основе неполной системы правил с последующим дообучением контроллера генетическими алгоритмами.

Литература.

1. L.A Zadeh “Fuzzy sets as a basis for a theory of possibility”// Fuzzy Sets and Systems vol. 4, no. 2, 1978. pp. 3-28.
2. A. Zubyuk, E. Fadeev, A. Shishkin “Bayesian Decision Making as a Theoretical Basis for a New Look at Fuzzy Logic Control” // Book of Abstracts of The Sixteenth International Conference on Fuzzy Set Theory and Applications FSTA 2022, 2022. pp. 38

**SELF-ORGANIZATION IN RANDOMLY FORCED POPULATION MODELS:
STOCHASTIC SENSITIVITY TECHNIQUE**

Kolinichenko A., Ryashko L.

Ural Mathematical Center, Ural Federal University, Russia, 620000, Ekaterinburg, Lenina 51,
Tel.: +7(953)6014858, E-mail: alexander.kolinichenko@urfu.ru

A spatially extended stochastic population dynamics model with diffusion is considered [1]. In the parametric zone of Turing instability, the system generates a number of spatially non-homogeneous stable structures (Turing patterns). Under the effect of random noise transitions between these states may occur. It is implied that the patterns display different degrees of stochastic sensitivity: the system is expected to prefer a less sensitive pattern.

The aim of our work is to investigate preference in noise-induced transitions and its relation to stochastic sensitivity. The variance of random states surrounding a stable pattern is measured with statistical data obtained from numerical simulations. It is shown that variance can be estimated analytically using the stochastic sensitivity function technique (SSF) [2, 3]. In addition, the attraction domains of patterns are estimated and compared. Possible applications of the SSF method are discussed on examples.

This work is supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (Ural Mathematical Center project No. 075-02-2022-310-877).

The work of on research and development of the stochastic sensitivity theory of patterns–attractors and its application to the study of noise-induced effects was supported by the Russian Science Foundation (N 21-11-00062).

References

1. *S. Levin, L. Segel*, Hypothesis for origin of planktonic patchiness // *Nature*, **Vol. 259**, No. 659, Year 1976.
2. *A. Kolinichenko, L. Ryashko*, Stochastic sensitivity analysis of stationary patterns in spatially extended systems // *Math Meth Appl Sci*. Year 2020. Pp. 1-9.
3. *I. Bashkirtseva, A. Kolinichenko, L. Ryashko*, Stochastic sensitivity of Turing patterns: methods and applications to the analysis of noise-induced transitions // *Chaos, Solit. Fractals*, **Vol. 153**, Year 2021, 111491.

**PARALLEL ALGORITHM FOR CALCULATING THE WIGNER FUNCTION FOR
A QUANTUM SYSTEM WITH A POLYNOMIAL POTENTIAL**

**E.E. Perepelkin, B.I. Sadovnikov, N.G. Inozemtseva,
E.V. Burlakov, R.V. Polyakova, P.N. Sysoev, M.B. Sadovnikova**

LIT, JINR, Dubna

When considering quantum systems in phase space, the Wigner function is used as a function of quasidensity of probabilities. Finding the Wigner function is related to the calculation of the Fourier transform from a certain composition of wave functions of the corresponding quantum system. As a rule, knowledge of the Wigner function is not the ultimate goal, and calculations of mean values of different quantum characteristics of the system are required. The explicit solution of the Schrödinger equation can be obtained only for a narrow class of potentials, so in most cases it is necessary to use numerical methods for finding wave functions. As a result, finding the Wigner function is connected with the numerical integration of grid wave functions. When considering a one-dimensional system, the calculation of N^2 Fourier intervals from the grid wave function is required. To provide the necessary accuracy for wave functions corresponding to the higher states of the quantum system, a larger number of grid nodes is needed. The article considers the construction of a parallel algorithm on the GPU computing architecture for finding the Wigner function of a quantum system with a polynomial potential. A numerical-analytical method for constructing the Wigner function, which is based on calculating the trace of the product of the density matrix and the matrix of the Weyl operator, is described. The operators are represented in the basis of a quantum harmonic oscillator, for which the Moyal equation transforms into the Liouville equation. This approach enables to visually analyze the degree of anharmonicity of the system in terms of the off-diagonal elements of the density matrix. The parallel implementation on the GPU massively parallel architecture has reduced the calculation time by two orders of magnitude compared to the single-threaded version on the x86 architecture.

The results described were obtained within a unified consideration of classical and quantum systems in the generalized phase space on the basis of the infinite self-interlocking chain of Vlasov equations. It is essential that using the apparatus of quantum mechanics in the phase space, one can estimate the required parameters of quantum systems, and the proposed numerical methods make it possible to perform such calculations efficiently. The availability of exact solutions to model nonlinear systems plays a cardinal role in designing complex physical facilities, for example, such as the SPD detector of the NICA project. Such solutions are used as tests when writing a program code and can also be encapsulated in finite difference schemes within the numerical solution of boundary value problems for nonlinear differential equations. The proposed efficient numerical algorithm can be applied to solve the Schrödinger equation and the magnetostatics problem in a region with a non-smooth boundary.

The work was supported by the RFBR grant No. 18-29-10014.

S3/W1

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ И
СИСТЕМНАЯ БИОЛОГИЯ

СALCULATIONAL AND
SYSTEMS BIOLOGY

Руководители:

*Николай Вадимович Белотелов, Татьяна Юрьевна Плюснина,
Андрей Александрович Полежаев, Галина Юрьевна Ризниченко,
Андрей Борисович Рубин.*

МОДЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ СИГНАЛОВ ДЛИТЕЛЬНОЙ ИНДУКЦИИ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ МОНОКУЛЬТУР МИКРОВОДОРОСЛЕЙ И ЦИАНОБАКТЕРИЙ С ЦЕЛЬЮ ФЕНОТИПИРОВАНИЯ ОБРАЗЦОВ

Беляева Н.Е., Бульчев А.А., Клементьев К.Е., Пащенко В.З.,
Ризниченко Г.Ю., Рубин А.Б.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Биологический ф-т,
каф. биофизики 119234, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 12, natalmurav@yandex.ru

Особенности процессов фотосинтеза одноклеточных водных организмов связаны с отличиями структуры тилакоидных мембран (ТМ) клеток эукариотов (микроводоросли) и прокариотов (цианобактерии). Системы ТМ содержат одинаковые элементы электронно-транспортной цепи (ЭТЦ), но в отличие от водорослей, цианобактериальные ТМ включают взаимосвязанные компоненты ЭТЦ и дыхательной цепи (обзор [1]). Нами исследовалась кинетика сигналов индукции флуоресценции (ИФ), вызываемой светом в монокультурах микроводоросли *Scenedesmus obliquus* [2] и цианобактерии *Synechocystis* sp. PCC6803 [3]. Для клеток *Scenedesmus* отношение F_m/F_0 выше, чем для культуры *Synechocystis*, а при детекции кинетических фаз быстрого (до секунды) ОЖР нарастания и медленного (до минут) PSMT спада ИФ величины амплитуд локальных экстремумов можно сопоставить с типом изучаемого образца. Особенно выражены кинетические отличия сигналов *Scenedesmus* и *Synechocystis*, вызываемые активничным светом средней интенсивности 1200 мкмоль фотон $m^{-2} c^{-1}$ при условии, что кривые ИФ, измерены от десятков микросекунд до минут. Анализ длительной ИФ в модели тилакоидной мембраны [2-5] основан на предположении, что пул пластохинонов/хинолов (PQ/PQH₂) обеспечивает приток и отток электронов в компонентах ЭТЦ водоросли либо взаимосвязь потоков зарядов ЭТЦ и дыхательной цепи цианобактерий. При расчетах кинетики ИФ необходимо учесть регуляцию State transition – переходов состояний [1-3, 6]. В модели ТМ показано, что при освещении размер антенны, подвижной в мембране между фотосистемами 2 и 1, зависит от редке состояния пула PQ/PQH₂ – посредника потоков электронов (e^-) в ЭТЦ. Возможный приток e^- на PQ за счет дыхательной цепи в циановых *Synechocystis* проявляется в отличающемся паттерне кинетики индукции флуоресценции на временах более 10сек.

Литература.

1. Stirbet A, Lazár D, Papageorgiou GC, Govindjee (2019) Chlorophyll a fluorescence in cyanobacteria: relation to photosynthesis. In: Cyanobacteria: From Basic Science to Applications Mishra AK, Tiwari DN, Rai AN, eds. Academic Press, Elsevier, 79-130
2. Беляева Н.Е., Бульчев А.А., Пащенко В.З., Клементьев К.Е., Ермаченко П.А., Конохов И.В., Ризниченко Г.Ю., Рубин А.Б. (2022) Динамика процессов в тилакоидных мембранах водорослей in vivo, изучаемая в моделях фотосистемы II и тилакоида по измерениям индукции флуоресценции. *Биофизика* 67(5) 1-20
3. Belyaeva N, Bulychev A, Klementiev K, Paschenko V, Riznichenko G, Rubin A (2020) Model quantification of the light-induced thylakoid membrane processes in *Synechocystis* sp. PCC 6803 in vivo and after exposure to radioactive irradiation. *Photosynth Res* 146(1):259-278
4. Belyaeva N, Bulychev A, Riznichenko G, Rubin A (2016) *Photosynth Res* 130:491–515
5. Belyaeva N, Bulychev A, Riznichenko G, Rubin A (2019) Analyzing ... chlorophyll a fluorescence and P700 absorbance changes. *Photosynth Res* 140:1-19
6. Elanskaya IV, Bulychev AA, Lukashev EP, Mironets EM (2021) Deficiency in flavodiiron protein Flv3 promotes cyclic electron flow and state transition under high light in the cyanobacterium *Synechocystis* sp. PCC 6803 BVA - *Bioenergetics* 1862 (2021) 148318

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАБОТЫ РЕЦЕПТОРА 3 ТИПА К ИНОЗИТОЛ-3-ФОСФАТУ (IP3R3)

Болдова А.Е., Василевская В.Д.¹, Свешникова А.Н.²

Центр теоретических проблем физико-химической фармакологии РАН, 109029, Москва,
ул. Средняя Калитниковская, 30

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, 119991, Москва

²Национальный медицинский исследовательский центр детской гематологии, онкологии
и иммунологии им. Д. Рогачева, 117997, Москва

Внутриклеточный кальций (Ca^{2+}) является одним из важнейших вторичных посредников в клетке, регулирующим такие процессы, как секреция, изменение формы, дифференцировка, пролиферация, и даже клеточная смерть. Одним из важнейших элементов, управляющих концентрацией Ca^{2+} в цитозоле, является канал-рецептор к инозитол-1,4,5-трисфосфату (IP3, IP3R), находящийся в мембране эндоплазматического ретикулаума (ЭПР). На сегодняшний день существует много математических моделей, описывающих работу IP3R 2 типа. В то же время, модель IP3R 3 типа, учитывающая динамические свойства данного канала, не была предложена.

Целью настоящей работы является разработка достоверной математической модели IP3R 3 типа, учитывающей нелинейный характер зависимости активности рецептора от концентрации Ca^{2+} и IP3 в цитозоле.

В качестве метода исследования была построена математическая модель, представляющая собой систему дифференциально-алгебраических уравнений. Параметры модели подбирались автоматически по ранее опубликованным экспериментальным данным [1]. Численное решение было получено методом LSODA с помощью программного обеспечения COPASI.

В результате исследования была предложена компьютерная модель, описывающая динамические свойства IP3R 3 типа. Было показано, что в простейшей системе, включающей IP3R 3 типа и кальциевую АТФ-азу SERCA2b, не наблюдается осцилляций в широком диапазоне параметров. Наиболее часто возникающим режимом функционирования системы является ответ «все-или-ничего», при котором в зависимости от концентрации IP3 либо не наблюдается мобилизации кальция, либо происходит полное опустошение кальциевых депо.

Таким образом, мы заключаем, что IP3R3 не демонстрирует способности к поддержанию кальциевых осцилляций, что согласуется с его предполагаемой ролью основного кальциевого канала сайтов контакта митохондрий с эндоплазматическим ретикулулом. Работа поддержана грантом РФФ 21-74-20087.

Литература.

1. Mak, D.O.; McBride, S.; Foskett, J.K. //J Gen Physiol 2001, doi:10.1085/jgp.117.5.435.

**ОСОБЕННОСТИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ЧАСТОТЫ
ИЗМЕНЕНИЯ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА ВОКРУГ
ГЕНОМНОЙ ДНК БАКТЕРИОФАГА T7 В ОБЛАСТИ ПРОМОТОРОВ,
СПЕЦИФИЧНЫХ ДЛЯ НАТИВНОЙ ФАГОВОЙ И ХОЗЯЙСКОЙ РНК
ПОЛИМЕРАЗЫ E.COLI**

Глытов И.В., Осипов А.А.¹

Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН

¹Институт высшей нервной деятельности и нейрофизиологии РАН

Целью данной работы было выявление различий между частотными характеристиками заряда молекулы ДНК фага T7 в области его нативных и хозяйских (*E.coli*) промоторов. В качестве инструмента для анализа было выбрано вейвлет-преобразование с использованием вейвлета Морле. Сравнение вейвлет-спектров фаговых и бактериальных промоторов между собой показало, что мощность сигнала в области хозяйских промоторов в диапазоне 10-15 Гц (длина волны 20-30 Ангстрем) выше таковой в области фаговых в 7-8 раз, а также что мощность частот в диапазоне 2-4 Гц (длина волны 75-150 Ангстрем) в среднем по всему геному меньше таковой в промоторных областях в 1.5 раза и что частоты в диапазоне 10-15 Гц в геноме аналогичны по мощности таковым в области хозяйских промоторов. Высокая мощность в диапазоне 2-4 Гц оказалась одинаково характерна как для бактериальных, так и для вирусных промоторов.

РОЖДЕНИЕ МОРФОМЕХАНИКИ

Ермаков А.С.

Московский Государственный Университет им М.В. Ломоносова, Биологический факультет, кафедра Эмбриологии, 119234, Россия, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 12, Тел. +7 (495) 939-35-25, e-mail: ermakov99@mail.ru

В конце XIX века Ганс Дриш провел эксперимент по разделению бластомеров зародыша морского ежа и открыл явления эмбриональных регуляций. В начале XX века русский биолог Александр Гаврилович Гурвич выдвинул Теорию Морфогенетического Поля, согласно которой, клетки в организме объединяются в единую целостную систему, и судьба клетки зависит от ее положения в целом организме. Идеи Гурвича стимулировали интерес к изучению механизмов интегральности живых систем. Судьба самого Гурвича была непростой, в 1948 году он попадает в опалу из-за конфликта с Трофимом Денисовичем Лысенко, теряет официальные позиции в науке и вплоть до конца жизни занимается наукой и проводит семинары неофициально. Одним из последних его учеников был внук Лев Владимирович Белоусов (Belousov, 1997).

В начале 1970-х Белоусов и его коллеги выдвигают гипотезу о том, что механические силы и напряжения могут лежать в основе интегральности развивающихся живых систем. Авторы выявили способность фрагментов эмбриональных тканей амфибий к немедленным и медленным (энергезависимым) деформациям после сепаровки, показали наличие стадио-специфических паттернов механических напряжений в эмбрионах (Белоусов и др., 1976). В дальнейшем было показано, что как релаксация механических напряжений на ранних стадиях развития, так и искусственно приложенные механические напряжения способны переориентировать систему морфогенетических движений и структуру зачатков осевых органов (Лакирев и др., 1988).

Можно говорить о рождении морфомеханики – новой междисциплинарной науки, фокусирующейся на изучении роли механических сил и напряжений в процессах биологического морфогенеза и клеточных дифференцировок.

Литература

1. Belousov, L.V., Life of Alexander G. Gurwitsch and his relevant contribution to the theory of morphogenetic fields// Int. J. Dev. Biol. no. 41, 1997. P. 771–779.
2. Белоусов Л.В., Дорфман Я.Г., Черданцев В.Г. Архитектура механических напряжений на последовательных стадиях развития зародышей травяной лягушки// *Онтогенез*, Т. 6, 1976. С. 621-63
3. Лакирев А.В., Белоусов Л.В., Наумиди И.И. Влияние внешних натяжений на дифференцировку тканей зародышей шпорцевой лягушки *in vitro*// *Онтогенез*. 1988. Том 19. № 6. С 591-600

ЦИФРОВАЯ МОДЕЛЬ ВОДНОЙ ЭКОСИСТЕМЫ БИО-ПРУДОВ ДООЧИСТКИ СТОЧНЫХ ВОД

Ермаченко П.А., Середин Д.С., Беляева Н.Е.¹

ТОО Нео-Экологджи, Алматы, Казахстан

¹Биологический факультет Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

Деградация водных экосистем связана с неконтролируемым развитием токсичного фитопланктона, как правило цианобактерий. В результате качество воды стремительно ухудшается, рыба и другие гидробионты массово гибнут, а биоразнообразие водных экосистем неуклонно уменьшается. Уже сейчас более 1,2 млрд людей живут в условиях постоянного дефицита пресной воды.

Целью нашего исследования является разработка алгоритмов поиска устойчивых режимов эксплуатации водных объектов при высокой антропогенной нагрузке. Фитированные параметры моделей мы произвели на основе экспериментальных данных полученных при эксплуатации водных объектов и в лабораторных модельных экспериментах. Структура применяемых математических моделей водных экосистем основана на уравнениях типа Навье-Стокса, решаемых совместно с задачей адвекции-диффузии-реакции. Также в структуре математических моделей водных экосистем учтены данные динамики трансформации энергии квантов света в тилакоидных мембранах фитопланктона по натурным измерениям кинетики индукции флуоресценции фотосистемы II [1].

Разработанная нами иерархическая математическая модель водных экосистем, включает следующие вычислительные блоки: аккумуляирования фосфора активным илом; роста зоо-фитопланктона в био-прудах; расчёта инсоляции и прогнозирования температурного режима водоемов; оптимизации условий эксплуатации био-прудов; прогноза устойчивости водных экосистем. Компьютерное моделирование показало, что экономически рентабельная степень удаления загрязнений на традиционных биологических очистных сооружениях с активным илом намного ниже нормативных значений. По этой причине основную доочистку сточных вод было предложено производить в специальных рыбоводно-биологических прудах [2].

Использование цифровых моделей водных экосистем с целью поиска устойчивых режимов эксплуатации водных объектов позволило нам сократить энергозатраты на очистку сточных вод в несколько раз, уменьшить углеродный след при культивировании кормовых микроводорослей и обеспечить условия для формирования здоровых водных экосистем.

Литература.

1. Беляева Н.Е., Булычев А.А., Пашенко В.З., Клементьев К.Е., Ермаченко П.А., Коныхов И.В., Ризниченко Г.Ю., Рубин А.Б. Динамика процессов в тилакоидных мембранах водорослей *in vivo*, изучаемая в моделях фотосистемы II и тилакоида по измерениям индукции флуоресценции // Биофизика. 2022. Т. 67. № 5. С. 877-896 (2022).
2. Субботина Ю.М. Технология выращивания молоди карпа в рыбоводно-биологических прудах: автореферат к.с.-х.н. 06.02.04. М.: ТСХА—28 с (1993).

**ЗАВИСИМОСТЬ СИЛЫ МУТАНТНЫХ ПРОМОТОРОВ ГЕНА RRNB
РИБОСОМАЛЬНОЙ РНК E.COLI ОТ ПАРАМЕТРОВ
ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО UP-ЭЛЕМЕНТА**

Корчагина В.М., Осипов А.А.¹

Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН

¹Институт высшей нервной деятельности и нейрофизиологии РАН

Целью данной работы было изучение зависимости силы мутантных промоторов гена *glnV* рибосомальной РНК *E.coli* от параметров электростатического *up*-элемента.

Задачи:

Рассчитать зависимость силы промотора от максимальной величины потенциала в окне длиной 50 пар оснований вокруг 75 позиции в соответствии с координатами набора мутантных *up*-элементов.

Рассчитать зависимость силы промотора от суммарной величины потенциала вокруг максимума в окне длиной 50 пар оснований вокруг 75 позиции в соответствии с координатами набора мутантных *up*-элементов.

КОНДЕНСАЦИЯ ДНК В БАКТЕРИЯХ

Крупянский Ю.Ф., Генералова А.А., Коваленко В.В., Лойко Н.Г.¹, Терешкин Э.В.,
Моисеенко А.В.², Терешкина К.Б., Соколова О.С.², Попов А.Н.³

ФИЦ Химическая Физика им.Н.Н.Семенова, РАН, 119991, Москва, Косыгина 4,
Тел.:(495) 939 73 00, e-mail: yufk@chph.ras.ru

¹ ФИЦ «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН, Россия, Москва

² МГУ им. М. В. Ломоносова, Биологический факультет, Россия, Москва

³ European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble Cedex 9, France

Изучение конденсации ДНК в клетке важно для понимания механизмов выживания бактерий и для медицины, поскольку упорядоченная конденсация ДНК обеспечивает устойчивость патогенных бактерий к действию антибиотиков. В разбавленном растворе длина ДНК составляет несколько сантиметров. Длина бактерии *Escherichia coli* составляет около 0,5 μ . Столь драматичное уменьшение объема, занимаемого ДНК - следствие ее конденсации. Обнаружено, что ДНК организована в нуклеоиде активно растущей клетки иерархически с тремя уровнями компактизации ДНК: Нижний уровень (малый масштаб ≥ 1 кб п.о.) обеспечивается гистоноподобными NAP белками. Активно растущие клетки поддерживают динамический, далекий от равновесия порядок, благодаря метаболизму. По мере перехода клеток в покоящееся состояние (практически полное отсутствие метаболизма) обычные биохимические способы защиты ДНК перестают работать и клетки, адаптируясь к новым условиям, вынуждены использовать физические механизмы защиты ДНК (плотную упаковку ДНК, нанокристаллизацию ДНК с белками и т. д.). Было проведено изучение структуры ДНК в нуклеоиде покоящихся клеткам, образующихся при стрессе голодания. Изучение проводилось с помощью дифракции синхротронного излучения и просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Экспериментальные результаты позволили визуализировать структуры нижнего иерархического уровня компактизации ДНК в нуклеоиде покоящихся клеток. Впервые проведенная серия дифракционных экспериментов свидетельствует о наличии периодической упорядоченной организации ДНК во всех изученных бактериях. ПЭМ позволила извлечь более тонкую визуальную информацию о типе конденсации ДНК в нуклеоиде бактерии *Escherichia coli*. Обнаружены внутриклеточные нанокристаллические, жидкокристаллические и свернутые нуклеосомо-подобные структуры ДНК. Свернутая нуклеосомоподобная структура наблюдалась впервые, она является результатом множественного сворачивания длинных молекул ДНК вокруг белка Dps и его ассоциатов. Далее проведено изучение изменений в архитектуре ДНК под влиянием химического аналога аутоиндуктора анабиоза 4-гексилрезорцина (4ГР). Рост концентрации 4ГР индуцирует переход части клеток популяции в анабиотическое покоящееся состояние, а затем и в мумифицированное состояние. Проведенные исследования структуры ДНК в анабиотическом и мумифицированном состояниях показывают спектроскопическую идентичность структуры ДНК в покоящемся анабиотическом состоянии и в покоящемся состоянии, образуемом при стрессе голодания.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЗАМЕДЛЕННОЙ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ ХЛОРОФИЛЛА ДЛЯ БИОТЕСТИРОВАНИЯ ЗАГРЯЗНЕНИЙ

Маторин Д.Н., Яковлева О.В., Тодоренко Д.А., Маторин Н.А., Алексеев А.А.¹

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Россия, 119234, г.
Москва, Ленинские горы, д.1, matorin@biophys.msu.ru

¹Северо-восточный федеральный университет имени М.К.Аммосова, Россия, 677000, г.
Якутск, ул. Белинского, д. 58

В условиях нарастающей антропогенной нагрузки проблема охраны окружающей среды привлекает внимание исследователей во всем мире. Важным источником информации о токсичности различных загрязнений может служить метод регистрации замедленной флуоресценции (ЗФ) или длительного послесвечения.

Отработаны научно-методологические подходы по использованию регистрации замедленной флуоресценции хлорофилла в биотестировании различных загрязнений. Проведенные многочисленные токсикологические эксперименты с тяжелыми металлами, гербицидами, полиароматическими углеводородами (ПАУ), ПАВ и др. показали, что снижение относительного выхода ЗФ и отношения индукционного максимума к стационарному значению являются одной из первичных неспецифических реакций водорослей на воздействие токсикантов. Разработана компьютерная программа для анализа токсичности по параметрам ЗФ. Водоросли были наиболее чувствительны к действию солей тяжелых металлов и гербицидам. Как показали результаты пробит-анализа, токсичность веществ указанных групп для водорослей возрастала в следующей последовательности: цинк < свинец < кадмий < ТПОХ < DCMU < хром < медь < ртуть.

К достоинствам использования ЗФ для экспресс-оценки токсичности вод и в особенности питьевой воды является короткая продолжительность испытаний и использование малых количеств тест-объектов. Преимущество ЗФ также в том, что измеряются только живые клетки с активными реакционными центрами фотосинтеза, что увеличивает чувствительность тестов на токсичность. Этот метод несет дополнительную информацию о важнейшем процессе в клетке – энергизации фотосинтетических мембран и связанным с этим образованием АТФ.

Исследование выполнено в рамках Программы развития МГУ «Будущее планеты и глобальные изменения окружающей среды».

Литература.

1. Маторин Д.Н., Осипов В.А., Венедиктов П.С., Рубин А.Б. Замедленная флуоресценция растений и водорослей. Теоретические и практические аспекты. – Альтрек, 2011. 202 стр.
2. Маторин Д.Н., Яковлева О.В. Фотолуминесценция растений. – Альтрек, 2019. 256 стр.

УТОЧНЕНИЕ СТРУКТУРЫ НЕУПОРЯДОЧЕННОГО КОМПОНЕНТА РАСТВОРА БЕЛКОВЫХ КРИСТАЛЛОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОДЕЛЕЙ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Мустафин Х.С., Гуцин И.Ю

Московский физико-технический институт,
Россия, 141700, г. Долгопрудный, Институтский пер., 9.,
E-mail: khalid.mustafin@phystech.edu

Количество разрешенных структур биологических молекул в PDB в настоящее время превышает 190 000; большинство из них определяется методами кристаллографии. Многие компьютерные программы упростили и ускорили процесс определения структуры [1]. Однако некоторые задачи требуют осторожного подхода в интерпретации результатов кристаллографии.

Ярким примером является задача моделирования компонент раствора белковых кристаллов. Среда, в которой выращивается кристалл белка, неизбежно содержит воду, ионы, нативные лиганды и т. д. В среднем около половины всего объема кристалла состоит из неупорядоченного раствора [2]. Неточная интерпретация электронной плотности компонент растворителя, особенно вблизи поверхности белка, может привести к неверным выводам о его физико-химических свойствах. Даже небольшие компоненты, такие как ионы хлора, могут играть важную роль в функционировании белка и быть неотъемлемой частью его структуры. В то же время ионы хлора имеют низкий аномальный сигнал и их легко спутать с молекулами воды [3].

В данной работе мы исследовали возможность классификации молекул воды и ионов хлора в кристаллографических структурах белков с использованием моделей машинного обучения. Мы представляем автоматизированную схему для анализа и классификации ионов хлора и молекул воды. Также нами были обнаружены кристаллографические структуры, в которых некорректно моделируются ионы хлора.

Литература.

1. Wlodawer A. et al. Protein crystallography for aspiring crystallographers or how to avoid pitfalls and traps in macromolecular structure determination // *FEBS J.* 2013. Vol. 280, № 22. P. 5705–5736.
2. Weichenberger C.X. et al. The solvent component of macromolecular crystals // *Acta Crystallogr. Sect. D Biol. Crystallogr.* 2015. Vol. 71, № 5. P. 1023–1038.
3. Skitchenko R.K. et al. Census of halide-binding sites in protein structures // *Bioinformatics* / ed. Elofsson A. 2020. Vol. 36, № 10. P. 3064–3071.

КООПЕРАТИВНОЕ СВЯЗЫВАНИЕ КИСЛОРОДА С ГЕМОГЛОБИНОМ: АНАЛИЗ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Нечипуренко Ю.Д., Вашанов Г.А.¹, Лавриненко И.А.¹

Институт молекулярной биологии им. Энгельгардта РАН, РФ, 119991, Москва,
Вавилова ул. 32, +74991352311, nech99@mail.ru

¹Воронежский госуниверситет, РФ, 394018, Воронеж, Университетская пл. 1,
с777mt@mail.ru, lavrinenko_ia@bio.vsu.ru

Исследование способности гемоглобина обратимо связывать кислород имеет длительную историю и позволяет лучше понять механизмы и фундаментальное значение феномена кооперативности для биосистем различного уровня организации. В контексте изучения этого явления с помощью математических моделей, разработанных для описания оксигенации гемоглобина, были предложены уравнения, которые нашли свое применение и в ряде других областей биологической науки: от задач ферментативной кинетики и анализа различных зависимостей типа «доза-эффект» до исследования сопряженного транспорта ионов и моделирования регуляции транскрипции генов и многое другое.

Нами была предпринята попытка кратко изложить эту историю с позиции формального анализа кооперативного присоединения кислорода гемоглобином, соединив обзор классических работ с некоторыми из наших исследований [1-5]. Показано, что модели оксигенации, построенные на степенной зависимости лучше аппроксимируют кривые диссоциации гемоглобина, относительно экспоненциальных моделей. Предложены математические модели оксигенации, несущие в своей основе уравнение Хилла, где коэффициент кооперативности модулирован распределениями Гаусса и Лоренца, как функциями от парциального давления кислорода.

Литература

1. Лавриненко И.А., Вашанов Г.А., Сулин В.Ю., Нечипуренко Ю.Д. Анализ моделей кооперативного связывания кислорода гемоглобином // *Биофизика* **66**, 6, 2021. Стр. 1065-1073.
2. Лавриненко И.А., Вашанов Г.А., Нечипуренко Ю.Д. Новая интерпретация коэффициента Хилла // *Биофизика* **67**, 2, 2022. Стр. 229-233.
3. Лавриненко И.А., Вашанов Г.А., Бучельников А.С., Нечипуренко Ю.Д. Кооперативное связывание кислорода гемоглобином как одна из обобщающих моделей в молекулярной биофизике // *Биофизика* **67**, 3, 2022. Стр. 421-433.
4. Лавриненко И.А., Вашанов Г.А., Нечипуренко Ю.Д. Новая математическая модель, описывающая оксигенацию гемоглобина // *Биофизика* **67**, 3, 2022. Стр. 444-450.
5. Lavrinenko I.A., Vashanov G.A., Hernández Cáceres J.L., Buchelnikov A.S., Nechipurenko Y.D. A New Model of Hemoglobin Oxygenation // *Entropy* **24**, 9, 2022. P. 1214.

СУПЕРМОДЕЛЬ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ЛОКАЛЬНЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ - ВЕРХУШКА ГИФЫ *NEUROSPORA CRASSA*

Потапова Т.В.

НИИ физико-химической биологии имени А.Н. Белозерского Московского государственного университета имени М. В.Ломоносова, Россия, 119192, г. Москва, Воробьевы горы, МГУ, факс: (495) 9393181, e-mail: potapova@belozersky.msu.ru

Мицелиальный гриб *Neurospora crassa* - чрезвычайно популярный объект, давно заслуживший славу **супермодели**. Второе издание книги «21st Century Guidebook to Fungi» [www.cambridge.org/9781108745680] содержит огромный массив научных данных о *N. crassa*, в том числе о новых успехах в изучении молекулярной генетики и молекулярной биологии грибов. Многие процессы и явления в гифах *N.crassa* можно рассматривать как **естественные технологии биологических систем** [1], так как они являются достаточно общими для многих живых систем. Например, явление энергетической кооперации между соседними клетками с помощью электрических токов через проницаемые межклеточные контакты, которое обнаруживается у многоклеточных систем, принадлежащих разным ветвям эволюционного древа жизни [2, 3]. Закономерным следствием такого взаимодействия между клетками оказывается появление и поддержание локальных электрических полей, которые в последнее время привлекают все больше внимания в плане их возможной регуляторной роли, в том числе — влияния на работу генома [4]. Поляризованный верхушечный рост вегетативной гифы *N.crassa* может служить удобной моделью для экспериментального и теоретического анализа этого явления, так как для растущей гифы *N.crassa* детально проанализированы теретически и экспериментально природа и закономерности появления локальной электрической гетерогенности в системе верхушечных клеток и возможности самоорганизации внутриклеточных структур под влиянием такого локального электрического поля [5].

Литература:

1. Уголев А.М. Естественные технологии биологических систем. Л-д: «Наука», 1987. 320 стр.
2. Potapova TV, Aslanidi KB. Energy coupling of adjacent cells as an universal function of cell-to-cell permeable junctions. *Progress in Cell Res.*, V.4. 1995. P.53.
3. Потапова Т.В. Мембранная биоэнергетика и разделение труда в системах электрически связанных клеток. *Цитология* Т.63 (1). 2021. Стр. 1 – 12.
4. Cervera J., Levin M., Mafe S. Bioelectric coupling of single-cell states in multicellular systems. *J. Phys. Chem. Lett.* V. 11. 2020. P. 3234. <https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcclett.0c00641>.
5. Потапова Т.В. Структурная и функциональная организация растущих верхушек гиф *Neurospora crassa*. *Биохимия* Т.79, вып.7, 2014. Стр.753-769.

АГЕНТНАЯ МОДЕЛЬ ПОПУЛЯЦИИ ДИАТОМОВЫХ ВОДОРΟΣЛЕЙ МОРЕЙ АРКТИКИ: РАЗНООБРАЗИЕ ЧИСЛЕННЫХ РЕШЕНИЙ

Фурсова П.В., Ризниченко Г.Ю., Погосян С.И.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Биологический факультет, Москва, Россия

Разрабатываемая авторами агентная модель [1] описывает механизм функционирования диатомового фитопланктона сообщества в условиях четкого разделения среды обитания на два слоя: в верхнем слое для микроорганизмов доступен солнечный свет, а в нижнем – необходимые элементы минерального питания. Такая стратификация характерна для некоторых северных морей и обусловлена большим материковым стоком речных вод и таянием льдов.

В основе модели лежит гипотеза о том, что для выживания клеткам фитопланктона необходимо перемещаться из одного слоя в другой. Перемещение осуществляется вследствие изменения плотности клетки микроводоросли: ее увеличения на свету за счет фотосинтеза и уменьшения в темноте в различных метаболических процессах, в том числе дыхании.

Проведено исследование поведения решений модели в зависимости от ключевых параметров: уровня приповерхностной освещенности и расстояния, на которое клетки смещаются в случайном направлении в каждый момент времени. Изменяя эти параметры, можно получить различные распределения клеток – численности в верхнем и нижнем слоях, – характерные для экспедиционных наблюдений. При небольших смещениях клеток популяция демонстрирует периодическое изменение численности. Постоянное преобладание клеток в одном из слоев или последовательная смена доминирования определяется заданной освещенностью. Перемещение клеток на большие расстояния, соответствующие условиям сильного волнения на море, сглаживают колебания численности популяции. Модельный эксперимент демонстрирует уменьшение общей численности клеток в сравнении с аналогичным экспериментом в отсутствии значительных перемещений клеток, поскольку снижается «доступность» солнечного света. В условиях более высокой приповерхностной освещенности общая численность клеток, перемещающихся на большие расстояния, становится выше, так как они оказываются в меньшей степени подверженными фотодеструкции. Динамика численностей в каждом из слоев также изменяется: при нормальном уровне освещенности максимумы численностей верхних и нижних клеток сменяют друг друга, что характерно для слабо перемещающихся клеток в условиях пониженной освещенности.

Исследование выполнено в рамках научного проекта государственного задания МГУ №121032500060-0.

Литература.

1. Фурсова П.В., Ризниченко Г.Ю., Конохов И.В., Погосян С.И. Агентная модель динамики численности популяций диатомовых водорослей краевых арктических морей в летний период (гипотеза) // *Океанология*. 2023 (в печати).

ДИСКРЕТНАЯ ПО ПРОСТРАНСТВУ И ВРЕМЕНИ АГЕНТНАЯ МОДЕЛЬ ФОТОСИНТЕТИЧЕСКОГО ЭЛЕКТРОННОГО ТРАНСПОРТА

Хрушев С.С., Плюснина Т.Ю., Маслаков А.С., Ризниченко Г.Ю., Рубин А.Б.

Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Биологический факультет, каф. биофизики, Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 12, styx@biophys.msu.ru

Для установления взаимосвязи морфологических изменений хлоропластов с наблюдаемыми изменениями функциональных параметров разработана математическая модель, позволяющая воспроизвести динамику редокс-превращений компонентов фотосинтетической электрон-транспортной цепи с явным учетом диффузии подвижных переносчиков электрона в сложном интерьере внутрехлоропластного пространства. Модель построена на основе упрощенной аналитической геометрии грани и окружающих ее стромальных ламелл, воспроизводящей наблюдаемую в эксперименте ультраструктуру и позволяющей варьировать форму компартментов изменением числовых параметров, что позволяет использовать ее для установления взаимосвязи морфологических изменений хлоропластов с наблюдаемыми изменениями функциональных параметров. Модель реализована в виде программы на языке программирования Python и является дискретной по времени и пространству.

Пространство внутри хлоропласта разбивается на ромбододекаэдрические ячейки объемом 2 нм^3 , используются тороидальные (периодические) граничные условия. Каждой ячейке присваивается идентификатор компартмента: строма, люмен либо тилакоидная мембрана. Предполагается, что состоящая из сближенных цилиндрических тилакоидов грана «прозает» стромальные ламеллы, при этом в области контакта формируются переходные спиральные структуры.

Модель построена по принципу клеточного автомата, белковые молекулы занимают несколько соседних ячеек, их форма задается по данным рентгеноструктурного анализа или криоэлектронной микроскопии. Одна или несколько ячеек вблизи поверхности трансмембранных комплексов задаются как активные сайты, попадание в которые подвижных переносчиков электрона приводит к запуску программы, анализирующей это взаимодействие.

Каждый из агентов модели может находиться в одном из нескольких редокс-состояний. То, каким образом происходят переходы между состояниями агентов, определяется заданной для каждого типа агентов программой, таким образом, можно легко изменять степень детализации процессов, происходящих в каждом из агентов, независимо от других агентов. Рассмотрена система, в которой все процессы электронного транспорта между трансмембранными комплексами моделировались как необратимые диффузионно-контролируемые. Несмотря на простоту, такая модель позволила воспроизвести основные особенности наблюдаемых в экспериментах кривых при использовании небольшого числа настраиваемых параметров.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ №20-04-00465 и РФН №22-11-00009.

АНАЛИЗ ПЕРЕХОДНЫХ ПРОЦЕССОВ В МОДЕЛИ ФОТОСИСТЕМЫ 2

Хрущев С.С., Плюснина Т.Ю., Ризниченко Г.Ю., Рубин А.Б.

Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Биологический факультет, каф. биофизики, Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 12, styx@biophys.msu.ru

Основной задачей исследования было составление детальной модели функционирования фотосистемы 2 в диапазоне времен от микросекунд до миллисекунд и приведения ее путем математической редукции в компактную форму, удобную для анализа большого массива экспериментальных сигналов индукции флуоресценции, а также использование полученной модели для оценки действия различных факторов стресса на протекание реакций в фотосистеме 2.

Разработан программный модуль, позволяющий осуществлять анализ состояний многокомпонентных ферментных комплексов, в частности, комплекса фотосистемы 2. Исходя из описания ключевых реакций, программный модуль позволяет: а) сгенерировать граф всех возможных состояний мультиферментного комплекса, б) записать соответствующую систему линейных обыкновенных дифференциальных уравнений, в) в рамках заданных диапазонов параметров выделить уравнения, содержащие в неявном виде сингулярные возмущения – малые параметры при производных.

Состояния ФС2 отличаются степенью восстановленности переносчиков электронов, входящих в состав комплекса ФС2. Предполагая, что каждый из переносчиков может находиться в любом из состояний независимо от остальных, общее число состояний ФС2 в модели, включая состояния с подвижным переносчиком пластохиноном, составляет 384. После исключения реакций с подвижным переносчиком пластохиноном в графе состояний остается 24 вершины, соответствующие состояниям ФС2 с различной степенью окисленности или восстановленности отдельных компонент этого комплекса. В соответствии с полученным графом была построена математическая модель, представляющая собой систему линейных обыкновенных дифференциальных уравнений для ФС2 под действием диурона (24 уравнения). Параметрами модели являются константы скоростей переходов между состояниями ФС2.

Все переменные модели на «быстрые» и «медленные». В соответствии с разделением переменных модели на «быстрые» и «медленные» проведена редукция системы дифференциальных уравнений. Полученная система линейных алгебраических уравнений была разрешена относительно «быстрых» переменных, в результате чего окончательная система дифференциальных уравнений для «медленных» переменных содержит только три уравнения, которые и определяют динамику сигнала индукции флуоресценции. Анализ решения показал, что некоторые из констант скоростей элементарных реакций по отдельности влияют на динамику системы, в то же время другие константы скоростей входят в решение в виде определенных комбинаций. Эти комбинации, соответствующие нескольким взаимосвязанным стадиям функционирования комплекса ФС2, мы использовали для идентификации модели по экспериментальным данным.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ №22-11-00009.

МОДЕЛЬ ЭВТРОФИРОВАНИЯ НОВОСИБИРСКОГО ВОДОХРАНИЛИЩА

Цхай А. А., Агейков В. Ю.

Институт водных и экологических проблем СО РАН, Россия, 656038, Барнаул, ул. Молодежная, 1, +79635384816, tskhai@iwep.ru

Подходы для моделирования процессов в живых системах могут быть разделены на системно-динамические (кинетические) и агентные [1]. В этом смысле данное исследование представляет собой кинетическое моделирование водной экосистемы с использованием некоторых эвристических предположений, право которых на существование, в конечном счете, определяется их способностью быть основой объяснения наблюдаемых явлений.

Для анализа данных о текущем состоянии и пространственно-временной динамике экосистемы водохранилища моделируются природные биогеохимические циклы трансформации лимитирующих элементов [2]. Новизна исследования состоит в объединении так называемого структурно-динамического моделирования [3], позволяющего учесть изменчивость видового состава и функциональных характеристик планктонных сообществ, с традиционными способами численных расчетов качества воды в пространственно-неоднородных водных экосистемах. На этом пути удалось воспроизвести тренд многолетнего эвтрофирования Новосибирского водохранилища [4-5]; выявить роль гидрологических факторов в необычном пространственном распределении фитопланктона; предсказать возможную реакцию изучаемой экосистемы на использование методов борьбы с эвтрофированием, используемых в мировой практике.

Исследование выполнено в рамках научной программы Института водных и экологических проблем СО РАН при поддержке РФФИ, грант № 18-41-220002.

Литература

1. *Ризниченко Г. Ю., Рубин А. Б.* Вопросы математического моделирования в биологии. Часть 1. Динамические модели первичных процессов фотосинтеза // *Успехи современной биологии* **140**, 4, 2020. 315-332. DOI 10.31857/S0042132420040110.
2. *Цхай А. А., Леонов А. В.* Прогноз качества воды проектируемого водохранилища на основе модели трансформации соединений азота и фосфора // *Водные ресурсы* **22**, 3, 1995. 261-272.
3. *Jorgensen S. E.* Structural dynamic model // *Ecological Modelling* **31**, 1-4, 1986. 1-9.
4. *Цхай А. А., Агейков В. Ю.* Моделирование изменения уровня эвтрофирования водохранилища на основе воспроизведения биогеохимических циклов // *Водные ресурсы* **47**, 1, 2020. 105-113. DOI 10.31857/S0321059620010149.
5. *Tskhai, A. A., Ageikov, V. Yu.* Disturbance of sustainability of the reservoir ecosystem: a model approach for assessing and forecasting the long-term process of eutrophication // *Journal of Sustainable Development of Energy, Water and Environment Systems* **9**, 1, 2021. 1080327. DOI 10.13044/j.sdewes.d8.0327.

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ИОНОВ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ НА КЛЕТКИ *CHLORELLA VULGARIS* ПОМОЩЬЮ КЛАССИФИКАТОРА «СЛУЧАЙНЫЙ ЛЕС»

Червицов Р.Н., Плюснина Т.Ю., Хрущев С.С., Годоренко Д.А.

Биологический факультет Московского государственного университета им. М.В.
Ломоносова, Москва, 119234, Россия, roman123qwe123@gmail.com

В настоящее время актуален вопрос определения присутствия в водной среде различных токсикантов, таких как ионы тяжелых металлов, поскольку их присутствие вызывает нарушение фотосинтетических процессов и повреждение клеток водорослей, что в конечном итоге может приводить к массовой гибели фотосинтетических организмов и нарушению баланса водных экосистем. Один из методов, позволяющих определить присутствие тяжелых металлов в среде, связан с измерением кривых индукции флуоресценции хлорофилла а, характеризующих состояние фотосинтетического аппарата клеток тестовых фотосинтетических организмов и изменяющих свою форму при воздействии различных факторов стресса. Из индукционных кривых могут быть рассчитаны параметры JIP-теста, характеризующие состояние отдельных элементов фотосинтетического аппарата. При обработке больших массивов таких данных целесообразно применять методы машинного обучения, в частности – алгоритм классификации «случайный лес».

В данной работе в качестве тестового организма использовалась зеленая водоросль *Chlorella vulgaris*. Клетки водорослей инкубировались в течение 60 часов, раз в час измерялась кривая индукции флуоресценции. Токсиканты ($CdSO_4$ или $K_2Cr_2O_7$ в концентрации 20 или 50 мкМ) добавлялись на 17 часу инкубации. Далее, для данных, полученных в интервале от 17 до 60 часов культивирования, были построены классификаторы по алгоритму случайного леса, где в качестве признаков для классификации использовались параметры JIP-теста. Классификатор для определения наличия или отсутствия токсиканта имеет точность 92% при определении контрольных данных и 94% при определении данных для проб с токсикантом. Классификатор для определения вида токсиканта (кадмий или хром) определяет контрольные данные также с точностью 92%; точность определения проб с кадмием составляет 73%, а проб с хромом – 89%. Показано также, что на точность классификации влияет интенсивность измерительного света: при снижении интенсивности возбуждающего света для измерения индукционных кривых снижается интенсивность флуоресценции, что ведет к снижению точности классификации, поскольку различия между данными для контрольных проб и проб с токсикантами становятся менее выраженными (значения точности приведены для наибольшей интенсивности измерительного света). Наиболее значимым для классификации из параметров JIP-теста является параметр Fv/Fm – квантовый выход первичной фотохимии, характеризующий эффективность работы фотосистемы II. Таким образом, существуют перспективы применения данного метода для оценки состояния водной среды в естественных местообитаниях.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ №22-11-00009.

РАЗМЕРНАЯ И ОБЕЗРАЗМЕРЕННАЯ МОДЕЛИ ОДНОРОДНОЙ ДНК

Якушевич Л.В.¹, Краснобаева Л.А.^{2,3}

¹Институт биофизики клетки Российской академии наук – обособленное подразделение
Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный
исследовательский центр «Пушкинский научный центр биологических исследований
Российской академии наук», Московская обл., г. Пушкино, Россия
142290, Институтская ул. 3

Тел.: (466)7739252, e-mail: kind@mail.ru

²Сибирский государственный медицинский университет (СибГМУ), Томск,
Россия 634050, Московский тракт, 2

Тел.: (3822)901101,

³Томский государственный университет, Томск, Россия
634050, пр. Ленина 36,

Тел.: (3822)529021, e-mail: kla1983@mail.ru

Математические модели, имитирующие внутреннюю подвижность молекулы ДНК, содержат множество динамических параметров, таких как моменты инерции азотистых оснований, расстояния между парами оснований, расстояния от центров масс оснований до сахаро-фосфатных цепочек, жесткость сахаро-фосфатного остова. Оценки значений этих параметров часто затруднены, а гарантировать их точность весьма проблематично.

С другой стороны, для проведения глубокого анализа модельных уравнений математики предпочитают использовать обезразмеренные уравнения. В них меньше параметров, их более удобно программировать, они легче поддаются анализу. Кроме того, обезразмеренные уравнения представляют интерес в связи с тем, что они не «привязаны» к конкретному объекту и могут иметь более широкое применение. Так они могут описывать нелинейную динамику не только молекулы ДНК, но и механических, электронных и других нелинейных систем.

В настоящей работе мы получили обезразмеренные уравнения, моделирующие нелинейную динамику молекулы ДНК, и, в частности, движение нелинейных конформационных возмущений – кинков. Расчеты выполнялись для случая однородной молекулы ДНК. Получено уравнение МакЛафлина-Скотта для обезразмеренной скорости кинка и его решения, построены графики, отражающие временные зависимости обезразмеренных скорости и координаты кинков.

EFFECT OF GAMMA RADIATION ON GRAPE SNAILS (*Helix pomatia*)

Khalilov R., Nasibova A.¹, Fridunbekov I., Bayramov M.¹

Baku State University, Azerbaijan, AZ 1148, Z.Khalilov str. 23. hrovshan@hotmail.com

¹Institute of Radiation Problems, Azerbaijan, AZ 1143, B.Vahabzade str.9.

aygun.nasibova@mail.ru

We are conducting research in the field of studying the influence of various stress factors on living systems. The study of paramagnetic centers in different plant species showed that under stress, they develop new magnetic properties [1,2]. Similar results were obtained in studies with animal organisms [3]. Using the electron paramagnetic resonance (EPR) spectroscopy method, we found that exposure to ionizing gamma radiation up to certain doses leads to the appearance of new magnetic properties in them. Shell and body parts of control snails and those irradiated with different doses of gamma radiation (100 Gy, 200 Gy, 300 Gy, 400 Gy, 600 Gy, 800 Gy) were examined separately.

Identification of the EPR spectra of the studied objects in a wide magnetic field (500-5500 Gs) showed that irradiation with gamma radiation leads to the appearance of wide EPR signals characterizing the iron oxide magnetic nanoparticles ($g=2.32$; $\Delta H=400$ Gs). It has been established that the intensity of the signal characterizing the magnetic iron oxide nanoparticles recorded in body parts of snails is higher than in the snail shell.

It also turned out that with an increase in the radiation dose, an increase in the amplitude of the characteristic broad EPR signal is observed. Depending on the dose of influencing radiation, we established a linear increase in free radical signals ($g=2.0023$) in the area of the body and shell of snails and a nonmonotonic change in the amplitude of the broad EPR signal ($g=2.32$) characterizing magnetic nanoparticles. The obtained results show that grape snails can be used as a bioindicator in the study of the ecological state of the environment.

References.

1. Nasibova A.N., Khalilov R.I. Preliminary studies on generating metal nanoparticles in pomegranates (*Punica Granatum*) under stress. // *International Journal of Development Research*. Vol.6, Issue 03, P. 7071-7078, 2016.
2. Nasibova A.N., Fridunbekov I.Y., Nabiyevev N.N., Khalilov R.I. Influence of UV and GAMMA radiation on paramagnetic properties in fragments of photosystem 2. // *International Journal of Pharmacy and Pharmaceutical Research*. 2016. V.7, Issue 4, P. 24-32.
3. Nasibova Aygun. The use of EPR signals of snails as bioindicative parameters in the study of environmental pollution. // *Advances in Biology & Earth Sciences*. Vol.4, No.3, 2019, P.196-205.

CLARIFYING THE STRUCTURE OF THE SOLVENT COMPONENT OF PROTEIN CRYSTALS USING MACHINE LEARNING MODELS

K. Mustafin, I. Gushchin

Moscow Institute of Physics and Technology
9 Institutskiy per., Dolgoprudny, Moscow Region, 141701, Russian Federation
E-mail: khalid.mustafin@phystech.edu

The number of resolved structures of biological molecules in the PDB currently exceeds 190,000; most of them are determined by crystallographic methods. Many computer programs have made the process of structure determination easier and faster [1]. However, some tasks require a careful approach to interpreting the results of crystallography.

A prime example is the problem of modeling the solvent component of protein crystals. The environment in which a protein crystal is grown inevitably contains water, ions, native ligands, etc. On average, about half of the entire crystal volume consists of disordered solvent [2]. Inaccurate interpretation of the electron densities of the solvent, especially near the surface of the protein, can lead to incorrect conclusions about its physical and chemical properties. Even small solvent components such as chloride ions can play an important role in the functioning of a protein and be an integral part of its structure. At the same time, chloride ions have a low anomalous signal and can easily be confused with water molecules [3].

In this work, we investigated the possibility of classifying water molecules and chloride ions in the crystallographic structures of proteins using machine-learning models. We present a complete end-to-end scheme for the analysis and classification of chloride ions and water molecules. We also found crystallographic structures, in which chloride atoms are modeled incorrectly.

References.

1. Wlodawer A. et al. Protein crystallography for aspiring crystallographers or how to avoid pitfalls and traps in macromolecular structure determination // *FEBS J.* 2013. Vol. 280, № 22. P. 5705–5736.
2. Weichenberger C.X. et al. The solvent component of macromolecular crystals // *Acta Crystallogr. Sect. D Biol. Crystallogr.* 2015. Vol. 71, № 5. P. 1023–1038.
3. Skitchenko R.K. et al. Census of halide-binding sites in protein structures // *Bioinformatics / ed. Elofsson A.* 2020. Vol. 36, № 10. P. 3064–3071.

S3/W2

**Молекулярное
МОДЕЛИРОВАНИЕ**

**Molecular
MODELING**

Руководители:

*Илья Борисович Коваленко, Владислав Михайлович Комаров,
Галина Юрьевна Ризниченко, Андрей Борисович Рубин,
Мария Григорьевна Хренова, Алексей Константинович Шайтан.*

ВЛИЯНИЕ РАССТОЯНИЯ МЕЖДУ МЕМБРАНАМИ КРИСТЫ МИТОХОНДРИИ НА СКОРОСТЬ ОБРАЗОВАНИЯ ПРЕДВАРИТЕЛЬНОГО КОМПЛЕКСА ЦИТОХРОМА C И ДИМЕРА III ДЫХАТЕЛЬНОГО КОМПЛЕКСА В МОДЕЛИ БРОУНОВСКОЙ ДИНАМИКИ

Абатурова А.М., Ризниченко Г.Ю.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, биологический ф-т, кафедра биофизики, Россия, 119991, Москва, Ленинские горы 1, стр. 12, +(495)9390289

В процессе окислительного фосфорилирования молекулы цитохрома C (цитС) переносят электроны в межмембранном пространстве митохондрий и кристах от III-его к IV-ому дыхательному комплексу. При увеличении толщины люмена крист (ТЛК) присходит затруднение окислительного фосфорилирования [1].

С помощью модели броуновской динамики, построенной в программе ProKSim [2], исследовали вероятность нахождения цитС (PDB ID 3O1Y) в участке кристы, содержащем неподвижный димер III (III₂) дыхательного комплекса (PDB ID 3O1Y). При диффузии цитС из случайного начального положения в течение 9-13.5 мкс было получено увеличение вероятности нахождения цитС в области неактивной субъединицы цитС₁ D III₂ с увеличением толщины люмена кристы (ТЛК) от 120 до 160Å. Получены кинетические кривые образования предварительных комплексов при энергии электростатического взаимодействия белков -3.7кТ и расстоянии между атомами Fe цитС и субъединицы P III₂ менее 35 Å для ионной силы 130 мМ, рН 7. Размеры реакционного объема: ТЛК 120 и 160 Å, длина мембран 260 и 300 Å. Центр масс молекулы цитС фиксировали и располагали относительно III₂ со стороны IV в респирасоме 5GPn. Начальная ориентация цитС относительно центра масс была случайной. Было проведено по 60000 численных экспериментов диффузии цитС и образования предварительного комплекса с III₂. Из кинетических кривых определяли время полупревращения образования предварительного комплекса белков $t_{1/2}$. При увеличении ТЛК с 120 до 160Å было получено увеличение $t_{1/2}$ с 0.86 ± 0.01 мкс до 1.02 ± 0.05 мкс.

Кинетика образования предварительного комплекса белков определяется как местом нахождения молекулы цитС в пространстве, так и энергией электростатического взаимодействия между связывающимися молекулами. Показано, что в модели при расширении кристы с 3-ей мкс увеличивается вероятность нахождения молекул цитС в районе неактивной субъединицы цитС₁ III₂, что приводит к увеличению времени $t_{1/2}$ образования предварительного комплекса и замедлению электронного транспорта по митохондриальной цепи. Исследование выполнено в рамках научного проекта государственного задания МГУ №121032500060-0

Литература.

1. Siegmund S.E. et al., 2018, DOI: 10.1016/j.isci.2018.07.014
2. Хрущев С.С. и др. 2013, 47-64., DOI: 10.20537/2076-7633-2013-5-1-47-64

ВЛИЯНИЕ ОКСИДАТИВНОГО СТРЕССА НА КОНФОРМАЦИИ ГЛУТАМАТНЫХ РЕЦЕПТОРОВ

Аксенова С.В., Батова А.С., Бугай А.Н., Душанов Э.Б.

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия, kgyr@mail.ru

Высокая внеклеточная концентрация глутамата способна вызывать эксайтотоксичность и нейродегенеративные изменения в нейронах [1]. В связи с развитием дисбаланса в нейротрансмиттерной системе при различных когнитивных нарушениях и ментальных заболеваниях активируются процессы оксидативного стресса [1, 2]. Оксидативный стресс в синаптической системе также может активироваться в результате гидролиза некоторых аминокислот глутаматных рецепторов, после радиационного воздействия в ЦНС.

Понимание механизмов нарушения синаптической пластичности вследствие оксидативного стресса в структурах мозга, связанных с обучением и хранением информации, необходимо для улучшения терапевтических подходов при лечении неврологических расстройств, связанных с потерей памяти.

Целью настоящей работы было исследование влияния оксидативного стресса на функционирование глутаматных рецепторов гиппокампа. Для оценки воздействия свободных радикалов на структуру глутаматных рецепторов было проведено молекулярно-динамическое моделирование различных типов рецепторов AMPA и NMDA в неактивном состоянии и в активной конформации. Проводимость ионного канала вычислялась по данным, полученным с помощью пакета HOLE, а также исходя из анализа связывания ионов магния внутри рецептора NMDA. Анализ полученных структур позволил определить изменение проводимостей ионного канала. Полученные данные использованы для изучения поведения нейронных сетей, содержащих рецепторы AMPA, GABA и NMDA.

Литература

1. *Babaei P.* NMDA and AMPA receptors dysregulation in Alzheimer's disease // *European Journal of Pharmacology*, **vol.** 908, 2021 DOI: 10.1016/j.ejphar.2021.174310
2. *Бойко А.С.* Окислительный стресс и глутаматергическая эксайтотоксичность в развитии лекарственно-индуцированной тардивной дискинезии // *Фундаментальные исследования.* – 2014. – № 10-6. – С. 1220-1226.

АНАЛИЗ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АМИНОКИСЛОТ ИЗ СОСТАВА ИЗОЛЯТА СЫВОРОТОЧНОГО БЕЛКА И ГИАЛУРОНОВОЙ КИСЛОТЫ

Брыксин К.А., Пластун И.Л., Гринев В.С.¹, Майорова О.А.¹

Саратовский Государственный Технический Университет имени Ю.А. Гагарина
¹Саратовский государственный исследовательский университет имени
Н.Г. Чернышевского

В последнее время всё большее распространение в медицине получает направление, связанное с адресной доставкой терапевтического и диагностического агента к пораженным клеткам. В качестве таких модулей применяют антитела и другие белки, которые умеют распознавать опухолевые маркеры — молекулы, характерные для раковых клеток.

Для транспортировки лекарственных препаратов используют гидрогели.

В рамках исследования был проведен анализ соединений гиалуроновой кислоты с аминокислотами из состава изолята сывороточного белка.

Моделирование межмолекулярного взаимодействия проводилось методами теории функционала плотности с функционалом B3LYP и базисом 6-31G(d) в программном комплексе Gaussian, оптимизация молекул проводилась в программных комплексах Avogadro и GaussView.

Первым этапом было проведено исследование молекулы гиалуроновой кислоты.

На спектрах присутствует небольшой пик на частоте 3144 см⁻¹, помимо этого, присутствует пик на 3634 см⁻¹, который свидетельствует об образовании водородного связывания средней силы. Для анализа степени водородного связывания рассмотрим пик на частоте 3634 см⁻¹.

Следующим этапом было исследование комплекса гиалуроновой кислоты с аминокислотами, присутствующими в составе изолята сывороточного белка. Для рассмотрения были выбраны пролин и серин.

На основании расчетов и сравнения была составлена таблица 1.

Таблица 1. Сравнительный анализ молекулярных комплексов.

Аминокислота	Тип связи	Длина Н-связи R, Å	Длина водородного мостика R _b , Å	Частота ν , см ⁻¹	Частотный сдвиг $\Delta\nu$, см ⁻¹	Энергия связи $-\Delta H$, kkal/mol	Интенсивность I _{IR} , km/mol
Серин	O-H...O	1,23	2,05	3577	57	1,36	499
Пролин	O-H...O	1,23	2,5	3526	108	2,72	400

Исходя из полученных данных можно сделать вывод о том, что аминокислоты из состава изолята сывороточного белка при взаимодействии с гиалуроновой кислотой образуют водородную связь слабой силы. Дальнейшее исследование может выявить наиболее подходящие комплексы веществ для использования в адресной доставке лекарственных препаратов.

ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА ИНГИБИРОВАНИЯ ДНК-СВЯЗЫВАЮЩЕГО ДОМЕНА БЕЛКА PARP-1 СОЛЯМИ УРАНА МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Булавко Е.С., Иванков Д.Н.

Сколковский институт науки и технологий, Центр наук о жизни,
Россия, 121205, г. Москва, Большой бульвар, д.30, стр.1
Тел.: (495)280-14-81, E-mail: egor.bulavko@skoltech.ru

Не только радиоактивные изотопы урана способны нанести серьезный вред живым клеткам. Как и многие другие тяжелые металлы, в избыточном количестве уран может изменять структуру белков и ДНК. В частности, было показано, что ион уранила (UO_2^{2+}) – наиболее стабильная форма урана в условиях, близких к физиологическим, – оказывает негативное воздействие на металлсодержащие белки – цитохромы, трансферрины, ДНК-связывающие домены и др. На уровне организма хроническое отравление проявляется в нарушениях в работе почек, нервной системы, кроветворения.

Цинковые пальцы – одни из основных ДНК-связывающих доменов эукариотических белков. Ион цинка в них необходим для поддержания правильной пространственной структуры интерфейса, взаимодействующего с ДНК. Недавние исследования показали (на примере цинкового пальца белка PARP-1, участвующего в исправлении повреждений ДНК), что функциональность последних нарушается в результате взаимодействия с ацетатом уранила, изменяющим третичную структуру домена. Целью настоящей работы стало исследование возможного молекулярного механизма токсического воздействия урана, а также сопутствующих конформационных изменений в структуре цинкового пальца белка PARP-1 (PDB ID: 3ODC).

Для моделирования химических превращений, включающих ион уранила, боковые цепи аминокислот в потенциальных сайтах связывания и каталитические молекулы воды, мы использовали подходы КМ/ММ динамики в сочетании со смещающими потенциалами (метод зонтичной выборки). Получаемые стабильные комплексы мы параметризовали в терминах классического силового поля для расчета длинных МД-траекторий. Последние необходимы для сэмпинга возможных конформационных состояний системы, а также для оценки динамических и энергетических параметров (конформационной энтропии, энтропии растворителя, энтальпии) последних.

По результатам моделирования было показано, что состояние, при котором уран расположен в нативном сайте связывания, разрушается вследствие спонтанного внутреннего гидролиза связи $U - SG_{Cys162}$. И хоть энтальпия гидролиза оказывается равной 3,1 ккал/моль, за счет приобретения значительной подвижности итоговое значение свободной энергии реакции становится -5,1 ккал/моль. Дезорганизация ДНК-связывающего интерфейса, по-видимому, приводит к потере аффинности к ДНК.

РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОЙ БИБЛИОТЕКИ ДЛЯ РАСЧЕТА ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ДНК НА ЯЗЫКЕ PYTHON

Васильев В. А., Армеев Г. А.

Биологический факультет Московского государственного университета
имени М.В.Ломоносова, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 12,
info@mail.bio.msu.ru, +7(495)939-10-00

Геометрия двуцепочечной ДНК в А и Б формах была определена в 1953 году и на данный момент в банке данных белковых структур содержится более 6000 структур, содержащих 2 и более цепей ДНК. Известно, что геометрия ДНК зависит от ионного окружения, последовательности ДНК и взаимодействия с белками. Для того чтобы изучать закономерности изменения геометрии необходимы методы описания конформации ДНК. Существует несколько подходов к описанию локальной геометрии двуцепочечной ДНК. Один из наиболее распространенных подходов описывает ДНК в виде набора динуклеотидов. При таком подходе положение каждой следующей пары описывается 6 параметрами относительно предыдущей пары: 3 описывают пространственное смещение вдоль взаимно перпендикулярных осей и 3 – повороты вокруг этих осей.

Существующие программы для расчета геометрических параметров такие как DSSR(3DNA) и CURVES+ имеют ряд недостатков. Данные программы не содержат интерфейса для интеграции в другие программные библиотеки, их исходный код отсутствует в свободном доступе. Также эти программы не оптимизированы для обработки траекторий молекулярных динамики. В данной работе мы разработали аналог программ 3DNA `find_pair` и `analyze` на языке программирования Python.

В нашей программной библиотеке расчёт параметров ДНК осуществляется в несколько этапов. Первый шаг - поиск нуклеотидов в PDB структуре и определение их типа (независимо от имени остатка и имен атомов). На втором шаге алгоритм определяет пары нуклеотидов. Последний этап - расчет внешних и внутренних параметров пар на основе определенных нуклеотидов и их пар. Работа данной программной библиотеки сравнивалась с работой 3DNA. Рассчитываемые значения параметров в среднем отличаются на 0.00274. Наша программная библиотека работает несколько медленнее 3DNA на отдельных структурах, но вычисления для траекторий производятся более чем в 10 раз быстрее.

Программная библиотека используется в работе программы для моделирования нуклеосомных фибрилл Pynamod (<https://github.com/intbio/PyNAMod>).

Работа была поддержана Российским Научным Фондом, грант №21-74-00033

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ МОДИФИЦИРОВАННОГО ГЛИЦИНА В ВОДЕ

Жулидин П.А.¹, Филлин П.Д.¹, Пластун И.Л.¹, Яковлев Р.Ю.²

¹Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю.А.,
Россия, 410054, Саратов, ул. Политехническая 77, +79626270045, zhulidina@mail.ru

²ООО «СМАРТ ПОЛИМОРФ ТЕХНОЛОДЖИЗ», Россия, 121205, Москва, б-р Большой
42, +79060972727, yarules@yandex.ru

Исследовано влияние водного окружения на энергетические характеристики модифицированной формы глицина. Методом теории функционала плотности были рассчитаны следующие структуры: молекула глицина, димер глицина, 4 молекулы глицина и их комплексы с водой. Проведено сравнение рассчитанных ИК спектров с экспериментальными данными.

Разработка полиморфных модификаций – это один из способов повышения фармакологического эффекта препаратов. С помощью технологии криохимической перекристаллизации органических веществ, разработанной ООО «СМАРТ ПОЛИМОРФ ТЕХНОЛОДЖИЗ», была получена модифицированная форма глицина.

Исследования морфологии глицина выполнялись на электронном микроскопе TESCAN MIRA3. Спектры инфракрасного излучения регистрировались на ИК спектрометре Spectrum Two в диапазоне 4000-600 см⁻¹. Молекулярное моделирование и расчет спектров молекул и их комплексов проводились на основе метода теории функционала плотности [1], используя функционал B3LYP [1,2] и базисный набор 6-31G(d).

Было обнаружено, что при добавлении 4 молекул воды к димеру глицина наблюдается смещение характерных пиков высокочастотной области спектра, соответствующих валентным колебаниям связи О-Н гидроксильной группы глицина, что указывает на образование водородных связей. Анализ результатов взаимодействия глицина с молекулами воды указывает, что во время получения полиморфных модификаций, после этапа лиофильной сушки, в модифицированном глицине присутствуют молекулы воды. В свою очередь, наличие взаимодействия глицина с молекулами воды способствует более сильному водородному связыванию, что приводит к изменению физико-химических свойств глицина.

Литература

1. *Кои В.* Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности // *Успехи физических наук.* 2002. Т.172, No 3. С. 336–348.
2. *Понт Дж. А.* Квантово-химические модели // *Успехи физических наук.* 2002. Т. 172, No 3. С. 349–356.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ПЛАСТИЧНОСТИ ДИМЕРА ГИСТОНОВ H2A-H2B
МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ**

Князева А.С., Армеев Г.А., Шайтан А.К.

Московский Государственный университет им. М.В.Ломоносова, Биологический ф-т,
каф. Биоинженерии, Россия, Москва, 119991, Ленинские горы, д. 1, стр. 73, Тел.:
+7(985)0616306, E-mail: a.kniazeva@intbio.org

Хроматин является формой существования генома в клеточном ядре; известно, что генетические функции реализуются через его динамику, которая тонко регулируется рядом эпигенетических факторов. Элементарной единицей хроматина является нуклеосома, в составе которой два димера белков-гистонов H2A-H2B, тетрамер гистонов (H3-H4)₂ и два неполных витка двойной спирали ДНК. Большие результаты в понимании свойств хроматина с точки зрения динамики дает метод молекулярного моделирования, в частности молекулярной динамики (МД). В нашей работе мы провели расчеты траекторий полноатомной МД нуклеосомы и ее компонентов для исследования динамики димера гистонов H2A-H2B и выяснения роли димера в динамике ДНК на уровне нуклеосомы. Проводилось моделирование трех типов систем: свободного димера гистонов H2A-H2B, димера с прилегающим фрагментом ДНК и полной нуклеосоомной коровой частицы. Была выделена мода динамики димера гистонов в виде изгиба центральных спиралей (являющаяся внутренней характеристикой димера, т.к. воспроизводилась во всех моделируемых системах, но с разной амплитудой и средним состоянием изгиба). Оказалось, что при формировании стабильных электростатических контактов между димером и ДНК в составе нуклеосомы одновременно с изгибовой деформацией ДНК происходит смещение изгиба димера в сторону контактов. Благодаря появлению движений откручивания и скольжения ДНК в микросекундных траекториях МД нуклеосомы нам удалось наблюдать изменение изгиба димера в ходе этих процессов. Ранее известные экспериментальные данные подтверждают необходимость пластичности димера для стабильности и динамики нуклеосом. На основе полученных данных выдвинуто предположение о роли моды изгиба димера H2A-H2B в функционировании хроматина на уровне нуклеосом.

Работа поддержана грантом РНФ № 18-74-10006. Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова.

МЕХАНИЗМ РЕАКЦИИ ИНГИБИРОВАНИЯ ПЕНИЦИЛЛИН-СВЯЗЫВАЮЩИХ БЕЛКОВ ЦЕФТРИАКСОНОМ

Кривицкая А.В., Хренова М.Г.¹

ФИЦ Биотехнологии РАН, Москва, Ленинский проспект, 33, стр. 2

¹МГУ имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Ленинские Горы, 1

Бактериальная резистентность к β -лактамам антибиотикам неуклонно растет. В клинической практике известны случаи выявления резистентности RBP2 из штаммов возбудителя гонореи *Nisseria gonorrhoeae* к цефалоспориновым антибиотикам. Терапия гонореи на сегодняшний день заключается в ингибировании пенициллин-связывающих белков 2 (RBP2) антибиотиком цефтриаксоном.

За возникновение резистентности отвечают мутации в гене *penA*, кодирующем RBP2 *N. gonorrhoeae*. Резистентность растет в ряду RBP2 из дикого штамма FA19 и из мутантных 35/02 и H041 за счет появления новых мутаций. В 35/02 за рост резистентности ответственны три мутации, – I312M, V316T и G545S; в H041, – A311V, V316P, T483S. Мутации в 311, 312 и 316 остатках связаны с изменением положения каталитической пары Ser310 и Lys313. Мутация G545S изменяет положение субстрата в активном центре. Для RBP2 известны константы эффективности ферментов (k_2/K_s). Для FA19 из литературы известны индивидуальные параметры реакции: константа ацилирования (k_2) и константа связывания (K_s). Но для мутантных форм определить эти параметры экспериментально не представляется возможным, ввиду слабого сродства к антибиотику. Таким образом, на данный момент неизвестно, за счет чего именно достигается рост резистентности: снижения сродства RBP2 к антибиотику, снижения скорости ацилирования или изменений в обоих этих процессах.

В работе выполнено молекулярное моделирование механизма реакции ингибирования RBP2 из штаммов FA19, 35/02 и H041 антибиотиком цефтриаксоном. Показано, что изменение положения субстрата в активном центре фермента ввиду мутации G545S отражается в формировании оксианионного центра и, как следствие, высоте энергетического барьера нуклеофильной атаки. Проанализированы молекулярно-динамические траектории фермент-субстратных комплексов, в частности электронно-плотными дескрипторами идентифицированы структуры как реакционные и нереакционные. Показано, что доля реакционных структур падает с ростом резистентности. Просканирована поверхность свободной энергии Гиббса, построены энергетические профили каждой стадии реакции до образования комплекса ацил-фермента. Установлено, что механизм реакции в мутантных RBP2 и из штамма дикого типа отличаются. Разрыв связи C–N и отрыв фрагмента антибиотика происходит последовательно в белке из штамма дикого типа и одновременно в мутантных белках. Новое положение субстрата в каталитическом кармане также влечет за собой изменение сродства к антибиотику. Анализ конформационных изменений петли β_3 - β_4 , показал, что с ростом резистентности сродство RBP2 к цефтриаксоном понижается.

Работа выполнена при поддержке РФФ (проект 18-74-10056).

СТРУКТУРА И ДИНАМИКА БЕЛКА E ОБОЛОЧКИ КОРОНАВИРУСА SARS-CoV-2

Кузьмин А.С., Гушин И.Ю.

Московский физико-технический институт,
Россия, 141700, г. Долгопрудный, Институтский пер., 9.
kuzmin.as@phystech.edu

Белок E является одним из наиболее загадочных основных структурных белков оболочки коронавируса, поскольку известно, что он связан со сборкой вирионов, эффективным переносом вирионов по секреторному пути, а также со снижением стрессовой реакции клетки-хозяина. Белок SARS-CoV-2 E состоит из 75 аминокислотных остатков и его последовательность на 95 % и 36 % идентична с последовательностями SARS-CoV и MERS-CoV E, для которых получено большое количество данных. Так известно, что белки E могут подвергаться пальмитоилрованию и гликозилированию, хотя роль данных модификаций не до конца ясна. В инфицированных клетках белок E локализуется, в основном, в промежуточном компартменте ERGIC между эндоплазматическим ретикуломом и аппаратом Гольджи [1]. На данный момент нет известных доступных полноразмерных экспериментальных структур белка SARS-CoV-2 E, а также не изучено влияние пальмитоилрования и гликозилирования. Таким образом, целью данной работы было изучение структуры, динамики и влияния вышеупомянутых модификаций на белок E оболочки коронавируса SARS-CoV-2 в липидном окружении.

При помощи метода молекулярной динамики нами показано, что трансмембранный домен SARS-CoV-2 E имеет преимущественную ориентацию в мембране, при этом амфифильный домен, представленный двумя спиралями H2 и H3, располагается на поверхности мембраны. Ориентация спирали H2 сильно зависит от пальмитоилрования цистеинов Cys40, Cys43, Cys44, а ориентация H3 - от гликозилирования Asn66. Также было показано, что белок E создаёт и чувствует мембранную кривизну, преимущественно локализуясь С-концом в выгнутых областях мембраны [2]. Наконец, создана модель взаимодействия белка E с димерным белком клетки-хозяина высокого молекулярного веса.

Работа выполняется при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение 075-03-2022-107, проект FSMG-2021-0002).

Литература.

1. Ruch T. R., Machamer C. E. The coronavirus E protein: assembly and beyond // *Viruses* **том 4**, номер 3, год 2012. Стр. 363-382.
2. Kuzmin A. et al. Structure and dynamics of the SARS-CoV-2 envelope protein monomer // *Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics* **том 90**, номер 5, год 2022. Стр. 1102-1114.

ДИССОЦИАТИВНЫЙ И АССОЦИАТИВНЫЙ МЕХАНИЗМ РАЗРЫВА P-O СВЯЗИ НУКЛЕОЗИДФОСФАТОВ ФЕРМЕНТАМИ: ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТИПА РЕАКЦИИ МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Кулакова А.М.¹, Мулашкина Т.И.¹, Хренова М.Г.^{1,2}

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,

Химический факультет, кафедра физической химии,
Россия, 119991, г. Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3,
Тел.: (495)939-48-40, E-mail: kulakova@lcc.chem.msu.ru

²ФИЦ Биотехнологии РАН, Россия, 119071, Москва, Ленинский проспект, д. 33, стр. 2

Разрыв P-O связи в нуклеозидфосфатах играет ключевую роль во многих биологических процессах: от формирования костей и хранения генетической информации до обеспечения энергией других энергозатратных процессов. На протяжении нескольких десятилетий обсуждается вопрос определения типа механизма разрыва P-O связи. Существует два основных механизма: ассоциативный – одностадийный процесс синхронного присоединения нуклеофила и разрыва P-O связи фосфора с уходящей группой; и диссоциативный – многостадийный процесс, в котором разрыв P-O связи и нуклеофильная атака на фосфор происходят последовательно. Экспериментальные способы и надежные вычислительные методы определения типа механизма являются трудоемкой задачей. В данной работе предлагается способ определения типа механизма только на основе электронной плотности фермент-субстратного комплекса (ФСК).

Расчет электронной плотности ФСК проводился с помощью программы ChemShell, содержащей эффективный оптимизатор DL-FIND, и квантово-химического программного пакета TURBOMOLE, которые позволили описывать систему в рамках комбинированного метода квантовой механики / молекулярной механики (KM: PBE0-D3/6-31G**, MM: CHARMM). Дескрипторы электронной плотности рассчитывались в программном пакете Multiwfn.

В качестве объектов выбора подходящего дескриптора использовались различные фермент-субстратные комплексы, для которых известен механизм протекания разрыва P-O связи. Наиболее эффективным дескриптором показал себя лапласиан электронной плотности $\nabla^2\rho(r)$ вдоль линии разрываемой P-O связи. Отрицательные значения $\nabla^2\rho(r)$ описывают области концентрации электронной плотности, а положительные – области деконцентрации электронной плотности. Характеристикой протекания реакции по ассоциативному механизму служит плато с $\nabla^2\rho(r)<0$ вдоль линии разрываемой P-O связи, в случае протекания реакции по диссоциативному механизму лапласиан электронной плотности на плато имеет положительные значения. Подобная характеристика помогла разрешить дискуссию о гидролизе аденозинтрифосфата в активном центре миозина, который протекает по диссоциативному механизму.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова при финансовой поддержке РФН (проект № 19-73-20032).

СРАВНЕНИЕ ФОТОАКТИВИРУЕМЫХ АДЕНИЛАТЦИКЛАЗ ИЗ *BEGGIATO* И *OSCILLATORIA ACUMINATA*

Курьшкина М.С., Кулакова А.М., Немухин А.В.

Московский Государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва
mariia.kuryshkina@chemistry.msu.ru

Циклический аденозинмонофосфат (сАМР) - аллостерический эффектор протеинкиназ. Протеинкиназы, фосфорилируют эффекторные белки, изменяя их активность. Таким образом, контроль концентрации сАМР позволяет осуществлять настройку биологических процессов. Инструментом контроля концентрации может быть оптогенетическая система на основе фотоактивируемой аденилатциклазы (РАС), катализирующей реакцию превращения аденозинтрифосфата (АТФ) в сАМР. Особенно интересен РАС из *Beggiatoa* (bРАС) ввиду значительного повышения скорости ферментативной реакции при фотовозбуждении (в 300 раз), в то время как для других организмов, в частности для *Oscillatoria acuminata* (ОаРАС), скорость возрастает не более чем в 20 раз. Целью данной работы являлось сравнение ферментов bРАС и ОаРАС методами молекулярного моделирования.

В качестве основы для получения полноатомных моделей апо-форм ферментов bРАС и ОаРАС были выбраны структуры 5M2A и 4YUT из банка данных Protein Data Bank. bРАС и ОаРАС - гомодимеры, мономеры (А и В) которых состоят из фоторецепторного (BLUF) и каталитического (АС) доменов и перемычки. Для систем была проведена молекулярная динамика (МД) с использованием программного пакета NAMD. Все расчеты проводились в каноническом ансамбле NPT ($p = 1$ атм, $T = 298$ К). Для белков использовалось силовое поле CHARMM36, для FMN – CGenFF, молекул воды – TIP3P. Шаг интегрирования составил 1 фс, продолжительность траекторий - 200 нс. Далее МД траектории были проанализированы с использованием динамического сетевого анализа. bРАС и ОаРАС, представимые в качестве связанных графов, были разбиты на восемь кластеров по алгоритму Гирвана-Ньюмана.

Для bРАС два кластера соответствуют BLUF доменам, четыре - АС доменам и два - перемычке. Для определения возможного пути аллостерической регуляции фермента при фотовозбуждении важно выявить аминокислотные остатки, являющиеся “связующими” между кластерами BLUF и АС доменов и перемычки. Так, для bРАС: LEU75 (А)-GLU124 (А), CYS76(А) - ASN136(А), TYR7(В) - LEU75(В) - “связующие” аминокислотные остатки между кластерами BLUF доменов и перемычки, ARG130(А)-GLU194(А), LYS125(А) - MET264(В), PRO128(А) - LYS263(В) - между кластерами перемычки и АС доменов. Для ОаРАС разбиение на кластеры отличается: два кластера соответствуют BLUF доменам, пять - АС доменам и один - перемычке. В качестве “связующих” аминокислот ОаРАС можно выделить следующие: SER78(А)-ILE134(А), LEU74(В) - GLU123(В) - между кластерами BLUF доменов и перемычек, GLU170(А)-ARG144(В) - между кластерами перемычек и АС доменов.

Стоит отметить большую “связность” bРАС, что может быть причиной более высокого повышения активности по сравнению с другими ферментами при фотовозбуждении.

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КВАНТОВЫХ ВЫХОДОВ
АКТИВИРОВАННОЙ КУМАРИНАМИ С–314 и С–525
ХЕМИЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ПОД ДЕЙСТВИЕМ КОМПЛЕКСА ЦИТОХРОМА С
С КАРДИОЛИПИНОМ**

Левченко И.Н.¹, Владимиров Г.К.², Ромодин Л. А.³, Володяев И.В.⁴, Тимофеев В.И.⁵

¹Московский Государственный Университет, Физический факультет, Москва, Россия;

²Первый МГМУ им. И.М. Сеченова, Институт регенеративной медицины, Москва, Россия;

³Московская государственная академия ветеринарной медицины и биотехнологии имени им. К.И. Скрябина, Москва, Россия;

⁴Московский Государственный Университет, Биологический факультет, Москва, Россия;

⁵Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия
e-mail: imlevchenko@yandex.ru

Сравнивая квантовые выходы природных красителей С–314 и С–525, которые перехватывают возбуждение у триплетно-возбужденных кетонов, имеют значения квантовых выходов ХЛ на 3–4 порядка выше, чем сами возбужденные кетоны, получаем ХЛ, активированную кумаринами С–314 и С–525, которые показывают значение интенсивности в ~1500 раз выше, чем спонтанная ХЛ липидов, не отличается от нее по параметрам кривых и имеет константы скорости одного порядка. Точность сравнения выходов определяется присутствием кардиолипина для стабилизации рН, гашением Fe^{2+} и наличием физических активаторов С–314 и С–525. Среди факторов, которые могут повлиять значение квантовых выходов, выделяется недостаточное добавление пероксида водорода, избыточное количество азота (II), метанола, денатурация белка, а также изменение конформации ЦитС в комплексе ЦитС–КЛ.

В нашей работе на основании анализа параметров цитохрома С с кардиолипином, физических активаторов С–314 и С–525, а также пероксидазы хрена и люминола, проведены исследования сенсibiliзирующей способности природных красителей кумаринов С–314 и С–525, как физических активаторов с целью сравнения величины квантовых выходов С–314* и С–525*.

Комплекс цитохрома С с кардиолипином отличается от нативного цитохрома С по следующим свойствам: (1) обладает флуоресценцией тирозиновых и триптофановых остатков; (2) теряет поглощение в полосе $Core(405-410\text{ нм})$, отражающей существование связи $Fe(heme) \cdots S(Met80)$; (3) обладает пероксидазной активностью и катализирует образование липидных радикалов в мембране; (4) С–525 «классический» активатор ХЛ, так же как С–314, окисляется комплексом ЦитС–КЛ, при этом скорость этого окисления ограничивается лишь концентрацией самого цитохрома С, который тоже разрушается в составе комплекса ЦитС–КЛ под действием пероксида водорода.

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КВАНТОВЫХ ВЫХОДОВ
АКТИВИРОВАННОЙ КУМАРИНАМИ С–334 и С–525
ХЕМИЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ПОД ДЕЙСТВИЕМ КОМПЛЕКСА ЦИТОХРОМА С
С КАРДИОЛИПИНОМ**

Левченко И.Н.¹, Владимиров Г.К.², Володяев И.В.³, Тимофеев В.И.⁴

¹Московский Государственный Университет, Физический факультет,
г. Москва, Россия;

²Первый МГМУ им. И.М. Сеченова, Институт регенеративной медицины,
г. Москва, Россия;

³Московский Государственный Университет, Биологический факультет,
г. Москва, Россия;

⁴Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, г. Москва, Россия;

e-mail: imlevchenko@yandex.ru

Сравнивая математическое моделирование квантовых выходов природных красителей С–334 и С–525, которые перехватывают возбуждение у триплетно-возбужденных кетонов, имеют значения квантовых выходов ХЛ на 3–4 порядка выше, чем сами возбужденные кетоны, получаем ХЛ, активированную кумаринами С–334 и С–525, которая показывает значение интенсивности в ~1500 раз выше, чем спонтанная ХЛ липидов, при этом не отличается от нее по параметрам кинетических кривых и имеет константы скорости одного порядка. Точность сравнения математического моделирования квантовых выходов определяется присутствием кардиолипина для стабилизации рН, гашением Fe²⁺ и наличием физических активаторов С–334 и С–525. Среди факторов, которые искажают значение математического моделирования квантовых выходов, выделяется недостаточное добавление пероксида водорода, избыточное количество азота (II), метанола, денатурация белка, а также изменение конформации ЦитС в комплексе ЦитС–КЛ.

В работе на основании анализа параметров цитохрома С с кардиолипином, физических активаторов С–334 и С–525, пероксидазы хрена и люминола, проведены исследования сенсibiliзирующей способности кумаринов С–334 и С–525, как физических активаторов с целью сравнения величины квантовых выходов С–334* и С–525*.

Комплекс цитохрома С с кардиолипином отличается от нативного цитохрома С по следующим свойствам:(1)обладает флуоресценцией тирозиновых и триптофановых остатков;(2) теряет поглощение в полосе Soret(405–410 нм), отражающей существование связи Fe(heme)···S(Met80);(3)обладает пероксидазной активностью и, катализирует образование липидных радикалов в мембране;(4)С–525 «классический» физический активатор ХЛ, так же как С–334, окисляется комплексом ЦитС–КЛ, при этом скорость окисления ограничивается концентрацией цитохрома С, который разрушается в составе комплекса ЦитС–КЛ под действием пероксида водорода.

**ВЛИЯНИЕ ЗАМЕСТИТЕЛЕЙ УХОДЯЩЕЙ ГРУППЫ НА ГИДРОЛИЗ
ФОСФОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ В АКТИВНОМ ЦЕНТРЕ
ФОСФОТРИЭСТЕРАЗЫ ИЗ PSEUDOMONAS DIMINUTA**

Мулашкина Т.И., Кулакова А.М., Хренова М.Г.¹

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Химический
факультет, кафедра физической химии,
Россия, 119991, г. Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3
Тел.: (495)939-48-40, E-mail: arxipova.t.i@gmail.com

¹ ФИЦ Биотехнологии РАН, Россия, 119071, Москва, Ленинский проспект, д. 33, стр. 2

Исследования показывают, что использование фосфорорганических соединений в качестве пестицидов и антипиренов приводит к загрязнению воды и почвы. Одна из самых известных фосфотриэстераз, которая способна гидролизовать широкий спектр нейротоксичных фосфорорганических соединений – фосфотриэстераза из *Pseudomonas diminuta* (Pd-ПТЕ). Активный центр фосфотриэстеразы Pd-ПТЕ включает в себя два катиона d-металлов, которые взаимодействуют с мостиковым гидроксид-анионом, непосредственно участвующим в реакции гидролиза. Кроме того, катионы металлов координированы четырьмя остатками гистидина (His55, His57, His201, His230), аспаратом (Asp301), карбоксилированным остатком Lys169 и субстратом. В данной работе проводилось изучение механизма реакции гидролиза, а также анализ геометрических и электронно-плотностных критериев интермедиата реакции с целью оценки влияния заместителей уходящей группы на гидролиз различных органофосфатов в активном центре Pd-ПТЕ.

В данном исследовании использовались подходы молекулярной динамики с КМ/ММ потенциалами [КМ(PBE0-D3/6-31G**/LANL2DZ)/ММ(CHARMM)] и КМ/ММ-МД с добавлением смешивающего потенциала методом зонтичной выборки. Квантовая подсистема включала в себя активный центр фосфотриэстеразы и органофосфат. Процесс гидролиза описывался двумя стадиями: нуклеофильная атака гидроксида-аниона с образованием интермедиата и отрыв уходящей группы для получения комплекса фермент-продукт. Для описания данных стадий в качестве координаты реакции были выбраны расстояния от фосфора до кислорода гидроксид-аниона (P-O_H) и до кислорода уходящей группы (P-O_{гн}), соответственно.

На основании анализа геометрических и электронно-плотностных критериев интермедиата реакции, а также полученной энергии Гиббса реакции гидролиза можно сделать вывод о низкой каталитической эффективности Pd-ПТЕ для органофосфатов с уходящими группами с низкой нуклеофугностью.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова при финансовой поддержке РФФИ (проект № 21-33-70001).

АНАЛИЗ МЕХАНИЗМОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КРАСИТЕЛЯ ЦИАНИН 7 С АМИНОКИСЛОТАМИ В БЕЛКОВЫХ СТРУКТУРАХ

Наумов А.А., Пластун И.Л.

Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю.А., Россия,
410054, Саратов, ул. Политехническая, 77

В последние годы в современной химии набирают популярность исследования, связанные с углеродными наночастицами. Углеродные наночастицы используются в таких областях как биомедицина и фармакология. В данной работе рассматривается применение углеродных наночастиц в качестве средства доставки и удержания лекарственных и диагностических препаратов. В связи с чем проводится анализ биологической совместимости оксидированного графена с биомолекулами ДНК и возможность образования устойчивых молекулярных комплексов с лекарственными препаратами. В качестве лекарственного препарата использовался доксорубин.

Анализ межмолекулярного взаимодействия производился на основе структур и ИК-спектров молекул и их комплексов методами теории функционала плотности (ТФП) с функционалом B3LYP и базисным набором 6-31G (d).

В результате молекулярного моделирования было обнаружено, что оксидированный графен образует молекулярные комплексы с биомолекулами ДНК так и с лекарственным препаратом доксорубин. Анализ ИК-спектров показал, что водородные связи, образованные в большинстве молекулярных комплексов, характеризуются как связи средней силы, это связано с тем что величина частотного сдвига находится в диапазоне от 146 см⁻¹ до 217 см⁻¹, а энергия связи при этом не превышает 5 ккал/моль.

В результате расчетов обнаружено, что между оксидированным графеном, биомолекулами ДНК и доксорубином могут происходить значительные супрамолекулярные взаимодействия, которые характеризуются наличием большого количества слабых и средних водородных связей, обеспечивающих высокую стабильность супрамолекулярных ансамблей.

Полученные результаты доказывают, что оксидированный графен имеет достаточно высокую степень биосовместимости с биомолекулами ДНК и лекарственными препаратами.

МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКЦИЙ ПРИСОЕДИНЕНИЯ КИСЛОРОДА ВО ФЛАВИН-ЗАВИСИМЫХ МОНООКСИГЕНАЗАХ МЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

Одинцов К.В., Домрачева Т.М., Григоренко Б.Л.

Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова, Россия, 119234,
Москва, ул. Колмогорова, 1, стр.3, +7(495)939-15-97,
konstantin.odintsov@chemistry.msu.ru, t.domracheva@lcc.chem.msu.ru

Флавиновые кофакторы (производные витамина B2) широко представлены в разнообразных ферментах и играют важную роль в биохимии. Их каталитическая активность обусловлена способностью принимать или отдавать два электрона на различные субстраты [1]. Особое место в иерархии флавино-содержащих ферментов занимают монооксигеназы, в которых флавиновый кофактор образует ковалентную связь с одним из атомов молекулярного кислорода.

Считалось, что механизм образования ковалентной связи флавин-кислород одинаков для всех монооксигеназ [2]. Однако, был обнаружен ряд монооксигеназ, которые, судя по всему, не подчиняются классическому механизму образования связи C_{4a}-O, и для них был предложен новый механизм, приводящий к N₅-оксиду флавина [3,4]. В связи с этим возникает задача установления доминирующего механизма в обнаруженных атипичных монооксигеназах, а также в еще не открытых.

Для решения поставленной задачи была рассмотрена система люмифлавин-кислород в газовой фазе, исследование которой позволяет использовать ее в качестве референса при установлении механизма в конкретных белках. В результате расчетов по ТФП (U-PBE0-D3, 6-31+G**) были проведены сравнения между двумя путями реакции. Кроме того, были рассмотрены реакции образования C_{4a}-аддукта в N₅-механизме и перегруппировка двух аддуктов друг в друга. Расчеты показали, что классический механизм, объединенный одной седловой точкой 1-го порядка, лежит высоко по энергии. Однако, связанный перенос протона и электрона, предполагавшийся для N₅-механизма, может приводить к обоим аддуктам, причем C_{4a}-продукт выглядит более перспективным в силу большей стабильности и меньшего барьера образования. Оказалось, что перегруппировка аддуктов друг в друга маловероятна из-за большого энергетического барьера протекания реакции в обоих направлениях.

Литература

1. *Fagan R.L., Palfey B.A.* Flavin-dependent enzymes. – Amsterdam: Elsevier, 2010. 37–113.
2. *Romero E. et. al.* Same Substrate, Many Reactions: Oxygen Activation in Flavoenzymes // *Chem. Rev.* **Vol. 118**, No. 4, 2018. Pp. 1742-1769.
3. *Teufel R. et. al.* Biochemical Establishment and Characterization of EncM's Flavin-N5-oxide Cofactor // *J. Am. Chem. Soc.* **Vol. 137**, No. 25, 2015. Pp. 8078-8085.
4. *Teufel R. et. al.* Enzymatic control of dioxygen binding and functionalization of the flavin cofactor // *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **Vol. 115**, No. 19, 2018. Pp. 4909-4919.

КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОТОРЕАКЦИИ ГИДРАТАЦИИ ХРОМОФОРА ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО БЕЛКА DREIKLANG

Поляков И.В., Григоренко Б.Л., Немухин А.В.

Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Россия, 119991,
Москва, Ленинские горы, дом 1, строение 3

Одним из перспективных вариантов флуоресцентных и фотопереключаемых белковых маркеров является Dreiklang [1], который флуоресцирует зелёным светом (максимум 515нм), выключается интенсивным облучением синим светом (максимум 405нм), и может быть реактивирован термически или с помощью ультрафиолетового облучения (максимум 365нм). Предполагается [1], что такое фотофизическое поведение обусловлено присоединением и отщеплением молекулы воды от хромофора этого флуоресцентного белка, что было подтверждено также и теоретическими работами, и показано, что важнейшим этапом фотопревращений является перенос электрона с ближайшего остатка Tyr203 на хромофор [2].

В рамках настоящей работы мы применили комбинированный метод квантовой и молекулярной механики (КМ/ММ) для описания молекулярной системы, моделирующей белок Dreiklang, а также ряд кластерных квантовых моделей. В качестве стартовых координат тяжёлых атомов модельной системы была использована структура PDB ID 3ST2. КМ/ММ расчёты проводились с помощью программы NWChem, используя приближение M06-L/6-31G**//AMBER99, квантовая подсистема включала в себя 155 атомов. Молекулярные кластеры рассчитывались в программе Firefly, используя методы CASSCF(16/12)/6-31G* для поиска стационарных точек и ХМСQDPT2//CASSCF(16/12)/6-31G* для расчёта энергий вертикальных переходов.

Нами была установлена полная схема фотопревращений и структура интермедиата X, имеющего максимум полосы поглощений 450нм (эксп.)/ 444 нм (расчёт). При поглощении синего света в состоянии S_0 и попадании системы в состояние с переносом заряда (CT) с боковой цепи остатка Tyr203 на хромофор, происходит перенос протонов с Tyr203 через молекулу воды w на атом N2 хромофора. В результате этого через коническое пересечение поверхностей состояний CT/ S_0 система релаксирует в основное состояние в район интермедиата X, который, по сути, представляет собой структуру катионного хромофора и аниона Tyr203, который и служит далее хорошим акцептором протона, в результате чего происходит присоединение гидроксила к атому C1 хромофора с низким барьером.

Работа была выполнена в рамках проекта РФФ №22-13-00012 с использованием оборудования ЦКП НИВЦ МГУ имени М.В. Ломоносова и ЦКП МСЦ РАН.

Литература

1. *Brakemann T. et al.* A Reversibly Photoswitchable GFP-Like Protein with Fluorescence Excitation Decoupled from Switching // *Nat. Biotechnol.* **29**, 2011. 942-947.
2. *Tirthendu S. et al.* Interplay between Locally Excited and Charge Transfer States Governs the Photoswitching Mechanism in the Fluorescent Protein Dreiklang // *J. Phys. Chem.* **125**, 2021, 757-770.

**КОРРЕЛЯЦИЯ ПРОТИВОВИРУСНОЙ АКТИВНОСТИ
1,2,4-ТРИАЗОЛСОДЕРЖАЩИХ ЛИГАНДОВ С ИХ СВЯЗЫВАНИЕМ В
АЛЛОСТЕРИЧЕСКИХ ЦЕНТРАХ ACE2, ВЫЯВЛЕННАЯ МЕТОДОМ
МОЛЕКУЛЯРНОГО ДОКИНГА**

Пьянкина Е.А.*, Олейник Е.С., Гребенкина Л.Е., Матвеев А.В.

МИРЭА - Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий
им. М.В. Ломоносова, кафедра биотехнологии и промышленной фармации.
Россия, 119571, Москва, пр. Вернадского, д.86, *pyankina.inbio2017@gmail.com.

Пандемия новой коронавирусной инфекции (COVID-19) обусловила значительный интерес исследователей к поиску новых молекул, обладающих противовирусной активностью. Возбудитель инфекции, вирус SARS-CoV-2, проникает в клетки хозяина в ходе взаимодействия вирусного гликопротеина S с человеческим мембраносвязанным рецептором ACE2 [1]. Следовательно, предотвратить проникновение вируса в клетки возможно, нарушив это взаимодействие, например, посредством малых молекул. Поскольку S-белок характеризуется высокой вариабельностью у разных штаммов, рецептор ACE2 является более привлекательной мишенью для таких агентов. Его структура включает в себя 3 аллостерических центра [2], взаимодействие с которыми может изменять конформацию фермента, что в перспективе способно препятствовать проникновению вируса в клетки [3].

Для проверки этого предположения на основе структуры рецептора (PDB ID: 1R4L) была создана модель связывания малых молекул, в качестве которых были выбраны производные 1,2,4-триазол-3-карбоновой кислоты – аналоги гетероциклического основания известного противовирусного препарата – рибавирина. Исследование *in silico* продемонстрировало преимущественное связывание исследуемых лигандов во 2 и 3 аллостерических сайтах рецептора. Полученные результаты были сопоставлены с результатами испытаний этих соединений *in vitro*, проведённых НИЦЭМ им. Н.Ф. Гамалеи. Анализ показал удовлетворительную корреляцию ингибирования цитопатического эффекта вируса *in vitro* с установленным *in silico* преимущественным связыванием соединений в аллостерических центрах ACE2.

Литература

1. Datta P.K., Liu F., et al. SARS-CoV-2 pandemic and research gaps: Understanding SARS-CoV-2 interaction with the ACE2 receptor and implications for therapy // *Theranostics*, Vol. 10, №16, 2020, P. 7448-7464.
2. Dutta K. Allosteric Site of ACE-2 as a Drug Target for COVID-19 // *ACS Pharmacol Transl Sci.*, Vol. 5, № 3, 2022, P. 179-182.
3. Hochuli J.E., Jain S., et al. Allosteric Binders of ACE2 Are Promising Anti-SARS-CoV-2 Agents // *ACS Pharmacol Transl Sci.*, Vol. 5, № 7, 2022, P. 468-478.

МОЛЕКУЛЯРНЫЙ МЕХАНИЗМ ПРЕВРАЩЕНИЯ АДЕНОЗИНТРИФОСФАТА (АТФ) В ЦИКЛИЧЕСКИЙ АДЕНОЗИНМОНОФОСФАТ (сАМР) В АКТИВНОМ ЦЕНТРЕ АДЕНИЛАТЦИКЛАЗЫ

Степанюк Р.А., Мулашкина Т.И., Хренова М.Г.¹

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Химический факультет, кафедра физической химии,

Россия, 119991, г. Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3

Тел.: (495)939-48-40, E-mail: RomanStepanyuk@outlook.com

¹ ФИЦ Биотехнологии РАН, Россия, 119071, Москва, Ленинский проспект, д. 33, стр. 2

Аденилатциклаза (АС) играет ключевую регуляторную роль практически во всех клетках. Известно, что продукт ферментативной реакции, катализируемой АС, циклический аденозинмонофосфат (сАМР), играет решающую роль в различных фундаментальных физиологических функциях клетки, начиная от роста и дифференцировки клеток, заканчивая регуляцией транскрипции и апоптозом. В аденилатциклазе млекопитающих (mAC) каталитического ядро образуется за счет связывания друг с другом каталитических доменов (C1a и C2a). Образованный таким образом активный сайт включает в себя аминокислотные остатки, расположенные в непосредственной близости к АТФ (Asp396, Ile397, Asp440, Cys441, Arg484, Ser1028, Arg1029, Lys1065) и два катиона Mg^{2+} или Mn^{2+} .

В данной работе для фермент-субстратного комплекса mAC-АТФ проведены расчеты методом молекулярной динамики с КМ/ММ потенциалами. Методом квантовой механики описывались активный центр mAC и 12 молекул воды. В расчетах квантовой части использовали неограниченный метод теории функционала плотности: функционал PBE0 с дисперсионной поправкой D3 и базис 6-31G**. Для описания молекулярно-механической части использовалось силовое поле CHARMM. Для изучения механизма реакции превращения аденозинтрифосфата (АТФ) в циклический аденозинмонофосфат (сАМР) в активном центре аденилатциклазы mAC использовались подходы молекулярной динамики с КМ/ММ потенциалами (КМ/ММ-МД) с добавлением смещающего потенциала методом umbrella sampling. Данные, полученные в ходе КМ/ММ-МД umbrella sampling моделирования обрабатывали методами анализа взвешенных гистограмм (WHAM) и зонтичного интегрирования (UI).

Таким образом, на основании результатов КМ/ММ-МД проведен анализ геометрических характеристик фермент-субстратного комплекса и обнаружены возможные пути переноса протона с АТФ. На основании результатов КМ/ММ-МД umbrella sampling моделирования получен профиль энергии Гиббса и установлен механизм реакции превращения АТФ в сАМР в активном центре mAC.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТАКСОЛА НА КОНФОРМАЦИОННУЮ ПОДВИЖНОСТЬ БЕЛКА ТУБУЛИНА МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Федоров В.А.^{1,2}, Холина Е.Г.², Гудимчук Н.Б.^{1,2}, Коваленко И.Б.²

¹Центр теоретических проблем физико-химической фармакологии РАН, Россия, 119334, Москва, ул. Косыгина, 4

²Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Россия, 119991, Москва, Ленинские горы 1, стр. 12, +7(495)9390289, xbgth@yandex.ru

Микротрубочки – белковые полимеры, как правило, состоящие из 13 протофиламентов белка тубулина, необходимые для транспорта, подвижности, деления и поддержания структуры клеток. Микротрубочки обладают свойством динамической нестабильности, т.е. способны самопроизвольно переключаться между фазами полимеризации и деполимеризации. На переход между этими фазами влияют разные факторы, такие как гидролиз ГТФ в составе β -тубулина, или некоторые препараты химиотерапии рака (таксол, винбластин, и др.). Последние оказывают влияние на динамику сборки микротрубочек и останавливают процесс клеточного деления в профазе-прометафазе. Молекулярные механизмы действия таких препаратов могут быть изучены *in silico* методом молекулярной динамики.

С целью установить каким образом отличаются механические свойства протофиламентов тубулина, связанного с ГТФ, ГДФ и ГДФ+таксол, мы изучили конформационную подвижность ГТФ-, ГДФ тубулинов и ГДФ тубулинов с таксолом *in silico* методом молекулярной динамики. Важным усовершенствованием по сравнению с предыдущими расчетами динамики протофиламентов ГТФ- и ГДФ тубулина было использование новых данных работы [1], в которой впервые были определены структуры тубулинов, связанных с ГДФ и негидролизуемым аналогом ГТФ в составе 13-протофиламентных микротрубочек.

С использованием разработанной нами методики анализа конформации протофиламентов тубулина [2], основанной на вычислении модифицированных углов Эйлера, было показано, что добавление таксола приводит к изменениям величины изгибной жесткости и направления изгиба как на внутри-, так и на междимерном интерфейсах.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова при поддержке грантом РНФ, проект № 22-74-00119.

Литература

1. Manka S.W., Moores C.A. The role of tubulin-tubulin lattice contacts in the mechanism of microtubule dynamic instability // *Nat Struct Mol Biol* **25**, 7, 2018. 607-615.
2. Fedorov V.A., et al. Mechanical properties of tubulin intra- and inter-dimer interfaces and their implications for microtubule dynamic instability // *PLoS Computational Biology* **15**, 8, 2019. e1007327

РОЛЬ ГИДРОФОБНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В ПРОЦЕССЕ ФОРМИРОВАНИЯ КОМПЛЕКСА БЕЛКОВ ПЛАСТОЦИАНИНА И ЦИТОХРОМА С6 С ЦИТОХРОМОМ F В ЦИАНОБАКТЕРИЯХ И ЗЕЛЕННЫХ ВОДОРОСЛЯХ

Федоров В.А., Хрущев С.С., Коваленко И.Б.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, биологический ф-т, кафедра биофизики, Россия, 119991, Москва, Ленинские горы 1, стр. 12, +7(495)9390289, xbgth@yandex.ru

Взаимодействия между белками лежат в основе большинства биологических процессов. Образование белкового комплекса это сложный многостадийный процесс требующий учета множества факторов, таких как дальнедействующие электростатические взаимодействия между поверхностями белков, геометрическая и химическая комплементарность областей связывания, молекулярная подвижность в белок-белковом интерфейсе, гидрофобные взаимодействия. Ранее нами был разработан оригинальный подход, позволяющий, благодаря совместному использованию методов броуновской и молекулярной динамики, предсказать структуру образовавшегося комплекса и молекулярные механизмы, приведшие к его образованию. В данном подходе метод броуновской динамики используется для моделирования образования двумя белками столкновительного комплекса с учетом процессов диффузии и электростатических взаимодействий, а молекулярная динамика используется для моделирования трансформации предварительного комплекса в финальный с учетом подвижности атомов, конформационных изменений и молекул растворителя.

Для выявления принципиальных физико-химических взаимодействий, лежащих в основе функционирования исследуемых белков, нами были рассчитаны матрицы контактов аминокислот одного белка с аминокислотами другого белка и их изменение во времени. Данный подход позволил нам выявить роль гидрофобных взаимодействий в образовании комплекса белков пластоцианина и цитохрома с6 с цитохромом f в цианобактериях и зеленых водорослях и показать, что их роль в формировании комплекса меняется вместе с эволюционными изменениями в белковых последовательностях.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова при поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых - кандидатов наук МК-2931.2022.1.4.

**ИДЕНТИФИКАЦИЯ САЙТОВ СВЯЗЫВАНИЯ КАТИОННЫХ
ФОТОСЕНСИБИЛИЗАТОРОВ НА ВИРУСНОЙ ОБОЛОЧКЕ МЕТОДОМ
БРОУНОВСКОЙ ДИНАМИКИ**

**Холина Е.Г., Федоров В.А., Хрущев С.С., Коваленко И.Б.¹, Страховская М.Г.,
Рубин А.Б.**

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, 119992, г. Москва,
Ленинские горы, 1 стр. 24

¹Астраханский государственный университет, 414056, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а

Фотосенсибилизаторы, участвующие в фотодинамических реакциях, могут вызывать повреждение оболочечных вирусов, в связи с чем считаются перспективными кандидатами для инактивации коронавирусов. Исследование точных молекулярных механизмов, лежащих в основе вирулицидной активности биоцидов, необходимо для их рационального применения в медицине и создания новых эффективных веществ.

Данная работа посвящена идентификации сайтов связывания катионного фотосенсибилизатора октакис(хोलинил) фталоцианина цинка (ФЦ) как на отдельных S белках трех коронавирусов SARS-CoV, MERS-CoV, SARS-CoV-2, так и на целой оболочке вириона SARS-CoV-2. Для рассмотренных моделей построено и проанализировано поверхностное распределение электростатического потенциала с помощью программного обеспечения ProKSim. Для каждой модели проведено несколько тысяч независимых расчетов броуновской динамики молекулы ФЦ относительно неподвижной модели белка/вириона. На основе анализа полученных электростатически выгодных диффузионно-столкновительных комплексов продемонстрировано существование общей для трех коронавирусов выраженной области с отрицательным электростатическим потенциалом на соединении «головы» и «ноги», притягивающей молекулу ФЦ. В результате анализа ансамбля полученных структур ФЦ в комплексе с вирионом показано, что в 43 % случаев ФЦ связывается с мембранными белками вирусной оболочки SARS-CoV-2, причем в большинстве случаев связывание происходит с S-белками (80 %). В остальных случаях молекула ФЦ связывается с отрицательно заряженными липидами. Результаты, полученные с применением методов компьютерного моделирования, согласуются с наблюдаемой в экспериментальных исследованиях потерей S белков и разрушением мембраны в результате фотодинамической инактивации коронавируса.

Литература.

1. Fedorov V., Kholina E., Khrushev S., Kovalenko I., Rubin A., Strakhovskaya M. Electrostatic Map of the SARS-CoV-2 Virion Specifies Binding Sites of the Antiviral Cationic Photosensitizer // Int. J. Mol. Sci. V. 23, №13, 2021. P. 7304.

АНАЛИЗ ЛОКАЛЬНОЙ ПОДВИЖНОСТИ ПОЛИИМИДОВ

Худобин Р.В., Мазо М.А., Балабаев Н.К.¹

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва, rvhudobin@gmail.com

¹Институт математических проблем биологии РАН - филиал Федерального государственного учреждения "Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук, Пущино Московской обл. balabaevnk@gmail.com

Ароматические полиимиды (АПИ) являются одним из наиболее перспективных газоразделительных материалов из-за их высокой газовой селективности, отличной термостойкости, высокой химической стойкости и хороших механических свойств. В связи с этим в последние годы идет активный поиск таких новых модификаций АПИ, которые сохраняют их замечательные физико-химические свойства и сочетают хорошую селективность с высокой проницаемостью. В рамках таких исследований недавно были синтезированы и охарактеризованы четыре новых полиэфиримида [1] на основе диамина FMTBDA и диангидридов BPADA, 6FDA, OPDA, BTDA.

Для каждого из этих полимеров было проведено молекулярно-динамическое моделирование (МДМ): серия из 32 образцов, около 50000 атомов в течение 2.5 нс в NPT ансамбле. По результатам МДМ анализировалась локальная структура мономеров и динамика углов внутреннего вращения в основной цепи, которая оценивалась по амплитуде флуктуаций угла за все время модулирования. Полученные результаты позволяют утверждать, что влияние внутримолекулярной подвижности различных диангидридов (BPADA>ODPA>6FDA>BTDA) противоположно влиянию величины доступного свободного объема [2] (BTDA~6FDA>ODPA>BPADA). Сравнение с экспериментом позволило оценить вклад обоих факторов в коэффициент диффузии различных пенетрантов.

Литература

1. N. Belov et al. New poly(ether imide)s with pendant di-tert-butyl groups// *Separation and Purification Technology* vol 216 (2019), pp 183-194.
2. M. Mazo et al. Structure and free volume of fluorine-containing polyetherimides // *Polymer* vol 258 (2022), 125318.

ИЗУЧЕНИЕ ПОСТТРАНЛЯЦИОННЫХ МОДИФИКАЦИЙ ГИСТОНОВ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Шаряфетдинова А.С., Армеев Г.А., Князева А.С.

Группа интегративной биологии на кафедре Биоинженерии Биологического факультета
МГУ, info@intbio.org, Tel/Fax: +7 495 939 57 38

Генетическая информация эукариот закодирована в молекуле ДНК, которая упакована в элементарные единицы – нуклеосомы. Нуклеосомы, помимо самой ДНК, состоят из четырех типов гистонов (H2A, H2B, H3, H4), каждый из которых представлен дважды и имеет концевые структурно неупорядоченные последовательности, именуемые гистоновыми хвостами. Гистоны с их хвостами играют ключевую роль в поддержании стабильности нуклеосомы, экспрессии генов, привлечении транскрипционных факторов и других процессах. Разнообразии функциональной активности увеличивается за счет наличия посттрансляционных модификаций (ПТМ), которые опосредуют множество путей регуляции хроматина, например, это одна из самых распространенных причин «откручиваний» гистоновых хвостов от нуклеосомы (что предоставляет возможность другим белкам взаимодействовать с ДНК и гистонами).

Для изучения нуклеосом с ПТМ применяют методы молекулярного моделирования, так как с его помощью можно наблюдать процесс в динамике на временах порядка фемто-микросекунд с атомистической точностью, из чего можно извлечь ценную для анализа информацию. На данный момент параметризация ПТМ в силовых полях – технически трудно реализуемая задача, поэтому для исследования влияния ПТМ на динамику нуклеосом мы использовали два подхода: 1) оценка изменения энергии нуклеосомы без молекулярной динамики (МД) - с использованием программы FoldX; 2) расчеты МД систем с мимиками заряд-экранирующих ПТМ (заменами положительно заряженных аминокислотных остатков на аланин). В первом подходе мы перебрали все возможные положения фосфорилирований в нуклеосоме, что позволило выделить ПТМ, увеличивающие и уменьшающие стабильность нуклеосомы, что может быть в дальнейшем использовано для экспериментальных исследований и выявления новых сайтов ПТМ. С использованием второго подхода мы показали, что введение мутаций - замены лизина и аргинина на аланин, уменьшает силу взаимодействия хвостов с ДНК, что приводит к их «откручиванию».

ПРОБЛЕМЫ СОВРЕМЕННОЙ БИМЕДИЦИНСКОЙ ФИЗИКИ, МОДЕЛИРОВАНИЯ И ПУТИ ИХ РЕШЕНИЯ

Широсов В.Г.

Научно-исследовательский центр "ИКАР",
426068, г. Ижевск, ул. Архитектора П.П. Берша, 29.
Тел.: (912)003-71-71, E-mail: ikar@udm.ru

К сожалению, ученые, не решив нелинейные ОДУ, даже для одной и двух частиц с учетом их спинов и магнитных моментов, перешли к дальнейшему описанию окружающего нас нелинейного мира на основе феноменологических уравнений.

Прошли столетия прежде, чем стало ясно [1-5], что линеаризация и цифровизация уравнений и учет слагаемых только кулоновских $\sim 1/r$ и центробежных $\sim 1/r^2$, без учета $\sim 1/r^3$ (типа диполь – дипольных, спиновых) и без аналогового моделирования принципиально ошибочны для современной биомедицинской физики живых и неживых систем. Современная "линейная" физика не справилась с описанием нелинейного мира. Ученые, при решении и выводе уравнений для объяснения возникших проблем, с водой выплеснули и "ребенка" (классическую нелинейную механику и электродинамику).

В 1988 году был разработан аналитический метод на основе принципа наименьшего действия для удержания и управления динамикой тел и частиц в неоднородных полях с учетом их зарядов, спинов и дипольных моментов вне и в зонах нелинейного параметрического резонанса [1, 3]. Метод стал "пинцетом и скальпелем" для резонансного удержания тел и частиц в атомарных ловушках, и для новых технологий [3, 5]. Учёт спиновых взаимодействий $\sim 1/r^3$ (Спиновых Изомеров – СИ) [1-5] привёл к пониманию процессов, происходящих в водных растворах, в неживых и неживых системах и к селективному управлению их динамикой.

Проведенные эксперименты и математическое моделирование (цифровое, аналоговое, символьное) на АЦВК-Русалка подтвердили возможность селективного управления динамикой частиц и биохимическими реакциями в условиях резонанса, и пришло осознание роли Спиновых Изомеров для неравновесных систем [2-5].

Литература.

1. *Широсов В.Г.* Об устойчивости неустойчивых состояний, бифуркации, хаос нелинейных динамических систем. - ДАН СССР, т. 314, № 2, [1990](#). Стр. 316-320.
2. *Широсов В.Г.* Задача двух магнитных диполей с учетом уравнений движений их спинов. - Изв. вузов, Физика, т. 28, № 7, [1985](#). Стр. 74-78.
3. *Широсов В.Г.* Резонанс в физике, химии и биологии. - Ижевск. Издательский дом "Удмуртский университет", [2000](#). 92 стр.
4. Сборник трудов 5-й Всероссийской конференции "Физика водных растворов". – Москва, РАН, [2022](#). 100 стр.
5. *Shironosov V.G.* Forceps and scalpel for nano- and biotechnologies. – "IIS-RT", sb.44-2, [2008](#), sb.75-1, [2020](#). Application for Invention №2021112973 from 04.20.2020.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА АНАЛИЗА НОРМАЛЬНЫХ МОД ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ МЕХАНИЗМОВ ДЕЙСТВИЯ ИНГИБИТОРОВ ДИНАМИКИ МИКРОТРУБОЧЕК

Шубина А.И.², Холлина Е.Г.², Коваленко И.Б.², Гудимчук Н.Б.^{1,2}, Федоров В.А.^{1,2}

¹Центр теоретических проблем физико-химической фармакологии РАН, Россия,
109029, Москва, ул. Средняя Калитниковская, д. 30

²Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Россия, 119991,
Москва, Ленинские горы 1, стр. 12, +7(495)9390289, xbgth@yandex.ru

Работа нацелена на изучение действия ингибиторов динамики микротрубочек – таксола, винбластина и колхицина. Каждое из этих веществ имеет свой конкретный механизм ингибирования пролиферации клеток. Считается, что колхицин "вклинивается" в тубулины между двумя мономерами, тем самым затрудняя встраивание димеров тубулина в решетку микротрубочки и таким образом препятствуя ее сборке. Винбластин предположительно действует в некоторой степени аналогично, однако, связывается между соседними димерами тубулина внутри протофиламентов. Таксол же связывается с внутренней стороны микротрубочки, и, вероятно, аллостерически влияет на конформацию тубулина, ингибируя так называемые «катастрофы» – переключения микротрубочек от фазы роста к фазе укорочения.

Несмотря на вышеозвученные гипотезы о механизмах работы трех основных классов тубулиновых ингибиторов, их конкретные эффекты на механику и энергетику тубулинов остаются плохо изученными. Мы используем ранее разработанные нами подходы [1] для изучения подвижности протофиламентов тубулина в комплексах с изучаемыми веществами на основе методов анализа нормальных мод (NMA), гауссовой сетевой модели (GNM), анизотропной сетевой модели (ANM), принципиальных компонент (PCA). Выделяются наиболее вероятные направления изгибов протофиламентов и оценивается их изгибная жесткость. Этот анализ позволяет установить взаимосвязь между конформационными изменениями тубулинов при связывании с низкомолекулярными лигандами и механическими характеристиками тубулиновых протофиламентов, влияющими на стабильность состоящих из них микротрубочек.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова при поддержке грантом РФФИ, проект № 22-74-00119.

Литература

1. Fedorov V. A., et al. Mechanical properties of tubulin intra- and inter-dimer interfaces and their implications for microtubule dynamic instability // *PLoS Computational Biology* **15**, 8, 2019. e1007327

THE EFFECT OF CHOLESTEROL ON “MOSAIC” NATURE OF THE LIPID BILAYER SURFACE

Kostiuk K., Efremov R.

Shemyakin and Ovchinnikov Institute of Bioorganic Chemistry,
Ulitsa Miklukho-Maklaya 16/10, Moscow, 117997, Russia
+7 (495) 335-01-00, E-mail: office@ibch.ru

The lipid bilayer structure is varied, and the distribution of hydrophobic properties on its surface is locally heterogeneous. Depending on lipids composing the bilayer, “mosaic” nature of this heterogeneity may vary, affecting protein-lipid interactions with the bilayer surface [1].

Cholesterol affects ordering of phospholipids and is an important participant of the protein's local lipid environment, which modifies structure and function of proteins, in particular, receptor tyrosine kinases (RTKs). However, little is known about the cholesterol's impact on hydrophobic properties of the lipid bilayer surface. Understanding of the phenomena underlying these processes will open up new perspectives in the study of lipid-protein interactions. RTKs often become therapeutic targets for cancer and other significant pathologies, therefore the study of these interactions is an urgent problem.

Using molecular dynamics simulations of lipid bilayers with varied hydrophilic “head” polarity, acyl chain length and saturation degree of phospholipids containing different amounts of cholesterol, we carried out a comparative analysis of the lipids geometric packing and the acyl chains order parameters in lipid bilayers with the experimental data from the literature in order to validate the results obtained. Based on the results of the analysis of hydrogen bonds, lipid density and geometric parameters of the simulated systems, we characterized the vertical and lateral distributions of cholesterol in bilayers of various compositions, which are consistent with the results of *in vitro* and *in silico* experiments from literature sources.

In this paper we show that adding cholesterol to lipid bilayers leads to a shift in the hydrophobicity of the bilayer surface towards neutral values. These changes are the result of reorganizing of phospholipids and most likely are not directly associated with cholesterol atoms present on the surface. The analysis of hydrophobic properties patterns of studied lipid bilayer surfaces shows that higher concentration of cholesterol may lead to the appearance of hydrophobic regions of higher area while areas of hydrophilic regions descend.

The results obtained will shed light on the mechanisms of modulating the activity of transmembrane proteins (in particular, RTKs) by influencing their membrane environment and the role of cholesterol in this process.

References.

1. Polyansky A.A., Volynsky P.E., Arseniev A.S., Efremov R.G. Adaptation of a membrane-active peptide to heterogeneous environment. II. The role of mosaic nature of the membrane surface // *Journal of Physical Chemistry B* Vol. 113, No. 4, 2009. Pp. 1120-1126.

**MODELING OF THERMODYNAMIC PARAMETERS OF CHEMILUMINESCENCE
ACTIVATED BY COUMARIN C-525 UNDER THE ACTION OF CYTOCHROME C
COMPLEX WITH CARDIOLIPIN**

Levchenko I.N.¹, Vladimirov G.K.², Romadin L. A.³, Volodyaev I.V.⁴, Timofeev V.I.⁵

¹ Russian National Research Medical University named after N. I. Pirogov, Moscow, Russia;

²I.M. Sechenov First Moscow State Medical University, Institute of Regenerative Medicine,
Moscow, Russia;

³Moscow State Academy of Veterinary Medicine and Biotechnology named after K.I.
Scriabin, Moscow, Russia;

⁴Moscow State University, Faculty of Biology, Moscow, Russia;

⁵A.V. Shubnikov Institute of Crystallography of the Russian Academy of Sciences
"Crystallography and Photonics", Moscow, Russia;

e-mail: imlevchenko@yandex.ru

This work is devoted to the mathematical modeling of the free energy, entropy and enthalpy of the chemiluminescence activated by coumarin C-525 under the action of the cytochrome C complex with cardiolipin. The presentation of the optimal process model allows the use of CL methods for the analysis of thermodynamic characteristics, which can be used as the main one that determines the state of the system.

Physical activators enhance the glow by 2-3 orders of magnitude without affecting the chemical processes taking place in the system. Mathematical modeling of the entropy of the natural dye C-525, which intercepts the excitation of triplet-excited ketones, while having values of CL 3-4 orders of magnitude higher than the excited ketones themselves, we obtain CL activated by coumarin C-525, which shows an intensity value ~1500 times higher than spontaneous CL of lipids, when it does not differ from it in terms of kinetic curve parameters and has velocity constants of the same order. The accuracy of the calculation of entropy, entropy and free energy is determined by the presence of cardiolipin for pH stabilization, the quenching of Fe^{2+} and the presence of a physical activator C-525. Among the factors that distort the value of entropy, enthalpy and free energy, there is insufficient addition of hydrogen peroxide, excessive amount of nitrogen (II), methanol, protein denaturation, and a change in the formation of CytC in the Cyt-CL complex.

In search of optimal excitation conditions, the systems of lipoperoxidase and quasi-lipoxygenase reactions activated by natural coumarin C-525 were analyzed.

In our work, based on the analysis of the parameters of cytochrome C with cardiolipin, the physical activator C-525, horseradish peroxidase and luminol, studies were conducted comparing mathematical modeling of the thermodynamic parameters of the system: entropy, enthalpy and free energy obtained from experimental data with the parameters obtained based on theoretical calculations.

DOCKING AND MACHINE LEARNING APPROACHES FOR THE ANALYSIS OF HCV NS5B SMALL MOLECULE BINDERS

Ma X., Bozdaganyan M.¹

Shenzhen MSU-BIT University, 1 International University Garden Road, Dayun New City, Longgang District, Shenzhen City, Guangdong Province, 518172, China, +86-18654513605, maxiaochen66ai@gmail.com

¹Shenzhen MSU-BIT University, 1 International University Garden Road, Dayun New City, Longgang District, Shenzhen City, Guangdong Province, 518172, China, +86-15816878293, m.bozdaganyan@gmail.com

Molecular docking is a powerful tool for predicting both binding poses of ligands in target proteins and estimation of binding affinities. Also, docking can be efficiently used to discriminate potential binders from non-binders during drug discovery campaigns. HCV NS5B polymerase is a valuable target for antiviral drug therapeutics. Our goal was to analyze the ligand-binding site for HCV NS5B protein. We first benchmarked a NS5B-inhibitor complex sets to PALM I, II, III binding sites. Afterwards, compounds targeting NS5B with known affinity values (IC₅₀/Kd) from ChEMBL were classified as active and inactive, their potential binding sites were classified manually. Then we docked ligands into the proteins using SMINA and VINA software. We used protein–ligand interaction profiler (PLIP) [1] in order to analyze the distance between the ligands and our protein key amino acids. Also, we have calculated the RMSD of the ligands inside the binding site in comparison with minimal structure. We found out that PHE193,551 and TYR448 play an important role in pi-stacking interactions. Some mutations that happened in key positions (e.g. residue ASN316) of different proteins induce the change of binding affinity [2] at the allosteric binding site. The study of NS5B protein structure and its binding modes to small inhibitors can increase the likelihood of discovering significant new drugs that efficiently treat HCV infection.

References.

1. Adasme, M. F. et al. PLIP 2021: expanding the scope of the protein–ligand interaction profiler to DNA and RNA. // *Nucleic Acids Res.* 49, W530–W534 (2021).
2. Hang, J. Q. et al. Slow Binding Inhibition and Mechanism of Resistance of Non-nucleoside Polymerase Inhibitors of Hepatitis C Virus. // *J. Biol. Chem.* 284, 15517–15529 (2009)

C-A TEST OF DNA FORCE FIELDS

Strelnikov I.A., Kovaleva N.A., Klinov A.P., Zubova E.A.

N.N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics of RAS

The DNA duplex may be locally strongly bent in complexes with proteins, for example, with polymerases or in a nucleosome. At such bends, the DNA helix is locally in the non-canonical forms A (with a narrow major groove and a large amount of north sugars) or C (with a narrow minor groove and a large share of BII phosphates). To model the formation of such complexes by molecular dynamics methods, the force field is required to reproduce these conformational transitions for a naked DNA. We analyzed the available experimental data on the B-C and B-A transitions under the conditions easily implemented in modeling: in an aqueous NaCl solution. We selected six DNA duplexes which conformations at different salt concentrations are known reliably enough. At low salt concentrations, poly(GC) and poly(A) are in the B-form, classical and slightly shifted to the A-form, respectively. The duplexes ATAT and GGTATACC have a strong and salt concentration dependent bias toward the A-form. The polymers poly(AC) and poly(G) take the C- and A-forms, respectively, at high salt concentrations. The reproduction of the behavior of these oligomers can serve as a test for the balance of interactions between the base stacking and the conformational flexibility of the sugar-phosphate backbone in a DNA force field. We tested [1] the AMBER bsc1 and CHARMM36 force fields and their hybrids, and we failed to reproduce the experiment. In all the force fields, the salt concentration dependence is very weak. The known B-philicity of the AMBER force field proved to result from the B-philicity of its excessively strong base stacking. In the CHARMM force field, the B-form is a result of a fragile balance between the A-philic base stacking (especially for G:C pairs) and the C-philic backbone. Finally, we analyzed some recent simulations of the LacI-, SOX-4-, and Sac7d-DNA complex formation in the framework of the AMBER force field.

This work was supported by the Program of Fundamental Research of the Russian Academy of Sciences (project FFZE-2022-0009). The calculations were carried out in the Joint Supercomputer Center of the Russian Academy of Sciences.

References.

1. C-A test of DNA force fields, Ivan A. Strelnikov, Natalya A. Kovaleva, Artem P. Klinov, and Elena A. Zubova, <https://doi.org/10.48550/arXiv.2211.10711>

PREDICTION OF SKIN PERMEABILITY COEFFICIENT BY MEANS OF COARSE GRAINED MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS

Yang A., Bozdaganyan M.¹

Shenzhen MSU-BIT University, 1 International University Garden Road, Dayun New City, Longgang District, Shenzhen City, Guangdong Province, 518172, China, +86-17350757302, smbuamy@gmail.com

¹ Shenzhen MSU-BIT University, 1 International University Garden Road, Dayun New City, Longgang District, Shenzhen City, Guangdong Province, 518172, China, +86-15816878293, m.bozdaganyan@gmail.com

Transdermal drugs and cosmetics are of great significance in the medical and cosmetic industries. The cost of experiments on human skin is relatively high, and the physiological gap between human skin and the substitutes such as pig skin, monolayer cells or chemical biofilms is too large. Using molecular simulation to study model skin cell membranes can provide predictions of experimental parameters such as permeability coefficients. Different concentrations of active ingredients and compound combinations can bring different penetration effects through the skin. This research mainly focuses on simulations of interactions of different chemical compounds with model skin bilayer. MARTINI force field and the Gromacs software is used in the study. The ratio of ceramide, cholesterol and free fatty acid of the skin cell membrane is 1:1:1. The membrane is equilibrated at 310 K during 0.5 microsecond. Firstly, we calculate the potential of mean force (PMF) between the membrane and 14 non-charged hydrophilic, hydrophobic and neutral beads which are following the standard MARTINI notation, after that we make estimations of logK_p like in [1]. Secondly, we calculate PMFs and logK_p for the selected compounds from CPE DB [2] and analyze the correlation between predicted logK_p and experimental one. This research provides a reference for the development and screening of new chemicals for transdermal drug delivery.

References

1. Hoffmann, C., Centi, A., Menichetti, R. *et al.* Molecular dynamics trajectories for 630 coarse-grained drug-membrane permeations. // *Sci Data* **7**, 51 (2020).
2. Vasyuchenko, E. P., Orekhov, P. S., Armeev, G. A. & Bozdaganyan, M. E. CPE-DB: An Open Database of Chemical Penetration Enhancers. // *Pharmaceutics* **13**, 66 (2021).

S3/W3

МЕДИЦИНСКАЯ И
РАДИАЦИОННАЯ БИОФИЗИКА

МEDICAL AND RADIATIONAL
BIOPHYSICS

Руководители:

Татьяна Юрьевна Плюснина, Андрей Александрович Полежаев,

Галина Юрьевна Ризниченко, Андрей Борисович Рубин.

КОЛИЧЕСТВЕННАЯ ОЦЕНКА ПОВРЕЖДАЮЩЕГО ДЕЙСТВИЯ КОСМИЧЕСКИХ ЛУЧЕЙ НА КЛЕТОЧНЫЕ И СУБКЛЕТОЧНЫЕ СТРУКТУРЫ МОЗГА

Батмунх М., Бугай А.Н., Баярчимэг Л., Лхагва О.¹

Объединенный институт ядерных исследований, Лаборатория радиационной биологии,
Россия, 141980, Дубна, ул. Жолио-Кюри 6, batmunkh@jinr.ru

¹Монгольский государственный университет, Монголия, 210646, Улан-Батор

Исследование воздействия спектра космических лучей на здоровые органы, в первую очередь, на структуры центральной нервной системы, являются актуальной задачей в космической радиобиологии при планировании межпланетных и длительных полётов к Марсу. Необходимость теоретическим предсказаниям первичных радиобиологических повреждений и возникающих отдаленных последствий облучения (вредных мутаций, опухолей и изменений высших интегративных функций мозга), продиктована сложностями проведения экспериментальных исследований над живыми организмами с тяжелыми ионами высокой энергии.

В данной работе, на основе модели переноса излучений, изучено повреждающее действие различных видов ионизирующих излучений с разными физическими характеристиками, на структуру мозга мышей. Геометрические модели структуры мозга на клеточном и субклеточном уровне построены на основе экспериментальных баз данных. В рамках вычислительного эксперимента, с применением суперкомпьютера «Говорун», рассмотрено действие спектра из 10 типов частиц космических лучей с энергетическом диапазоне от 20 до 1000 МэВ/нуклон на формирование повреждений ДНК с учетом кластеризации при прохождении частиц через чувствительные области мозга. Показано, что наибольшее количество повреждённых клеток образуется в гранулярной зоне и относительно мало в субгранулярной зоне гиппокампа. Путем моделирования выявлено, что более 70% одонитевых разрывов ДНК вызваны действием протонов, и при облучении ионами железа в дозах ниже 0.5 мГр возникают большие кластеры двунитевых разрывов ДНК, чего не достигается при воздействии протонов и других ионов в дозах до 125 мГр. Расчетным путем также показана количественная оценка влияния линейной передачи энергии частицы разных типов на выход повреждений ДНК различной природы в клетках мозга. В этом случае получено хорошее совпадение результатов моделирования с экспериментальными данными. Полученные данные и предсказания на основе разработанной модели, вносят вклад в оценку радиационных рисков для космонавтов при длительных космических полётах, а также могут быть применены для оценки побочных эффектов в здоровых тканях при планировании адронной терапии рака мозга.

ВЛИЯНИЕ КОЛЛЕКТИВНОГО ПОТЕНЦИАЛА НА НЕЛИНЕЙНУЮ ДИНАМИКУ МИКРОТРУБОЧЕК

Батова А.С., Бугай А.Н., Ranković D.¹, Sivčević V.², Zdravković S.³

Объединенный институт ядерных исследований, Россия, 141980, Дубна, ул. Жолио-Кюри, 6, тел. 216-2119, anna-sergeevna00@yandex.ru

¹ Farmaceutski fakultet, Univerzitet u Beogradu, Serbia, 11221, Beograd, Vojvode Stepe 450

² Levi 9 Global Sourcing Balkan D.O.O., Serbia, 21000, Novi Sad, Trifkovićev trg 6

³ Institut za Nuklearne Nauke Vinča, Laboratorija za Atomsku Fiziku (040), Serbia, 11001, Beograd, Poštanski pregradak 522

В настоящей работе исследуется нелинейная динамика микротрубочек (МТ), важнейших компонентов цитоскелета эукариотических клеток [1]. МТ представляют собой полые цилиндры, стенки которых образованы 13 протофиламентами (ПФ), собранными из димеров белка тубулина. Каждый димер состоит из α - и β -мономеров и обладает собственным дипольным моментом. Благодаря сегнетоэлектрическим свойствам МТ участвуют в проведении электрических и механических сигналов [2].

Двухкомпонентная модель МТ описывает угловые и тангенциальные колебания димера с учетом геометрии МТ, диполь-дипольных взаимодействий димеров белка и наличии затухания. Модельный подход предлагает рассмотрение динамики МТ в пределах одного ПФ, а влияние соседних димеров учитывается через коллективное электрическое поле. Для описания взаимодействия между димерами вводится эффективный двухямный потенциал. Исследуются три вида потенциала: один симметричный и два несимметричных.

Для нахождения частных аналитических решений нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных, описывающих динамику МТ, применялся метод укороченного разложения по гиперболическим тангенсам [3]. Для каждого типа коллективных потенциалов получены несколько решений в виде уединенных волн (кинк-солитонов). Анализ стабильности решений показывает, что стабильны дозвуковые волны, в то время как сверхзвуковые волны неустойчивы [4].

Проект выполнен в рамках Соглашения о сотрудничестве между Объединенным институтом ядерных исследований (ОИЯИ) и Министерством образования и науки Республики Сербия.

Литература

1. *Dustin P.* // Microtubules. - Springer. 1984.
2. *S. Zdravkovic, A.N. Bugay, G.F. Aru, A. Maluckov.* Localized modulated waves in microtubules // *Chaos* **24** (2), 2014. P. 23139-1-23139-7.
3. *El-Wakil S. A., Abdou M. A.* New exact travelling wave solutions using modified extended tanh-function method // *Chaos, Solitons & Fractals* **31**, №4, 2007. P. 840-852.
4. *Zdravkovic S. et al.* Three Kinds of W-Potentials in Nonlinear Biophysics of Microtubules // *SSRN Electronic Journal*, 2022. P. 4250844.

КИНЕТИКА РЕПАРАЦИИ ДВУНИТЕВЫХ РАЗРЫВОВ ДНК ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ФОТОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Батова А.С.¹, Пилинская Д.Л.², Душанов Э.Б.^{1,2}, Насонова Е.А.¹, Бугай А.Н.^{1,2}

¹Объединенный институт ядерных исследований, Россия, 141980, Дубна, ул. Жолио-Кюри, 6, тел. 216-2119, anna-sergeevna00@yandex.ru

²Государственный университет «Дубна», Россия, 141980, Дубна, ул. Университетская, 19, тел. 216-6081, Ladushka_00@mail.ru

Ключевым повреждением клетки, определяющим ее судьбу, являются двунитевые разрывы (ДР) ДНК, неправильная репарация которых приводит к хромосомным aberrациям, которые могут быть летальными для клетки [1]. Поэтому понимание механизмов индукции и кинетики репарации ДР ДНК важно для прогнозирования радиационно-индуцированного ответа на лучевую терапию и выживаемости клеток, которые подверглись действию ионизирующего излучения.

Данная работа посвящена математическому моделированию процесса репарации ДР после воздействия редкоионизирующего излучения с различными характеристиками. Проведено математическое моделирование нескольких этапов клеточного ответа на облучение клеток V79 китайского хомячка рентгеновским излучением, и клеток карциномы человека γ -излучением, таких как: индукция и репарация ДР ДНК, кинетика образования неправильно отрепарированных двунитевых разрывов ДНК и образование хромосомных aberrаций [2].

Сравнительный анализ модельных данных с экспериментальными данными, полученными методом преждевременной конденсации хромосом [3], показал, что для X-лучей и для γ -лучей кинетика репарации ДР одинакова в клетках млекопитающих и человека подчиняется одинаковому закону. Количество ДР и хромосомных aberrаций прямо пропорционально дозе облучения и фазе клеточного цикла.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта ОМУС ОИЯИ (проект № 22-702-01).

Литература

1. Goodhead D. T. Initial events in the cellular effects of ionizing radiations: clustered damage in DNA // *International journal of radiation biology* **65**, №1, 1994. P. 7-17.
2. McMahon S. J., Prise K. M. A mechanistic DNA repair and survival model (Medras): applications to intrinsic radiosensitivity, relative biological effectiveness and dose-rate // *Frontiers in oncology*. – 2021. P. 2319.
3. Nasonova, E. Gudowska-Nowak, S. Ritter, G. Kraft E. Analysis of Ar-ion and X-ray-induced chromatin breakage and repair in V79 plateau-phase cells by the premature chromosome condensation technique // *International journal of radiation biology* **77**, №1, 2001. P. 59-70.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РАДИАЦИОННО-ИНДУЦИРОВАННЫХ ПОВРЕЖДЕНИЙ ДНК

Васильева М.А., Бугай А.Н., Душанов Э.Б.

Объединенный институт ядерных исследований, Лаборатория радиационной биологии,
Россия, 141980, г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, 6, 8(49621)67197 mal2008@jinr.ru

Разработана математическая модель, описывающая основные пути репарации повреждений ДНК, индуцированных тяжелыми заряженными частицами: повреждений оснований (ПО), одностранных (ОР) и двустранных разрывов (ДР) ДНК в клетках млекопитающих и человека. В модели отражены ключевые молекулярные механизмы восстановления ДНК путем репарации одностранных разрывов ДНК (SSR), эксцизионной репарации оснований (BER), негомологичного воссоединения концов (NHEJ). Учет всех трех репарационных механизмов и их возможных взаимодействий позволяет более полно описать ответ клетки на облучение тяжелыми ионами. Для формализации молекулярных механизмов составлена динамическая система из дифференциальных уравнений, описывающая химическую кинетику белковых взаимодействий в соответствии с законом действующих масс и кинетическими уравнениями Михаэлиса-Ментена. Численное интегрирование полученных нелинейных дифференциальных уравнений произведено в программном пакете Wolfram Mathematica, который также был использован для анализа и визуализации полученных результатов. Наряду с моделированием взаимодействий основных регуляторных белков и белковых комплексов было учтено наличие метастабильных состояний ДНК, формирующихся на разных стадиях репарационного процесса. Показано, что модель корректно описывает временную динамику формирования и репарации ключевых типов повреждений ДНК в клетках человека при действии тяжелых ионов.

Литература.

1. Васильева М.А., Бугай А.Н., Душанов Э.Б. Моделирование репарации повреждений ДНК, индуцированных тяжелыми ионами в клетках млекопитающих // Актуальные вопросы биологической физики и химии. т. 7, № 4. 2022, с. 557 – 564.

АНАЛИЗ ПАРАМЕТРОВ ПРОЛИФЕРАЦИИ В МОДЕЛИ НАРУШЕНИЯ НЕЙРОГЕНЕЗА У ВЗРОСЛЫХ МЫШЕЙ C57BL/6J ПОСЛЕ ОБЛУЧЕНИЯ РЕНТГЕНОВСКИМИ ЛУЧАМИ

Глебов А.А., Колесникова Е.А., Бугай А.Н.

Объединённый институт ядерных исследований,
Россия, 141980, г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, д. 6,
E-mail: glebov.atth@gmail.com

Математическая модель нарушения пролиферации нервных стволовых клеток и клеток-предшественников нейронов после облучения рентгеновскими лучами предсказывает пик восстановления пролиферации спустя один-два месяца после момента облучения [1]. Однако, экспериментальные данные демонстрируют более ранний пик компенсаторного усиления пролиферации [2], что говорит о необходимости уточнения параметров лежащих в основе моделирования нарушения пролиферации клеток-предшественников после облучения.

Мы проанализировали данные исследований пролиферации у мышей C57BL/6J подвергшихся облучению рентгеновскими лучами и сравнили их с расчётами в рамках модели радиационно-индуцированного нарушения нейрогенеза [1-4]. Расчёты показали, что исключение параметров выбора клеточной судьбы и влияния активированной микроглии, исходя из экспериментальных данных [3,4], не повлияет на оценку краткосрочного эффекта усиления пролиферации. Кроме того, показано, что для более точного моделирования пика компенсаторного усиления пролиферации требуются отбор экспериментальных данных исходя из критерия одновременной оценки численности клеток коэкспрессирующих маркеры пролиферации с маркерами нервных стволовых клеток или незрелых нейронов, для оценки скорости деления клеток на разных этапах развития до и после облучения.

Литература.

1. *Cacao E., Cucinotta F.A.* Modeling impaired hippocampal neurogenesis after radiation exposure // *Radiat. Res.* **Vol. 185**, No. 3, 2016. Pp. 319-331.
2. *Casciati A. et al.* Age-related effects of X-ray irradiation on mouse hippocampus // *Oncotarget.* **Vol. 7**, No. 3, 2016. Pp. 28040.
3. *Ben Abdallah N. M. B., Slomianka L., Lipp H. P.* Reversible effect of X-irradiation on proliferation, neurogenesis, and cell death in the dentate gyrus of adult mice // *Hippocampus.* **Vol. 17**, No. 12, 2007. Pp. 230-240.
4. *Fishman K. et al.* Radiation-induced reductions in neurogenesis are ameliorated in mice deficient in CuZnSOD or MnSOD // *Free Radical Biology and Medicine.* **Vol. 47**, No. 10, 2009. Pp. 1459-1467.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НИЗКОЧАСТОТНЫХ КОЛЕБАНИЙ В СЕРДЕЧНО-СОСУДИСТОЙ СИСТЕМЕ ЧЕЛОВЕКА

Гриневич А.А.

Институт биофизики клетки Российской академии наук - обособленное подразделение
Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный
исследовательский центр «Пушкинский научный центр биологических исследований
Российской академии наук». Пушкино, Россия, ул. Институтская, д. 3.

Фундаментальная особенность сердечно-сосудистой системы человека (ССС) заключается в выраженном колебательном характере ее параметров. Источники низкочастотных колебаний (ниже частоты дыхания) мало изучены и интересны с точки зрения понимания регуляторных механизмов функционирования ССС. Особенно интересны колебания с частотой 0.1 Гц. Они присутствуют в вариабельности сердечного ритма и в микроциркуляторном кровотоке. В аспекте ритмогенеза важно понимать связь между динамическими и функциональными свойствами ССС. Используя методы математического моделирования, мы исследовали механизмы формирования низкочастотных колебаний в ССС и роль динамических факторов в ее функциональной регуляции.

Показано, что резонансно-подобный отклик респираторной синусовой аритмии на дыхательные движения в условиях контролируемого дыхания, связан с обратной степенной зависимостью изменения активности вегетативного контроля от амплитуды респираторного водителя ритма [1]. Обнаружена связь между низкочастотными колебаниями кровотока в периферическом микроциркуляторном русле и функционированием сердца при стохастических воздействиях в условиях отсутствия контроля со стороны вегетативной нервной системы, что говорит о возможности центрального регулирования низкочастотных ритмов микрогемодинамики [2]. Влияние модулированного шума на сердце выявило формирование низкочастотных колебаний микроциркуляторного кровотока с пиками на частотах модуляции, что свидетельствует о наличии в ССС нелинейного и фильтрующего компонентов [3].

Полученные результаты позволили выявить новые механизмы формирования низкочастотных колебаний в ССС на частоте 0.1 Гц, где гидродинамические параметры сосудистого русла и внешние воздействия играют ключевую роль.

Литература.

1. Гриневич А.А., Танканог А.В., Чемерис Н.К. Исследование зависимости спектров сердечного ритма человека от контролируемой частоты дыхания // Математическая биология и биоинформатика. – 2013. – Т.8. – №2. – С.537–552.
2. Гриневич А.А., Танканог А.В., Чемерис Н.К. Влияние стохастических воздействий на гидродинамическую связь активности желудочков сердца и низкочастотных колебаний кровотока в микроциркуляторном русле человека // Биофизика. 2019. — Т. 64, — № 1. — С. 140–152
3. Grinevich A.A., Tankanog A.V., Chemeris N.K., Mathematical modeling of low-frequency oscillations induced by modulated noise in human microvasculature // Proc. SPIE. 2020; 114590S.

АНАЛИЗ КЛИНИЧЕСКИХ ДАННЫХ ПО ВОССТАНОВЛЕНИЮ СЕРДЕЧНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ПАЦИЕНТОВ, ПЕРЕНЕСШИХ АОРТОКОРОНАРНОЕ ШУНТИРОВАНИЕ

Киселева Д.Г., Плюснина Т.Ю., Лищук А.Н.¹

¹ Центр Кардиохирургии ФГБУ «НМИЦ ВМГ им. А.А. Вишневого», Россия, 143400, Московская область, Красногорский район, г. Красногорск, ул. Светлая, д.11

Аортокоронарное шунтирование (АКШ) в условиях аппарата искусственного кровообращения (АИК) является одним из наиболее распространенных операционных вмешательств, направленных на уменьшение симптомов ишемической болезни сердца. При подготовке пациента к отключению от АИК, сердечная деятельность не всегда восстанавливается самостоятельно, и в таких случаях требуется проведение дополнительных реанимационных мероприятий по восстановлению ритма сердца. При такой ситуации резко повышается риск летального исхода, а также риск послеоперационных осложнений. Целью анализа является выявление потенциальных биомаркеров, сигнализирующих об ухудшении состояния пациента и потенциальном риске невозможности самостоятельного восстановления сердечной активности на основе показателей артериальной крови, а также процессов на клеточном уровне и уровне отдельного органа, которые потенциально могут привести к развитию патологического состояния.

Авторами были обработаны и проанализированы данные 10 пациентов тестовой группы, у которых сердечная деятельность восстанавливалась с помощью нескольких разрядов дефибриллятора, и 11 пациентов контрольной группы. Информация о пациентах оставалась конфиденциальной, цифровые данные обрабатывались в обезличенном виде. По итогам статистического анализа с использованием непараметрического критерия Манна-Уитни нулевая гипотеза об отсутствии различий между контрольной и тестовой выборками была отклонена для следующих показателей: концентрация ионов натрия и хлорида, осмоляльность крови, уровень глюкозы.

Все показатели имеющие статистически значимые отличия для двух групп тесно взаимосвязаны, при этом натрий вносит основной вклад в значение осмоляльности. В связи с этим, вероятно, гипоосмоляльность и гипонатриемия могут быть потенциальными маркерами отека клеток и послужить причиной невозможности самостоятельного восстановления сердечной деятельности.

МОДЕЛЬ ФОРМИРОВАНИЯ ЛАМЕЛЛОПОДИЙ ТРОМБОЦИТОВ

Коробкина Ю.Д.Д., Свешникова А.Н.¹

Центр теоретических проблем физико-химической фармакологии РАН, Москва

¹Национальный медицинский исследовательский центр им. Д. Рогачева, Москва

В течение минуты после активации тромбоцитов они изменяют форму с образованием новых актиновых структур – ламеллиподий и филоподий. Данные органеллы состоят из густой динамической сети актиновых филаментов, способных проталкивать мембрану клетки. Считается, что распластывание тромбоцита зависит от формирования именно ламеллоподий. При активации тромбоцитов мономеры глобулярного (G) актина полимеризуются с образованием филаментозного (F) актина. Нуклеация и полимеризация актина регулируются широким спектром белков, включающим комплекс Arp2/3, который осуществляет ветвление филаментов.

В настоящей работе мы адаптируем ранее опубликованную компьютерную модели роста псевдоподии нейтрофила [1] для описания начальных стадий образования ламеллоподии тромбоцита. Модель представляет собой стохастический алгоритм полимеризации актина с возможностью зависимость от Arp2/3 ветвления в окрестности мембраны клетки. Интегрирование модели происходило с помощью Python 3.8. Рассчитанная скорость роста ламеллоподии сравнивалась с существующими экспериментальными данными для здоровых доноров и пациентов с мутациями в гене ARPC1B, кодирующем одну из субъединиц комплекса Arp2/3.

В существующих экспериментальных данных по росту ламеллоподий тромбоцитов протрузия вырастала за 8-10 минут на 1,5-2 мкм, что соответствует предсказаниям модели. При этом модельная максимальная скорость роста составила 0,6 мкм/мин, что сравнимо с экспериментальными 0,5 мкм/мин. Таким образом, предложенная модель успешно описывает характерные размеры и скорости роста ламеллоподии. При уменьшении константы ветвления в 3 раза рост ламеллоподий прекращался. Это согласуется с данными об отсутствии формирования ламеллоподий тромбоцитов у пациентов с дефицитом ARPC1B. Однако модель не может описать экспериментально наблюдаемую остановку роста ламеллоподий через 8-10 минут.

Таким образом, модель успешно описывает только первые стадии роста ламеллиподий в тромбоцитах человека. Включение механизмов остановки роста ламеллиподии, например, истощение пула G-актина, в модель является предметом дальнейших исследований. Работа поддержана грантом РФФИ № 21-74-20087.

Литература

1. Korobkin, J.; Garcia, A.; Sveshnikova, A. A Minimal Mathematical Model of Neutrophil Pseudopodium Formation during Chemotaxis. SBPReports 2021, 1, 10

КОМПЬЮТЕРНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ АССОЦИАЦИЙ ЗАБОЛЕВАНИЙ КАК ОБОБЩЕНИЕ ГЕННЫХ СЕТЕЙ НА ПРИМЕРЕ ОПУХОЛЕЙ МОЗГА

Орлов Ю.Л., Красильникова А.А., Булгакова А.В., Майорова А.А., Соколова А.В.,
Варакина Э.С., Туркина В.А.

Первый МГМУ им. И.М. Сеченова Минздрава России (Сеченовский Университет),
Россия, 119991, г. Москва, ул. Трубецкая, д. 8, стр. 2.
Тел.:(495)609-14-00, E-mail: y.orlov@sechenov.ru

Компьютерные модели ассоциаций заболеваний, их фенотипов, лекарственных средств, а также генов и их белковых продуктов могут быть построены в форме структур графа. Такие исследования расширяют подходы к исследованиям генных сетей и метаболических путей. Визуализация сети, статистическое исследование структуры взаимодействий представляет собой отдельное математическое направление. Исследование структуры сети, выявление узловых компонент позволяет определить критические точки сети – в случае генной сети заболевания это наиболее важные гены, которые могут рассматриваться как потенциальные гены-мишени. Само понятие сети заболеваний (англ. Diseasesome), развивается в связи с исследованиями сетей разных типов, не только генных сетей, но и компьютерных сетей, сетей контактов в интернете, социальных сетей. Ассоциативные генные сети заболеваний могут быть построены с помощью анализа литературы, по упоминаниям в научных публикациях, и по экспериментальным данным (платформы GeneCards, MalaCards). В данной работе рассмотрена реконструкция генной сети для глиомы и опухолей мозга [1]. Сама классификация опухолей требует уточнения. Так, мультиформная глиобластома (англ. Glioblastoma multiforme, GBM) — наиболее частая и наиболее агрессивная форма опухоли мозга, которая составляет до 52% первичных опухолей мозга, реклассифицирована в современной медицинской литературе. Причина большинства случаев глиобластомы неизвестна. Нестандартными факторами риска являются генетические нарушения, такие как нейрофиброматоз и синдром Ли-Фраумени, а также предшествующая лучевая терапия. В рамках дипломных работ по цифровому обучению в Сеченовском Университете разрабатываются компьютерные модели заболеваний, основанные на компьютерной реконструкции генных сетей, описания списка ассоциированных генов и анализа самой структуры сети. Использовались онлайн-инструменты биоинформатики – STRING-DB (<https://string-db.org/>), GeneMANIA (<http://genemania.org/>), база данных OMIM (<https://omim.org/>). Для анализа категорий генных онтологий, связанных с заболеванием, использовались ресурсы DAVID (<https://david.ncicrf.gov/summary.jsp>) и PANTHER (<http://pantherdb.org/>).

Литература

1. Gubanova N.V., Orlova N.G., Dergilev A.I., Oparina N.Y., Orlov Y.L. Glioblastoma gene network reconstruction and ontology analysis by online bioinformatics tools // *Journal of Integrative Bioinformatics* Vol. 18, 2022. P. 20210031.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОЙ АКТИВАЦИИ ТРОМБОЦИТОВ В ПЕРСОНАЛИЗИРОВАННЫХ АРТЕРИОВЕНОЗНЫХ ФИСТУЛАХ ДЛЯ ГЕМОДИАЛИЗА

Салихова Т.Ю.^{1,2}, Пушин Д.М.¹, Нестеренко И.В.³, Бирюкова Л.С.¹, Гурия Г.Т.^{1,2}

¹ФГБУ «НМИЦ гематологии» Министерства Здравоохранения Российской Федерации, Россия, 125167, Москва, Новый Зыковский проезд, д. 4

²Московский физико-технический институт (научно-исследовательский университет), Россия, 141701, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, д. 9

³ГБУЗ Городская клиническая больница имени С.П. Боткина, Россия, 125284, Москва, 2-й Боткинский проезд, д. 5

Гидродинамическая активация тромбоцитов (SIPAct) является важным механизмом инициации тромбоза в условиях интенсивного кровотока. Этот механизм основан на взаимодействии тромбоцитов с макромолекулами фактора фон Виллебранда (VWF), способными претерпевать конформационные изменения под действием высоких сдвиговых напряжений. Такого рода напряжения сдвига возникают в кровотоке в артериовенозных фистулах (АВФ), используемых для процедур гемодиализа. Анализ рисков гидродинамической активации тромбоцитов требует корректного учета особенностей гемодинамики [1]. Настоящая работа ставит своей целью разработку математического подхода для оценки рисков гидродинамической активации тромбоцитов в персонализированных артериовенозных фистулах.

В работе проведено объединение методов компьютерной реконструкции геометрии сосудов пациента, математической модели активации тромбоцитов, опосредованной VWF [2], и методов вычислительной гидродинамики. Был разработан новый персонализированный подход к моделированию SIPAct в сосудах с интенсивной гемодинамикой. Возможности подхода были продемонстрированы на примере двух персонализированных геометрий АВФ.

Подход позволяет определять зависимость уровня SIPAct как от биомеханических (скорость потока в АВФ), так и от биохимических факторов (размер VWF). Установлено, что зависимость уровня SIPAct от скорости потока аппроксимируется степенным законом. Критическая скорость потока оказалась убывающей функцией размера мультимера VWF. Разработанный подход может быть использован для определения специфических факторов риска тромбоза у пациентов с АВФ.

Работа была поддержана Российским научным фондом (грант №19-11-00260).

Литература

1. *Pushin D.M., Salikhova T.Y., Zlobina K.E., Guria G.Th.* Platelet activation via dynamic conformational changes of von Willebrand factor under shear // PLOS ONE **Vol. 15**, 2020. Pp. 1-17.
2. *Salikhova T.Yu., Pushin D.M., Nesterenko I.V., Biryukova L.S., Guria G.Th.* Patient specific approach to analysis of shear-induced platelet activation in haemodialysis arteriovenous fistula // PLOS ONE **Vol. 17**, 2022. Pp. 1-8.

КОМПЬЮТЕРНАЯ РЕКОНСТРУКЦИЯ ГЕННОЙ СЕТИ БОЛЕЗНИ ПАРКИНСОНА

**Туркина В.А., Вишнякова Е.В., Орунбаева А.А., Соболева Л.П., Бурмистров Н.Д.,
Крючкова К.Ю., Голубева Е.А., Белова О.В., Орлов Ю.Л.**

Институт Цифровой Медицины, Первый МГМУ им. И.М. Сеченова Минздрава России (Сеченовский Университет), Россия, 119991, г. Москва, ул. Трубецкая, д. 8, стр. 2. Тел.: +7 (495) 609-14-00, E-mail: y.orlov@sechenov.ru

Компьютерный анализ генов предрасположенности к комплексным заболеваниям с помощью открытых баз данных, онлайн инструментов биоинформатики, позволяет строить сложные модели прогрессии заболеваний, определять потенциальные гены-мишени для терапии. Рассмотрена реконструкция генной сети для генов, ассоциированных с болезнью Паркинсона — хронического нейродегенеративного заболевания. Несмотря на определенные успехи, достигнутые в изучении молекулярных и биохимических механизмов развития этого заболевания, остается много открытых вопросов, как по генетике заболевания, так и возможным способам терапии [1]. В рамках дипломных работ по цифровому обучению в Сеченовском Университете разработаны компьютерные модели болезни Паркинсона, основанные на реконструкции генной сети, описаны узловые элементы сети – гены и их продукты.

Использовались онлайн-инструментов биоинформатики – STRING-DB (<https://string-db.org/>), GeneMANIA (<http://genemania.org/>), а также база данных OMIM (Online Mendelian Inheritance in Man) (<https://omim.org/>). Поиск выполнялся по ключевому словосочетанию «parkinson disease» (болезнь Паркинсона). Для анализа категорий генных онтологий, связанных с заболеванием, использовались ресурсы DAVID (Database for Annotation, Visualization and Integrated Discovery) (<https://david.ncifcrf.gov/summary.jsp>).

Показано, то наиболее значимыми категориями для генов болезни Паркинсона являются паркинсонизм, нейродегенерация и клеточный ответ на окислительный стресс, а также регуляция программируемой клеточной смерти, регуляция апоптоза, положительная регуляция клеточного метаболических процессов. В рамках данной работы собрана функциональная аннотация основных генов, связанных с заболеванием. Была построена генная сеть. Найдены гены болезни Паркинсона, имеющие наибольшее число связей с другими элементами: SNCA, SNCA, CASP3, GFRA1, HTT, PARK7. Исследование структуры генной сети показывает высокую связность генов внутри определенных кластеров, связанных биологически генных продуктов.

Литература

1. Орлов Ю.Л., Галиева А.Г., Орлова Н.Г., Иванова Е.Н., Мозылева Ю.А., Анашкина А.А. Реконструкция генной сети болезни Паркинсона для поиска генов-мишеней // *Биомедицинская химия* **том 67**, выпуск 3, 2021. Стр. 222-230 doi: 10.18097/PBMC20216703222

**РЕКОНСТРУКЦИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ ЧЕЛОВЕЧЕСКОГО
ТЕЛА ПО ДАННЫМ МНОГОКАНАЛЬНЫХ МАГНИТНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ**

Устинин М.Н.

Пущино, институт математических проблем биологии РАН

Доклад посвящен новому методу анализа данных многоканальных физических измерений. Метод позволяет восстанавливать пространственное распределение мощности электрических источников по внешним магнитным полям. Результаты, полученные в энцефалографии, кардиографии и миографии, позволяют говорить об успешном применении метода в фундаментальных исследованиях и при решении задач медицинской диагностики.

МОДЕЛИРОВАНИЕ УГЛЕВОДНО-ЛИПИДНОГО ОБМЕНА АДИПОЦИТА В УСЛОВИЯХ РАЗЛИЧНЫХ РЕЖИМОВ ПИТАНИЯ

Чистякова Ю.А., Плюснина Т.Ю.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Биологический ф-т, каф. Биофизики Россия, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 12 Тел.: +7-915-263-87-70
Email: chistyakyu@gmail.com

Количество людей, имеющих лишний вес и ожирение, растет на протяжении последних десятилетий, что приводит к росту заболеваемости диабетом второго типа, атеросклерозом, учащению развития сердечно-сосудистых заболеваний. Наиболее часто используемым подходом к корректровке веса и улучшению метаболизма является подбор диетического питания. Однако, эмпирический подбор диет может быть не всегда правильным, а иногда и в корне ошибочным из-за особенностей метаболизма конкретного человека.

В данной работе была построена математическая модель углеводно-липидного обмена адипоцита, которая описывает регулируемую инсулином динамику концентраций метаболитов, участвующих в образовании жировой капли. Модель была верифицирована на экспериментальных данных, описывающих изменение концентраций различных метаболитов в плазме крови после однократного приема пищи и показала высокий уровень согласованности с экспериментом. Далее было исследовано поведение модели при изменении количества приемов пищи и интервалов между ними при неизменной суточной калорийности, а также при различном соотношении жиров и углеводов в пище. Результаты моделирования показали, что при преобладании жиров в рационе (кето-диета) двух-, трех- и пятиразовое питание приводят к снижению концентрации триглицеридов жировой капли. При обычном и высокоуглеводном питании двухразовое питание ведет к снижению, а пятиразовое – к увеличению концентрации триглицеридов жировой капли. Кроме того, при длительности голода 16 часов эти эффекты различного количества приемов пище проявляются слабее или даже противоположны тем, что наблюдаются при длительности голода в 12 часов. Было выдвинуто предположение, что изменение концентрации триглицеридов жировой капли обусловлены различиями в регуляции инсулином реакций поступления глюкозы и триглицеридов в адипоцит, а также реакций образования и распада жировой капли.

ANALYSIS OF ABDOMINAL AORTIC HIGH-DENSITY COMPONENT AT CT ANGIOGRAPHY

Kodenko M., Kulberg N.¹, Samorodov A.²

Research and Practical Clinical Center for Diagnostics and Telemedicine Technologies,
Moscow, Russia, 127051, Petrovka street, 24, building 1, m.r.kodenko@yandex.ru

¹Federal Research Center “Computer Science and Control” of Russian Academy of
Sciences, Moscow, Russia, 119333, Vavilova street, 44, building 2, kulberg@yandex.ru

²Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russia, 105005, 2nd Baumanskaya
street, 5, building 1, avsbmstu@yandex.ru

Computed tomographic angiography (CTA) is the gold standard for diagnosis and preoperative planning of abdominal aorta's pathologies [1]. Currently, the data of CTA studies of the aorta are used mainly to determine the features of its geometry. However, CTA-image contains much more detailed information on a set of textural features, which has potentially high diagnostic value. Our purpose is to analyze the possibility of isolating the deterministic component of X-ray absorption from CT-angiography data.

The data presented in the public domain were used [2]. Using 3D Slicer software we carried out semi-automatic expert marking of abdominal aortic lumen and wall. Data was processed using R Studio tool (version 4.2.1). We proposed a mathematical model that represents a deterministic component of signal (F_{det}) as a trend (F_0 , A, b, c, d, e - coefficients corresponding to physiological processes):

$$F_{det} = F_0 - A * ((1 + \exp(b, c, x))^{-1} - (1 + \exp(d, e, x))^{-1}) \quad (1)$$

We analyzed 4 studies (normal/pathological balance was 1:1, median number of slices in the study was 144, IQR [134; 158.5]). The hypothesis of a trend in the data was confirmed (p-value < 0.05). The presence of a harmonic trend - pulse pressure wave (p-value < 0.05) and the difference of coefficients describing the behavior of the frontal curves for different intensity of contrast outflow into the wall were confirmed. The limitations of the study include small sample size, absence of ECG synchronization, and integral assessment of local hemodynamic processes.

Obtained results can be useful for the hemodynamic models development as well as for the improvement of CTA image processing.

References

1. D'Souza D, Niknejad M, Gaillard F, et al. Abdominal aortic aneurysm. [Electronic resource] // URL: <https://doi.org/10.53347/rID-826> (accessed: 12.04.2022)
2. Artificial intelligence in radiology [Electronic resource] // URL: <https://mosmed.ai/datasets/> (accessed: 12.01.2022).
3. nlsLM function - RDocumentation [Electronic resource] // URL: <https://www.rdocumentation.org/packages/minpack.lm/versions/1.2-2/topics/nlsLM> (accessed: 26.08.2022).

S3/W4

МОДЕЛИРОВАНИЕ,
ВИЗУАЛИЗАЦИЯ И АНАЛИЗ
ДАННЫХ В ИССЛЕДОВАНИИ
КОГНИТИВНЫХ СИСТЕМ

МODELING, VISUALIZATION AND
DATA ANALYSIS IN THE STUDY
OF COGNITIVE SYSTEMS

Руководители:

Алексей Рудольфович Браже, Дмитрий Энгелевич Постнов,

Галина Юрьевна Ризниченко, Андрей Борисович Рубин.

ПЕРИОДИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ НА ПАТТЕРНАХ ФИЛЛОТАКСИСА

Вейзе Д.Л.

ФГБУ НИИЦ "ЦНИИСиЧЛХ" Минздрава России, 119021, Москва, Тимура Фрунзе 16,
+79032481210, phyllon@list.ru

Цель работы - показать возможность отображения некоторых периодических и квазипериодических последовательностей в паттерне очередного листорасположения. Наш подход предлагает, в частности, распределение *спектра действительного числа* на полярной целочисленной решетке. Эту систему координат условно обозначим как филлотактическую. График в этой координатной сетке рассматривают как инструмент визуализации и изучения периодичных явлений, будь то движение небесных тел или законы музыкальной гармонии. В поле зрения лежат такие математические понятия, как спектр вещественного числа, последовательности Битти включительно, непрерывные дроби, алгоритм Евклида, проекция двумерной решетки на одномерное пространство, прямая Брезенхэма. Спектр действительного числа α определяется как бесконечное множество целых чисел. $\text{Spec}(\alpha) = \{ \lfloor \alpha \rfloor, \lfloor 2\alpha \rfloor, \lfloor 3\alpha \rfloor, \dots \}$; $\lfloor x \rfloor$ = наибольшее целое число, меньшее или равное x . Спектр действительного числа, который тесно связан с «алгоритмом средней точки» Брезенхэма и алгоритмом Евклида, находит свое применение в календарных вычислениях. Предложена компьютерная анимация некоторых календарных систем в филлотактическом представлении. Спектры чисел $12/7$ и $12/5$ отражают чередование белого и черного цветов клавиш фортепиано, а их проекция на филлотактический паттерн с углом дивергенции $360^\circ \cdot 5/12 = 150^\circ$ разворачивает двухмерную компоновку одномерного винтового круга. Проекция целочисленных последовательностей на решетку филлотаксиса лежит в русле концепции когнитивной графики, предложенной Александром Зенкиным. «Когнитивная визуализация направлена на то, чтобы представить сущность научной абстрактной проблемной области, т. е. наиболее принципиальные связи и отношения между элементами этой области, в графической форме, чтобы увидеть и открыть принципиально новое знание концептуального характера» [1].

Литература

1. Zenkin, A., (2010). *Cognitive (Semantic) Visualization of the Continuum Problem and Mirror Symmetric Proofs in the Transfinite Numbers Theory*
<https://vismath1.tripod.com/zen/zen1.htm>.

ЭФФЕКТ НОРАДРЕНАЛИНА НА АСТРОЦИТАРНУЮ КАЛЬЦЕВУЮ ДИНАМИКУ В МОДЕЛИ НЕЙРОН-ГЛИАЛЬНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

Кирсанов А.В., Вервейко Д.В.¹, Верисокин А.Ю.¹, Браже А.Р., Постнов Д.Э.²

МГУ им. М.В. Ломоносова, Биологический факультет, Россия, 119192, Москва,
Ленинские горы 1/24

¹Курский государственный университет, Центр физики конденсированного состояния,
Россия, 305000, Курск, ул. Радищева, 33

²Саратовский государственный университет, кафедра оптики и биофотоники, Россия,
410012, Саратов, ул. Астраханская, 83

Работа мозга требует скоординированной активности как нейронов, так и глиальных клеток, в том числе астроцитов. Астроциты играют важную роль в обработке информации путём интеграции нейрональных синаптических входов и выброса собственных сигнальных молекул – глутрансмиттеров. Характер подобного нейрон-глиального взаимодействия определяется как локальной синаптической активностью нейронов, так и глобальным состоянием сети (сон/бодрствование, покой/локомоция и т.д.), которое во многом зависит от паттерна нейромодуляторов. Однако большинство существующих моделей нейрон-глиального взаимодействия игнорируют влияние профиля нейромодуляторов на динамику системы. Одним из основных нейромодуляторов является норадреналин, играющий важную роль в чувствительности глиальных клеток к синаптическим входам [1].

Основной целью работы являлось описание эффекта норадренергической модуляции на кальциевую динамику астроцита. Для этого нами была расширена разработанная ранее пространственная модель взаимодействия астроцитов и нейронов [2], добавлены механизмы выброса и диффузии норадреналина, а также его эффект на образование вторичного мессенджера инозитол-три-фосфата.

Проведенные модельные исследования показали, что подобный механизм действия норадреналина приводит к увеличению частоты кальциевых событий в астроците, подтверждая экспериментальные данные о роли норадреналина в астроцитарной кальциевой динамике. Основными направлениями для дальнейших исследований являются более подробное описание влияния норадреналина на активность нейронов и анализ влияния локализации участков выброса нейромодулятора на динамику системы. Исследование выполнено за счёт гранта РНФ (проект №22-74-00146).

Литература.

1. Paukert, M. et al. Norepinephrine Controls Astroglial Responsiveness to Local Circuit Activity. *Neuron* 82, 1263–1270 (2014).
2. Verisokin, A. Yu., Verveiko, D. V., Postnov, D. E. & Brazhe, A. R. Modeling of Astrocyte Networks: Toward Realistic Topology and Dynamics. *Front. Cell. Neurosci.* 15, 645068 (2021).

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ОБРАТНОГО ЗАХВАТА ВНЕСИНАПТИЧЕСКОГО ГАМК НА ГЕНЕРАЦИЮ ГИПОКАМПАЛЬНОГО ТЕТА-РИТМА

Лагоша С.В., Кирсанов А.В., Браже А.Р.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, биологический факультет, кафедра биофизики, Россия, 119234, Москва, Ленинские горы дом 1 стр. 24,
E-mail: brazhe@biophys.msu.ru

Синхронизированная активность ансамблей нейронов в различных отделах мозга регистрируется как набор ритмических компонент с характерными частотами. Одним из ярко выраженных ритмов мозга является, т.н. тета-ритм, проявляющийся в гиппокампе и сопровождающий локомоторную активность и исследовательское поведение животных. Тета-ритм определяется синхронизованной синаптической активностью на пирамидальных нейронах гиппокама с частотой от 4 до 12 герц. Нарушения в генерации тета-ритма приводят к проблемам с консолидацией памяти.

Считается, что основным пейсмекером тета-ритма является ГАМКергический вход из медиальной септальной области, при этом отдельные области гиппокама также способны к генерации ритма в тета-диапазоне, т.е. наблюдается взаимодействие между нелинейными осцилляторами. Важным механизмом, определяющим согласованную активность в гиппокампе, является отрицательная обратная связь между возбуждением пирамидальных и корзинчатых нейронов. Заметную роль в этом может играть явление выхода ГАМК за пределы синаптической щели (spillover, растекание) при повышенной синаптической активности, приводящее к взаимодействию ГАМК с экстрасинаптическими рецепторами и тоническому торможению.

Мы исследовали влияние экстрасинаптической ГАМК на гиппокампаальный тета-ритм. Для этого мы использовали среду моделирования BRIAN 2, уравнения мембранного потенциала описывались формализмом CAEx [1]. Модель описывала набор нейронов области CA3 гиппокампа. Нами предложен подход, позволяющий количественно и качественно характеризовать ритмическую активность. Показано, что увеличение концентрации внеклеточного ГАМК уменьшает выраженность тета-ритма. Уменьшение удельной ГАМК-зависимой проводимости либо увеличение характерного времени отдачи приводит к увеличению равновесного уровня внесинаптического медиатора, который в свою очередь может быть измерен экспериментально и служить для верификации модели. В качестве предварительных данных, проведено сравнение двух моделей тета-ритма в гиппокампе на основе модели CAEx и формализма Ходжкина-Хаксли.

Литература

1. Tomasz G., Depannemaecker D., and Destexhe A., "Conductance-based adaptive exponential integrate-and-fire model."// *Neural Computation* том 33, номер1 (2021): Стр. 41-66.

УПРАВЛЕНИЕ НЕЙРО-АСТРОЦИТАРНОЙ АКТИВНОСТЬЮ В МОДЕЛИ КОМПЛЕКСНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НЕЙРОГЛИОТРАНСМИТТЕРОВ И НОРАДРЕНАЛИНА

Лукин П.О.^{1а}, Верисокин А.Ю.^{1б}, Вerveйко Д.В.^{1с}, Браже А.Р.², Постнов Д.Э.³

¹Курский государственный университет, Центр физики конденсированного состояния, Россия, 305000, Курск, ул. Радищева, 33, ^аluckinpavel97@gmail.com, ^бffalconn@mail.ru, ^сallegroform@mail.ru

²Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Биологический факультет, Россия, 119192, Москва, Ленинские горы 1/24, brazhe@gmail.com

³Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, кафедра оптики и биофотоники, Россия, 410012, Саратов, ул. Астраханская, 83, postnov@info.sgu.ru

Моделирование функционирования нервной ткани как правило связано с описанием комплекса взаимодействий синаптически связанных нейронов. Тем не менее, на настоящее время установлено, что не меньшее значение играют разнообразные внесинаптические связи, которые опосредованы как функционированием глиальных клеток, так и диффузией нейромедиаторов в межклеточном пространстве. Показано, что нейро-астроцитарная активность существенно зависит от вполне умеренных, физиологически нормальных изменений нейронной активности, например, от переходов между состояниями сна и бодрствования.

В работе мы расширяем предложенную ранее модель кальциевой динамики в астроците [1]. Мы включаем в модель ряд нейро-астроцитарных процессов, в частности нейроглиотрансмиттерные связи, пространственно-неоднородное распределение норадреналина, а также комплекс сложных взаимодействий между ними. Разработанная модель обладает следующими существенными особенностями: 1) основанное на экспериментальных данных 2D представление структуры астроцита; 2) рандомизированное по пространству и времени описание активности синаптических терминалов; 3) пространственно-неоднородное распределение уровня норадреналина.

Полученные нами в ходе вычислительного эксперимента результаты соответствуют известным экспериментальным данным. Построенная модель может быть в дальнейшем использована для поиска путей регуляции синаптической активности, а также модельного прогнозирования биофизических процессов в нервной ткани, которые затруднительно или невозможно воспроизвести или проконтролировать экспериментально.

Исследование выполнено за счёт гранта РНФ (проект №21-74-00095).

Литература

1. *Verisokin, A. Yu., Verveйко, D. V., Postnov, D. E., Brazhe, A. R. Modeling of Astrocyte Networks: Toward Realistic Topology and Dynamics // Front.Cell.Neurosci.* 15, 645068 (2021)

СМЕНА ПАРАДИГМЫ В ПОХОДЕ К МОДЕЛИРОВАНИЮ МОЗГА

Мысин И. Е.

Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН,
Россия, 142290, г. Пущино, ул. Институтская, 3, +7 (4967) 73-26-48
Email: imysin@mail.ru

Современная нейронаука накопила большой объем данных о мозге. Однако обобщить объем современных данных в виде математических моделей не удалось. Большие проекты, такие как "Blue brain" или "Human brain project", не дали ожидаемых результатов, хотя значительно продвинули наше понимание мозга. Таким образом проблема построения моделей нейронных сетей, имитирующих работу мозга, является актуальной задачей.

Мы предлагаем решение задачи на основе объединения двух подходов. Первый подход - это популяционные модели. В такого типа моделях воспроизводится поведение не одного нейрона, а частота разрядов большой популяции нейронов. Наиболее известен популяционный подход на основе уравнения Фоккера-Планка. В нашей работе мы использовали метод моделирования распределения рефрактерной плотности (РПП) [1]. Второй подход — это метод сопряженного состояния [2]. Данный метод позволяет оценить градиент от решения системы дифференциальных уравнений, по параметрам симуляции. Оценка градиента в свою очередь дает две возможности. Во-первых, это позволяет оценивать чувствительность результатов симуляции по отношению к параметрам. Если модуль частной производной по некоторому параметру большой, то это означает высокую чувствительность к данному параметру. Во-вторых, оценка градиента позволяет использовать методы градиентного спуска для нахождения оптимальных параметров.

Мы применили наш подход к задаче моделирования фазовых отношений между тормозными нейронами поля CA1 гиппокампа при генерации тета-ритма. С помощью градиентного спуска мы нашли параметры сети тормозных нейронов наилучшим образом описывающие экспериментальные данные о фазовых отношениях разрядов нейронов и тета-ритма. Решение этой задачи показывает принципиальную применимость нашего подхода. Наш подход к построению моделей может быть масштабирован для применения к задачам с большим числом оптимизируемых переменных.

Работа поддержана грантом РФФ № 20-71-10109.

Литература

1. Chizhov A.V., Graham L.J. Population model of hippocampal pyramidal neurons, linking a refractory density approach to conductance-based neurons. // *Phys. Rev. E Stat. Nonlin. Soft Matter Phys.* 2007. Vol. 75, № 1 Pt 1. P. 011924.
2. Chen R.T.Q., Rubanova Y. Neural ordinary differential equations // *Advances in neural Neural Information Processing Systems* 31, 2018.

БИОИНФОРМАТИКА, НЕЙРОБИОЛОГИЯ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ И ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ

Осинов А.А.

Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН; Институт высшей нервной деятельности и нейрофизиологии РАН

Представлена связь между биоинформатикой, нейробиологией нового поколения и искусственным интеллектом.

Биоинформатика использует методы традиционного искусственного интеллекта для анализа данных и в свою очередь ставит задачи и онтологии для инструментов ИИ типа систем поддержки принятия врачебных решений.

Вводится понятие: "нейробиология нового поколения" - этап развития нейробиологии, который характеризуется использованием методов автоматического получения и анализа массовых данных, применением неинвазивных высокоразрешающих методов, тесной интеграцией с биоинформатикой и разработками в области традиционного ИИ. Нейробиология нового поколения использует биоинформатику для получения и анализа массовых геномных данных, а также адаптирует ее подходы и методы для анализа больших данных собственных специфических типов. Приводятся примеры исследований, в которых используются указанные данные и методы, и описываются современные системы депонирования интегрированных массовых данных.

Нейробиология нового поколения предоставляет данные для изучения структурного и функционального устройства и фундаментальных механизмов функционирования мозга как носителя естественного интеллекта для создания его функциональной модели, способной выполнять основные когнитивные задачи сильного искусственного интеллекта.

Вводится понятие: "средний нейроморфный искусственный интеллект" - промежуточный между узкоспециализированным реактивным слабым ИИ и универсальным проактивным сильным ИИ. Средний нейроморфный искусственный интеллект характеризуется универсальностью, реактивностью и ограниченной нейроморфностью. Универсальность позволяет выполнять необходимые комплексные когнитивные функции. Реактивность снимает этические проблемы безопасности человечества и непреумножения страданий мыслящих существ, а также задачу создания эмоционально-мотивационного блока, системы регуляции внимания и т.д. Ограниченная нейроморфность вызвана неполнотой наших знаний об устройстве мозга как субстрата когнитивной деятельности, отсутствием нужды в системах жизнеобеспечения, эмоционально-мотивационного блока, системы регуляции внимания и т.п. Также ограничение нейроморфности вызвано необходимостью решать некоторые задачи ввода/вывода, обработки и хранения информации, недоступные для живых систем, но желательные для функционирования искусственного интеллекта как инструмента человеческой деятельности.

В свою очередь, создание среднего искусственного интеллекта позволит систематизировать накопленные научные знания на беспрецедентном уровне и принципиально повысить эффективность научного труда.

PERIODIC STRUCTURES ON PHYLLOTACTIC PATTERNS

Weise D.

Central Research Institute of Dental and Maxillofacial Surgery, Department of Radiation Diagnostics. Moscow, 119021, Russia, +79032481210, e-mail: phyllon@list.ru

The purpose of the work is to show the possibility of displaying some periodic and quasi-periodic sequences in the pattern of the alternate leaf arrangement (phyllotaxis). Our approach proposes, in particular, the distribution of the spectrum of a real number on a polar integer lattice. This coordinate system will be conditionally designated as phyllotactic. A graph in this coordinate grid is considered as a tool for visualizing and studying periodic phenomena, whether it be the movement of celestial bodies or the laws of musical harmony. In the field of view lie such mathematical concepts as the spectrum of a real number, Beatty sequences inclusive, continued fractions, Euclid's algorithm, the projection of a two-dimensional lattice onto a one-dimensional space, the Bresenham's line. The spectrum of a real number α is defined as an infinite set of integers. $\text{Spec}(\alpha) = \{[\alpha], [2\alpha], [3\alpha], \dots\}; [x] = \text{largest integer less than or equal to } x \text{ (floor)}$. The concept of the spectrum of a real number, which is closely related to Bresenham's "midpoint algorithm" and Euclid's algorithm, finds its application in calendar calculations. Computer animation of some calendar systems in phyllotactic representation is proposed. The spectra of the numbers $12/7$ and $12/5$ reflect the alternation of white and black colors of the piano keys, and their projection onto the phyllotactic pattern with a divergence angle $360^\circ * 5/12 = 150^\circ$ reverses the 2D arrangement of the 1D circle of fifths. Some calendars employ two cycles running simultaneously. We offer a computer "phyllotactic" animation of the Eastern calendar of the 60-year cycle, the Maya Tzolkin calendar with a 260-day cycle, the 52-year circle of the calendar, called Xihuitl.

The projection of integer sequences onto the phyllotactic lattice is in line with the concept of cognitive graphics proposed by Alexander Zenkin. "Cognitive visualization is aimed at presenting the essence of a scientific abstract problem area, i.e. the most fundamental connections and relationships between the elements of this area, in a graphic form in order to see and discover fundamentally new knowledge of a conceptual nature" [1].

References

1. Zenkin, A., (2010). *Cognitive (Semantic) Visualization of the Continuum Problem and Mirror Symmetric Proofs in the Transfinite Numbers Theory*
<https://vismath1.tripod.com/zen/zen1.htm>.

S4

СОЦИАЛЬНО-ЭКОНОМИЧЕСКИЕ
ИССЛЕДОВАНИЯ
АНАЛИЗ И МОДЕЛИРОВАНИЕ
СОЦИАЛЬНО-ЭКОНОМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

SOCIAL-ECONOMY RESEARCH
SOCIAL-ECONOMY MODELING AND ANALYSIS

Руководители:

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

КАЧЕСТВЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ТРАНСФОРМАЦИИ РОССИЙСКОЙ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ СИСТЕМЫ

Бобкова И.А.

Центральный экономико-математический институт РАН
Россия, г. Москва, Нахимовский просп., 47
Российский биотехнологический университет (РОСБИОТЕХ) Россия,
г. Москва, Врубеля, 12
Email: bob@ceimi.rssi.ru; bobkovaia@mgupp.ru

В исследовании подводятся итоги процессам трансформации российского образования, начатым в конце 2000-х годов, а также влиянию нескольких ковидных лет на качество образования в образовательных учреждениях.

Российская система образования активно трансформируется последние 20 лет, а постепенный процесс трансформации начался еще в конце 1970х годов. Поэтому можно уже подводить определенные итоги этого процесса. Последние два десятилетия ознаменовались и переходом на Болонскую систему, и введением ЕГЭ и ОГЭ, и изменением условий финансирования вузов, и активной цифровизацией, и курсом на инновационные методы и методики, и несколькими ковидными годами и опытом повсеместного онлайн-обучения. В связи с вовлечением образовательных учреждений в цифровую среду, т.е. участие системы образования в процессах цифровизации всех секторов экономики, также резко возросла проблема взаимоувязки количественной и качественной оценки знаний [1]. Количественные оценки положены в основу формальной оценки качества образования. Было проведено исследование на базе бакалавриата и колледжа одного из московских вузов по соответствию результатов ЕГЭ и ОГЭ уровню реальной подготовки студентов. Кроме количественных показателей учтены и неколичественные и экспертные оценки. Сделан вывод о провале попытки улучшить качество образования за счет принятых нововведений и о рисках последствий трансформации российской системы образования для дальнейшего развития экономики РФ.

Литература

1. *Бобкова И.А.* Влияние совершенствования цифровой образовательной среды на качественные параметры системы образования - Научно-практический журнал Концепции, М., ФБГУН ЦЭМИ - № 1/2022(41), с.94-102

ГОСПОДДЕРЖКА ЗАНЯТОСТИ НАСЕЛЕНИЯ

Васильева И.А.

Центральный экономико-математический институт РАН,
Тел.: (916)343-73-72,
E-mail: via_51@mail.ru

Проблема занятости населения является одной из главных социально – экономических проблем экономики современной России, которая постоянно находится в центре внимания правительства. Принятый в 2014г. Закон о занятости населения определяет правовые, экономические и организационные основы государственной политики содействия занятости населения, в том числе гарантии государства по реализации конституционных прав граждан РФ на труд и социальную защиту от безработицы. Приоритетом государственной политики в сфере содействия занятости населения в долгосрочной перспективе является создание правовых, экономических и институциональных условий, способствующих развитию гибкого, эффективно функционирующего рынка труда, повышению качества рабочей силы и мотивации к труду. Целями принятой госпрограммы РФ "Содействие занятости населения" являются: непревышение к 2030 году значения уровня регистрируемой безработицы более 1 процента; создание условий для формирования культуры безопасного труда и повышение эффективности мер, направленных на сохранение жизни и здоровья работников в процессе трудовой деятельности. В рамках обновленной госпрограммы "Содействие занятости населения" национального проекта "Демография" реализуются: мероприятие по профессиональному обучению и дополнительному профессиональному образованию граждан, ищущих работу и обратившихся в органы службы занятости, включая безработных граждан, а также граждан в возрасте 50 лет и старше, граждан предпенсионного возраста, женщин, находящихся в отпуске по уходу за ребенком в возрасте до 3 лет, женщин, не состоящих в трудовых отношениях и имеющих детей дошкольного возраста; мероприятие по повышению эффективности службы занятости населения; мероприятие по содействию работодателям в привлечении трудовых ресурсов в рамках реализации региональных программ повышения мобильности трудовых ресурсов. Благодаря национальному проекту проводится модернизация центров занятости в субъектах РФ. Основной онлайн-ресурс для поиска работы и подбора работников — единая цифровая платформа в сфере занятости и трудовых отношений «Работа России». Агентство развития навыков и профессий запустило в 21 регионе страны два проекта с целью содействия молодежи в трудоустройстве и развитии их предпринимательские навыки путем персонального сопровождения. В 2022 г на это будет направлено более 9,9млрд руб., включая предоставление субсидий работодателям за трудоустройство молодых людей, которым часто бывает сложно найти работу, например, инвалидов, а также запуск проекта «Страна мастеров». В результате уровень безработицы среди молодежи должен существенно снизиться: к 2024 году доля трудоустроенных выпускников должна достигнуть 85%, а к 2030 году — 92%.

ВЗГЛЯДЫ СТУДЕНТОВ-ФИЛОЛОГОВ НА БУДУЩУЮ КАРЬЕРУ, ИХ ПРИОРИТЕТЫ И МОТИВАЦИИ

Винокурова Н.А.¹, Гудович И.С.

Воронежский государственный университет, математический факультет, кафедра математического моделирования, Россия, 394018, г. Воронеж, Университетская пл., д.1,
Тел.: +7(910)2805807, goudovitch@mail.ru

¹Центральный Экономико-математический институт РАН, Россия, 117418, г. Москва, Нахимовский проспект, д. 47, Тел.: +7(903)6820947, vinokurova@yandex.ru

Данное исследование относится к циклу работ, посвященных взглядам, настроению и планам современного студенчества и основанных на опросе студентов в 14 вузах в 5 городах РФ. В ходе исследования было выявлено, что различаются не только взгляды и мотивации студентов разных специальностей, но и их социально-демографические характеристики. Это обуславливает важность анализа данных опроса для разных категорий студентов. В этой статье мы рассмотрим взгляды студентов-гуманитариев, точнее студентов-филологов, и выявим их специфику. Прежде всего, отметим, что филология традиционно остается женской профессией, так что гендерный фактор может влиять на взгляды и планы студентов. Основной особенностью отношения студентов филологического направления к будущей карьере является их желание работать на фрилансе, которое оказалось значительно большим, чем у всех остальных студентов. Частично это можно объяснить как раз гендерным фактором. В работе показано, что для женщин очень важны свободный режим работы и возможность совмещать работу и личные дела. Однако в наше время уже нельзя рассматривать фриланс только как стремление к свободному режиму работы или как замену безработицы. Теперь фриланс – это свободная творческая работа, возможность самореализации. Сегодня биржа фриланса предлагает как раз те виды работ, которыми могут заниматься выпускники филологического направления. Это редакторы, корректоры, копирайтеры, переводчики, создатели рекламных материалов и т. п. Даже наиболее распространенный вид работы для гуманитариев (преподавание), теперь тоже часто проходит дистанционно и поэтому может присутствовать на фрилансе. Так что здесь сошлись личные интересы студентов и условия, сложившиеся на рынке труда. Несмотря на интерес к фрилансу, всё-таки почти 30% филологов выразили желание организовать свой бизнес. Почти половина филологов хотела бы стать предпринимателями в сфере досуга и развлечений (48,4% ответов), что вполне соответствует мировой тенденции на переход к экономике досуга. Таким образом, студенты проявляют себя вполне рациональными людьми, серьезно подходящими к вопросам будущей карьеры. Об этом свидетельствует и их выбор сферы предпринимательства, связанной с образованием (43,5% ответов). В целом можно ожидать, что рассматриваемая группа студентов сумеет успешно вписаться в рынок труда.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ПОДХОДОВ К ОЦЕНКЕ ЭКОНОМИЧЕСКОЙ СЛОЖНОСТИ РЕГИОНОВ

Гусев А.А.

ЦЭМИ РАН gusevalexeval@yandex.ru

Индекс экономической сложности (ECI) (Hidalgo, Hausmann, 2009) измеряет сложность производственной структуры региона путем объединения информации о разнообразии экономики (количество сильных секторов) и распространенности сильных секторов (количество регионов, в которых сектор является сильным). Идея, лежащая в основе ECI, заключается в том, что развитые региональные экономики разнообразны (диверсифицированы) и производят продукцию сильных секторов, которые в среднем имеют низкую распространенность, потому что только несколько региональных экономик развили сектор до уровня сильного. Характеристики сложности производственных структур регионов можно рассматривать как показатель уровня человеческого и социального капитала региональной экономики, поскольку способность региона производить продукцию сильных секторов с высокими оценками сложности зависит от накопленных знаний и способности людей формировать социальные и профессиональные сети для того, чтобы собирать, накапливать и использовать в производстве новые знания (Hidalgo, 2015).

В докладе предложен подход к оценке экономической сложности регионов России по 24 видам экономической деятельности (ВЭД). Подход основан на стандартном методе оценки экономической сложности регионов и позволяет получить оценки экономической сложности ВЭД. Проведён сравнительный анализ оценок экономической сложности по 82 секторам и 24 ВЭД для 79 регионов по данным за 2019 г. Корреляция составляет 0,77. При отсутствии трёх добывающих регионов (Оренбургская, Тюменская и Сахалинская области) корреляция оценок экономической сложности регионов по секторам и по ВЭД становится 0,82. Рассмотрены различные пороговые значения для показателя RCA. Максимальная близость между оценками экономической сложности регионов по секторам и ВЭД достигается при пороговых значениях 0,25 по секторам и 0,25 по ВЭД соответственно. Корреляция составляет 0,87. Таким образом, оценки экономической сложности регионов сохраняют высокую устойчивость при переходе от данных по налоговым поступлениям при оценке по секторам к данным по объёмам производства при оценке по ВЭД. Оценка экономической сложности регионов по 24 ВЭД может быть полезна при решении задач управления, направленных на повышение экономической сложности региона.

Литература.

1. Hidalgo, C. (2015). *Why information grows: The evolution of order, from atoms to economies*. New York: Penguin Press.
2. Hidalgo, C. A., & Hausmann, R. (2009). The building blocks of economic complexity. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 106(26), 10570–10575.

ВЛИЯНИЕ РОБОТИЗАЦИИ НА ИЗМЕНЕНИЕ ЧИСЛЕННОСТИ ЗАНЯТЫХ

Дубинина В.В.

Учреждение Российской академии наук Центральный экономико-математический институт РАН, Россия, 117418, Москва, Нахимовский проспект, 47, тел. (499)7242532, Факс: (495)1291400, E-mail: Viktoria@li.ru

Для развития мировой экономики наиболее важными производственными процессами являются цифровизация и роботизация производства. Внедрение роботизации позволяет ускорить производственные процессы, повысить загрузку производственных мощностей, оптимизировать технические, человеческие и природные ресурсы, повысить конкурентоспособность экономики, что особенно актуально для России в условиях санкций и взятого курса на реиндустриализацию экономики.

За период 1998-2021 гг. мировой парк промышленных роботов значительно вырос (почти в 5 раз), и, по прогнозам, в ближайшие 10 лет он будет расти еще быстрее благодаря рекордным темпам установки роботов в Китае.

Наиболее важными факторами роста продаж роботов являются ускорение и изменение бизнес-циклов, сокращение времени производства товаров, необходимость большей гибкости производственных процессов, большая способность настраивать выпуск продукции в соответствии с требованиями клиентов.

В то же время ускоряющаяся автоматизация промышленного производства вызвала опасения, что значительная часть рабочей силы, особенно неквалифицированная, может потерять рабочие места. Многие исследователи считают, что существует угроза технологической безработицы. Однако эта угроза не одинакова для всех стран и связана с уровнем экономического развития того или иного государства. Таким образом, страны с более низким ВВП на душу населения характеризуются более высоким процентом людей, подверженных риску замещения их рабочих мест роботами. По оценкам экспертов, в России процессы роботизации могут затронуть 50% занятых (35.4 млн человек).

В связи с этим целесообразно изучить, как влияет роботизация на численность занятых в различных странах и отраслях промышленности. Оценкой уровня распространения роботов в экономике в целом и отраслях промышленности служит показатель плотности роботизации (количество роботов на 10 тыс. занятых). Этот показатель использовался в данной работе для моделирования влияния роботизации на численность занятых.

АДДИТИВНОЕ ПРОИЗВОДСТВО В РОССИИ И ЗА РУБЕЖОМ

Дубинина М.Г.

Учреждение Российской академии наук Центральный экономико-математический институт РАН, Россия, 117418, Москва, Нахимовский проспект, 47, тел. (499)7242532, Факс: (495)1291400, mgdub@yandex.ru

Аддитивное производство (АМ) представляет собой процесс послойного соединения материалов для изготовления деталей на основе данных 3D-моделей. За годы своего существования эта технология перешла от печати прототипов к созданию готовой продукции, а ее рынок за период 1995-2021 гг., по данным отчетов Wohlers, вырос более чем в 32 раза (с 471 млн долл. в 1995 г. до почти 15.3 млрд долл. в 2021 г.). Эта технология позволяет быстро и относительно дешево создавать пользовательские объекты по индивидуальным характеристикам, а напечатанные продукты можно использовать в самых разных отраслях промышленности, в строительстве и медицине.

Существенно расширился круг используемых в аддитивном производстве материалов. Несмотря на сохранение ведущей роли полимеров, в промышленном производстве все больше используются металлические порошки, керамика и другие материалы. Рынок 3D-печати металлом развивается быстрее, чем любой другой сегмент. Объем мирового рынка аддитивного производства с использованием металлических порошков по оценкам экспертов в 2020 г. составил более 590 млн долл. Инновации в области материалов для 3D-печати позволяют производить продукты со свойствами, которые соответствуют или превышают свойства продуктов, изготовленных с помощью традиционных методов.

Доля промышленных 3D принтеров в общей стоимости 3D принтеров в 2021 г. составила более 70%, хотя в количественном выражении в 2018 г. она не превышала 3,3%. Это связано с гораздо более высокой стоимостью промышленных 3D принтеров по сравнению с настольными, хотя в последние годы их цена снизилась в несколько раз (стоимость промышленных и профессиональных 3D-принтеров в 2016 г. составляла примерно до 10 тыс. и 5 тыс. долл. соответственно, а в 2015 г. - более 20 тыс. долл.).

До недавнего времени Россия занимала 11-е место в мире по использованию 3D-печати, ее доля на мировом рынке не превышала 2%. Однако в 2021 г. была принята программа развития аддитивных технологий в России. В настоящее время, в связи с введенными против нашей страны санкциями, развитие аддитивных производств становится особенно актуальным. За последние годы удалось снизить долю зарубежных принтеров в аддитивном производстве с 96% в 2011 г. до 58% в 2019 г. Основным потребителем аддитивного производства в России является авиационная промышленность (около 30%).

В работе выявляются основные тенденции развития и области применения аддитивных технологий, оцениваются темпы роста числа патентов в области 3D-печати по странам и используемым технологиям.

АНАЛИЗ СОВРЕМЕННОГО СОСТОЯНИЯ РЫНКА ТРУДА В НАУЧНОЙ СФЕРЕ

Ковалева А.В.

Объединенный Институт Ядерных Исследований

Сфера науки представляет собой сложный и постоянно развивающийся социальный организм. Благодаря регулированию развития научной сферы государство имеет реальные возможности обеспечить общее экономическое развитие страны, а также эффективно решать вопросы, касающиеся ее стратегических интересов на международной арене. В значительной степени данный процесс способствует конвергенции наук и технологий, благодаря которой достигаются результаты, которые были бы невозможны в рамках только одной из наук.

Основным регулятором, обеспечивающим необходимый рациональный баланс между процессами сохранения и обновления количественного и качественного состава научных кадров в сфере науки, является рынок труда научных работников.

Для эффективного регулирования спроса и предложения на рынке труда научных работников необходимо осуществление постоянного мониторинга рынка труда с целью изучения динамики происходящих изменений, а также выявления влияющих на конъюнктуру рынка факторов при помощи статистических методов анализа данных.

Целью исследования является оценка текущего состояния рынка труда в сфере науки и оптимизация существующих экономических и законодательных механизмов его регулирования.

Для исследования рынка труда в сфере науки использовались официальные статистические данные за период 2015-2020 гг. Для сравнительного анализа данных указанного периода с предшествующими периодами изучались статистические данные за период 1992-2020 гг., в том числе в разрезе динамики общей численности населения страны, а также миграции научных кадров. Источником необходимой для исследования сведений служила информация Федеральной службы государственной статистики (Росстат), а также сведения профильных министерств и ведомств – Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, Министерства просвещения Российской Федерации, Федеральной службы по труду и занятости, Федеральной службы по интеллектуальной собственности и т.д. Для анализа отдельных аспектов использовалась информация Института статистических исследований и экономики знаний Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики» (ИСИЭЗ НИУ ВШЭ).

Анализ рынка труда в сфере науки необходим для понимания и оценки динамики происходящих на нем изменений, выявления факторов, оказывающих существенное влияние на его развитие и конъюнктуру, а также выработки и принятия управленческих решений, направленных на своевременное устранение выявленных недостатков.

ОЦЕНКА СТРУКТУРНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ РОССИЙСКОЙ ЭКОНОМИКИ НА ОСНОВЕ АНАЛИЗА ДАННЫХ КРУПНЕЙШИХ КОМПАНИЙ

Комкина Т.А.

ЦЭМИ РАН, 117418 Москва, Нахимовский проспект, 47, т. 8(495)779-13-25,
tania_kom@mail.ru

Российская экономика переживает в настоящее время значительную трансформацию, что обусловлено процессами импортозамещения, новыми партнерами по внешнеэкономической деятельности, происходящей перестройкой систем закупки материалов и оборудования, изменениями технологических цепочек внутри отраслей, а также внутренней реструктуризацией компаний. В связи с этим интерес представляет анализ динамики показателей рейтинга крупнейших компаний России «Эксперт-400» за период 2010–2019 гг. (до пандемии), исследование изменений, которые происходили за этот период времени в структуре российской экономике [1].

Отраслевой анализ динамики доли отрасли в общем объеме реализации за рассматриваемый период показал, что лидерами роста стали такие направления, как «Телекоммуникации и связь», «Многоотраслевые холдинги», «Строительство», «Агропромышленный комплекс», «Информационные технологии». При этом направление «Инжиниринг, промышленно-инфраструктурное строительство» показало значительное снижение по данному показателю (на 67%). С 2013–2014 г. в связи с санкциями и девальвацией рубля упали доходы нефтегазового сектора, что, в свою очередь способствовало снижению инвестиционной активности самого крупного в нашей стране потребителя машиностроительной продукции (нефте-газодобывающих компаний), что, возможно и спровоцировало падение объема реализации машиностроительной продукции в последние несколько лет.

Анализ общих показателей рейтинга «Эксперт 400» показывает, что за период 2010–2019 гг. совокупная выручка компаний, входящих в рейтинг, в текущих ценах выросла более чем в 3 раза. На первые двадцать крупнейших компаний в рейтинге приходится более половины всей выручки (это в основном нефтегазовые компании - дают 33,3% выручки, а также инфраструктурные монополии). Ожидаемых существенных структурных изменений за рассматриваемый период в рейтинге 400 крупнейших российских компаний не произошло. Лидеры по доле отрасли в общем объеме реализации остались прежними (нефтяная и нефтегазовая промышленность, розничная торговля, банки). Следует отметить значительное продвижение в рейтинге многоотраслевых холдингов («Ростех», группа «Сафмар», «Росатом», EN+2, АФК «Система», «Мечел», группа «Синара», ГК «Ташир»). В 2010 г. в рейтинг входил только АФК «Система».

Литература

1. Рейтинг крупнейших компаний России «Эксперт-400»
<https://expert.ru/expert400/2021>.

СВЯЗЬ ИНДЕКСА ЭКОНОМИЧЕСКОЙ СЛОЖНОСТИ И ВРП: РЕГИОНЫ РОССИИ

Кудров А.В.

Центральный экономико-математический институт РАН,
Россия, 117418, Москва, Нахимовский проспект, 47,
E-mail: kovlal@inbox.ru

Индекс экономической сложности определяет основу современной теории экономической сложности и отражает уровень знаний, заложенных в производственной структуре экономики. Цель данной работы – построение модели, отражающей механизм влияния экономической сложности на ВРП для данных по субъектам РФ за период 2018-2020 гг. Необходимые зависимости между переменными модели выявляются с использованием методов причинного анализа и техники проверки значимости семейства гипотез. Для этого строится граф непосредственных связей системы показателей, включающей индекс экономической сложности и основные факторы в обобщенном представлении производственной функции для ВРП. На основании полученного графа строится модель региональной экономики, в которой учитывается вклад и роль экономической сложности. Статистические расчёты и полученные значения основных параметров модели позволяют по-иному взглянуть на интерпретацию индекса экономической сложности, который не является связанным конкретно с развитием обрабатывающих производств и науки, но представляет собой характеристику уровня диверсификации региональной экономики.

АНАЛИЗ РАЗВИТИЯ МОБИЛЬНЫХ ЧИПСЕТОВ КОМПАНИЙ QUALCOMM, APPLE И SAMSUNG

Кузнецова М.С.

Учреждение Российской академии наук Центральный экономико-математический институт РАН, Россия, 117418, Москва, Нахимовский проспект, 47, тел. (499)7242532, Факс: (495)1291400, mary.cuznetsow2012@yandex.ru

Для поддержания интереса среди потребителей производители смартфонов вынуждены постоянно улучшать их технические характеристики. Чипсет (система на кристалле, SoC) является важнейшим элементом смартфона, он во многом определяет его производительность и эффективность.

Чипсет (System on a Chip, SoC) - набор микросхем, включающий центральный процессор (CPU), графический процессор (GPU), цифровой процессор обработки сигналов, процессор обработки изображений, банк памяти, модули связи и т.д. Технические показатели чипсета определяются величиной техпроцесса, на основе которого он изготовлен: чем меньше нормы производства, тем меньше размер устройства (и больше транзисторов можно разместить на одинаковой площади) и более высокие частотные показатели, производительность.

Совершенствование чипсета расширяет возможности современных смартфонов и позволяет использовать их более интенсивно. Вместе с тем, как правило, повышаются риски негативного воздействия энергии электромагнитного поля на здоровье человека. Поэтому представляет интерес ориентировочная оценка изменения технических показателей чипсетов компаний Qualcomm (семейство Snapdragon), Apple (Ax), Samsung (Exynos), которые используются в наиболее известных смартфонах Samsung, Apple и Nokia.

В работе выявлены закономерности и тенденции изменения технических показателей чипсетов на основе исследования развития техпроцесса чипсетов Qualcomm 2007-2022 гг., Apple 2010-2022 гг., Samsung 2010-2021 гг., а также определены взаимосвязи между показателями.

Для анализа технических показателей чипсетов были рассмотрены следующие характеристики: техпроцесс, серия чипсета, поколение чипсета, частота центрального процессора (CPU), частота графического процессора (GPU), количество ядер.

Результаты исследования показывают, что развитие чипсетов характеризуется снижением величины техпроцесса (если в 2007 г. величина техпроцесса составила 65 nm, то 2022 г. - 4 nm), а также тенденцией к увеличению количества ядер, частоты центрального процессора и частоты графического процессора.

РАСПРОСТРАНЕНИЕ ИКТ В РЕГИОНАХ РОССИИ КАК ОДИН ИЗ ФАКТОРОВ СНИЖЕНИЯ ЦИФРОВОГО НЕРАВЕНСТВА

Никонова М.А.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Центральный экономико-математический институт РАН, Россия, 117418, Москва,
Нахимовский пр-т, 47, flowerchek1982@mail.ru

Одно из направлений государственной политики в области развития информационного общества и электронного правительства на федеральном и региональном уровнях является развитие сектора ИКТ. В проведенном исследовании в качестве эндогенной переменной, отражающей уровень распространения ИКТ в регионах России, был использован показатель распространения интернета в домашних хозяйствах (доля домашних хозяйств, использующих мобильные устройства (мобильные телефоны или смартфоны, устройств для чтения электронных книг и др.) для выхода в сеть интернет). В качестве экзогенных переменных были выбраны следующие: x_1 – ВРП в расчете на душу населения (тыс. руб./чел.), x_2 – среднедушевые доходы населения (тыс. руб./чел.), x_3 – доля городского населения (%), x_4 – плотность населения (чел./км²), x_5 – телефонная плотность (фиксированная электросвязь) на 100 человек населения. Исследование проводилось по федеральным округам РФ.

На первом этапе был проведен однофакторный анализ распространения интернета. Далее были построены многофакторные модели, позволившие выявить специфику регионов. Так, в ЦФО рост использования мобильных устройств для выхода в интернет характерен для регионов с высокой плотностью населения и высоким уровнем ВРП на душу населения и среднедушевых доходов населения. При этом повышение уровня телефонной плотности снижает уровень использования мобильными устройствами для выхода в интернет.

Для регионов СЗФО было показано, что более высокий уровень использования мобильных устройств для выхода в интернет характерен для регионов с более высокими среднедушевыми доходами населения и плотностью населения

В регионах СКФО уровень использования мобильного интернета выше в более урбанизированных регионах (с более высокой долей городского населения и уровнем телефонной плотности). При этом среднедушевые доходы населения отрицательно коррелированы с использованием мобильных устройств для выхода в интернет.

Для регионов УФО была выявлена положительная корреляция показателя с ВРП на душу населения (или среднедушевыми доходами населения) и долей городского населения; для регионов СФО – со среднедушевыми доходами населения и плотностью населения.

НОВЫЕ ТЕНДЕНЦИИ РЕГУЛИРОВАНИЯ РЕПРОДУКТИВНОГО ЗДОРОВЬЯ ЖЕНЩИН РОССИИ

Русанова Н.Е.

Институт социально-экономических проблем народонаселения имени Н.М.
Римашевской ФНИСЦ РАН
Россия, 117218, г. Москва, Нахимовский проспект, дом 32
ninrus238@mail.ru

Внимание к репродуктивному здоровью возрастает в связи с медиализацией естественного движения населения как основы демографической ситуации. Регулирование репродуктивного здоровья отражает его взаимосвязь с общественными потребностями демографического перехода, учитывающих репродуктивные возможности населения. При высокой рождаемости основное внимание уделялось медицинским компонентам репродуктивного здоровья (материнская смертность, аборт, инфекции, передаваемые половым путем), при низкой рождаемости повышается значение социальных и организационных компонентов, связанных с доступностью репродуктивной помощи, лечения бесплодия, комфортностью беременности и родов.

Цель исследования – оценить новые тенденции изменения репродуктивного здоровья населения на макроуровне по данным официальной статистики и профессиональных сообществ (Росстат и МЗ РФ за 1990-2020 гг.), на микроуровне – по данным авторского опроса 2022 г. и вторичной социологической информации.

Одним из самых консервативных компонентов репродуктивного здоровья является организация ведения беременности и родовспоможения, поскольку строго регулируется государственной системой общественного здравоохранения, с одной стороны, и испытывает серьезное влияние национальных традиций и обычаев, с другой. Первичный анализ пилотного электронного опроса 54 женщин репродуктивного возраста (апрель 2022 г.), в котором участвовали немедицинские специалисты: доулы, ведущие курсы подготовки к родам, перинатальные психологи и проч., показал намерение женщин подходить к ведению собственной беременности и организации родов как части жизненного цикла, соответствующей социальным требованиям постиндустриального общества и не ограничивающей достижение карьерных целей. Несмотря на положительное отношение к государственным стандартам охраны здоровья беременных, ок. 20% опрошенных предпочли нелицензированные в России домашние роды как альтернативу «акушерской агрессии», вызванной необоснованным вмешательством врачей в процесс родовспоможения.

Вариативность ведения беременности и родовспоможения является новой тенденцией последних лет, свидетельствующей об осознанном репродуктивном выборе и дифференциации подхода к медиализации всего процесса беременности, от максимальной на стадии зачатия, часто связанной с медико-ассоциированной репродукцией, до минимальной на стадии родов, когда женщины стремятся избежать чрезмерного медицинского вмешательства.

ДИНАМИКА ВОСПРИЯТИЯ РЫНКА ТРУДА И ЗАНЯТОСТИ В РФ С 90-Х ГГ.

Тарасова Н.А.

Центральный экономико-математический институт РАН,
Россия, 117418, г. Москва, Нахимовский проспект, 47
tarasovan2008@yandex.ru

Терминология сферы труда и занятости с 90-х гг. отражала резкое разделение исследователей (и исследований) в этой сфере по двум направлениям. Первое исходило, прежде всего, из меняющихся реалий экономического развития России с начала 90-х гг. (исследования в ЦЭМИ РАН); второе — из априорного принятия логики развития России по логике, меркам и оценкам нелиберальной экономики, принятой по примеру Запада (так сказать, «западники» с лидерством ВШЭ). Наиболее ярко это отразилось в терминологии, предлагаемой или использованной в каждом направлении.

В ЦЭМИ РАН все началось с 1993 г. с исследований (начатых одновременно и независимо друг от друга, что подчёркивает их актуальность) акад. Львова и к.э.н. Тарасовой по организации вынужденной занятости трудящихся (ВЗ) — т.к. власть осознавала опасность их массовых волнений. Это была ВЗ наемных работников в организациях и предприятиях, т.е. на микроуровне экономики. В ВШЭ начало было положено публикациями о «ненормальности» российского рынка труда — на основе опубликованной в Англии в 1995 г. работе по эластичности оплаты труда. Дальнейшее расхождение характера исследований и в ЦЭМИ РАН, и в ВШЭ шло в условиях кризиса 2008-2009 гг. В ЦЭМИ РАН это определялось пониманием необходимости развития ВЗ уже на мезоуровне экономики — прежде всего, для «спасения» попавших в тяжёлые ситуации кризисных моногородов. «Западники» же спокойно докладывали (на международной конференции в ВШЭ) о таком выходе для жителей этих городов: «...а остальные сопьются». Это сопровождалось непониманием (в т.ч. и экспертами Всемирного банка, по их признанию на конференции) отсутствия в РФ массовой безработицы при кризисе, что опять было отнесено к «ненормальности» нашего рынка труда. Кстати, постоянно, широко и весьма тщательно используемый нами в исследованиях многоаспектный семиотический контроль данных (по семиотике Ч.С. Пирса) позволил доказать некорректность работы западных учёных (на базе РМЭЗ с весьма недостаточным контролем данных) для расчёта так и не оправдавшейся эффективности ввода в РФ 13%-ой плоской налоговой шкалы; но на конференции-2011 в ВШЭ работу наградили 1-й премией РФ по прикладной экономике.

В ЦЭМИ РАН при исследовании нами занятости в кризисных моногородах, помимо ВЗ наёмных работников, было введено и новое понятие «вынужденный предприниматель» — их появление властями поощрялось, но сфера их действий при этом ограничивалась. «Западники» же (А.Б. Шаповал и др., ВШЭ) в 2017 г. стали в публикациях на русском и английском языках использовать этот термин при полностью искажённом его понимании (с чем позднее согласился и А.Б. Шаповал) — просто как нехватки личных способностей при неограниченных возможностях. В РФ политика занятости, доходов и налогов социализируется. Это — и государственные программы развития кризисных моногородов, и вообще активное поощрение ВЗ государством (в т.ч. полной ВЗ в форме административных, или, как их назвал в 2022 г. президент, вынужденных отпусков), и рост семейных и пенсионных выплат, и ввод, по инициативе В.В. Путина, так называемого «налога на богатых» с 15% налога на годовой доход свыше 5 млн руб. Ввод этого налога, чья выплата за год более чем в 10 раз превысила ожидаемую, согласуется с таким необычным явлением в западной экономике, как недавнее открытое письмо (к конференции в Давосе) более 100 миллионов из разных стран Запада о необходимости роста налогов с них ради устранения исходной несправедливости налоговой системы, вызывающей угрозу бурного недовольства низов условиями их жизни (что уже проявлялось в выступлениях прекариата — например, во Франции).

ОТКЛОНЯЮЩЕЕСЯ ПОВЕДЕНИЕ КАК СОЦИАЛЬНО-ЭКОНОМИЧЕСКИЙ ФЕНОМЕН

Устюжанина Е.В.

Центральный экономико - математический институт РАН , Отделение макроэкономики и моделирования региональных систем

Высокая динамика институциональной среды порождает множество институциональных дисфункций, в том числе, различные виды отклоняющегося поведения. Под отклоняющимся поведением в работе понимается поведение социальных акторов, которое не совпадает с ожиданиями других лиц, сформированными на основе общих ментальных моделей и сложившихся социальных норм. Определены основные факторы, обуславливающие возникновение и распространение данного феномена. Предложены критерии классификации и выделены основные типы отклоняющегося поведения. Особое внимание уделено отклоняющемуся поведению в системе высшего образования.

О СОВРЕМЕННЫХ МОДЕЛЯХ И СИСТЕМАХ РАННЕГО ПРЕДУПРЕЖДЕНИЯ ВООРУЖЕННЫХ КОНФЛИКТОВ

Фаркова Н.А.

Дипломатическая академия МИД РФ, Москва, ул.Остоженка, 53/2, стр. 1

С 90-х годов прошлого века понятие «предупреждение конфликта» стало одним из самых обсуждаемых как в научных кругах, так и среди практиков различных направлений. Предупреждение конфликтов — часть общего управления конфликтами и является довольно долгогостоящим и длительным процессом, подразумевающий широкий спектр действий, способствующих предотвращению и разрешению конфликта с применением различных методов, включая посредничество в поддержании мира, миротворчество, меры по поддержанию доверия, неформальную дипломатию и т.д. Выделяют такие процедуры как анализ сложившейся ситуации, фиксацию социальных фактов, превентивные профилактические меры, направленные на устранение или минимизацию причин возникновения конфликтов. При применении количественных методов анализа предупреждения конфликтов наряду с другими инструментами, используют системы индикаторов раннего предупреждения (early warning indicators), принцип анализа и использования которых совпадает с индикаторами, используемыми для предотвращения финансовых кризисов. Такой подход позволяет с относительно высокой точностью выявлять потенциальные очаги политической напряжённости, способные перерасти в широкомасштабные конфликты.

Одним из индексов для анализа рисков возникновения (или продолжения и возобновления) вооруженных конфликтов является Глобальный индекс мира, публикуемый австралийской исследовательской организацией Институтом экономики и мира с 2007 г. Индекс базируется на подходе оценки «негативного мира», который рассматривается как основа для «позитивного мира». «Позитивный мир» определяется как совокупность социальных отношений, структур и институтов, которые способствуют формированию и устойчивости мирных обществ. «Негативный мир» состоит из трех измерений, каждое из которых составляет отдельную группу индикаторов: продолжающийся внутренний или международный конфликт, социальная безопасность и защищенность, милитаризация.

Модели в количественных исследованиях раннего предупреждения конфликтов имеют большую практическую ценность для отбора индикаторов конфликта. В докладе обсуждаются их преимущества и недостатки.

Литература.

1. Л.М.Капица. Индикаторы мирового развития - монография/коллектив авторов, под ред. Л.М. Капицы - Москва: КНОРУС, 2020

ПРИМЕНЕНИЕ ВІ АНАЛИТИКИ В СКВОЗНЫХ ЗАДАЧАХ

Шитова Ю.Ю., Петров А.С.¹

Российский государственный гуманитарный университет, Россия, 125047, Москва,
Миусская пл.д.6., shitova.yu@rggu.ru.

Для объяснения возможностей сквозной аналитики и ее применения необходимо рассмотреть уровни данных и метрики, которые используются на различных уровнях данных. Построение сквозной аналитики неразрывно связано с инфраструктурой сайта, которая выстраивается с помощью веб-аналитики. В то время как расчет эффективности продаж для “традиционных” маркетинговых инструментов (например, телевизионная реклама) уже давно практикуется, для новой, развивающейся области цифрового маркетинга эта работа продолжается. В зависимости от целей кампании и ее сложности точное измерение может быть очень сложным. Тем не менее, в качестве общего управленческого правила следует попытаться оценить результаты. Это означает, что компаниям необходимо работать со всей доступной информацией.

Веб-аналитика — это практика измерения, сбора, анализа и представления интернет-данных для того, чтобы понять, как сайт используется аудиторией и как его оптимизировать. Целью веб-аналитики является понимание пользователей сайта, их поведения и активности. Для того чтобы веб-аналитика была значимой, процесс сбора данных должен быть тщательно разработан для получения последовательных и надежных данных. Аналитики, работающие в веб-аналитике, должны быть осведомлены о том, как работают системы и как они генерируют данные. Первый шаг при анализе системы сквозной аналитики — это проверка достоверности информации. Однако, как видно из обзора литературы, в экосистеме больших данных нет единого мнения о том, какие конкретные показатели наиболее полезны — например, клики, показы, время на сайте. При этом стоит отметить, что данные метрики больше относятся к уровню веб-аналитики, которые предшествует сквозной аналитике. В любом случае, чтобы правильно использовать метрики оценки эффективности, необходимо разбить путь пользователя на несколько последовательных шагов, для достижения каждого шага стоит выделять свои отдельные метрики, также, необходимо изучить различные модели заключения контрактов, используемые при расчете ставок на цифровую рекламу во время онлайн аукционов.

S4

СОЦИАЛЬНО-ЭКОНОМИЧЕСКИЕ
ИССЛЕДОВАНИЯ

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ЭКОНОМИКЕ И
СОЦИОЛОГИИ (ЭКОНОФИЗИКА И СОЦИОФИЗИКА)

SOCIAL-ECONOMY RESEARCH

ECONOPHYSICS AND SOCIOPHYSICS:
MATHEMATICAL METHODS

Руководители:

Ольга Евгеньевна Пыркина, Анатолий Викторович Шатров.

РЕЖИМЫ МИНСКОГО В ДВУМЕРНОЙ ДИСКРЕТНОЙ ЛИНЕЙНОЙ МОДЕЛИ

Волкова Е.С., Гисин В.Б.

Финансовый университет при Правительстве Российской Федерации,
Россия, 125167, Москва, пр-кт Ленинградский, д. 49/2,
E-mail: vginin@fa.ru

С именем Минского связано одно из направлений современной макроэкономики, оказывающее большое влияние на развитие экономической науки в целом и анализ природы кризисов в особенности, см. [1]. Интерес к работам Минского резко вырос после финансового кризиса 2008 г. В течение довольно продолжительного времени идеи Минского не получали должной оценки. Одной из причин этого было то, что они не были оформлены в виде математических моделей. Циклическая смена режимов финансирования фирм (стержневая концепция теории Минского): хеджевый режим (H) – спекулятивный режим (S) – режим Понци (P), — служит объяснением экономической динамики, однако сложно поддается математическому моделированию (см. [2]). Тем не менее, разработано большое число динамических моделей, в которых проявляются характерные черты финансовой нестабильности, описанные Минским [3]. Согласно кейнсианскому подходу при оптимальной инвестиционной стратегии предельная эффективность инвестиций должна совпадать с рыночной ставкой. Модели Минского, как правило, основываются на посткейнсианском подходе [4], при котором к рыночной ставке добавляется дополнительное слагаемое (предельный риск), растущее вместе с суммой инвестиционных расходов. В этом докладе описывается дискретная двумерная линейная модель, поведение которой демонстрирует характерную смену режимов HSP при реалистичных значениях экономических параметров. Уравнения связывают выпуск с долговой нагрузкой. Модель содержит восемь основных макроэкономических параметров: базовое потребление, предельная склонность к потреблению, правительственные расходы, скорость адаптации выпуска к спросу, действующая процентная ставка, доля труда и доля капитала в общей стоимости выпуска. Три специфических параметра связаны с функцией инвестирования. В модельном эксперименте показано, что управление объемом правительственных расходов, может отсрочить неблагоприятную смену режимов.

Литература

1. *Розманский И. В.* Вклад Х. Ф. Мински в экономическую теорию и основные причины кризисов в позднейиндустриальной денежной экономике // *Terra Economicus*. 7, 1, 2009. 31—42.
2. *Розманский И. В., Селицкий М. С.* Подтверждение гипотезы финансовой нестабильности на данных частных фирм Южной Кореи // *Журнал экономической теории* **18**, 3, 2021. 417-432.
3. Nikolaidi M., Stockhammer E. Minsky models: a structured survey // *J. of Economic Surveys Analytical Political Economy* 31, 5, 2017. 1304-1331.
4. Keen S. *The New Economics: A Manifesto*. - John Wiley & Sons, 2021. 140 pp.

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ИССЛЕДОВАНИЙ МЕТОДОМ ГЛАВНЫХ КОМПОНЕНТ

Заречнев В.А.

Кировский государственный медицинский университет,
кафедра физики и медицинской информатики
Россия, 610998, г. Киров, ул. К. Маркса, д. 112, 8-953-693-89-66, zarechnev_v@mail.ru

В литературе к методу главных компонент, обращаются, как правило, для получения интегральных показателей на основе только первой главной компоненты. А именно, построение на основе данных вначале матрицы унифицированных данных, далее стандартизированной матрицы, получение на ее основе матрицы парных коэффициентов корреляции и спектра этой матрицы. Затем, если первое собственное значение преобладает (более 55% по сравнению с суммой всех вместе взятых), то, перемножив матрицу унифицированных данных на первый собственный вектор-столбец, получали интегрированные показатели. Предметом нашего исследования было наглядное представление показателей 82 регионов России в 2021 году [1] в графическом виде на основе двух первых главных компонент. Спектр матрицы парных коэффициентов корреляции позволяет получить координаты наблюдений в системе координат, более удобной для интерпретации. Первые два собственных значения в сумме составляли, как правило, более 90% от общей суммы. Точечные графические построения и в Statistica и в Excel предусматривают использование только той информации, которая содержится в двух столбцах, на основе которых и выполняется построение. Но нам была необходима возможность наряду с двумя столбцами, на основе которых строится график использовать третий столбец с детальным описанием наблюдений, которые бы мы хотели видеть на графике. Всему этому удовлетворяла программа построения двумерных графиков [4]. В данной программе интервал, на основе которого строится двумерный график, включает в себя и третий столбец, содержащий подписи под точками, координаты которых брались из первых двух столбцов. Естественно подписи в данном случае возможно делать только под интересующими нас точками. Также можно делать фрагменты графиков в задаваемых границах. Ну, а при использовании программ нахождения спектра матриц методом Якоби [2;3] или QR-разложения матриц [4] необходимость в использовании программы Statistica для нашего исследования вообще отпадает.

Литература

1. https://rosstat.gov.ru/storage/mediabank/Region_Pokaz_2021.pdf
2. Заречнев В.А. Статистическое моделирование. Методы, алгоритмы, реализация. Учеб. пособие. – Киров, “Авангард”, 2004. – 159 с.
3. Заречнев В.А. Прогнозирование на компьютере. Методы, алгоритмы, реализация. Учеб. пособие. – Киров, “Старая Вятка”, 2004. – 134 с.
4. Заречнев В.А. Многомерный статистический анализ. Избранные главы. - Киров, ВятГУ, 2012. Электронный ресурс.

ИНТЕРПОЛИРОВАНИЕ ЕСТЕСТВЕННЫМ КУБИЧЕСКИМ СПЛАЙНОМ

Заречнев В.А.

Кировский государственный медицинский университет,
кафедра физики и медицинской информатики
Россия, 610998, г. Киров, ул. К. Маркса, д. 112, 8-953-693-89-66, zarachnev_v@mail.ru

Кубическим интерполяционным сплайном называется функция $P_3(x)$, определенная на отрезке $[x_1, x_n]$, проходящая через точки (x_i, y_i) , называемые узлами интерполирования, дважды дифференцируемая, представляющая на каждом отрезке (x_{i-1}, x_i) $i = 2 \div n$ элемент кубической параболы [1]. Значение $s_i = P_3'(x_i)$ называется наклоном сплайна в точке x_i . Чтобы выполнялось условие непрерывности в точках x_i “стыка” многочленов, приравняем значения вторых производных $P_{3,i}''(x_i) = P_{3,i+1}''(x_i)$, где $i = 2, \dots, n-1$. Зададим еще два краевых условия $P''(x_1) = 0$; $P''(x_n) = 0$, которые определяют так называемый естественный кубический сплайн. Указанные краевые условия дают еще два необходимых уравнения для однозначного определения неизвестных s_i .

Располагая их соответственно первым и последним, получаем систему уравнений с трехдиагональной матрицей

$$\begin{cases} 4h_2s_1 & + 2h_2s_2 & & = 6(y_2 - y_1) \\ h_i^{-1}s_{i-1} & + 2(h_i^{-1} + h_{i+1}^{-1})s_i & + h_{i+1}^{-1}s_{i+1} & = 3[h_i^{-2}(y_i - y_{i-1}) + h_{i+1}^{-2}(y_{i+1} - y_i)] \\ & 2h_n s_{n-1} & + 4h_n s_n & = 6(y_n - y_{n-1}), \end{cases}$$

где $h_i = x_i - x_{i-1}$.

Из системы нам необходимо найти значения s_i . Заметим, что сплайн в [1] выражен в неявной форме, от которой автор [2] приходит к выражению коэффициентов a_0, a_1, a_2, a_3 для привычной формы кубического полинома $P_{3,i}(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3$, коэффициенты которого выражаются через абсциссу и ординату соответствующих узлов и их первых производных, найденных из системы уравнений с трехдиагональной матрицей. Для каждого интервала программа вычисляет эти коэффициенты, что в дальнейшем позволит легко выполнить расчет уже непосредственно в Excel и проверить правильность конечных результатов.

Литература

1. Амосов А.А., Дубинский, Н. В. Копченова Н. В. Вычислительные методы для инженеров”. М., 1994. – 335 с.,
2. Заречнев В.А. Прогнозирование на компьютере. Методы, алгоритмы, реализация. Учеб. пособие. – Киров, “Старая Вятка”, 2004. – 134 с.

ИТЕРАТИВНЫЕ РАСЧЕТЫ В EXCEL

Заречнев В.А.

Кировский государственный медицинский университет,
кафедра физики и мед. информатики
Россия, 610998, г. Киров, ул. К. Маркса, д.112,8-953-693-89-66, zarechnev_v@mail.ru

Как известно в Excel имеется режим итеративных вычислений. Выполнение таких расчетов производится путем нажатия на клавишу F9 при соответствующих настройках Excel. Наиболее удобным представляется двухтактный способ расчетов. Рассмотрим этот способ на примере последовательного возведения матриц в степень для рассмотрения свойств дискретных цепей Маркова. При умножении множителя, которым является исходная матрица переходных вероятностей, на множитель, уже возведенную в некоторую степень исходную матрицу, мы получаем результат в виде матрицы в степени на единицу большей, чем множитель. Затем, при втором нажатии на F9 производится только перезапись вновь полученной матрицы на место матрицы-множителя. В итеративном методе решения уравнений и систем нелинейных уравнений тот же принцип. Вначале рассчитывается новое значение, или совокупность переменных в случае решения систем:

$$\begin{pmatrix} x_1^{(k)} \\ \vdots \\ x_n^{(k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1^{(k-1)} \\ \vdots \\ x_n^{(k-1)} \end{pmatrix} - \left(\begin{array}{ccc} \frac{\partial f_1(x_1^{(k-1)}, \dots, x_n^{(k-1)})}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_1(x_1^{(k-1)}, \dots, x_n^{(k-1)})}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n(x_1^{(k-1)}, \dots, x_n^{(k-1)})}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_n(x_1^{(k-1)}, \dots, x_n^{(k-1)})}{\partial x_n} \end{array} \right)^{-1} \cdot \begin{pmatrix} f_1(x_1^{(k-1)}, \dots, x_n^{(k-1)}) \\ \vdots \\ f_n(x_1^{(k-1)}, \dots, x_n^{(k-1)}) \end{pmatrix}$$

Рассчитываются погрешность или погрешности, что позволяет оценить достигнутую точность расчетов и решить вопрос о целесообразности проведения дальнейших итераций. А затем новые значения записываются на место старых. А в примере на решение задачи по робастному оцениванию параметров, приводимый автором [2, 1] решаются одновременно две системы нелинейных уравнений, между которыми осуществляется обмен параметрами. Итеративный процесс завершается также при приблизительном равенстве соответствующих параметров на предыдущей и последующей итерациях.

Литература

1. Заречнев В.А. Прогнозирование на компьютере. Основы теории. В 3 частях. Часть 3. Учеб. пособие. – Киров, ВятГУ, 2005. – 99 с.
2. Смоляк С. А., Титаренко Б. П. Устойчивые методы оценивания. – М.: Статистика, 1980. – С. 104.

ОБУЧЕНИЕ ПЕРЦЕПТРОНА ВЫПОЛНЕНИЮ ОПЕРАЦИИ УМНОЖЕНИЯ

Заречнев В.А.

Кировский государственный медицинский университет,
кафедра физики и медицинской информатики
Россия, 610998, г. Киров, ул. К. Маркса, д.112,8-953-693-89-66, zarechnev_v@mail.ru

Задачу, которую поставил перед собой автор [2], состояла в создании наглядной программы, которая бы позволяла понять процедуру обучения перцептрона [1] на основе таблицы умножения. При этом результатом обучения была бы не только таблица весов сети, но и результат в виде расчетных значений в нейронах сети при расчете конкретного примера вплоть до денормализации результата, то есть получения результата умножения. Как известно, сигмоидальная функция активации будь то логистическая функция или гиперболический тангенс работают в интервале от 0 до 1. У гиперболического тангенса часть от -1 до 0 не используется. Поэтому для обучения данные в виде таблицы умножения нормализуются, то есть приводятся к значениям от 0 до 1. Пользователь может задать тот или иной вид сети с одним или двумя скрытыми слоями нейронов в ячейке Excel. После этого выполняется режим “Инициализация сети”, которая формирует сеть и выводит ее в виде структуры соединений. Далее пользователь решает, какую функцию использовать для расчета и вводит диапазон ячеек с обучающими данными, представляющие собой таблицу умножения в виде трех столбцов. Имеется два режима так называемого “Пакетного обучения сети последовательно”: логистическая функция и гиперболический тангенс. В ходе обучения происходит реализация известного алгоритма “обратного распространения ошибки”, используя выбранную пользователем функцию активации. Алгоритм подробно рассматривается [2]. При реализации алгоритма после 1000 итераций показываются последние значения поправок весов нейронов сети при обратном проходе в ячейках Excel, а также появляется окно с максимальным отклонением расчетного значения результата умножения от действительного для самого “неудачного” примера и задается вопрос пользователю о дальнейших его действиях: можно продолжить процедуру расчетов и активизировать следующую партию из 1000 итераций. А можно завершить с получением весов соединений и провести собственный расчет по сформированной сети, дающий те же результаты. Запуская в расчет следующие примеры необходимо только менять входные данные, так как введенные формулы расчетов будут полностью аналогичны, а результаты расчетов совпадут с рассчитанными программой.

Литература

1. *Боровиков В.П.* Нейронные сети. STATISTICANeuralNetworks: Методология и технологии современного анализа данных. / Под редакцией В. П. Боровикова 2-е изд., перераб. И доп.. М.:Горячая линия – Телеком, 2008. – 392 с., ил.
2. *Заречнев В.А.* Многомерный статистический анализ. Избранные главы. - Киров, ВятГУ, 2012. Электронный ресурс.

ПЕРЕХОД ОТ ДИСКРЕТНЫХ К НЕПРЕРЫВНЫМ МАРКОВСКИМ ПРОЦЕССАМ

Заречнев В.А.

Кировский государственный медицинский университет,
кафедра физики и медицинской информатики
Россия, 610998, г. Киров, ул. К. Маркса, д. 112, 8-953-693-89-66, zarechnev_v@mail.ru

Во многих случаях описание моделей не укладывается в рамки дискретных марковских цепей, а требуется их описание в виде непрерывных процессов. Так, например, модель Фикс и Неймана [1] предусматривала измерение доли лиц, умерших от рака для любых временных периодов. Эта модель исходила из матрицы переходных вероятностей с одним поглощающим состоянием – смертью больного. Однако требовалось найти аналитическое соотношение доли умерших от рака, которое было бы функцией от произвольных интервалов времени. Непрерывные марковские процессы исходят из соотношения

$$p(t + \Delta t) = p(t)P(\Delta t) = p(t)(I + \Delta t \cdot R), \quad p(t) = p(0)e^{Rt} = p(0) \left\{ \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(Rt)^i}{i!} \right\}, \quad \text{где}$$
$$R = \ln(P(1)) = \ln(I + X) = X - \frac{X^2}{2} + \frac{X^3}{3} - \dots + (-1)^{k-1} \frac{X^k}{k} + \dots, \quad \text{где } X = P - I.$$
Здесь $p(t + \Delta t)$ – вектор строки вероятностей, P и R – матрицы переходных вероятностей и интенсивностей, I – единичная матрица.

Для того, чтобы найти аналитическое выражение модели необходимо использовать спектральное разложение матрицы интенсивностей R

$$p(t) = e^{Rt} = \sum_{i=1}^r e^{\lambda_i t} \begin{pmatrix} y_1^{(i)} \\ \vdots \\ y_r^{(i)} \end{pmatrix} (x_1^{(i)} \quad \dots \quad x_r^{(i)}) = \sum_{i=1}^r e^{\lambda_i t} \Psi_i.$$

Здесь λ_i – собственное значение, Ψ_i – соответствующая ему сопутствующая матрица. Автор [2] последовательно рассматривает и решает возникающие задачи: нахождение матрицы переходных вероятностей по матрице интенсивностей и обратно, нахождение спектра матрицы интенсивностей на основе QR-алгоритма и метода Гаусса [3], построение спектрального разложения и, наконец, построение конечного уравнения.

Литература

1. *Бартоломью, Д.* Стохастические модели социальных процессов / Под ред. О. В. Старовойта. – М.: Финансы и статистика, 1985.
2. *Заречнев В.А.* Прогнозирование на компьютере. Основы теории. В 3 частях. Часть 2. Учеб. пособие. – Киров, ВятГУ, 2005. – 99 с.
3. *Заречнев В.А.* Многомерный статистический анализ. Избранные главы. - Киров, ВятГУ, 2012. Электронный ресурс.

КАТЕГОРНАЯ МОДЕЛЬ СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ

Зеликин Н.В.

МГУ имени М.В. Ломоносова, Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1,
8 (495) 939 1786, n-zl@yandex.ru

Категорный метод может стать основой концептуальной разработки систем управления экономическими объектами, что особенно актуально в условиях перехода на отечественные средства, в отсутствие на российском рынке поставщиков и операторов зарубежных систем класса ERP (управления ресурсами предприятий). Основой любой системы управления является набор корпоративных баз данных, включающих полный перечень активов, оборотных и внеоборотных, персонала компании, основных и вспомогательных бизнес-процессов, накопительную базу документов и многие другие, привязанные к основным тем или иными количественными отношениями. С точки зрения категорного подхода предприятие представляет собой суперпозицию комплекса производственных узлов в качестве базовой категории, проходящих через них потоков материалов и сетки транзакционных производственно-хозяйственных бизнес-процессов, описывающих последовательное преобразование материалов в процессе переработки сырья и комплектующих в товарную продукцию. В процессе производства все существенные факты регистрируются в виде документов, непрерывно пополняющих корпоративную базу данных, по определенному регламенту формирующих учетные регистры, служащие для создания оперативных и периодических отчетов, заполнения бухгалтерских и налоговых форм. Строго регламентированные бухгалтерские и налоговые, а также детально описанные управленческие процедуры представляют собой категорию собственно управленческой системы – основы для системной разработки транзакционной системы, синхронно актуализирующей все взаимно увязанные специализированные разделы базы данных предприятия. Каждый акт производственно-хозяйственной деятельности отражается в базах данных материалов и трудозатрат. Изменения материальных запасов интегрированы с расчетами с контрагентами и переходят в область финансового планирования. Таким образом категорный подход предоставляет не только концептуальную канву, но и инструментальные средства для разработки автоматизированных систем управления, что способствует эффективной разработке современных АСУ.

Литература:

1. *Ralf Krömer* Tool and Object. A History and Philosophy of Category Theory.- Springer Science & Business Media, 2007
2. *David I. Spivak* Category Theory for the Sciences. - MIT Press, Cambridge, 2013.
3. *Н.В. Зеликин* Категорный метод в приложениях: экономика и социология. Тезисы докладов XXIV конференции МКО. – Москва, 2022

ЭЛЕМЕНТАРНАЯ МОДЕЛЬ БИСТАБИЛЬНОСТИ РЫНКА ТРУДА ДЛЯ ИНДУСТРИАЛЬНОЙ ЭКОНОМИКИ

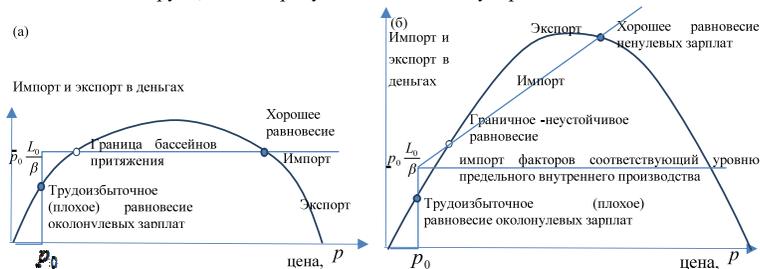
Кривошеев О.И.

Институт проблем управления РАН, Россия, 117997, Москва, Профсоюзная 65,
89261477736, o-krivosheev@yandex.ru

В рамках в том числе широкой общественной дискуссии о возможности и вероятности наступления и усугубления избытка на рынке труда в Мире в целом полезно и необходимо иметь простую и легко интерпретируемую модель соответствующего явления. Именно такая проявляющая от одного до трех равновесий (в зависимости от имеющихся на месте параметров) особо простая модель предлагается в докладе.

Рассматривается единственная линейная технология, импортирующая 1 фактор производства по независящей от объема покупки цене и предлагающая конечный продукт как на внутреннем так и на внешнем рынке. На внешнем рынке спрос описывается линейной функцией в реальных и квадратичной - в номинальных переменных, тогда как импорт факторов производства описывается денежной функцией типа ступенька. В случае отсутствия потребительского импорта -а) картина внешнеторгового баланса на этом исчерпывается, в случае линейного раздела доходов между импортом и внутренним производством - функция полезности а la Кобба-Дуглас получаем линейную добавку к спросу на импорт как изображено на рисунке б) -справа.

В сложном случае (как на рисунке) имеем два устойчивых равновесия, разделенных неустойчивым третьим. Параметрическое исследование модели показывает, что правое равновесие полной занятости исчезает при значительном росте производительности труда, что потребует активного государственного вмешательства.



Литература

1. Кривошеев О.И. Моделирование ренты в трудоизбыточной экономике. 2 стр. Социофизика-2018. Сборник трудов конференции. 2018 год

АНАЛИЗ ЗОН МУЛЬТИСТАБИЛЬНОСТИ СТОХАСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДВУХ ПОТРЕБИТЕЛЕЙ

Павлецов М.М.¹, Первалова Т.В.²

¹ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б. Н. Ельцина», Россия, 620000,
Екатеринбург, Мира, 19, (343) 389-94-77, evlucid@gmail.com

²ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б. Н. Ельцина», Россия, 620000,
Екатеринбург, Мира, 19, (343) 389-94-77, tatyana.perevalova@urfu.ru

В работе рассматривается стохастическая модель взаимодействия двух потребителей, детерминированный вариант которой был представлен в [1]:

$$\begin{cases} x_{1t+1} = \frac{b_1}{p_x p_y} (a_1 x_{1t} (b_1 - p_x x_{1t}) + D_{12} x_{2t} (b_2 - p_x x_{2t})) + \varepsilon \left(\xi_1 \sigma_1 + \xi_3 \sigma_3 \frac{b_1 D_{12}}{p_x p_y} x_{2t} \right), \\ x_{2t+1} = \frac{b_2}{p_x p_y} (a_2 x_{2t} (b_2 - p_x x_{2t}) + D_{21} x_{1t} (b_1 - p_x x_{1t})) + \varepsilon \xi_2 \sigma_2. \end{cases} \quad (1)$$

В данной модели каждый индивид корректирует свои предпочтения исходя из своего прошлого опыта потребления и опыта потребления другого индивида. Система подвержена случайному воздействию либо в виде аддитивного или параметрического шума. Аддитивный шум характеризует разницу в количестве приобретаемых и потребляемых товаров. Параметрический шум описывает ситуацию, когда один из потребителей не обладает информацией о доходах второго, при том, что второй полностью информирован о доходах первого.

В работе проводится анализ детерминированного и стохастического варианта модели в параметрической зоне сосуществования пяти аттракторов. Для детерминированного варианта описываются бифуркационные сценарии при изменении параметра D_{12} , изучаются бассейны притяжения аттракторов. Для стохастической системы изучаются индуцированные шумом переходы между аттракторами, в зависимости от интенсивности случайного воздействия. С помощью техники функции стохастической чувствительности [2] изучается чувствительность аттракторов на вносимый шум и дается конструктивное описание переходов между аттракторами с помощью метода доверительных областей. Описывается индуцированная шумом десинхронизация.

Литература

1. Wulf Gaertner and Jochen Jungeilges. A non-linear model of interdependent consumer behaviour // Economics Letters 27, 2, 1988. 145–150.
2. Bashkirtseva, I., Ryashko, L., Tsvetkov, I. Sensitivity analysis of stochastic equilibria and cycles for discrete dynamic systems // Dyn. Contin., Discrete Impulsive Syst. Ser. A 17, 2010. 501–515.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ РАСЧЕТА КРЕДИТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ДЛЯ ПРОМЫШЛЕННЫХ КОМПАНИЙ

Стихова О.В.

ФГБОУ ВО «МГТУ «СТАНКИН», Россия, Москва, 127055, Вадковский пер., 3а

Математические функции моделей калибровки состояния дефолта промышленных компаний продолжают оставаться актуальными благодаря своим свойствам многопараметричности. Как правило, реальная структура зависимости финансовых активов отличается от гауссовой, особенно в условиях рыночных колебаний.

В работе рассмотрены подходы, необходимые для рынка производных кредитных инструментов применительно к производителям промышленной продукции [1].

Рассмотрены функциональные характеристики, необходимые для решения задач прогнозирования поведения облигаций, обеспеченных долговыми обязательствами (CDO) и свопов на дефолт по кредиту (CDS).

Многопараметрическая модель, основанная на обобщенной гиперболической куполе с обобщенными гиперболическими границами (CGH) учитывает различные смешанные распределения и различные распределения граничных областей, сохраняет при этом желаемые свойства одномерного распределения GH [2].

Рассмотрены модели расчета риска невозврата кредита по одному эмитенту, с помощью которых оценивается возможность наступления дефолта и выход из дефолта [3].

В работе проведены вычислительные эксперименты и верификация результатов по моделированию стоимостных показателей продуктов рынка производных кредитных ценных бумаг компаний производственного сектора, обеспеченных долговыми обязательствами и подверженных дефолту, как на искусственно сгенерированных выборках, так и с использованием реальных данных.

Литература.

1. Стихова О.В. Математическое моделирование поведения дефолта кредитных деривативов промышленных компаний // Вестник МГТУ «Станкин». Научный рецензируемый журнал. №4(23). 2012. стр.81-84.
2. Стихова О.В. Математическое моделирование двойной нормальной обратной куполы гаусса и аппроксимация большого портфеля // «Фундаментальные физико-математические проблемы и моделирование технико-технологических систем». Ежегодный сборник научных трудов. Вып.16. 2014. стр. 97-102
3. Stikhova O.V. Mathematical Estimation Methods and Models for Industrial Companies // EPJ Web of Conferences. 248, 03001 (2021) MNPS-2020 <https://doi.org/10.1051/epjconf/202124803001>.

СРЕДСТВА АНАЛИЗА КОРРЕЛЯЦИИ МЕЖДУ ПОКАЗАТЕЛЯМИ НЕЭФФЕКТИВНОСТИ ЭКОНОМИЧЕСКИХ АГЕНТОВ И ОЦЕНКАМИ ЭТИХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ В МОДЕЛИ СТОХАСТИЧЕСКОЙ ГРАНИЦЫ

Фурманов К.К., Никольский И.М.

ЦЭМИ РАН, МГУ им. М.В. Ломоносова

Работа посвящена актуальной задаче измерения эффективности производства методами анализа данных. Данная задача представляет несомненный практической интерес, выявление неэффективных предприятий является задачей государственного регулирования. Решается она методами анализа данных регулирующими органами Австралии и ряда европейских стран. Оценка эффективности представляет интерес и для теоретических исследований. Так например, журнал «Journal of Productivity Analysis», посвящённый исследованиям производственной эффективности, имеет высокие наукометрическими показателями. В отечественной научной литературе представлен ряд исследований эффективности предприятий отдельных отраслей и целых регионов, а работы посвящённые математико-статистическим аспектам анализа. На данный момент существует достаточно большое количество методов анализа неэффективности. Это и анализ оболочки данных (Data Envelopment Analysis, DEA), и регрессионные модели границы производственных возможностей, и многие другие. Предлагаемая работа использует одну из регрессионных моделей - модель стохастической границы. Её особенность — разделение случайной ошибки регрессии на неэффективность и «случайный шок». К сожалению, данная особенность делает невозможным получение состоятельных оценок эффективности отдельных производителей. В настоящей работе представлены результаты исследования согласованности ранжировок производителей. Исследования проводились на основании модели стохастической границы в форме серии статистических экспериментов над синтетическими случайными данными с известными ранжировками. Было показано, что даже на больших выборках точная ранжировка производителей возможна лишь в случае, когда дисперсия компоненты неэффективности превосходит дисперсию случайных шоков.

Литература

1. Aigner D., Lovell C.A.K., Schmidt P. (1977). Formulation and estimation of stochastic frontier function models. *Journal of Econometrics*, 6: 21–37.
2. Horrace W.C., Seth R.-S., Wright I. (2015). Expected efficiency ranks from parametric stochastic frontier models. *Empirical Economics*, 48(2): 829–848.
3. Rudenko V.A. (2018). Specification Scheme of the Stochastic Production Function for Assessment of Technical Efficiency of the Regions in the Russian Federation. *Russian Journal of Mathematical Research, Series A*, 4: 38–47.
4. Ипатова И.Б. (2015). Динамика совокупной факторной производительности и её компонентов на примере российской отрасли, производящей пластмассовые изделия. *Прикладная эконометрика*, 38(2): 21–40.
5. Малахов Д.И., Пильник Н.П. (2013). Методы оценки показателя эффективности в моделях стохастической производственной границы. *Экономический журнал Высшей Школы Экономики*, 17(4): 660–686.

COMPUTATIONAL METHODS FOR CALCULATION OF CREDIT DERIVATIVES FOR INDUSTRIAL COMPANIES

Stikhova O.V.

MSTU “STANKIN”, Vadkovskiy lane, 3a , Moscow, 127055, Russia

Mathematical functions of default calibration models for industrial companies continue to be relevant due to their multiparametric properties. As a rule, the real dependence structure of the financial assets is different from the Gaussian one and especially under situations of market stress.

The approaches required for the industrial production manufacturers derivative credit tools market are shown in this paper [1].

The estimation functional characteristics required for solving the problems of forecasting the behavior of some collateralized debt obligations (CDO) and credit default swaps (CDS) problem are given in this paper.

The multiparametrical model based on generalized hyperbolic copula with generalized hyperbolic borders (CGH) takes into account the various mixed distribution and various boundary areas distributions, keeps desirable one-dimensional distribution GH properties [2].

The single-name non-repayment credit risk estimation models help us to estimate the default opportunity and avoid it [3].

In this work the computing experiments and results verification on market products industrial sector companies credit default derivatives value are carried out both with the generated samples and with the real data.

References.

1. Stikhova O.V. Mathematical modeling of the industrial companies credit derivatives default process // Vestnik MSTU «STANKIN». Scientific referenced journal. №4(23). 2012. pp.81-84
2. Stikhova O.V. Mathematical modeling double normal inverse gaussian copula and large portfolio approximation // «The Fundamental physics and mathematical problems and techno-technological systems modeling ». Annual collected scientific papers. 16. 2014. pp. 97-102
3. Stikhova O.V. Mathematical Estimation Methods and Models for Industrial Companies // EPJ Web of Conferences. 248, 03001 (2021) MNPS-2020 <https://doi.org/10.1051/epjconf/202124803001>

S5

Г УМАНИТАРНОЕ И ЕСТЕСТВЕННО-
НАУЧНОЕ ОБРАЗОВАНИЕ

N ATURAL AND SOCIAL
SCIENCE EDUCATION

Руководители:

*Надежда Васильевна Аммосова, Елена Владимировна Борисова,
Владимир Ильич Залятин, Владимир Ефимович Карпов,
Полина Викторовна Фурсова.*

О ПРОЕКТЕ ЦИФРОВОЙ АКТУАЛИЗАЦИИ РАБОЧИХ ПРОГРАММ ДИСЦИПЛИН ДЛЯ СТУДЕНТОВ ТЕХНИЧЕСКОГО ВУЗА

Герцен Т.А., Любимов Н.Ю., Любимова А.А.

Пермский национальный исследовательский политехнический университет
614068, г. Пермь, ул. Профессора Поздеева 11, +79223056178, tanger59perm@vandex.ru

Одной из ключевых задач высшего профессионального образования в современных условиях является эффективное и гибкое применение цифровых технологий при подготовке будущего специалиста в соответствии с социальным заказом и требованиями рынка труда. Цель данной работы – на примере РПД «Процессы самоорганизации в химии» представить проект актуализации с активным внедрением цифровых технологий и инструментов.

Занятия по дисциплине (по выбору) несколько лет проводятся для магистров «Хемобиодинамика и биоинформатика», а также представляют интерес как факультатив для студентов экологов, биомехаников, биотехнологов.

Целью развития цифровых навыков на практических занятиях является подготовка специалистов к разработке современных исследовательских технологий в области биоинформатики, умение использовать цифровую измерительную и вычислительную технику для решения фундаментальных и прикладных задач. Выпускник магистратуры должен уметь использовать цифровые инструменты для организации коллективной работы, хранения, обработки данных, визуализации процесса и результатов

В актуальные задачи реализации программы магистратуры направления 01.04.02 входит владение стандартными средствами представления информации (MS Office, Мой Офис), средствами коммуникации Яндекс Телемост, Telegram, а также анализом моделей процессов формирования самоорганизующихся структур с учетом концепции цифровизации естественнонаучных исследований, развития и использования цифровых инструментов для повышения эффективности работ, в том числе (MATLAB (Wavelet), Python, CHEMCAD, SigmaPlot, ChemBio 3D, Chem Draw и их российские аналоги; Яндекс-документы, Яндекс Формы, Google Form, GNU plot, образовательные платформы Stepic, ЭНИОС ПНИПУ LMS Moodle). Кроме того, наблюдения с использованием цифровой техники: микроскоп + компьютер (пример - упорядоченные самоорганизующиеся структуры в природе (кольца Лизеганга) и визуальное наблюдение процесса образования подобных структур в лабораторных условиях

Лекционный блок (16 часов), Лабораторные / практические занятия (18 часов). Самостоятельная работа (72.), а также фонд оценочных средств, включающий не только предметные показатели, но и показатели освоения цифровых инструментов, в том числе кейс (проектное задание).

Результат работы - продолжение актуализация рабочих программ дисциплин на примере магистерской РПД «Процессы самоорганизации в химии» с более широким включением цифровых технологий и цифровых инструментов.

БЕЛОЕ ОБЛАКО

Зезюля Н.В., Емельянова Е.Н.

Государственное бюджетное общеобразовательное учреждение города
Москвы «Школа № 37»
РФ, 119192, г. Москва, ул. Столетова, д. 3, email: 37@edu.mos.ru,
тел. (495) 932-61-02, (499) 739-35-21, (499) 739-35-28 – факс

Наша ассоциация с ватой связана с подготовкой к Новому Году. Разбирая с ребятами старшей группы игрушки для украшения, мы нашли старого ватного Деда Мороза (принесенного воспитателем заранее). Ребята не могли понять, из чего он сделан: это была и не ткань, и не пластик. Оказалось, это - вата! Решили узнать, откуда же берётся вата, и приступили к исследованию.

Историю происхождения хлопка мы с ребятами узнали из детских энциклопедий, научной литературы, презентации и интернета. Это растение называется хлопчатник - одно из самых полезных растений на земле. Выращивают его на огромных плантациях уже тысячелетия. Хлопку необходимо много тепла и света, поэтому растет он в жарких странах. Плод этого растения - коробочка, выглядит, как гигантский пушистый шарик диаметром около 3 дюймов и называется «хлопковый шарик». Его собирают, отрывая коробочку от растения. Затем отвозят на перерабатывающие заводы. Здесь его обрабатывают: вычесывают семена, пух скручивают в нити, расчёсывают, просушивают и формируют в огромные бабины. Получается вата.

Вата, это и есть пух хлопка, только очищенный. Через лупу мы увидели, что вата состоит из очень тоненьких волокон — ниточек, которые при скручивании дают прочное и длинное волокна. Его используют при изготовлении тканей, из которых сшита наша одежда.

Затем мы приступили к исследованию свойств хлопка на примере ваты. Оказывается, это очень послушный материал. Он хорошо впитывает воду, хорошо сохнет и, при этом, сохраняет свою форму. Хорошо склеивается и прекрасно окрашивается. А ещё – приятен на ощупь. Проведя опыты и изучив свойства, ребята пришли к заключению: из пушистого шарика хлопка, если его намочить водой с клеем ПВА, придав форму, и покрасив, можно изготовить Деда Мороза и много других новогодних игрушек.

Мы с ребятами пришли к выводу, что материал (вата и ткани), получаемый из растения хлопчатник, очень полезен для людей, иначе оно не просуществовало бы столько тысячелетий рядом с человеком. Вата обладает отличными качествами: это натуральный, безопасный материал, хорошо сохраняет тепло, впитывает влагу, она мягкая, податливая, долговечная. Изготовленные из ваты изделия, в том числе наши игрушки, недорогие, не приносят вред окружающей среде, изготавливаются без отходов и не загрязняют природу.

ОБ ОСОБЕННОСТЯХ ИЗУЧЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКИХ ДИСЦИПЛИН БУДУЩИМИ ЭКОНОМИСТАМИ В ЭПОХУ ЦИФРОВИЗАЦИИ ОБРАЗОВАНИЯ

Липагина Л.В.

Финансовый университет при Правительстве РФ, Россия, ГСП-3, 125993, Москва,
Ленинградский проспект, 49, E-mail: LLipagina@fa.ru

В 2002 году в России был запущен эксперимент по проведению Единого Государственного Экзамена (ЕГЭ) по дисциплинам школьного образования. А с 2008 года во всех регионах страны ЕГЭ был введен как единственный формат итоговой аттестации за курс средней школы. Преподаватели вузов, ежегодно работающие на первом курсе с выпускниками, сдавшими ЕГЭ, отмечают, что те компетенции, наличие которых у большинства студентов до единого экзамена не вызывало сомнений, в современной ситуации, к сожалению, сформированы у меньшей части бывших школьников. Это обусловлено объективными и субъективными причинами и требует тщательного изучения. Однако, преподавателю необходимо обучать студентов здесь и сейчас. Традиционно математические дисциплины являются достаточно сложными для студентов, получающих экономическое образование. В условиях недостаточной сформированности школьных математических знаний, умений и навыков им приходится осваивать понятия высшей математики. В связи с этим Департаментом математики Финансового университета при Правительстве РФ была создана следующая система обучения математике. В начале первого курса всем студентам рекомендуется пройти повторение школьного курса математики на платформе Открытой Онлайн-Академии в рамках MOOK «Вспомнить все! Школьная математика для первокурсников» (разработан преподавателями департамента). Параллельно с традиционными формами обучения (лекции+семинары+консультации) студентам предлагается Электронный Учебный Курс (ЭУК), содержащий всю необходимую информацию по дисциплине, а также тематические тренинги и тесты. Текущие и промежуточные испытания проводятся с использованием ЭУК. Варианты контроля генерируются системой из созданного в департаменте электронного банка задач. Учебная дисциплина сопровождается учебниками и задачками, написанными с учетом особенностей электронных тестов.

МЕТОДИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ СИСТЕМНОЙ ИНТЕГРАЦИИ ТРАДИЦИОННЫХ И ЦИФРОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ПРЕПОДАВАНИЯ МУЗЫКАЛЬНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ.

Лисицкая Е.В., Гернет Н.Д.¹

ГАПОУ МО «Московский Губернский колледж искусств», преподаватель, Россия, Москва,
e-mail: levgia@yandex.ru, naukaint2016@gmail.com

«Переводчики - это почтовые лошади просвещения»

А. С. Пушкин

Цифровизация всех областей деятельности человека активно меняет и сферу образования, в том числе процесс обучения музыкальной дисциплине. При создании эффективной технологии преподавания, обеспечивающей формирование у ученика знаний, умений, навыков, достаточных для решения профессиональных задач, основываясь на исторической междисциплинарности музыкальной науки, представляется возможным использование современных математических методов системного анализа. В последнее время число различных технологий преподавания каждого предмета, среди которых значительную часть составляют традиционные технологии (ТТ), резко возросло за счёт вынужденного использования цифровых технологий (ЦТ). Анализ накопленного опыта указывает на нецелесообразность отбрасывания как ТТ, так и ЦТ, так как для ТТ накоплен значительный опыт, а ЦТ имеют мощный потенциал за счёт использования методов, моделей, инструментария цифровизации учебного процесса. Очевидно разумным является системная интеграция ТТ и ЦТ, при которой ТТ усиливают ЦТ и ослабляют влияние их недостатков, а ЦТ усиливают достоинства ТТ и ослабляют влияние их недостатков на качество учебного процесса (КУП). Каждая ТТ и каждая ЦТ имеют слабые стороны (СЛС) и сильные стороны (СИС). СИС способствует повышению КУП, а СЛС способствует его снижению. Процесс влияния СИС и СЛС на КУП может быть представлен в виде иерархической модели. В докладе рассматриваются экспертные процедуры, которые на основе метода анализа иерархий находят глобальные приоритеты наиболее значимых: сильных сторон технологий по степени их влияния на повышение КУП; слабых сторон технологий по степени их влияния на снижение КУП; СИС ТТ и ЦТ, существенно ослабляющих влияние СЛС ТТ и ЦТ на снижение КУП. Предлагается способ определения на основе результатов экспертиз выборки ТТ и ЦТ для создания технологии преподавания дисциплины. В заключении рассматриваются особенности практической реализации предлагаемой процедуры для музыкальной дисциплины, требования к отбору экспертов, эффективность применения системного подхода в музыкальном образовании.

СЕТЕВОЕ НАСТАВНИЧЕСТВО. ФОРМА: ПЕДАГОГ-ПЕДАГОГ

Макарова О.В., Яворская Е.Л.

Муниципальное автономное общеобразовательное учреждение «Гимназия №56»,
Россия, 426034, г. Ижевск, ул. Удмуртская, 230,
Тел.(3412)433483, факс (3412)433483
E-mail: makarova_sch56@bk.ru; yavka@list.ru

На сегодняшний день становится актуальной система наставничества, в том числе в сетевом формате. Для создания такой системы необходим запрос от образовательной организации, имеющей молодых или неопытных педагогов-предметников, к образовательной организации с высококвалифицированными педагогами-предметниками на оказание наставнической помощи через различные формы взаимодействия.

В течении нескольких лет гимназия №56 г.Ижевска является ресурсным центром сетевого взаимодействия с образовательными организациями Удмуртской Республики по освоению педагогами современных подходов к решению актуальных задач образования. Одно из направлений взаимодействия гимназии №56 г.Ижевска и МБОУ «Вавожская СОШ» Вавожского района УР - сетевое наставничество, цель которого создание продуктивной педагогической среды, способствующей повышению профессиональных компетентностей педагогов, формированию их потребности в постоянном саморазвитии и самосовершенствовании. Для реализации цели были поставлены следующие задачи:

- создать условия для удовлетворения запросов и устранения дефицитов в профессиональной деятельности педагогов–предметников Вавожской СОШ;
- дифференцированно и целенаправленно спланировать методическую работу на основе выявленных дефицитов неопытных педагогов Вавожской школы и сильных сторон опытных педагогов-предметников гимназии №56.

Методическое обеспечение и реализация практики сетевого наставничества включает следующие шаги: заключить договор о сетевом наставничестве с Вавожской СОШ, нуждающейся в поддержке опытных педагогов-наставников; подписать согласия на совместную работу наставника и наставляемого; назначить координатора, в обязанности которого будет входить налаживание контактов на административном уровне, подобрать формы взаимодействия; провести серию он-лайн встреч и консультаций опытного педагога-наставника с неопытным педагогом-предметником, провести промежуточный и итоговый мониторинги контрольных точек реализации наставничества; получить обратную связь от педагогов сети.

Реализация сетевой формы наставничества обладает положительным эффектом: мобильное взаимодействие с педагогами-наставниками гимназии №56 г.Ижевска, позволяет неопытным педагогам - предметникам Вавожской СОШ устранить проблемы в профессиональной деятельности, сформировать уверенность в своем профессиональном росте, развить навыки и профессиональные компетенции, наметить пути дальнейшего самосовершенствования и развития.

ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ АСПЕКТЫ КОМПЬЮТЕРНОЙ РЕКОНСТРУКЦИИ ГЕННЫХ СЕТЕЙ НА ОСНОВЕ ОНЛАЙН-ИНСТРУМЕНТОВ БИОИНФОРМАТИКИ

Орлов Ю.Л., Туркина В.А., Карпын А.Б., Анашкина А.А., Лебедев Г.С.

Институт Цифровой Медицины, Первый МГМУ им. И.М. Сеченова Минздрава России
(Сеченовский Университет), Россия, 119991, г. Москва, ул. Трубецкая, д. 8, стр. 2
Трубецкая, 8-2, Тел.: +7 (495) 609-14-00, E-mail: y.orlov@sechenov.ru

В работе рассмотрены вопросы компьютерной реконструкции генных сетей – комплексов взаимодействующих макромолекул – по списку генов, ассоциированных с тем или иным заболеванием, или комплексным расстройством на основе общедоступных онлайн-инструментов биоинформатики – STRING-DB, GeneMANIA, приложений Cytoscape. Представлены примеры компьютерного построения и визуализации генных сетей онкологических заболеваний – глиомы, рака молочной железы, а также сложных металлических расстройств, таких как болезнь Паркинсона, шизофрения, которые были опубликованы в соавторстве со студентами в российских и международных журналах в 2021-2022 годах [1,2,3]. Использование только онлайн-инструментов биоинформатики имеет учебный характер, ориентировано на студентов, как математического профиля, так и естественно-научных и медицинских дисциплин, у которых недостаточно навыков в информатике, программировании, написании собственного кода. Автоматическое построение списков генов, ассоциированных с заболеванием с использованием открытых баз данных (OMIM, GeneCards.org), компьютерная реконструкция генных сетей, расчеты статистики обогащенности категорий генных онтологий успешно освоены студентами и представлены в серии дипломных работ. Оценка навыков студентов дана на основе преподавания в НИУ, ДВФУ, РУДН, Первого МГМУ им. И.М.Сеченова Минздрава России.

Проект реализуется победителем грантового конкурса для преподавателей магистратуры 2021/2022 Стипендиальной программы Владимира Потанина.

Литература

1. Дохоян А.Ю., Глущенко М.В., Орлов Ю.Л. Реконструкция генной сети шизофрении для поиска генов-мишеней // *Ульяновский медико-биологический журнал* **том 3**, 2022. Стр. 6–22. doi: 10.34014/2227-1848-2022-3-6-22.
2. Орлов Ю.Л., Галиева А.Г., Орлова Н.Г., Иванова Е.Н., Мозылева Ю.А., Анашкина А.А. Реконструкция генной сети болезни Паркинсона для поиска генов-мишеней // *Биомедицинская химия* **том 67**, выпуск 3, 2021. Стр. 222-230 doi: 10.18097/PBMC20216703222
3. Gubanova N.Y., Orlova N.G., Dergilev A.I., Oparina N.Y., Orlov Y.L. Glioblastoma gene network reconstruction and ontology analysis by online bioinformatics tools // *Journal of Integrative Bioinformatics* **Vol. 18**, 2021. pp. 20210031. doi: 10.1515/jib-2021-0031

ИНДИВИДУАЛЬНЫЙ ПРОЕКТ КАК ЭФФЕКТИВНЫЙ СПОСОБ ПРОФЕССИОНАЛИЗАЦИИ СТАРШЕКЛАССНИКА ГУМАНИТАРНОГО ПРОФИЛЯ

Орлова М.В.

МАОУ "Гимназия № 56", Россия, 426056, Ижевск, ул. Удмуртская, 230; orlova@labore.ru

В современной школе проектная деятельность является неотъемлемой частью образовательного процесса. Она развивает интеллектуальный потенциал школьников и открывает широкие возможности для развития личности и самоопределения. К одиннадцатому классу перед каждым обучающимся гимназии стоит задача продемонстрировать умение создавать проект самостоятельно от начала и до конца, освоив необходимые этапы проектной деятельности. Каждый школьник выбирает тему и создает продукт проекта согласно своему профилю. В классах гуманитарного профиля программу «Индивидуальный проект» реализуют учителя профильных предметов – права, литературы, английского языка или истории, являясь кураторами проектной деятельности обучающихся. Старшеклассники работают в тесной связке с куратором проектов, а также с учителем, которого выбирают в качестве руководителя. Кураторы в своей работе по сопровождению проектов применяют коучинговые технологии: «Колесо знаний», «шкалирование», «доска» и др. А в оценивании метапредметных результатов обучающихся используют разработанную в гимназии электронную программу «Комплекс электронных модулей» (КЭМ), которая позволяет на разных этапах индивидуального проекта фиксировать уровни развития метапредметных компетентностей обучающегося гуманитарного профиля.

На примере индивидуального проекта на тему «Иллюстрации к стихам Куздебая Герда в стиле кубизм» ученицы Н. мы рассмотрели результаты использования алгоритмов сопровождения и оценивания развития метапредметных компетентностей старшеклассника на трех этапах выполнения проекта: «защита выбора темы индивидуального проекта», «защита планирования индивидуального проекта», «защита индивидуального проекта». В электронной программе КЭМ эти результаты доступны ученику в его «личном кабинете» в виде графиков и таблиц, отражающих уровень его развития, что для ученицы Н. явилось мотивом к формированию индивидуального образовательного запроса к куратору проекта, который, в свою очередь разрабатывает карту индивидуального роста и предлагает новые формы и методы работы для развития метапредметных компетентностей обучающегося. Как показывает опыт, работа над проектом развивает познавательные навыки выпускников, ориентироваться в информационном пространстве, умение самостоятельно конструировать свой образовательный маршрут, способствует профессиональному самоопределению.

ОБРАЗОВАНИЕ И ПРОСВЕЩЕНИЕ В МУЗЕЕ ЗЕМЛЕВЕДЕНИЯ МГУ: ШАГИ ЦИФРОВИЗАЦИИ

Пикуненко М.М., Попова Л.В.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Научно-учебный
Музей земледения МГУ, Россия, 119991, г. Москва, Ленинские горы д.1, Главное
здание МГУ, тел.: 8(495)9393011; E-mail: pikulenkomarina@mail.ru, lvpo.eco@mail.ru

Цифровая трансформация образования — динамичный процесс, затрагивающий все уровни образования. В Научно-учебном музее земледения МГУ каждый год проходят учебные лекции, семинары для студентов (более 2000 час), образовательные и открытые просветительские проекты для школьников и учителей. Создание цифровых учебно-методических материалов, инструментов и сервисов, разработка и распространение новых моделей организации учебной деятельности коснулись и естественнонаучный музей университета. В 2012-2022 годах произошло существенное преобразование и расширение существующей музейной практики в нашем университете, появились дистанционные курсы, образовательные проекты в дистанционном формате, музейные онлайн абонементы и практические занятия. Это послужило качественной научно-методической поддержкой цифровой трансформации дополнительного образования и сотрудничества университета и школы.

Анализ позволяет выделить несколько этапов развития цифровой трансформации образовательной деятельности в музее земледения. Первый этап затронул перевод в дистанционную форму программ повышения квалификации учителей в области обязательных школьных дисциплин. На основе заключенного договора МГУ имени М.В. Ломоносова с издательством «Дрофа» в 2012 г. авторами был разработан дистанционный курс повышения квалификации для преподавателей биологии и экологии средних школ (на примере УМК по биологии Н.И. Сонина). Второй этап в 2014-2019 годах заключался в применении дистанционных технологий для отдельных этапов традиционных музейных практик (например, онлайн регистрации на образовательные мероприятия, дистанционного участия в Олимпиаде, Форуме молодых исследователей). Третий этап с 2019 по н.в. затронул создание новых методических приемов проведения онлайн практических занятий и онлайн музейных абонементов.

ПОМОЩЬ ВУЗОВ В ОСМЫСЛЕННОМ ОЗЕЛЕНЕНИИ ПРИШКОЛЬНЫХ УЧАСТКОВ

Потапова Т.В.

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, НИИ физико-химической биологии имени А.Н. Белозерского. Россия, 119192, г. Москва, Воробьевы горы, МГУ, факс: (495) 9393181, e-mail: potapova@belozersky.msu.ru

XXI век принес в жизнь человечества массу проблем, которые отодвигают в сознании людей на задний план внимание к жизни природы и заботу о ней как основе системы жизнеобеспечения на нашей планете. Выдающемуся математику Н.Н. Моисееву: принадлежат замечательные слова: *«Человечество, чтобы выжить на Земле, должно почувствовать себя единым. Ему необходимо обрести ощущение нераздельной общности и ответственности за судьбу своей планеты. Оно должно почувствовать себя экипажем одного космического корабля, имя которому «Планета Земля».* Важность экологической ориентации в XXI веке каждого жителя планеты Земля очевидна для ученых, однако, совершенно неочевидна для большинства педагогов и родителей. А ведь именно от них зависит, чтобы дети ежедневно получали живые впечатления от наблюдений за жизнью природы, участвовали в исследовании законов этой жизни, активно обсуждали в своем ближайшем окружении взаимоотношения человека с природой. На летней школе для учителей «Озеленение пришкольного участка как среды для развития биосферного мышления» (7-8 июня 2022 г.) обсуждался конкретный опыт создания уголка Леса на участке детского сада в Раменках и «птичьей рощи» на участке Лицея информационных технологий, - при поддержке Ботанического сада МГУ объединенными усилиями ученых, педагогов, родителей, студентов и аспирантов с опорой на информационную базу программы «Человек и Природа. Первые шаги» НИИ ФХБ имени А.Н. Белозерского МГУ [<http://belozersky.msu.ru/links/chip/>]. В прошлом веке в проектах «Малыши и няньки» ученые Пушинского НЦБИ РАН вместе с педагогами детских садов готовили школьников на роль экологических наставников для младших. Этот опыт получил международное признание благодаря публикации в журнале Юнеско «Сонпест». В 2005-2007 г.г. при поддержке грантами программы «Make a connection» московские студенты и школьники оказывали реальную помощь детским садам в осмысленном озеленении их участков и выступали в роли экологических наставников для малышей, используя деревья и кустарники как материал для общения с детьми. Специалисты вузов, аспиранты и студенты могут оказать бесценную практическую помощь конкретным школам и детским садам в своем ближайшем окружении. Школам и детским садам нужна реальная практическая поддержка в ландшафтном проектировании пришкольных участков, подборе подходящих видов растительности и их непосредственной посадке, оборудовании деревьев и кустарников системами видеонаблюдений и т. д. Наличие таких условий поможет педагогам грамотно организовать занятия с детьми самого разного возраста.

ПОВЛИЯЛА ЛИ АНТИЧНОСТЬ НА РАЗВИТИЕ НАШЕЙ ЦИВИЛИЗАЦИИ?

Пустогаров А.А.

Независимый исследователь, Россия, Москва, stogarov@rambler.ru

Т.н. альтернативная история содержит довольно широкий набор аргументов в пользу тезиса: античного исторического периода не было. Не включаясь в этот спор, рассмотрим вопрос: если античная эпоха была, какое влияние она оказала на последующее развитие человечества? В XIV в.н.э. человечество находилось на самой низком со времен античности уровне - это был кризис позднего Средневековья, охвативший Европу, арабский мир, Византию, Киевскую Русь. Далее человечество развивалось поступательно. При этом оно создавало ключевые технологии заново, не используя опыт античности. Ключевые технологии нашей цивилизации - металлургия и каменное строительство. На этих технологиях базируется производство оружия и фортификационное строительство. Владение ими - вопрос выживания. До XIII в.н.э. в Европе в ходу были сыродутные горны, в которых получалось кричное железо, не пригодное, как показывают современные эксперименты (1), для создания оружия и орудий труда. В конце XIII в. на смену, как их прямое развитие, пришли шутофены, а в XV в. - блауофены, позволявшие получать сталь и чугун. Таким образом, металлургия с конца XIV в. начала развиваться с нуля, что демонстрирует, что человечество утратило античные металлургические технологии и на протяжении нескольких веков создавало все заново. В фортификации в Европе с Каролингов до конца XI в. использовались только земляные сооружения. Далее появилась каменная кладка, но не из кирпича, как подсказал бы античный опыт, а из белого камня. Лишь с XV века начал применяться кирпич: сначала только в фортификации, затем он полностью вытеснил белый камень. То есть кирпичное строительство человечество также не вспомнило, а пришло к нему через эпоху белого камня. Для важнейшей технологии - распространения информации - к началу книгопечатания отсутствовала подобная античной система тиражирования рукописей,. Иначе гуманистам не пришлось бы разыскивать манускрипты античных классиков. А, значит, геометрия Евклида, впервые напечатанная в 1482 г., могла широко использоваться в производстве и строительстве только с этого года. К тому времени в Европе уже стояли огромные сооружения, такие, как собор Парижской Богоматери, построенные без обращения к античной науке. Выборная и династийная власть, деспотия и т.д. отмечались среди индейцев Северной Америки, то есть нет необходимости возводить к античности политическое устройство средневековой Европы, оно могло возникнуть без заимствования античного опыта. В целом, античный период не оказал влияния на ключевые технологии нашей цивилизации, а, значит,, и на саму цивилизацию, за исключением литературного образа античности.

Литература.

1. Колчин Б.А., Круг О.Ю. Физическое моделирование сыродутного процесса производства железа, в сб. Археология и естественные науки - Наука, 1965, с.196-215.

ПРЕИМУЩЕСТВА И ПРОБЛЕМЫ ЦИФРОВОГО ПРЕПОДАВАНИЯ МАТЕМАТИКИ СТУДЕНТАМ НЕМАТЕМАТИЧЕСКИХ СПЕЦИАЛЬНОСТЕЙ

Пыркина О.Е.

Финансовый университет при Правительстве Российской Федерации
Россия, 125993, ГСП-3, г. Москва, Ленинградский проспект д.49 +7(499)503-4721
olga.pyrkina@gmail.com

В современном цифровом мире активно меняются механизмы восприятия информации и освоения новых знаний, особенно у молодежи. Именно поэтому преподавание математических дисциплин с опорой не столько на традиционные аналитические, сколько на цифровые методы, становится одной из первоочередных задач при модернизации системы высшего образования [1].

В Финансовом университете при Правительстве РФ активно разрабатываются новые методы преподавания математики с использованием современных вычислительных средств. На первых курсах экономических специальностей преподается цифровая математика на языке R, с опорой на компьютерный практикум [2]. На втором курсе студентам всех специальностей, включая чисто гуманитарные, читается курс анализа данных с использованием вычислительных возможностей пакета Excel и R studio, что позволяет обрабатывать большие массивы реальных данных, легко проводить статистический анализ и проверять те или иные статистические гипотезы на основе реальных данных. Такого рода работа с реальными данными и статистическими пакетами, проводимая постоянно по мере изучения различных разделов курса, позволяет освоить основы теории вероятностей, математической статистики и специальные разделы, относящиеся к Data Science, существенно глубже, чем чисто теоретическое изучение предмета.

К основным сложностям и проблемам цифрового преподавания математики можно отнести общий низкий уровень школьной математической подготовки студентов, особенно гуманитарных специальностей, что заставляет при использовании цифровых методов опираться во многом на графическое представление информации и визуализацию данных. Это не всегда дает возможность донести в полном объеме смысл и значение многих теоретических математических понятий.

Литература

1. Цифровизация математики в ВУЗе / Монография. Коллектив авторов *под рек С.А. Зададаева*. – М: Прометей, 2021. 578 стр.
2. Зададаев С.А. Математика на языке R. М.: Изд-во: Прометей, 2018 г., 323 стр.

КОНТРПРИМЕРЫ В СИСТЕМЕ ПРЕПОДАВАНИЯ МАТЕМАТИКИ

Серовайский С.Я.

Казахский национальный университет им. аль-Фараби,
Казахстан, 050040, Алматы, пр. аль-Фараби 71, +7 701 83151976 serovajskys@mail.ru

Любая математическая теорема фактически сводится к утверждению вида «*При выполнении следующих условий ... имеет место следующий результат ...*». При этом, как правило, основное внимание уделяется самому результату, его теоретической значимости и практическому применению, а не условиям, при которых этот результат получается. Однако более глубокое понимание обсуждаемой проблемы связано с анализом условий, при которых данный результат получен. Действительно, что произойдет, если эти условия будут в той или иной степени нарушены?

Возможно, нарушение какого-либо условия теоремы приведет к нарушению утверждений теоремы. Возможно, напротив, эти утверждения останутся в силе, хотя условие теоремы и не выполняются. Однако не исключен вариант, когда ослабление условий теоремы приводит к тому, что утверждения теоремы будут выполняться в некоторой ослабленной форме, также имеющей теоретический и практический смысл. Вне зависимости от того, какая из описанных ситуаций реализуется в том или ином случае, выход за пределы условий применимости обсуждаемого математического результата может оказаться более эффективным, чем простой обзор примеров, иллюстрирующих данный результат. Реализовать этот выход можно за счет подбора и анализа специальных «нехороших» примеров, выводящих за известные границы.

Следует также иметь в виду, что при решении практических задач исследователь часто не может обосновать применимость используемых математических методов в конкретной ситуации, выполняя те или иные действия формально. В этих условиях есть вероятность натолкнуться на какую-то преграду, а значит, нужно владеть искусством диагностики неудачных результатов. Овладеть им можно, познакомившись с контрпримерами, иллюстрирующими степень применимости используемых математических методов.

Использование контрпримеров при преподавании общих математических дисциплин и чтение специальных курсов, посвященным разбору подобных примеров в какой-либо конкретной предметной области представляется весьма целесообразным для подготовки будущих специалистов в области математической науки.

Литература.

1. Гелбаум Б., Олмстед Дж. Контрпримеры в анализе. – Москва, Мир, 1967. – 251 с.
2. Gelbaum B., Olmsted J. Theorems and Counterexamples in Mathematics. – Springer, 2012. – 305 p.
3. Serovaiskii S. Counterexamples in the optimal control theory. – Brill Academic Press. Netherlands. Utrecht–Boston, 2004. – 176 p.
4. Serovaiskii S. Counterexamples in the optimal control theory. – De Gruyter, 2011. – 175 p.

ПОСТРОЕНИЕ СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ ОБУЧЕНИЕМ НА ОСНОВЕ ИНТЕГРИРОВАННОГО КОНСТРУКТОРА ТРЕНАЖЁРОВ И ПРЕДМЕТНОГО ЯЗЫКА СЦЕНАРИЕВ

Шишов В.А.

Лаборатория Vitrolix, Россия, 350062, г. Краснодар, Яна-Полуяна д. 60, 8(928)8434898,
E-mail: milegold@mail.ru

Развитие форм информационного взаимодействия в обществе предполагает внедрение технологий во все сферы деятельности человека, в том числе и в образование. При этом используются различные методики и инструментальные средства, например системы управления обучением (LMS), обеспечивающие полноценную поддержку дистанционного обучения. При фронтальном обучении полноценный и эффективный образовательный процесс помогают обеспечить виртуальные образовательные среды (VLE). Распространены также системы электронных учебников, а также системы их проектирования, например на основе Scott стандарта. Получение процедурного знания облегчается применением систем тестирования и интерактивных компьютерных тренажёров, которые сейчас перерастают в полноценные системы «геймификации» курсов. При этом в большинстве систем используется единая траектория обучения в каждом курсе, а возможности адаптивного обучения на основе обратной связи от обучаемого используются редко.

Опыт использования и разработки адаптивных электронных курсов с интегрированными интерактивными компьютерными тренажёрами показал ряд преимуществ: возможность построения нескольких траекторий обучения с динамическим переключением траекторий, удобство отработки процедурных навыков при применении встроенных тренажёров, упрощение «геймификации» курса и поддержка различных систем мотивации и вознаграждения обучаемых.

Цель нашей работы - построение и апробация системы, комбинирующей возможности LMS и VLE систем с применением адаптивных стратегий обучения. Система представляет собой микросервисную клиент-серверную архитектуру проигрывания курсов с взаимодействием между пользователями в реальном времени, а также конструктор курсов, реализующий множественность траекторий обучения на основе предметного языка сценариев и конструктор интерактивных тренажёров с возможностью их интеграции в курсовые траектории обучения.

Литература.

1. Kasim N. N. M., Khalid F. Choosing the right learning management system (LMS) for the higher education institution context: A systematic review //International Journal of Emerging Technologies in Learning. – 2016. – Т. 11. – №. 6.
2. Говоров, А. И., Говорова, М. М., & Валитова, Ю. О. (2018). Оценка актуальности разработки методов использования средств геймификации и игровых технологий в системах управления обучением. Компьютерные инструменты в образовании. (2), 39-54. <https://doi.org/10.32603/2071-2340-2018-2-39-5>

**ON THE PROJECT OF DIGITAL UPDATING OF WORK PROGRAMS OF
DISCIPLINES FOR STUDENTS OF A TECHNICAL UNIVERSITY**

Gertzen T.A., Lyubimov N.Yu., Lyubimova A.A.

Perm National Research Polytechnic University
614068, Perm, Professor Pozdeyev str. 11, +79223056178, tanger59perm@yandex.ru

One of the key tasks of higher professional education in modern conditions is the effective and flexible use of digital technologies in the preparation of a future specialist in accordance with the social order and the requirements of the labor market. The purpose of this work is to present an actualization project with the active introduction of digital technologies and tools using the example of the WPD "Self-organization processes in Chemistry".

Classes in the discipline (optional) have been held for several years for masters in "Chemobiodynamics and Bioinformatics", and are also of interest as an elective for students of ecologists, biomechanics, biotechnologists.

The purpose of developing digital skills in practical classes is to prepare specialists for the development of modern research technologies in the field of bioinformatics, the ability to use digital measuring and computing equipment to solve fundamental and applied problems. A graduate of a master's degree should be able to use digital tools for organizing teamwork, storing, processing data, visualizing the process and results

The actual tasks of the implementation of the master's degree program in the direction 01.04.02 include the possession of standard means of information presentation (MS Office, My Office), Yandex Teleconference, Telegram communication tools, as well as analysis of models of processes of formation of self-organizing structures, taking into account the concept of digitalization of natural science research, development and use of digital tools to improve the efficiency of work, including (MATLAB (Wavelet), Python, CHEMCAD, SigmaPlot, ChemBio 3D, Chem Draw and their Russian counterparts; Yandex documents, Yandex Form, Google Form, GNU plot, educational platform Stepic, ANJOS PNRPU Moodle LMS). In addition, observations using digital technology: microscope + computer (for example, ordered self-organizing structures in nature (Lysegang rings) and visual observation of the formation of similar structures in the laboratory

We have Lecture block (16 hours), Laboratory / practical classes (18 hours). Independent work (72.), as well as a fund of evaluation tools, which includes not only subject indicators, but also indicators of the development of digital tools, including a case (project assignment).

The result of the work is the continuation of updating the work programs of the disciplines on the example of the master's program "Self-organization processes in chemistry" with a wider inclusion of digital technologies and digital tools

S6

МУЗЕЙ

В СОВРЕМЕННОМ МИРЕ

MUSEUM

IN MODERN CULTURE

Руководители:

*Татьяна Петровна Гончарова, Любовь Наумовна Краснопольская,
Александр Дмитриевич Силаев, Павел Николаевич Сорокин.*

РУСЬ КУПЕЧЕСКАЯ БОРИСА КУСТОДИЕВА

Гладышев М.С.

Объединенный мемориально-художественный музей-заповедник «Усадьба «Мураново» им. Ф.И.Тютчева и народных художественных промыслов «Усадьба Лукутиных»,
E-mail: gladyshev.mike@yandex.ru

Борис Михайлович Кустодиев (1878–1927) — русский советский живописец, график, художник театра. Родился Кустодиев в старинном торговом купеческом городе Астрахани в семье преподавателя духовной семинарии. Ребенком он с восторгом слушал няини сказки о купчихах и домовых. Они пробуждали в нем интерес к причудливой фантазии русского фольклора. Следуя семейной традиции, Кустодиев получил богословское образование. Переломным моментом в жизни будущего художника стала выставка передвижников, привезенная в Астрахань. С этого момента у него зародилась мечта стать художником. В 1896 году Кустодиев поступил в Академию художеств в Петербурге. Учился в мастерской И. Е. Репина. В 1901–1902 годах участвовал в создании знаменитого полотна своего учителя «Заседание Государственного Совета». Дипломная работа Кустодиева «Базар в деревне» (1903) была удостоена Золотой медали и пенсионерской поездки во Францию и Испанию. В 1909 году он получил звание академика живописи и совершил незабываемое для него путешествие в Италию. Был членом объединений «Мир искусства» и «Союз русских художников». Работал как театральный художник, книжный график и скульптор.

В творчестве Кустодиева ярко проявляется интерес к национальному быту. Он создает целые серии картин на темы крестьянского и провинциального мещанско-купеческого быта — ярмарки, деревенские праздники, масленицы, балаганы. Центральное место в этих работах занимает тема зимних гуляний и праздников. Художник восторгается волшебством русской зимы: «Это ведь мое самое любимое время года, эти морозные, сказочные дни с инеем, этот звенящий воздух, этот скрип полозьев по хрустящему снегу и багровое в тумане солнце». Весёлый и остроумный Кустодиев обожал общение. Сочетание мощности таланта и волевого характера притягивало к нему людей. Среди его друзей были Александр Блок, Максимилиан Волошин, Дмитрий Шостакович, Федор Шаляпин и Исаак Бродский. Исаак Бродский был большим поклонником творчества Бориса Кустодиева и часто обращался к нему за советом. Желая поддержать художника, прикованного болезнью к креслу, он заказал ему серию акварелей «Русь». Кустодиев изобразил с добрым, мягким юмором многоликие русские типы: важных купцов и дородных купчих, солидных торговцев и юрких трактирщиков, изможденных монашек и хитроватых священников, лирников и странников. Кустодиеву удалось соединить воедино наивность и условность народного искусства с высоким профессиональным мастерством. В серию вошли также две ироничные зарисовки: «Портрет И. И. Бродского» — портрет самого коллекционера, представленного в духе дружеской шутки, с мягким юмором и любовью, и сатирический шарж «Матрос и милая». Впервые серия с большим успехом экспонировалась в 1920 году на персональной выставке Кустодиева в Петрограде. Позже акварели попали в собрание музея Академии художеств, где хранятся до нашего времени. В данный момент 17 акварелей из серии демонстрируются в выставочном зале Мурановского музея и вызывает большой интерес у посетителей музея. Выставка торжественно открылась 26 ноября 2022 г., будет работать до 26 февраля 2023 г.

КАВКАЗ И ЕГО ДЕЯТЕЛИ КУЛЬТУРЫ В НАСЛЕДИИ ПОЭТА, ПРОЗАИКА, ХУДОЖНИКА И РЕДАКТОРА ДМИТРИЯ ГОЛУБКОВА (1930-1972)

Голубкова М.Д.

Москва, Союз писателей, E-mail: uccelli@mail.ru

Голубкова Марина Дмитриевна – филолог, секретарь Комиссии Союза писателей по литературному наследию Д.Н. Голубкова (с 1990 г.), его биограф и составитель сборников "Недуг бытия: роман, повесть, рассказ" (М., "Советский писатель", 1987), "Это было совсем не в Италии..." (М., "Маска", 2013), "Недуг бытия: роман с восстановленными издательскими купюрами, 4 эссе и стихи о поэтах" (М., 2020).

Российская газета (неделя 4-8 ноября 2022 г.) посвятила статью к 50-летию со дня смерти Д.Н. Голубкова.

Окончив журфак МГУ в 1955 г., будущий автор 14 книг, в т.ч. единственного в русской литературе романа о Боратынском ("Недуг бытия") стал редактором редакции литератур народов СССР Гослитиздата (ныне "Художественная литература"). Он дружески общался с Ахматовой, Пастернаком и Маршаком, о чем подробно и красочно – как экс-ученик художественной школы при Институте им. Сурикова, – поведал в дневниках, включенных мною в изданный за свой счет его Изборник "Это было совсем не в Италии..." Переводы Голубкова – по подстрочникам носителей языка в Большой серии Библиотеки поэта и десятках сборниках лирики Кавказа соседствуют с переводами прославленных поэтов РФ. Ему принадлежат авторизованные переводы с армянского О. Шираза, С. Капутикян, А. Граши, с абазинского – М. Чикотуева, с балкарского – К. Кулиева.

Впервые на Кавказ он приехал в 1956 г. по приглашению зам. председателя Совмина Кабардино-Балкарии Алима Кешокова; творческий итог – цикл "Свидание с Кавказом" в первой книге стихов Д. Голубкова. "Влюбленность" (М., "Мол. гвардия", 1960). Тема Кавказа звучит в поэмах "Поручик Лермонтов" ("Зов". – "Мол. гвардия", 1964) и "Светлорука Адиух" по мотивам адыгского эпоса ("Твердь". – "Сов. писатель", 1964); повести о поэте Полежаеве "Пленный ирокезец" ("Когда вернуться". – "Мол. гвардия", 1972); рассказе "Эльбрус" ("Отцовский табак". – "Мол. гвардия", 1966). Многие стихи посвящены Армении, Абхазии и Кабарде. Д. Голубков был любимым переводчиком нар. поэта КБ АССР Кайсына Кулиева. Его карандашный портрет работы Голубкова, как и стихотворное посвящение К.Отарову "Балкарский аул 1956 г." опубликованы в "Нашем наследии" в 2017 г. В 1958 г. в Гослите вышла Антология поэзии Абхазии; ее редактор и один из переводчиков – Д. Голубков; в 1969 г. он – среди руководителей V Всесоюзного совещания молодых писателей. В октябре 1970 г. по приглашению д.фил.н., нар. арт. СССР И. Андроникова поэт читал фрагменты из "Поручика Лермонтова" на могиле классика и в театре Пятигорска, в Ставрополе и Минводах. Кульминация темы Кавказа в творчестве Д. Голубкова – Повесть о художнике М. Сарьяне "Доброе солнце" (М., "Дет. Лит-ра", 1970). В 1969 г. Союз писателей удовлетворил его запрос о командировке в Ереван для общения с Сарьяном. Авторы (см. десятки писем и автографов на книгах) называли своего редактора "соавтором и братом, истинным поклонником литератур Кавказа, прекрасным человеком". Проза Д. Голубкова, кроме "Недуга бытия" не переиздавалась, стихи об Абхазии и Кабарде не изданы.

**ЛЕВ ТЕРМЕН – ИНЖЕНЕР И МУЗЫКАНТ.
К 90-ю ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА.**

Ермолаева Е.О.

МГУ имени М.В. Ломоносова, Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1,
Тел.: 8 916 422 5808, eoermolaeva@yandex.ru

В Московском Университете к лету 1933 г. было сформировано пять естественных факультетов, в их числе Физфак, в задачи которого входила подготовка научных исследователей и преподавателей вузов, а не работников промышленности, как ранее на физмат отделении. После возвращения из эвакуации к осени 1943 г. был утверждён список кафедр МГУ общим числом 131, новую кафедру акустики возглавил профессор С.Н. Ржевкин (1891–1981). Именно он в 1975 г., при поддержке ректора МГУ Р.В. Хохлова принял в лабораторию акустики и гидроакустики талантливого инженера-физика Л.С Термена (1896-1993), изобретателя первого электромузыкального инструмента «терменвокса» (1). Они познакомились в Москве еще в 1919 г., где служили по призыву в Военно-Радиотехнической лаборатории, а с 1923 г. оба ученых-физика проводили исследования в Государственном институте музыкальной науки. Л.Н. Термен родился в Санкт-Петербурге, где окончил в 1916 г. консерваторию по классу виолончели, а в 1926 г. Петроградский политехнический институт. В эти десять лет была учеба в офицерской электротехнической школе, работа в Физико-техническом отделе у А.Ф. Иоффе, изобретение и первая демонстрация в 1920 г. терменвокса, разработка систем охранных сигнализаций и дальновидения, выступления по городам России и концертный европейский тур 1927 г., принесшем ему мировую известность. В 1928–1938 гг., оставаясь советским гражданином, Термен жил и работал в США, где успешно реализовал свой талант бизнесмена и изобретателя. После возвращения на родину был арестован, работал в так называемой «туполовской шарашке», где занимался разработкой беспилотных летательных аппаратов и прослушивающих систем. В 1947 г. был реабилитирован, но продолжал работу в «закрытых» КБ. В 60-х трудился в лаборатории акустики и звукозаписи Московской Консерватории, где занимался разработкой новых электромузыкальных инструментов (2). Работая на Физфаке, Термен продолжал свои занятия музыкальной акустикой. Впервые в МГУ организовал факультатив для всех интересующихся этими проблемами, вел дипломников, концертировал. Много времени он уделял усовершенствованию терменвокса, и к ним пришла вторая молодость! В перестройку он с родными смог вновь побывать в Америке и на музыкальном европейском фестивале, о нем стали выходить статьи и сниматься фильмы. Дело Термена в настоящее время продолжает его правнук. История МГУ и Физфака неразрывно связана с имена многих легендарных людей, одним из которых, несомненно, был сотрудник кафедры акустики Лев Термен.

Литература.

1. Кафедра акустики сегодня. К 70-ю кафедры акустики физического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова. - М.: Изд-во физфака МГУ, 2013. 100 с.
2. *Ковалева С. К.*, Лев Термен. Феномен XX века. - Чехов: Бюро Квантум, 2008. 354 с.

РАБОТА МУЗЕЯ ИСТОРИИ ДЕТСКОГО ДВИЖЕНИЯ ГБПОУ «ВОРОБЬЕВЫ ГОРЫ» ПО УВЕКОВЕЧИВАНИЮ ПАМЯТИ СОТРУДНИКОВ МОСКОВСКОГО ДОМА-ДВОРЦА ПИОНЕРОВ – УЧАСТНИКОВ ВЕЛИКОЙ ОТЕЧЕСТВЕННОЙ ВОЙНЫ

Ефимова Е.А.

119334, Москва, улица Косыгина, дом 17, 8-916-945-4954, E-mail: ea-efimova@yandex.ru

На протяжении многих лет одной из важных тем в работе музея истории детского движения является изучение истории нашего учреждения, в том числе и персонализированной в его сотрудниках. Нам уже доводилось информировать уважаемых участников данной конференции в 2018 г. о работе нашего музея по теме «Бессмертный полк Дома-Дворца пионеров».

Для сбора и концентрации информации по теме немало сделал в 1980-е гг. Совет ветеранов Великой Отечественной войны Московского городского Дворца пионеров и школьников, который возглавлял В.Я. Игошкин, являвшийся основателем и первым руководителем Кабинета истории пионерской организации Дворца пионеров, предшественника нашего музея. Сотрудники музея много лет работали над расширением источниковой базы этой темы, привлекая данные периодической печати военных лет, сведения из государственных архивов: ЦОА УСО г. Москвы (Центральный объединённый архив учреждений системы образования г. Москвы, в прошлом – архив отдела народного образования Исполкома Моссовета), ОХДОПИМ и ОХДМ после 1917 г. ЦАГМ (Центральный государственный архив г. Москвы, Отдел хранения документальных материалов после 1917 г; Отдел хранения документов общественно-политической истории Москвы). В 2012-2021 гг. были изучены документы ЦАО УСО, работа с материалами ЦАГМ продолжается. Вновь анализируются фонды музея, например, групповые фотографии ветеранов войны и труда Дворца за 1965-2000-е гг., которые аннотированы недостаточно; работа в этом направлении ведется.

В 2016 г. музей по поручению дирекции ГБПОУ «Воробьевы горы» приступил к работе по проекту «Бессмертный полк Дворца» с привлечением Интернет-ресурсов: «Память народа», «Подвиг народа», ОБД «Мемориал», «Дорога памяти». В 2019-2020 гг. сотрудниками Музея велась публикация в фейсбуке в группах «Сообщество “Наследники Победы”» и «Музей истории детского движения» под рубрикой «Бессмертный полк Дворца» биографий фронтовиков-сотрудников Дома-Дворца.

К 2022 г. было написано около 1200 биографий фронтовиков, значительная часть их снабжена фотографиями из фондов музея и Интернет-ресурсов.

С этого времени существенную помощь в работе оказывают внештатные военные консультанты музея А.Д. Силаев и И.Ю. Кублановский. Работа продолжается, мы надеемся на возможность публикации ее результатов.

АКВИЛОН – ИЗДАТЕЛЬСКИЙ ПРОЕКТ 20-Х ГОДОВ 20-ГО ВЕКА

Иванна О.Б.

Объединенный мемориально-художественный музей-заповедник «Усадьба «Мураново» им. Ф.И.Тютчева и народных художественных промыслов «Усадьба Лукутиных»,
E-mail: iob1977@yandex.ru

Аквилон — частное издательство, работавшее в Петрограде с сентября 1921 по 1 ноября 1923 года. Аквилон — в римской мифологии северный ветер, летящий с быстротой орла. Именно его изобразил художник М.В.Добужинский на книжной марке издательства, создав изящную аллегорическую композицию. Владельцем издательства был инженер-химик и страстный библиофил-книголюб В.М.Кантор, руководителем и организатором искусствоведа и коллекционер Федор Федорович Ноттафт (1896-1942). Главной целью издательства «...был не коммерческий расчет, не ориентация на книжный рынок, а исключительно поощрение книжно-полиграфического искусства». Тиражи изданий невелики — всего по 500-1500 экз, но каждая книга и каждый экземпляр были подлинными произведениями полиграфического искусства. Возможность появления частного заведения обусловила Новая Экономическая Политика (НЭП), объявленная в первой половине 1921 г. Ф.Ф. Ноттафт – человек известный в художественном мире Петербурга, единственный член объединения «Мир искусства» не будучи художником, сумел создать творческий коллектив, куда входили выдающиеся художники: М.В. Добужинский, Б.М. Кустодиев, К.С.Петров-Водкин, А.Н. Бенуа и др. Каждая из 22 книг, опубликованных в издательстве, занимала исключительное место в книжной продукции тех лет. «Несколько изданий русских классиков, выпущенных «Аквилоном» в 1921-1923 годах, знаменуют собой наиболее высокую возможную вершину русского книжного искусства», - так писал известный исследователь А.А.Сидоров в книге «Классики «Аквилона». Наиболее значимые издания: «Белые ночи» Ф.М.Достоевского с иллюстрациями М.В.Добужинского, «Штопальщик» Н.С.Лескова с иллюстрациями Б.М.Кустодиева.

Одной из первых книг издательства была книга, посвященная 100-летию со дня рождения Н.А. Некрасова с иллюстрациями Кустодиева. Одной из последних книг, выпущенных в 1923 г., была книга «Русь. Русские типы». Произведения Кустодиева, написанные к его персональной выставке 1920 года проиллюстрированы способом фототипии. Для вступительной статьи пригласили известного писателя Евгения Ивановича Замятина (1884-1937). Оба автора подружились на совместной работе, и результат оказался удивительно гармоничным. Писатель, разложив на столе кустодиевских красавиц, извозчиков, купцов, трактирщиков, погрузился в мир, изображенный художником, и в короткое время сочинил повесть в стиле народной мечты-утопии «Русь. Город Кустодиев» - мечта об идеальной стране, о спокойной, привольной и изобильной России со своим вековым укладом. Замятин вспоминал: «Кустодиев видел Русь другими глазами, чем я, его глаза были куда ласковей и мягче... Так случилось, что Русь Кустодиева и моя могли теперь уложиться на полотно, на бумаге в одних и тех же красках». Текст понравился и Кустодиеву и всем окружающим. Получился гармоничный синтез текста и изображения. Но судьба издания не была счастливой. В 1931 году Е.И. Замятин эмигрировал и почти весь тираж поместили в спецфонд. Только после войны альбом могли увидеть любители и коллекционеры.

К БИОГРАФИИ МОЕГО ДЕДА, ЛАПТЕВА ЛЕОНИДА МИХАЙЛОВИЧА (ПО ДОКУМЕНТАМ ЦАМО)

Силаев А.Д.

Музей истории детского движения ГПБОУ г. Москвы «Воробьевы горы»,
Улица Донская, 37, Центр «на Донской», каб. 35
8(903)159-24-19, sasha-silaev@mail.ru

Статья посвящена к продолжению моих архивных изысканий к биографии моего деда Лаптева Леонида Михайловича, участника Великой Отечественной войны, начатыми мною еще при его жизни и продолженных к 100-летию со дня рождения, в 2020 г.

В 2022 г. в ЦАМО РФ нашёл учетную карточку награжденного. Поподробнее остановимся на этом документе/

«Лаптев Леонид Михайлович, 1920 г., г.р., Кировская обл., Верхошижемский р-н, д. Рамеши [или Рамяши — не разборчиво написано название] рядовой

Воинское звание - рядовой

Пол — мужской

Партийность (с какого года) — Беспартийный

Образование — Низшее

Национальность — Русский

С какого года в Советской Армии — с 6.1941 по 2.1945 г.

Место службы (наименование части) и занимаемая должность в момент награждения — Западный фронт, 61-й отдельный батальон связи — курсант-радист

Место службы и должность в настоящее время — Туапсинская горконтора связи — линейный надсмотрщик

Домашний адрес награжденного — Краснодарский край, г. Туапсе, ул. Пролетарская, 16а

В графе: «Наименование орденов, медалей» - «За отвагу» (№ сер. Е. 7377444 - Указ от 8.2.1958 г.; «За Победу над Германией» (ПУ сер Я 0671543 - Указ от 9.5.1945 г.)

Подпись награжден — Лаптев

Туапсинский Горвоенком, подполковник *Моряшов*

15 апреля 1958 г.» [1].

Литература

1. ЦАМО. Учетная карточка награжденного.

S7+R1

РУССКИЙ НАУЧНЫЙ ЯЗЫК

КУЛЬТУРНОЕ ПРОСТРАНСТВО РОССИИ

RUSSIAN SCIENTIFIC LANGUAGE

& RUSSIA CULTURE MEDIA

Руководители:

*Юрий Дмитриевич Нечипоренко, Галина Юрьевна Ризниченко,
Марина Юрьевна Сидорова.*

ЗАЧЕМ НУЖНА РУССКАЯ ЛИТЕРАТУРА

Голубков М.М.

Филологический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, кафедра истории новейшей русской литературы и современного литературного процесса

В докладе утверждается понимание литературы как сферы формирования исторической памяти в качестве актуальной составляющей каждодневного бытия личности. Литература дает понимание исторической перспективы существования русской цивилизации и личной причастности к ней, через века доносит до нас нормы национальной жизни и выработанные столетиями принципы отношений: отрицает культ личного и финансового успеха, конкуренцию как форму социального взаимодействия, настаивая на взаимной поддержке и взаимопомощи, утверждает ценность чести, которая важнее жизни; категории рукопожатности и чистоплотности определяют ценность личности. Русская литература по природе своей глубоко антибуржуазна – достаточно вспомнить «теорию целых кафтанов» Лужина, героя Ф. Достоевского, или рассказ И. Бунина «Господин из Сан-Франциско». Главная идея представленной в докладе монографии состоит в том, что русская литература формирует национально значимые представления об истории и учит ответственному отношению к собственной жизни, которая мыслится в контексте жизни национальной.

БИОСФЕРНАЯ КОНЦЕПЦИЯ ЭТНОГЕНЕЗА Л.Н.ГУМИЛЕВА: ПРОБЛЕМЫ ВОСПРИЯТИЯ И ГОРИЗОНТ ПРЕДСКАЗУЕМОСТИ

Ермолаев В.Ю.

фонд Н.Л. Гумилева

Доклад посвящён одному из ярких достижений отечественного естествознания - биосферной концепции этногенеза Л.Н.Гумилева, которая была создана в начале 1970-х гг. Последующие исторические условия оказались в целом неблагоприятны для ее общественного восприятия и научного признания. Однако ключевым препятствием признанию послужили парадигмальные основания самой концепции. При этом восприятие концепции в гуманитарных и естественных науках принципиально различалось. Это различие до настоящего времени сохраняет принципиально разный вес, поскольку дальнейшее развитие концепции может происходить только при условии ее превращения в естественнонаучную теорию. Ключевое значение для превращения гумилевской концепции в научную теорию имеет осознание специалистами ее предсказательных возможностей, и прежде всего - понимание природы ее предсказуемости. Эта природа предсказуемости будет обсуждена в докладе на материале из этнической истории России. На этом же материале в докладе будет определен минимальный горизонт предсказуемости, присущий гумилевской концепции.

О КУЛЬТУРЕ В ЦЕЛОМ. ГЕНЕТИЧЕСКИЙ СРЕЗ

Карякин Ю.В.

Томский политехнический университет Россия, 634 050, г. Томск, пр. Ленина, 30 E-mail:
art-39-1@yandex.ru

Рассматривается понятие культуры как синтетической формы проявления социума, в которой системно взаимодействуют онтологические основы жизни с одной стороны и механизм развития планеты как родового элемента космоса, с другой. Названные факторы отражают взаимодействие внутреннего и внешнего как условия развития.

Что есть жизнь? Обобщение результатов современных наук провоцирует на поиск ответа не только в области эмпирического исследования, но и в той широко понимаемой междисциплинарности, которая покусается на синтез эмпирики с прочими аспектами познания мироустройства. В рамках такой синтетической парадигмы жизнь представляется процессом, субстанционально трактуемым в понятии духоматерии.

Внешнее воздействие на культуру на стыке тысячелетий понимается как многоаспектные обоюдонаправленные процессы планетарно-солнечного и солнечно-космического обмена энергией.

В синтетической онтогенезной парадигме [1] культура трактуется в статусе интегрального показателя процесса гармоничного взаимодействия внутреннего и внешнего как обобщённых воздействий. Культура на планете Земля есть результат исторического опыта социализации гомо сапиенс, курируемого космосом как внешним, метасистемным фактором.

В настоящий исторический момент культура на планете находится в состоянии узлового скачкообразного преобразования биосферы на основе синтеза совокупности этнокультурных образований с ориентацией на формирование космического сознания. В этом процессе России отводится роль посредника-синтезатора, гармонизирующего взаимодействие двух противоположностей, Востока и Запада.

Литература.

1. Ю.В. Карякин ПРОЕКТ Преобразование системы образования в соответствии с требованиями III-тысячелетия.
<http://www.trinitas.ru/rus/doc/0033/001a/00331825.htm>

ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА В НАУЧНОМ ДИСКУРСЕ

Клементьева А.А.

МГУ им. М.В. Ломоносова, Филологический ф-т, каф. Русского языка,
Россия, 119234, г. Москва, ул. Ленинские горы, 1
8-495-939-26-05, E-mail: aklementyeva@mail.ru

В докладе будут отмечены некоторые особенности формирующегося сейчас «языка междисциплинарного общения» в рамках методологии и разработки систем ИИ. Материалом для исследования послужили научные статьи последних десятилетий, посвященные проблемам разработки ИИ, осмыслению его роли в общественной жизни и результатов его использования.

Проведенный лингвистический анализ позволил выявить следующие особенности научных текстов.

А) Посредством предикации (приписывания субъекту определенных свойств) утверждаются представления об ИИ как об активнействующем субъекте, способном выполнять ментальные действия (*робот получает информацию*), обладать творческими способностями (*машина создаст рисунок*), угрожать человеку (*ИИ может совершенно уничтожить человечество*).

Б) Использование акциональных предикатов применительно к ИИ (*обыграл чемпиона мира, научился диагностировать рак, находит ошибки в школьных сочинениях*) помогает осуществлять языковое манипулирование, менять представления о действительности.

В) Отсутствие в рассмотренных текстах точного определения для ИИ и связанные с этим попытки описать его с помощью метафор и аналогий позволяют смещать фокус с сущности феномена ИИ на его функции и свойства.

Г) «Взаимная» метафора (машина как человек, человек как машина) искажает представления о сложноустроенной человеческой природе, создаёт предпосылки для её концептуального переосмысления (*мозг выполняет операции, дает команды, получает сигналы*).

Авторы исследования считают, что отмеченные языковые особенности научных текстов свидетельствуют об усилении технократического мышления, а тенденция к очеловечиванию ИИ ведет к разрыву с действительностью.

**О ХВОСТИКАХ, ЛАПКАХ, ЧАСТИЧКАХ И ЦЕПОЧКАХ: О НЕКОТОРЫХ
ОСОБЕННОСТЯХ ФОРМИРОВАНИЯ ЯЗЫКА РУССКОЙ НАУКИ В XVIII –
НАЧАЛЕ XIX ВВ**

Николенкова Н.В.

Москва, Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова,
Филологический факультет

Некоторые современные требования к оформлению научного текста являются негативными: нежелательно использовать в научном стиле определенные слова и конструкции. К примеру, не рекомендуется использовать лексемы, имеющие экспрессивную окраску. Среди них – диминутивы. Однако многие диминутивы и сейчас используются в качестве терминов в разных науках. Обращаясь к самому раннему периоду формирования русского научного языка, мы покажем, как данные лексемы входили в язык, и выскажем предположения о том, почему этот процесс был остановлен.

Кроме того, будет рассмотрено, как сегодня нарушается общее требование о вхождении экспрессивных слов в научный язык. По нашим наблюдениям, во многих научных текстах сегодня превышена доля и степень выразительности слов с отрицательной оценкой взглядов оппонентов. Не приведет ли это к тому, что научный язык первой половины XXI века будет характеризоваться лексемами с диминутивами иной окраски?

ЧЕЛОВЕК И ПРИРОДА: ЗДЕСЬ И СЕЙЧАС

Потапова Т.В.

НИИ физико-химической биологии имени А.Н. Белозерского Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова. Россия, 119192, г. Москва, Воробьевы горы, МГУ, факс: (495) 9393181, e-mail: potapova@belozersky.msu.ru

По мере развития цивилизации меняются отношения Человека с Природой и представления каждого человека об этих отношениях. Техносфера (Мир Вещей) создается людьми и подвластна воле Человека. Биосфера существует по своим законами и воле людей не подвластна. В XXI в. развитие Техносферы уже соперничает с Биосферой по обороту вещества и энергии в масштабах планеты. Для предупреждения экологических катастроф необходима научно обоснованная ориентации деятельности каждого Человека по отношению к Природе. Тревогу за судьбу человечества, пренебрегающего своим единством с природой и ответственностью за нее, выражали в конце XX в. такие выдающиеся математики, как И.М. Гельфанд и Н.Н. Моисеев. Беда в том, что погружение с детства в мир вещей не позволяет человеку сформировать в своем мышлении адекватные представления о жизни Природы и необходимости беречь ее как основу своего жизнеобеспечения. Позитивный пример гармоничного сочетания промышленного производства с бережным отношением к Природе на основе духовного единства с ней — культура современной Японии. К сожалению, реалии нашей жизни таковы, что молодые родители, ЗДЕСЬ и СЕЙЧАС, предпочитают раннее приобщение детей к миру вещей, хлопотливым и трудоемким занятиям по приобщению их к миру природы с активным обсуждением законов природы, ее значения для жизни Человека на планете Земля и необходимости заботиться о ней как неподвластной воле человека системе, обеспечивающей всех людей кислородом для дыхания, водой и продуктами питания. Что делать? Можно обратиться к глубокой укоренности представлений о единстве Человека и Природы в отечественной культуре, которую еще в XIX в. К.Д. Ушинский положил в основу начальной педагогики, следуя идеям И.Г. Песталоцци о необходимости опоры на природные силы организма и природные закономерности развития ребенка для полноценной подготовки его к счастливой жизни в окружающем мире. Система Ушинского прочно вошла в нашу культуру как искусство приобщения ребенком опыта (личного или совместного с наставником) взаимодействия с природой, осознания с помощью речевого общения закономерностей природы и обучения навыкам договариваться с другими по поводу взаимодействия с природой. В 2014-2022 г.г. в рамках программы «Человек и Природа: первые шаги» НИИ ФХБ имени А.Н. Белозерского МГУ накоплен богатый опыт объединения усилий ученых, педагогов и родителей с целью воспитания у детей до 10-12 лет навыков и ценностных мотиваций к гармонизации отношений Человека с Природой. Этот опыт представлен как открытый Интернет-ресурс на сайте НИИ ФХБ [<http://belozersky.msu.ru/links.chip>].

ЛИРИЧЕСКАЯ ПОЭЗИЯ КАК ТЕРРИТОРИЯ ВЫСШИХ СМЫСЛОВ

Сидорова М.Ю.

Филологический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, кафедра русского языка

Каждая функциональная сфера деятельности человека обслуживает какое-либо архетипическое стремление, желание человека, и язык в этой функциональной сфере «заточен» под это предназначение. Так, в науке реализуется стремление человека к поиску истины и язык науки (должен быть) устроен так, чтобы обеспечить это стремление наилучшим образом. СМИ и их язык, в котором функция воздействия подавляет функцию сообщения, обслуживают архетипическое стремление человека к власти над другими людьми. Лирическая поэзия возникает как поиск связи с высшими смыслами, стремление к трансцендентности, попытка выйти за пределы видимого мира, духовно приблизиться к абсолюту. Отсюда – особенности языка лирической поэзии и ее тематическое своеобразие. Лирика – это всегда «сны о чем-то большем», поэты всех времен и народов пишут в конечном итоге на четыре темы: о творчестве, о жизни и смерти, о боге и о любви. Без попытки «вычитать» в лирическом стихотворении эти высшие смыслы его интерпретация обречена на провал. Современная филология обладает исследовательскими инструментами, позволяющими открыть ценностный пласт без разрушения цельности произведения, примеры такого анализа будут продемонстрированы в докладе.

МЕСТО И РОЛЬ ЛИТЕРАТУРОВЕДЕНИЯ В СИСТЕМЕ СОВРЕМЕННОГО ЗНАНИЯ

Симонова Л.А.

Библиотека №7. Культурный центр им. А. де Сент-Экзюпери

В настоящее время все без исключения дисциплины нуждаются в литературе и становятся всё более и более «литературными» (точные и естественные науки, как и гуманитарные, всё активнее прибегают к языку литературы и делают ставку на создание на основе изучаемых объектов «истории» как связанного текста, объединённого доминирующим шифром – формулой, биологической или химической реакцией, природным явлением, – показанном благодаря расширяющему информационно-смысловое пространство языку в их процессуальности и глобальности). «История болезни», «история того или иного биологического или физического учения» или той или иной «математической теории» – всё имеет литературный характер. В гуманитарных дисциплинах влияние литературы огромно: в таких науках, как психология, социология, философия, экономика и т.д., доминирующее положение занимает теория субъекта, которая связывает личностную идентичность и нарративность. В начале XXI века литература остаётся достойным ответом человека на ситуацию распавшегося, фрагментарного, а значит, ушибленного, недостаточного знания. Приблизительно до середины XX века литература успешно выполняла познавательную, ценностно-определяющую, смыслоорганизирующую, наконец, миромоделирующую роль. В конце XX – XXI века литература перестала быть способом глобального смыслопорождения и мироорганизации, что необходимо будет восполнено литературоведением, которое должно взять на себя все те главные функции, которые раньше принадлежали в первую очередь литературе – философскую, аксиологическую, этическую, в целом, целе- и смысло-полагающую, так же как и словотворческую (без чего иное невозможно) в условиях становящегося и активно проявляющего себя коллективного и личного бытия. В условиях упадка современной литературы голос литературных шедевров – классицизма, романтизма, модернизма – заметно ослабевает, поскольку становится невидимым, трудно постигаемым, поэтому главная задача литературоведения – сделать со-временными шедевры прошлого. Литературоведение становится важнее самой литературы, поскольку оно устанавливает связь «тогда» и «сейчас», устанавливает необходимые для восприятия классики интерпретативные подходы. Конечная исследовательская и одновременно преобразующая цель (как раньше у литературы) – «покрыть» всё языком литературоведения, создать абсолютный текст миробытия из знаков филологической науки. На современном этапе литературоведение столкнулось с необходимостью преодоления стагнации, законсервированности языка. На современном этапе задачу возможного преодоления оскотенения языка гениально решил Фуко, который в своих трудах демонстрирует возможность вбирать, объединять, покрывать собой как пишущим множество разнородных дискурсивных практик, преодолевая замкнутость каждой из них и одновременно не подавляя их волевой авторитетностью критика.

БАЗОВЫЕ ПОНЯТИЯ СОЦИОЛИНГВИСТИКИ: ЯЗЫК И ДИАЛЕКТ

Теркулов В.И.

Донецкий национальный университет

В работе рассматриваются базовые понятия социолингвистики: язык, диалект, региолект. На примере сопоставления русских и украинских идиомов устанавливаются критерии разграничения языков, диалектов и региолектов. Под диалектом понимается естественный интегрированный моноидиом, функционирующий на ограниченном, в первую очередь сельском, пространстве и выступающий в качестве минимальной территориальной разновидности языка. Под языком понимается совокупность идиомов (диалекты, сленги, просторечия, литературный язык), носители которых реализуют тождественную этническую самоидентификацию. Интегрирующую функцию для языка выполняют общезыковые койне и литературные языки. Под региолектом понимаются территориальные разновидности языка, представленные тождественным комплексом регионально маркированных идиомов (регионально маркированные диалекты, просторечия, сленги и литературный язык/общезыковое койне).

«ВАЛЕНТНОСТЬ НА ИНТЕРПРЕТАЦИЮ» КАК УСЛОВИЕ БЫТИЯ ХУДОЖЕСТВЕННОГО ТЕКСТА

Чернейко Л.О.

Филологический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова.

1. Вопрос, сформулированный в названии круглого стола, можно расширить до более значимого теоретического вопроса: «Зачем нужна художественная литература».

2. Один из ответов лежит в плоскости такой значимой духовной потребностей человека, как эстетическая потребность. Второй ответ затрагивает не менее значимую потребность в поиске и обретении смысла жизни, который складывается из системы транслируемых культурой ценностей, художественной литературой в частности. Третий ответ связан с познавательной установкой сознания и с ограниченными возможностями отдельной личности охватить жизнь в ее горизонтальной бесконечности.

3. В сложившейся к концу 20 в. науке о литературе (а это не только и не столько литературоведение, сколько лингвистика текста) приоритет был отдан изучению структуры художественного текста, которое достигло немалых успехов. Однако внимание к «текстурному письму» оставило в тени проблему восприятия художественного текста, т.е. проблему читателя. Но, как писал Р. Барт, художественный текст не состоялся, если он не спровоцировал метатекста - ответного читательского понимания.

4. Структура текста хоть и не дана исследователю в эксплицитном виде, ее реконструкция опирается на герметически замкнутую конструкцию, состоящую из линейной последовательности означающих. Основная асимметрия текста, сводящаяся к различию в статусах двух сторон языкового знака - материальности означающего и идеальности означаемого, - обуславливает открытость текста интерпретации. Иными словами, текст, как и все значимые для культуры лексические единицы (в основном это абстрактные имена существительные), имеет «валентность на интерпретацию».

5. Лингвистические методы реконструкции смысла текста могут быть применены и к изучению его восприятия. И эти методы дополняют психолингвистический подход к изучению читательского восприятия, разработанный в недрах рецептивного литературоведения.

6. Что дает сравнение интерпретаций одного текста его разными читателями: основание рецептивного изучения художественного текста, которое определяется не только спецификой «культурного момента», но и особенностями личности. Анализ двух метатекстов повести «Скучная история» А.П. Чехова.

МЕТОД НЕВЕРБАЛЬНОГО СЕМАНТИЧЕСКОГО ДИФФЕРЕНЦИАЛА В ИЗУЧЕНИИ АССОЦИАТИВНОГО ПОЛЯ ПОНЯТИЙ

Чернейко Л.О.

Москва, МГУ имени М.В.Ломоносова, филологический факультет

1. Проблема изучения визуализации понятий уходит корнями в философию, в частности, в постулируемое Р. Декартом разграничение идей «ясных» и «отчетливых», принадлежащих именам разного семиотического статуса: идея ясная стоит за всеми предметными именами, с которыми в сознании ассоциативно связан наглядный образ, т.е. перцептивный след прототипического референта, тогда как идея отчетливая связывается с возможностью выделения в ней различительных параметров предмета (вещи, абстрактного феномена) и, соответственно, формулирования сигнификата понятия. В отечественной философии отчетливость идеи связывалась с аналитическим (дискурсивным) типом мышления, противоположным мышлению интуитивному (дологическому и синтетическому). Дискурсивный тип мышления предполагает владение интенциональным предметом в формате «знаю-понимаю-объясняю». Именно в объяснении значения понятий (resp. слов) Платон видел высшую форму владения сознанием стоящей за словом вещью, т.е. отчетливость ее идеи. У интуитивного мышления иной способ постижения мира – сублогический, иной инструмент – это ассоциации, создающие вокруг культурно значимых феноменов ассоциативный ореол, и иная форма языкового воплощения ассоциаций – это метафора.

2. Дологические формы сознания и мышления стали предметом пристального внимания отечественной философии во второй половине 20 в. (конференция «Бессознательное» 1979 г.). Однако за полвека до этого важного события В.В. Кандинский разработал «Опросный лист», позволяющий, по замыслу Кандинского и его соратников, составить универсальную «азбуку искусства» на основе ассоциативного эксперимента, в котором в качестве стимула предлагались слова, а реакцией на них был выбор из трех базовых геометрических фигур – треугольника, квадрата и круга. Спустя 35 лет американский психолог Ч. Осгуд разрабатывает метод изучения значимых для культуры понятий, получивший название «вербальный семантический дифференциал (ВСД)». Метод ВСД был дополнен В.П. Петренко методом НСД, но пальма первенства принадлежала В.В. Кандинскому. Базовые геометрические фигуры можно дополнить цифрами и получить нетривиальные результаты их ассоциативных связей с именами и геометрическими фигурами.

АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

- Bayramov M.A. 95
Bozdaganyan M. 126, 128
Burlakov E. 76
Efremov R.G. 124
Fridunbekov I.Y. 95
Gertzen T.A. 199
Gushchin I. 96
Inozemzeva N. 76
Khalilov R.I. 95
Klinov A.P. 127
Kodenko M.R. 143
Kolinichenko A.P. 75
Kostiuk K.A. 124
Kovaleva N.A. 127
Kulberg N.S. 143
Levchenko I.N. 125
Lyubimova A.A. 199
Lyubimova N.Yu. 199
Ma X. 126
Mustafin K. 96
Nasibova A.N. 95
Perepelkin E. 76
Polyakova R. 76
Ryashko L.B. 75
Sadovnikov B. 76
Sadovnikova M. 76
Samorodov A.V. 143
Stikhova O.V. 183
Strelnikov I.A. 127
Sysoev P. 76
Weise D. 152
Yang A. 128
Zubova E.A. 127
Абагурова А.М. 98
Агейков В.Ю. 92
Аксёнова С.В. 99
Александров И.И. 44
Алексеев А.А. 85
Анашкина А.А. 191
Анпилов С.В. 45, 56, 68
Аристова Е.Н. 46
Армеев Г.А. 102, 104, 121
Афонин П.В. 62
Балабаев Н.К. 120
Батмунх М. 130
Батова А.С. 99, 131, 132
Башкирцева И.А. 47
Баярчимэг Л. 130
Белова О.В. 140
Беляева Н.Е. 78, 82
Бирюкова Л.С. 139
Бобкова И.А. 154
Богатиков Е.В. 63
Болдова А.Е. 79
Бормонтов Е.Н. 63
Бочаров К. 51
Браже А.Р. 147, 148, 149
Брыксин К.А. 100
Бугай А.Н. 99, 130, 131, 132, 133, 134
Булавко Е.С. 101
Булгакова А.В. 138
Бульчев А.А. 78
Бурлаков Е.В. 62
Бурмистров Н.Д. 140
Варакина Э.С. 138
Василевская В.Д. 79
Василенко А.В. 65
Васильев В.А. 102
Васильева И.А. 155
Васильева М.А. 133
Вашанов Г.А. 87
Вейзе Д.Л. 146
Вервейко Д.В. 147, 149
Верисокин А.Ю. 147, 149
Винокурова Н.А. 156
Вишнякова Е.В. 140
Владимиров Г.К. 110
Волкова Е.С. 172
Володяев И.В. 110
Ганджа Т.В. 48
Генералова А.А. 84
Гернет Н.Д. 189
Герцен Т.А. 186
Гисин В.Б. 172

- Гладышев М.С. 202
Глебов А.А. 134
Глытов И.В. 80
Голубев В.И. 73
Голубева Е.А. 140
Голубков М.М. 210
Голубкова М.Д. 203
Грачев В.А. 49
Гребенкина Л.Е. 115
Григоренко Б.Л. 113, 114
Гринев В.С. 100
Гриневич А.А. 135
Громов В.А. 38
Гудимчук Н.Б. 117, 123
Гудович И.С. 156
Гурия Г.Т. 139
Гурьянова И.Э. 39
Гусев А.А. 157
Гусев В.А. 40
Гусева Е.К. 54
Гущин И.Ю. 86, 106
Демяненко Я.М. 53
Домрачева Т.М. 113
Друзь А.С. 50
Дубинина В.В. 158
Дубинина М.Г. 159
Душанов Э.Б. 99, 132, 133
Елиферов В. 51
Емельянова Е.Н. 187
Ермаков А.С. 81
Ермаченко П.А. 82
Ермолаев В.Ю. 211
Ермолаева Е.О. 204
Ефимова Е.А. 205
Жулидин П.А. 103
Заворотнюк Д. 51
Заляпин В.И. 41
Заречнев В.А. 173, 174, 175, 176, 177
Захаров И.А. 63
Здравкович С. 131
Зезюля Н.В. 187
Зеликин Н.В. 178
Зубюк А.В. 74
Иваненко Г.А. 47
Иванина О.Б. 206
Иванков Д.Н. 101
Исаков К.А. 48
Караваева Н.И. 46
Карпов В.Е. 52
Карпын А.Б. 191
Карякин Ю.В. 212
Кирсанов А.В. 147, 148
Киселева Д.Г. 136
Клабукова Ю.В. 47
Клементьев К.Е. 78
Клементьева А.А. 213
Князева А.С. 104, 121
Ковалева А.В. 160
Коваленко А.С. 53
Коваленко В.В. 84
Коваленко И.Б. 117, 118, 119, 123
Колесникова Е.А. 134
Комкина Т.А. 161
Конов Д.С. 54
Коробкина Ю.Д. 137
Коробов Н.А. 61, 69
Корчагина В.М. 83
Красильникова А.А. 138
Краснобаева Л.А. 94
Кривицкая А.В. 105
Кривошеев О.И. 179
Крупянский Ю.Ф. 84
Крючкова К.Ю. 140
Кудров А.В. 162
Кузнецова М.С. 163
Кузьмин А.С. 106
Кулагин А.Е. 55, 67
Кулакова А.М. 107, 108, 111
Курышкина М.С. 108
Лавриненко И.А. 87
Лагоша С.В. 148
Лапонин В.С. 45, 56, 68
Лебедев Г.С. 191
Левченко И.Н. 109, 110
Липагина Л.В. 188
Лисицкая Е.В. 189
Лищук А.Н. 136
Лобанов А.И. 52
Лойко Н.Г. 84
Лукин П.О. 149

- Лхагва О. 130
Любимова А.А. 186
Любимова Н.Ю. 186
Мазо М.А. 120
Майорова А.А. 138
Майорова О.А. 100
Макарова О.В. 190
Марков П.Н. 69
Мартинович Е.Н. 57
Маслаков А.С. 90
Матвеев А.В. 115
Маторин Д.Н. 85
Маторин Н.А. 85
Медведев Д.Ю. 58
Михайличенко А.А. 59
Моисеенко А.В. 84
Мулашкина Т.И. 107, 111, 116
Муратов Д.А. 60
Муратов М.В. 54
Мустафин Х.С. 86
Мысин И.Е. 150
Мягков А.С. 61
Надыкто А.Б. 69
Назаренко Е.С. 69
Назаренко К.М. 61, 69
Найшгут Ю.С. 49
Насонова Е.А. 132
Наумов А.А. 112
Немухин А.В. 108, 114
Нестеренко И.В. 139
Нечипуренко Ю.Д. 87
Николаев Е. 51
Николенкова Н.В. 214
Никольский И.М. 182
Никонова М.А. 164
Одинцов К.В. 113
Олейник Е.С. 115
Орлов Ю.Л. 138, 140, 191
Орлова М.В. 192
Орунбаева А.А. 140
Осипов А.А. 80, 83, 151
Павлецов М.М. 180
Пащенко В.З. 78
Пеков С. 51
Первалова Т.В. 180
Перепёлкин Е.Е. 62
Петров А.С. 169
Петров И.Б. 54
Пикуленко М.М. 193
Пилинская Д.Л. 132
Пластун И.Л. 100, 103, 112
Плоснина Т.Ю. 90, 91, 93, 136, 142
Погосян С.И. 89
Поляков И.В. 114
Полякова Р.В. 44, 62
Попов А.Н. 84
Попов Е.А. 63
Попов Е.В. 57
Попов И. 51
Попова Л.В. 193
Постнов Д.Э. 147, 149
Потанина Д.С. 63
Потапова Т.В. 88, 194, 215
Пустовалов А.В. 64
Пустогаров А.А. 195
Пушин Д.М. 139
Пыркина О.Е. 196
Пьянкина Е.А. 115
Ранкович Д. 131
Репников П.М. 74
Ризниченко Г.Ю. 78, 89, 90, 91, 98
Рубин А.Б. 78, 90, 91, 119
Русанова Н.Е. 165
Рустанов А.Р. 42
Савенкова Н.П. 45, 56, 65, 68
Салихова Т.Ю. 139
Свешникова А.Н. 79, 137
Середин Д.С. 82
Серовайский С.Я. 197
Сивчевич В. 131
Сидоров С.В. 66
Сидорова М.Ю. 216
Силаев А.Д. 207
Симонова Л.А. 217
Синюков С.А. 67
Скворцова М.И. 58
Складчиков С.А. 45, 56, 68
Соболева Л.П. 140
Соколова А.В. 138
Соколова О.С. 84

- Соломонова Е.В. 58
Сорокин А. 51
Степанюк Р.А. 116
Стихова О.В. 181
Страховская М.Г. 119
Такарев Д.А. 69
Тарасова Н.А. 166
Терешкин Э.В. 84
Терешкина К.Б. 84
Теркулов В.И. 218
Тимофеев В.И. 110
Тодоренко Д.А. 85, 93
Токарев Д.А. 61
Трайтак С.Д. 70
Туркина В.А. 138, 140, 191
Угрозов В.В. 71
Устинин М.Н. 141
Устюжанина Е.В. 167
Фадеев Е.П. 74
Фаркова Н.А. 168
Федоров В.А. 117, 118, 119, 123
Филин П.Д. 103
Филиппов А.Н. 71
Фурманов К.К. 182
Фурсова П.В. 89
Харитонова С.В. 42
Холина Е.Г. 117, 119, 123
Хренова М.Г. 105, 107, 111, 116
Хрущев С.С. 90, 91, 93, 118, 119
Худобин Р.В. 120
Цхай А.А. 92
Червицов Р.Н. 93
Черкасова В.А. 66
Чернейко Л.О. 219, 220
Чистякова Ю.А. 142
Шайтан А.К. 104
Шаповалов А.В. 55, 67
Шаравин В.С. 72
Шаряфетдинова А.С. 121
Шевченко А.В. 73
Шириносов В.Г. 122
Шитова Ю.Ю. 169
Шишкин А.П. 74
Шишов В.А. 198
Шубина А.И. 123
Шуткин А.С. 57
Яворская Е.Л. 190
Яковлев Р.Ю. 103
Яковлева О.В. 85
Якушевич Л.В. 94

ДЛЯ ЗАМЕТОК

Научное издание

Математика. Компьютер. Образование

Симпозиум с международным участием

Биофизика сложных систем

Вычислительная и системная биология

Молекулярное моделирование

Под редакцией

Г. Ю. Ризниченко и А. Б. Рубина

Тезисы

Выпуск 30

Подписано в печать 02.08.2023. Формат 60×84 ¹/₁₆.

Печать цифровая. Усл. печ. л. 13,14. Уч.-изд. л. 13,42.

Гарнитура «Таймс». Бумага для цифровой печати. Заказ № 23-36.

АНО «Ижевский институт компьютерных исследований»,

426061, г. Ижевск, ул. Ворошилова, д. 123.

E-mail: mail@icd.ru Тел./факс: +7 (3412) 50-02-95

Отпечатано в цифровой типографии

АНО «Ижевский институт компьютерных исследований».