

**ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ
ТЕХНОЛОГИИ В РЕШЕНИИ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ
И ПРИКЛАДНЫХ НАУЧНЫХ ЗАДАЧ**

Сессия ИВТН-2005



COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENTIFIC RESEARCHES

IVTN-2005 Session

Сборник материалов
The Proceedings



Москва – 2005
Moscow - 2005

ИВТН.ru – электронные конференции

Информационно-Вычислительные Технологии в Науке

Главный организатор - NC Group/НБК "ВИСТ"

При поддержке Zenon N.S.P.

IVTN.ru – web conferences

Computer Applications in Science

Provided by NC Group/NVK "VIST"

Supported by Zenon N.S.P.

Руководитель проекта ИВТН.ru *Габусу Полина*

Исполнительный секретарь ИВТН.ru *Пшеничникова Наталья*

IVTN.ru Project Leader *Gabusu Paulina*

IVTN.ru Executive Secretary *Pshenichnikova Natalia*

Организационный комитет выражает благодарность всем участникам сессии ИВТН-2005

The Organizing committee thanks all of the participants of the IVTN-2005 session

В сборнике материалов сессии ИВТН-2005 представлены аннотации докладов конференций "Информационно-вычислительные технологии в решении фундаментальных научных проблем и прикладных задач химии, биологии, фармацевтики, медицины" и "Информационно-вычислительные технологии в фундаментальных и прикладных физико-математических исследованиях". В докладах обсуждаются научные исследования и разработки в указанных областях, а также информационные и компьютерные технологии, являющиеся важным инструментом для достижения научных результатов.

These proceedings of the IVTN-2005 session include the annotations of the reports participated in the conferences "Computer Applications in Chemistry, Biology, Pharmaceutics and Medicine" and "Computer Applications in fundamental and applied Physics and Mathematics". Different scientific researches, achievements and computer applications examples are discussed in these reports.

© NC Group / НБК «Вист»

© NC Group / NVK «VIST»

Организаторы ИВТН-2005 IVTN-2005 Providers

Конференции ИВТН-2005 организованы по инициативе NC Group/НВК "ВИСТ", при поддержке научных центров и институтов Российской Академии Наук и Российской Академии Медицинских Наук.

The IVTN-2005 Conferences were initially organized by NC Group/NVK "VIST" and supported by Scientific Centers and Institutes of Russian Academy of Sciences and Russian Academy of Medical Sciences.

Информационно-вычислительные технологии в решении фундаментальных научных проблем и прикладных задач химии, биологии, фармацевтики, медицины

Computer Applications in fundamental and applied Chemistry, Biology, Pharmaceutics and Medicine

Базовые организации

ГУ НИИ биомедицинской химии им. В.Н.Ореховича
РАМН
Институт геохимии и аналитической химии им.
В.И.Вернадского РАН
Институт органической химии им. Н.Д.Зелинского РАН

Химический факультет Московского государственного
университета им. М.В.Ломоносова
Пушкинский научный центр РАН
Институт кристаллографии им. А.В.Шубникова РАН

Центр химии лекарственных средств

Hosting

V.N. Orekhovich Institute of Biomedical Chemistry of
Russian Academy of Medical Sciences
V.I.Vernadskiy Institute of Geochemistry and Analytical
Chemistry of Russian Academy of Science
N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry of Russian
Academy of Sciences
Department of Chemistry of M.V. Lomonosov Moscow State
University
Pushchino Scientific Center of Russian Academy of Sciences
A.V.Shubnikov Institute of Crystallography of Russian
Academy of Sciences
Center for Drug Chemistry, Chemical-Pharmaceutical
Research Institute

Программный комитет

Арчаков А.И., академик РАМН - **председатель**
Грибов Л.А., доктор физико-математических наук,
профессор, член-корр. РАН
Иванов А.С., доктор биологических наук, профессор
Кузьминский М.Б., кандидат химических наук
Михеев О.В., кандидат технических наук
Польшаков В.И., доктор химических наук
Поройков В.В., доктор биологических наук, профессор

Тартаковский В.А., академик РАН
Зефирова Н.С., академик РАН

Program Committee

Archakov A.I., Full member of Russian Academy of Medical
Sciences - **Chairman**
Gribov L.A., Doctor of Physical and Mathematical Sciences,
Professor, Member -correspondent of Russian Academy of
Sciences
Ivanov A.S., Doctor of Biology, Professor
Kuzminskii M.B., Ph.D. in Chemistry
Mikheyev O.V., Ph.D. in Engineering
Polshakov V.I., Doctor of Chemistry
Poroikov V.V., Doctor of Biology, Professor

Tartokovskii V.A., Full member of Russian Academy of
Sciences
Zefirov N.S., Full member of Russian Academy of Sciences,

Экспертный совет конференции

Иванов А.С., доктор биологических наук, профессор
Корнилов В.В., кандидат физико-математических наук
Кузьминский М.Б., кандидат химических наук
Михеев О.В., кандидат технических наук
Палулин В.А., кандидат химических наук
Польшаков В.И., доктор химических наук
Поройков В.В., доктор биологических наук, профессор –
председатель
Скворцов В.С., кандидат биологических наук

Expert Committee

Ivanov A.S., Doctor of Biology, Professor
Kornilov V.V., Ph.D. in Physical and Mathematical Sciences
Kuzminskii M.B., Ph.D. in Chemistry
Mikheyev O.V., Ph.D. in Engineering
Palulin V.A., Ph.D. in Chemistry
Polshakov V.I., Doctor of Chemistry
Poroikov V.V., Doctor of Biology,
Professor – **Chairman**
Skvortsov V.S., Ph.D. in Biology

Информационно-вычислительные технологии в фундаментальных и прикладных физико-математических исследованиях

Computer Applications in Fundamental and Applied Physics and Mathematics

Базовые организации

Институт проблем управления РАН
Институт космических исследований РАН
Институт вычислительной математики РАН
Институт математического моделирования РАН
Институт системного программирования РАН
Научно-исследовательский вычислительный центр МГУ
Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики (Технический университет)
Институт радиотехники и электроники РАН

Hosting

Institute of Problems of Management of the Russian Academy of Science
Institute of Space Research of the Russian Academy of Sciences
Institute of Numerical Mathematics of the Russian Academy of Sciences
Institute for Mathematical Modelling of the Russian Academy of Sciences
Institute for System Programming of the Russian Academy of Sciences
Research Computing Center of the Moscow State University
Moscow State Institute of Radio Engineering, Electronics, and Automatics (Technical University)
Institute of a Radio Engineering and Electronics of the Russian Academy of Sciences

Программный комитет

Воеводин В.В., академик РАН – председатель
Иванников А.Д., доктор технических наук, профессор
Калиткин Н.Н., доктор физико-математических наук, профессор, член-корр. РАН
Кузнецов С.Д., доктор технических наук, профессор
Михеев О.В., кандидат технических наук
Самохин А.Б., доктор физико-математических наук, профессор
Тихонравов А.В., доктор физико-математических наук, профессор
Трахтенгерц Э.А., доктор технических наук, профессор
Четверушкин Б.Н., доктор физико-математических наук, профессор, член-корр. РАН

Program committee

Voevodin V.V., Full member of Russian Academy of Sciences- **Chairman**
Ivannikov A.D., Doctor of Engineering Sciences, Professor
Kalitkin N.N., Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Member -correspondent of Russian Academy of Sciences
Kuznetsov S.D., Doctor of Engineering Sciences, Professor
Mikheyev O.V., Ph.D. in Engineering
Samokhin A.B., Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor
Tikhonravov A.V., Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor
Trahtengerts E.A., Doctor of Engineering Sciences, Professor
Chetverushkin N.N., Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Member -correspondent of Russian Academy of Sciences

Экспертный совет конференции

Антонов А.С., кандидат физико-математических наук, доцент
Воеводин В.В., доктор физико-математических наук, профессор, член-корр. РАН
Куликов С.П., кандидат физико-математических наук, доцент
Лифанов И.К., доктор физико-математических наук, профессор
Михеев О.В., кандидат технических наук
Самохин А.Б., доктор физико-математических наук, профессор - **председатель**
Фальк В.Н., доктор технических наук, профессор
Фетисов Ю.К., доктор физико-математических наук, профессор
Чердынцев В.В., кандидат физико-математических наук, доцент
Якововский М.В., кандидат физико-математических наук, доцент

Expert committee

Antonov A.S., Ph.D. in Physical and Mathematical Sciences, Assistant Professor
Voevodin V.V., Doctor of Engineering Sciences, Professor, Member -correspondent of Russian Academy of Sciences
Kulikov S.P., Ph.D. in Physical and Mathematical Sciences, Assistant Professor
Lifanov I.K., Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor
Mikheyev O.V., Ph.D. in Engineering
Samokhin A.B., Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor - **Chairman**
Falk V.N., Doctor of Engineering Sciences, Professor
Fetisov Yu.K., Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor
Cherdyntsev V.V., Ph.D. in Physical and Mathematical Sciences, Assistant Professor
Yakubovskiy M.V., Ph.D. in Physical and Mathematical Sciences, Assistant Professor

Уважаемые коллеги!

Проект "ИВТН.ru-электронные конференции" - уникальный опыт объединения усилий научных и коммерческих организаций по актуальным вопросам применения информационных технологий в решении фундаментальных и прикладных научных задач.

Цель проекта ИВТН.ru – практически участвовать в развитии отечественной науки и искать новые формы такого участия.

В задачи ИВТН.ru входит содействие в области обмена научным опытом и достижениями, организация обсуждений научных вопросов, устранение географических и ведомственных барьеров, поддержка инициативных групп, работающих в науке, поиск новых контактов с зарубежными учеными в сфере использования информационно-вычислительных технологий в научных исследованиях и разработках.

В сессии ИВТН-2005 одновременно проводились две междисциплинарные конференции по следующим направлениям:

- Информационно-вычислительные технологии в решении фундаментальных научных проблем и прикладных задач химии, биологии, фармацевтики, медицины
- Информационно-вычислительные технологии в фундаментальных и прикладных физико-математических исследованиях

Среди участников конференций есть представители, как научного сообщества, так и различных высокотехнологичных компаний.

Организационный комитет благодарит всех участников ИВТН-2005 и надеется на Ваше участие в последующих сессиях ИВТН.ru.

Организационный комитет ИВТН.ru

Dear Colleagues!

The project "IVTN.ru – web conferences" is a unique example of cooperation between scientific organizations and commercial enterprises created to discuss various issues and problems of computer applications in fundamental and applied science.

The main aim of the IVTN.ru project is to take an active part in supporting Russian science and apply new forms of the support.

The main objectives of the IVTN.ru include providing opportunities for exchange of research experience, arranging discussions on actual problems, eliminating geographic and bureaucratic borders, supporting the search for foreign scientific contractors.

Two multi-discipline conferences were held in terms of the IVTN-2005 session:

- Computer applications in fundamental and applied Chemistry, Biology, Pharmaceuticals and Medicine
- Computer applications in fundamental and applied Physics and Mathematics

The audience of the conferences includes employees of different high-tech companies and the representatives of scientific community.

The Organizing committee thanks all the participants of the IVTN 2005 and looks forward to your participation in terms of the following IVTN.ru sessions.

The IVTN.ru Organizing committee

**ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ
ТЕХНОЛОГИИ В РЕШЕНИИ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ
НАУЧНЫХ ПРОБЛЕМ И ПРИКЛАДНЫХ ЗАДАЧ
ХИМИИ, БИОЛОГИИ, ФАРМАЦЕВТИКИ,
МЕДИЦИНЫ**



**COMPUTER APPLICATIONS IN FUNDAMENTAL
AND APPLIED CHEMISTRY, BIOLOGY,
PHARMACEUTICS AND MEDICINE**

СЕКЦИЯ 1**ОБЩИЕ ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ И КОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В НАУКЕ****SECTION 1****GENERAL PROBLEMS AND PROSPECTS OF COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENCE****ПРИНЦИПЫ ПОСТРОЕНИЯ НАУЧНОГО ЗНАНИЯ****Грибов Л.А.**Институт геохимии и аналитической химии
им. В.И.Вернадского РАН

В данной работе рассматриваются принципы построения научного знания. В силу универсальности своего характера изложенный материал может быть интересен специалистам из различных областей науки

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=354>**PRINCIPLES OF CREATION OF SCIENTIFIC KNOWLEDGE****Gribov L.A.**V.I.Vernadsky Institute of Geochemistry and Analytical
Chemistry of Russian Academy of Sciences

The following report deals with the principles of creation of scientific knowledge. The material considered in this work is universal and could be interesting for specialists of different branches of science

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=354**ФИЗИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПРОЦЕССОВ****Грибов Л.А.**Институт геохимии и аналитической химии
им. В.И.Вернадского РАН

Предлагаемая читателям публикация построена на основании материалов устных докладов, которые автор сделал на семинарах целого ряда НИИ Академии наук и др. В статье в форме тезисов с большим количеством иллюстраций излагаются основные положения новой физической теории как простейших внутримолекулярных процессов, при которых всё сводится к изменению состояний одной молекулы (внутримолекулярные переходы с одного уровня энергии на другой), так и более сложных, когда возникают новые продукты в результате структурной изомеризации и реакций синтеза и разложения

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=376>**PHYSICAL THEORY OF THE MOLECULAR PROCESSES****Gribov L.A.**V.I.Vernadsky Institute of Geochemistry and Analytical
Chemistry of Russian Academy of Sciences

The suggested publication is based on the material of oral reports, made by the author during the seminars in different scientific and research institutes of the Russian Academy of Sciences. The article deals with the statements of the new physical theory both of the simple intermolecular processes, when we consider only the changes of conditions of the single molecular (intermolecular transfer from energy level to another), and of more complex ones, when the new products appear as a result of structural isomerization and reactions of synthesis and dissolution

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=376

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИНФОРМАЦИОННЫХ
ТЕХНОЛОГИЙ В ПРОЕКТНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ
УЧАЩИХСЯ****Яковенко Т.В.**Средняя общеобразовательная школа №165,
г.Казани**USING OF IT IN STUDENT'S PROJECT ACTIVITY****Yakovenko T.V.**

165 Kazan Secondary School

Педагогический дизайн неотъемлемая часть любой педагогической технологии, являясь процедурным механизмом, благодаря которому эта педагогическая технология доходит до реального применения в учебно-воспитательном процессе. Широкое поле для творчества педагогов элективные курсы. В таких курсах отсутствует оценочная система. Решить эту проблему позволяет проектный метод в сочетании с информационными технологиями. Курс невозможно провести в стандартных условиях, не прибегая к помощи информационным средствам обучения, позволяющего сократить время, сделать материал ярким, наглядным

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=360>

Pedagogical design is an essential part of any educational technology, it is procedure mechanism, with the help of which, and educational technology could be really applied in teaching and educational process. Elective courses are a wide field for teacher's creative work. Thus courses avoid marking system. For solving this problem there is a project method coupled with IT. Course could not be carried in standard conditions, without help of IT resources for educating, allowing to cut down the time, and to make materials more vivid and understandable.

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=360

СЕКЦИЯ 2

КОМПЬЮТЕРНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ, ИХ ОРГАНИЗАЦИЯ (СЕТИ И ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ)

SECTION 2

COMPUTING AND COMPUTING MANAGEMENT (NETWORKS AND PARALLEL COMPUTATION)

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ДНК АПТМЕРОВ К ТРОМБИНУ И ИХ КОМПЛЕКСОВ С ТРОМБИНОМ

Головин А.В., Решетников Р., Спиридонова В.А.,
Копылов А.М.

Московский государственный университет
им. М.В.Ломоносова

COMPUTER MODELING OF DNA APTAMERS TO THROMBIN STRUCTURE, AND THEIR COMPLEXES WITH THROMBIN

Golovin A.V., Reshetnikov R., Spiridonova V.A.,
Kopylov A.M.

M.V.Lomonosov Moscow State University

В работе проведено моделирование методами компьютерной молекулярной динамики (МД) комплексов ДНК-аптамеров с тромбином. Средствами построения стандартных структур НК сконструирована модель пространственной структуры Апт-30 на основе известной структуры Апт-15. Проведена симуляция МД полученной структуры Апт-30 и Апт-15 в растворе, как в свободном состоянии, так и в комплексе с ионами натрия и калия. Оба аптамера показали высокую стабильность на протяжении 10 нс в присутствии иона калия в структуре G-квартета, что находится в хорошем соответствии с данными литературы. Модификация структуры Апт-15 при построении Апт-30 не повлияла на устойчивость и стабильность G-квартета. Смоделированные комплексы тромбина с Апт-30 и Апт-15 были подвергнуты равновесной МД. Оба комплекса оказались стабильными. Структурным основанием меньшей кКд комплекса тромбина с Апт-30 является увеличение числа водородных связей с тромбином, которые образуют выпетливания, не принадлежащие G-квартету. Общая ориентация Апт-30 в комплексе с белком позволяет аптамеру более эффективно блокировать место связывания фибриногена с тромбином.

Работа поддержана грантами - РФФИ-04-04-48942, РФФИ-НВО- 03-04-89001, РФФИ-ГФЕН -04-04-39014, Университеты России 05-02-041, РФФИ 05-04-49750

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=337>

The modeling of complexes of DNA aptamers with thrombin, using the methods computer molecular dynamics was carried out. With the help of design tools for standard structures of nucleic acids, the 3D model of Apt-30 basing on known structure of Apt-30 was created. The simulating of molecular dynamics of the result structures of Apt-30 and Apt-15 in solution, in free state and with natrium and potassium ions was held. Both aptamers have shown high stability during 10 nanoseconds with the potassium ion in G-quartet structure, and this is well conform to literature data. The modification of Apt-15 structure, during the creation of Apt-30 had no influence on steadiness of G-quartet. The created complexes of thrombin and Apt-30 and Apt-15 were subjected to equilibrium molecular dynamics. Both the complexes were stable. The structure base of the smallest complex of thrombin and Apt-30 is the increasing number of hydrogen bonds with thrombin, which create loops that are not included in G-quartet. The general orientation of Apt-30 in complex with protein allows aptamer to block effectively the binding site of fibrinogen with thrombin.

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=337

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ОБЪЕКТНО-ОРИЕНТИРОВАННОЙ ТЕХНОЛОГИИ ПРОГРАММИРОВАНИЯ ДЛЯ СИНХРОННОГО ПОСТРОЕНИЯ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ И СИЛОВОЙ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛ

Дьяченко Г.Г.

Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН

USING OF OBJECT-ORIENTED PROGRAMMING FOR SYNCHRONOUS CONSTRUCTION OF MOLECULE GEOMETRIC AND FORCE STRUCTURE

Diyachenko G.G.

P.N.Lebedev Physical Institute of Russian Academy of Sciences

Предлагается объектная модель молекул и их фрагментов, содержащая данные об атомах, матрице связности, естественных координатах и силовых постоянных, то есть полную информацию, необходимую для решения колебательной задачи в приближении валентных сил. С помощью процедуры склейки из фрагментов конструируется необходимая молекула, при этом допускается перекрывание фрагментов, и автоматически модифицируются все компоненты объекта. Для построения колебательного уравнения при наличии всех неэквивалентных фрагментов не требуется ничего кроме процедуры склейки

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=302>

Molecules and its fragments object model, containing the atoms, adjacent matrix, natural coordinates and force constants data, i.e. the full information needed for the vibrational calculations in valence-force approximation. The molecule is constructed from fragments with using gluing procedure, at that the covering of fragments is allowed, and all object components automatically are modified. Nothing needs for vibrational equation construction in presence of all non-equivalent fragments except gluing procedure

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=302

СЕКЦИЯ 3**МОДЕЛИРОВАНИЕ, ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ****SECTION 3****COMPUTER SIMULATION****МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКОГО
СТРОЕНИЯ ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВЫХ
КОМПЛЕКСОВ БЕНЗОЛА С МОЛЕКУЛАМИ АЗОТА****Дьяченко Г.Г.**

Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН

**GEOMETRICAL STRUCTURE MODELING OF
BENZENE VAN-DER-VAALS COMPLEXES WITH
NITROGEN MOLECULES****Diyachenko G.G.**P.N.Lebedev Physical Institute of Russian Academy of
Sciences

Методы молекулярной механики, динамики и полумпирические методы использованы для моделирования геометрического строения ван-дер-ваальсовых комплексов бензола с молекулами азота, образующихся в сверхзвуковой струе. Найдены наиболее энергетически выгодные конфигурации комплексов, которые характеризуются тем, что молекулы азота концентрируются преимущественно с одной стороны плоскости бензольного кольца, за исключением одной молекулы азота, которая, как правило, располагается с противоположной стороны

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=291>

Molecular mechanics, dynamics and semiempirical methods are used for geometrical structure modeling of benzene van-der-vaals complexes with nitrogen molecules, formed in supersonic jet. Most energetically stable complex configurations are found. The main characteristic of this configurations is localization of nitrogen molecules from the one side of the benzene ring except one, which usually are placed on the opposite side

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=291**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ АЛГОРИТМА МОДЕЛИ
ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПРОБОЯ ДЛЯ ОПИСАНИЯ
РАЗВИТИЯ ГРИБНЫХ КОЛОНИЙ В
ГЕТЕРОГЕННЫХ СРЕДАХ****Цветкова Е.О., Пагина Л.К.**

Санкт-Петербургский государственный университет

**DIELECTRIC BREAKDOWN MODEL ALGORITHM
APPLICATION FOR FUNGI COLONIES EVOLUTION
PROCESSES MAPPING****Tsvetkova E.O., Pagina L.K.**

Saint-Petersburg State University

Рассмотрен новый подход к моделированию структурообразования в грибных колониях на основе алгоритма DBM. Проведена компьютерная реализация алгоритма с учетом особенностей грибных систем. Предложены пути модификации модели для случая развития колонии в гетерогенной анизотропной среде

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=328>

A novel approach based on the algorithm of DBM model to structure formation in Fungi colonies mapping has been considered. Computer realisation of the algorithm has been carried out regarding peculiarities of fungal systems. Ways for the model adaptation to heterogeneous anisotropic media case have been suggested

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=328

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ РЕАКЦИЙ С-АРИЛИРОВАНИЯ УЧАСТИЕМ НЕСИММЕТРИЧНЫХ ДИХЛОРИДОВ ТРИАРИЛВИСМУТА**Зеленцов С.В., Марьясин Б.А., Фёдоров А.Ю**

Нижегородский государственный университет им. Н.И.Лобачевского

Используя полуэмпирический квантово-химический метод (PM3), исследованы пути реакций С-арилирования с участием несимметричных дихлоридов триарилвисмута, с целью описания экспериментально установленной зависимости региоселективности реакций от используемого субстрата. Определены геометрические и энергетические параметры образующихся интермедиатов. Показано, что образование продуктов арилирования или фенилирования может быть объяснено различием указанных выше параметров интермедиатов

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=344>**QUANTUM CHEMICAL STUDY OF C-ARYLATION WITH PARTICIPATION OF NON-SYMMETRICAL TRIARYLBISMUTH DICHLORIDES****Zelentsov S.V.**

N.I.Lobachevskiy State University of Nizhniy Novgorod

The reaction pathways of C-arylation with participation of non-symmetrical triaryl bismuth dichlorides were studied using semi-empirical quantum chemical method (PM3) in order to describe the experimentally observed reaction's regioselectivity as a function of used substrates. The geometrical and energetic parameters intermediates formed were determined. It was shown, that the formation of arylation (phenylation) product can be explained by distinction of parameters of intermediates

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=344**QSAR ИССЛЕДОВАНИЯ АСЕНИТИИ И ДЕЛФИНИИИ АЛКАЛОИДОВ С ПРОТИВОАРИТМИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТЬЮ****Турабекова М.А., Джакхангиров Ф.Н., Расулев Б.Ф.**

Национальный Университет Узбекистана

Выполнен QSAR анализ для серии дитерпеноидных алкалоидов противоаритмического действия выделенных из родов растений Aconitum и Delphinium. Молекулы алкалоидов с ликоктониновым, гетератизиновым, напеллиновым и денадутинным скелетами оптимизированными полуэмпирическим методом AM1, были использованы для поиска закономерности между структурой и противоаритмической активностью. Методом генетического алгоритма и множественного линейного регрессионного анализа (GA-MLRA) отобран ряд лучших прогнозирующих моделей наиболее полно описывающих возможный механизм биологической активности

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=330>**QSAR STUDIES ON ACONITUM AND DELPHINIUM ALKALOIDS OF ANTIARRHYTHMIC ACTIVITY****Turabekova M.A., Dzhakhangirov F.N., Rasulev B.F.**

National University of Uzbekistan

QSAR analysis has been performed for the series of antiarrhythmic diterpenoid alkaloids isolated from Aconitum and Delphinium plant spp. Alkaloid molecules with lycocotnine, heteratisine, napelline and denadutine core skeletons have been optimised using AM1 semiempirical method and applied in further structure-activity relationship studies carried out. A number of best predictive models significantly related to the mode of action have been identified by Genetic Algorithm method combined with Multiple Regression Analysis (GA-MLRA)

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=330**СТРУКТУРНАЯ ДИНАМИКА МОЛЕКУЛЫ КВЕРЦЕТИНА В РАСТВОРЕ****Брусков В.П.**

Институт химии растительных веществ им. С.Ю.Юнусова Академии Наук Республики Узбекистан

Методами спектроскопии ЯМР 13С и квантовой химии исследована кето-енольная таутомерия природного флавоно-3-ола кверцетина. Показано, что миграция протона может происходить как внутримолекулярный переход, так и с участием молекул растворителя

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=343>**STRUCTURAL DYNAMICS OF THE QUERCETIN MOLECULES IN SOLUTION****Bruskov V.P.**

S.Yu.Yunusov Institute of the Chemistry of Plant Substances of Uzbekistan Republic Academy of Sciences

Using the methods of NMR spectroscopy and quantum chemistry the keto-enol tautomerism of the natural flavone-3-ole quercetin was studied. It was shown that migration of proton could happen both as intermolecular transfer, and with the help of dissolvent molecules.

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=343

**АНАЛИЗ КОМПЛЕКСНОГО ВЛИЯНИЯ ПРИЗНАКОВ
НА ПЕСТИЦИДНЫЕ СВОЙСТВА****Сементеева Л.Ш., Кирлан С.А., Пешкина И.В.,
Тюрина Л.А., Кантор Е.А.**Уфимский государственный нефтяной технический
университет

В результате анализа связи «структура - пестицидная активность» гетероорганических соединений с помощью системы «SARD» выявлено комплексное влияние признаков, характерных одновременно для нескольких типов активности. Например, замещенные пиперидин и триазол обладают рострегулирующей и фунгицидной активностью, 1,3,5-зам. Ar – гербицидной и фунгицидной, 1-зам. Ar – фунгицидной и инсектицидной, эфиры фосфиновой кислоты – фунгицидной, инсектицидной и рострегулирующей

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=311>**ANALYSIS OF COMPLEX INFLUENCE OF
CHARACTERISTICS ON PESTICIDE FEATURES****Sementeyeva L.Sh., Kirlan S.A., Peshkina I.V.,
Tyurina L.A., Kantor E.A.**

Ufa State Technical Oil University

As the result of analysis of “structure-pesticide activity” relationship of hetero-organic compounds using “SARD” system, the complex influence of characteristics, simultaneously typical for several types of activities, was discovered. For instance, substituted piperidine and triazole have growth regulative and fungicidal activities 1, 3, 5 – substituted Ar - herbicidal and fungicidal, 1 – substituted Ar – fungicidal and insecticidal, ethers of phosphinic acid have fungicidal, insecticidal and growth regulative activities.

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=311**ВНУТРЕННИЙ МЕХАНИЗМ ГЕНЕРАЦИИ
ЗНАЧИТЕЛЬНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО
ДИПОЛЬНОГО МОМЕНТА МОЛЕКУЛЫ ДНК.
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ****Кабанов А.В., Комаров В.М.**

Институт биофизики клетки РАН

В работе, основываясь на развиваемой авторами идее о внутреннем полиморфизме уотсон-криковских пар в структуре двойной спирали ДНК, с помощью квантово-химических полуэмпирических расчетов проанализирован механизм накопления большого электрического дипольного момента в модельных спиральных стопках из неплюских канонических АТ и GC пар азотистых оснований. Рассмотрена зависимость величины и направленности электрического дипольного момента двойной спирали от длины спирали, от различных геометрий водородного связывания пар, а также, от величины изгибового искривления главной оси спирали

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=335>**INTERNAL MECHANISM OF BIG ELECTRICAL
DIPOLE MOMENT GENERATION OF THE DNA
MOLECULE. QUANTUM-CHEMICAL ANALYSIS****Kabanov A.V., Komarov V.M.**Institute of Cell Biophysics of Russian Academy of
Sciences

In this work on the basis of the idea of the intrinsic polymorphism of Watson-Crick base pairing in DNA structure, with the use of quantum-chemistry methods we analyzed the process of electric dipole moment accumulation in model spiral stacks of canonical non-planar AT and GC pairs. The dependence of the value and orientation of electrical dipole moment of a double helix from spiral lengthening, from different geometries of base H-pairing, and also, from the spiral bending were considered

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=335**ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ И
ПОЛУЭМПИРИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ФОТОПРЕВРАЩЕНИЯ ТЕМНОВЫХ РЕАКЦИЙ В
ХЕМИЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ****Васильев Р.Ф., Цаплев Ю.Б.**Институт биохимической физики
им. Н.М.Эмануэля РАН

Обнаружены случаи превращения «темновой» реакции в хемилюминесцентную посредством предварительного облучения реагентов светом низкой (несколько мВт/см²) интенсивности. Примеры – реакции гидразона салицилового альдегида или антрона с ОН. Проведены РМЗ-расчеты энергетического профиля, теплоты, энергии активации возможных путей реакции. Показано, что реакция с ОН фотопродукта с повышенной внутренней энергией и реакционной способностью, возвращает полученную энергию в форме света. Явление интересно как для теории, так и для химического анализа

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=345>**EXPERIMENTAL STUDIES AND SEMIEMPIRICAL
MODELLING OF PHOTOTRANSFORMATION OF
DARK REACTIONS INTO THE CHEMILUMINESCENT
PROCESSES****Vasilev R.F., Caplev Y.B.**N.M.Emanuel Institute of Biochemical Physics
of Russian Academy of Sciences

The cases were found when a “dark” reaction might be transformed into chemiluminescent one by pre-irradiation with the light of low (a few mW/cm²) intensity. Reactions of salicylaldehyde hydrazone or anthrone with OH are the examples. PM3 calculations were made of energy profile, reaction heat, activation energy for possible reaction routes. It was shown that the OH reaction with the photoproduct, having the increased internal energy and reactivity, returned the obtained energy in the form of light. This effect is of interest for the theory as well as for analytical chemistry

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=345

**ВЛИЯНИЕ ХОЛЕСТЕРИНА НА СВОЙСТВА
БИСЛОЕВ НЕНАСЫЩЕННЫХ
ФОСФАТИДИЛХОЛИНОВ: МОДЕЛИРОВАНИЕ
МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ**
Корнилов В.В., Балабаев Н.К., Рабинович А.Л.
Институт математических проблем биологии РАН

Использован метод молекулярной динамики для исследования влияния холестерина на структурные и динамические свойства гидратированных бислоев фосфатидилхолинов различной степени ненасыщенности в жидкокристаллическом состоянии. Рассчитаны профили параметров порядка связей C-H и C-C углеводородных цепей липидов и ориентационные свойства этих связей; построены профили плотности различных атомов и групп атомов относительно нормали к поверхности бислоя; исследована диффузионная подвижность молекул липидов в латеральной плоскости

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=370>

**INFLUENCE OF THE CHOLESTEROL ON FEATURES
OF BIO-LAYERS OF NON-SATURATED
PHOSPHATIDYLCHOLINES: SIMULATING BY THE
METHOD OF MOLECULAR DYNAMICS**
Kornilov V.V., Balabaev N.K., Pabinovitch A.L.
Institute of Mathematical Problems of Biology Russian
Academy of Sciences

The method of molecular dynamics was used for studying of the influence of the cholesterol on structural and dynamic properties of hydrated bio-layers of non-saturated phosphatidylcholines of different level of nonsaturation in liquid-crystal state. We've calculated the profiles of parameters of the levels of orders of C-H and C-C links in hydrocarbon chains of lipids and orientation features of these links; the profiles of density of different atoms and groups of atoms respectively to the normal line to the bio-layer surface were built up; the diffusion mobility of the molecules of lipids in lateral surface were studied

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=370

**РАСЧЕТ СРЕДНЕИОННЫХ КОЭФФИЦИЕНТОВ
АКТИВНОСТИ В ГИДРАТНОЙ МОДЕЛИ
РАСТВОРОВ СИЛЬНЫХ ЭЛЕКТРОЛИТОВ**
Монич В.А., Лазукин В.Ф.

Нижегородская государственная медицинская академия

С помощью процедуры идентификации параметров определены значения параметров функциональных зависимостей вкладов в гидратной модели водных растворов сильных электролитов. Рассчитаны приведенные химические потенциалы стандартного состояния гидратированных ионов для 20 галогенидов и 5 гидроокисей щелочно-земельных элементов. Воспроизведены значения среднеионных коэффициентов активности для 15 систем растворов в зависимости от концентрации исходных компонентов в интервале от 0,01 до 3 моль на 1 кг растворителя со средней погрешностью, не превышающей 0,8%

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=366>

**CALCULATING OF THE MEAN ION COEFFICIENTS OF
ACTIVITY IN HYDRATED MODEL OF STRONG
ELECTROLYTES SOLUTIONS**
Monich V.A., Lazukin V.F.

Nizhniy Novgorod State Medical Academy

With the help of identifying of the parameters, the values of the parameters of functional relations of the contributions in hydrated model of strong electrolytes solutions. The chemical potentials of the standard state of the hydrated ions for twenty halogenides and five hydrates of alkaline-earth elements were calculated. The values of mean ion coefficients of activity for 15 systems of solutions were reproduced depending on concentration of initial components in the intervals from 0.01 to 3 moles to 1 kg of the dissolvent with the average mistake not more than 0.8%

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=366

**ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА
БИОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ CA²⁺-РЕГУЛИРУЕМЫХ
ФОТОПРОТЕИНОВ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИМ РМЗ
МК-ССП МЕТОДОМ**
Романова Т.А., Высотский Е.С.

Институт вычислительного моделирования СО РАН

Биолюминесценция у ряда морских организмов, связана с окислительным декарбоксилированием 2-гидропероксицелентеразина до возбужденных продуктов в активном центре фотопротеинов. Расчитаны геометрия и электронная структуры интермедиатов и продуктов реакции в вакууме и кластерной модели активного центра WT обелина методом РМЗ, а возбужденные формы продукта также МК-ССП. Распределение электронной плотности и локализация НОМО чувствительны к изменению поля зарядов АК-окружения и для исследования механизмов таких реакций в модельных системах важен учет зарядового поля этого оружия

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=364>

**THE STUDY OF BIOLUMINESCENCE MECHANISM OF
CA²⁺-REGULATED PHOTOPROTEINS IN THE
CLUSTER MODEL OF ACTIVE SITE BY
SEMIEMPIRICAL CAS-CI METHOD**
Romanova T.A., Vysotsky E.S.

Institute of Computational Modeling of Siberian Branch of Russian Academy of Sciences

The photoproteins are responsible for the bioluminescence of a variety of marine organisms. Therefore the residues comprising the CLZ-binding cavity may critically affect the pathway leading to formation of the excited state of CLM. The possible intermediates of the CLZ decarboxylation reaction and excited states of the CLM were calculated both in gas phase and in the amino acid environment by semiempirical PM3 method in MCSCF approach. It has been shown that the electron density redistribution and HOMO localization are very sensitive to the charge field of the surrounding amino acid residues

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=364

ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ЦЕПИ ПРИ (СО)ПОЛИМЕРИЗАЦИИ СПИРО-ОРТО-КАРБОНАТОВ**Дмитрук А.Ф., Зайцева В.В., Тюрин Т.Г., Заречная О.М., Горбань О.А.**

Донецкий государственный университет экономики и торговли им. М.Туган-Барановского

FORMING OF THE STRUCTURE OF MOLECULAR CHAIN DURING (CO-) POLYMERIZATION OF SPIRO-ORTHOCARBONATES**Dmitruk A.F., Zaitseva V.V., Tyurina T.G., Zarechnaya O.M., Gorban' O.A.**

M.Tugan-Baranovsky Donetsk State University of Economics and Trade

В работе представлены результаты экспериментального и квантово-химического исследования реакции изомеризации макрорадикала спиро-орто-карбоната в процессах (со)полимеризации. Установлено, что теоретическими расчетами электронных, геометрических и термодинамических параметров реакции подтверждающие данные ИК-и ПМР спектров о присутствии в макромолекулярной цепи линейных структур, содержащих кетонные и карбонатные группы, что однозначно свидетельствует о возможности протекания реакции изомеризации растущего макрорадикала

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=287>

The results of experimental and quantum-chemical analysis of isomerization of Spiro-Orthocarbonates macroradical during (co-) polymerization are presented in the report. It was determined that theoretical calculations of electronic, geometric and thermodynamic parameters of the reaction

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=287**ВНУТРЕННИЙ МИР СТРУКТУРНОГО ПОЛИМОРФИЗМА МОЛЕКУЛЫ ДНК: КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ****Комаров В.М., Кабанов А.В., Теплухин А.В.**
Институт биофизики клетки РАН

Работа посвящена обсуждению проблемы структурно-функциональной организации молекул нуклеиновых кислот, являющейся одной из фундаментальных проблем современной физико-химической биологии. На основе результатов квантово-химических расчетов развивается идея о ключевой роли скрытого полиморфизма водородного связывания уотсон-криковских пар азотистых оснований в существовании полиморфизма форм двойных спиралей ДНК и в формировании механизма зависимости вторичной структуры ДНК от нуклеотидной последовательности

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=332>**INTERNAL WORD OF STRUCTURAL POLYMORPHISM OF DNA MOLECULE: QUANTUM-CHEMICAL ANALYSIS****Komarov V.M., Kabanov A.V., Teplukhin A.V.**
Institute of Cell Biophysics of Russian Academy of Sciences

The report is devoted to discussing one of fundamental problems of a modern physico-chemical biology - the problem of structural-functional organization of nucleic acids molecules. On the basis of the results of quantum-chemical calculations we substantiate the idea about a key role of hidden polymorphism of Watson-Crick base pairs in the appearance of DNA structural polymorphism, and in the formation of mechanism of sequence-dependence of DNA secondary structure

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=332

DFT РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ И СПИНОВОГО СОСТОЯНИЯ АТОМА ЖЕЛЕЗА ЦИТОХРОМА P450 НА СТАДИЯХ КАТАЛИЗА МОНООКСИГЕНАЗНЫХ РЕАКЦИЙ**Романова Т.А.**

Институт вычислительного моделирования СО РАН

Представлены результаты исследования электронной структуры и спинового состояния атома железа цитохрома P-450 на стадиях катализа монооксигеназных реакций методом DFT в базе B3LYP/6-31G***. Показано, что промежуточные комплексы, которые образуются за счет присоединения молекулы O₂ и последующий ее трансформации (изменение способа координации и приход дополнительных электронов, образование комплекса с атомом кислорода) как правило характеризуются низким или промежуточным спиновым состоянием. Источником нескомпенсированного спина, который несимметрично распределяется на порфириновом кольце, являясь d-состояния железа

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=352>**STUDY OF THE ELECTRONIC STRUCTURE AND IRON SPIN STATE OF CYTOCHROME P-450 DURING MONOOXYGENASE CATALYTIC CYCLE BY DFT METHOD****Romanova T.A.**

Institute of Computational Modeling of Siberian Branch of Russian Academy of Sciences

The electronic structure and iron spin state of cytochrome P-450 during monooxygenase catalytic cycle have been studied by DFT B3LYP/6-31G*** calculations. The transition complexes formed by adding of oxygen molecule and following rearrangement (changing of coordination and adding additional electrons formation of a complex with oxygen atom) can be characterized by low or intermediate spin state caused by Fed-states. The uncompensated spin state is asymmetrically delocalized on the porphyrine ring

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=352**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ БАЗ ДАННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ АНАЛИЗА СВЯЗИ «СТРУКТУРА АКТИВНОСТЬ» ДЛЯ ОЦЕНКИ КОМПЛЕКСНОГО И СЕЛЕКТИВНОГО ВЛИЯНИЯ СТРУКТУРНЫХ ПРИЗНАКОВ НА РАЗНЫЕ ТИПЫ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ****Тюрина О.В., Тюрина Л.А., Сементеева Л.Ш., Кирлан С.А.**

Башкирский государственный медицинский университет

При дизайне потенциально активных структур сочетание или разделение различных биоэффектов производится введением комплексных или селективных структурных признаков, обуславливающих сходство и различие по нескольким типам активности. Такие признаки могут быть выявлены двумя путями, отличающимися исследуемыми альтернативными группами: а) сопоставлением оценок, полученных для отдельных видов свойств, б) проведением специальных расчётных экспериментов. Применение комплексных или селективных признаков определяется предполагаемыми целевыми свойствами и используемыми базовыми структурами. Пример сопоставления признаков приведён для 4-х типов пестицидной активности

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=333>**USING THE DATABASE OF THE RESULTS OF THE ANALYSIS OF STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIPS FOR ESTIMATING COMPLEX AND SELECTIVE INFLUENCE OF STRUCTURE FEATURES ON VARIOUS TYPES OF BIOLOGICAL ACTIVITY****Tyurina O.V., Tyurina L.A., Sementeyeva L.Sh., Kirilan S.A.**

Bashkir State Medical University

During the design of potential active structures, combination and disjunction of different bio-effects is carried out by introducing complex or selective structure features, determining similarity and difference in several types of activity.

These features could be disclosed by two ways, differs by alternative groups being researched: a) by comparing appraisals, obtained for separate types of features; b) by carrying out special calculations. The application of complex or selective features is determined by supposed objective features and base structures used. The example of comparing of features was carried out for four types of pesticides activity.

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=333

АНАЛИЗ ОБЛАСТИ КОНТАКТА СУБЪЕДИНИЦ ОБРАТНОЙ ТРАНСКРИПТАЗЫ ВИЧ

Белов Д.А., Веселовский А.В.

ГУ НИИ Биомедицинской химии им.В.Н.Ореховича
РАМН

Проведен анализ контактных поверхностей субъединиц обратной транскриптазы ВИЧ. Показано, что область контакта образуется преимущественно гидрофобными аминокислотами с малым количеством водородных связей между субъединицами. Проведена оценка вклада отдельных аминокислотных остатков в энергию связывания субъединиц

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=289>

ANALYSIS OF CONTACT INTERFACE OF THE REVERSE TRANSCRIPTASE HIV SUBUNITS

Belov D.A., Veselovskiy A.V.

V.N.Orekhovich Institute of Biomedical Chemistry of
Russian Academy of Medical Sciences

The analysis of contact interfaces of subunits of the reverse transcriptase HIV was done. The contact interface predominately is formed by hydrophobic amino acids with low amount of hydrogen bonds between the subunits. The contribution of amino acid residues in binding energy of the subunits was estimated

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=289

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАНСПОРТА ПЛОТНЫХ СМЕСЕЙ В НАНОРАЗМЕРНЫХ КАНАЛАХ И ОРИЕНТАЦИОННЫЕ СОСТОЯНИЯ МОЛЕКУЛ

Товбин Ю.К.

Научно-исследовательский физико-химический
институт им. Л.Я.Карпова

Построена молекулярно-кинетическая теория процессов переноса компонентов разного размера газообразных и жидких смесей в узких каналах с учетом атомарной структуры их стенок. Разработан пакет программ для расчета равновесных и динамических характеристик смесей молекул разной формы и размера в объемной фазе и в наноразмерных щелевидных и цилиндрических каналах с учетом вклада вращательных движений молекул в диссипативные коэффициенты. По точности новый подход сопоставим с методом молекулярной динамики, а по скорости расчетов не менее чем на два порядка превосходит его и позволяет исследовать процессы в значительно более широком временном интервале

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=288>

SIMULATIONS OF A TRANSPORT OF DENSED MIXTURES IN NANOSCALED CHANNELS AND ORIENTATION STATES OF MOLECULES

Tovbin Y.K.

L.Ya.Karpov Institute of Physical Chemistry

Molecular kinetic theory of transportation processes for dense gases and liquid components with various sizes in narrow pores and channels, which taking into account an atomic structure of their walls was developed. The software package for simulation of the equilibrium and dynamic characteristics of mixtures with various shapes and sizes of molecular components for bulk phase and in narrow slit-like pores and cylindrical channels is developed which take into account the rotation movements of molecules in dissipative coefficients. New approach have the same accuracy as the molecular dynamics method but a speed of accounts not less than on two orders surpass it and permit to investigate processes in a considerably wider temporary interval

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=288

ВЛИЯНИЕ ДЕФЕКТА ВЕТВЛЕНИЯ НА РАЗМЕР И ФОРМУ ДЕНДРИМЕРОВ

Бессонов В.В., Мазо М.А., Балабаев Н.К.

Институт математических проблем биологии РАН

Методом молекулярной динамики проведено исследование влияния одиночного дефекта ветвления на форму, размер и плотность дендримера. Рассматривались 8 поли(пропилениминовых) дендримеров 7-й генерации с различной степенью повреждения в хорошем и плохом растворителях. Показано, что наличие одиночного дефекта в дендримере практически не влияет на размер молекулы. Плотность молекулы в хорошем растворителе слегка уменьшается только при наиболее сильных повреждениях, а в плохом растворителе дендримеры образуют компактные глобулы с одинаковой плотностью

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=319>

INFLUENCE OF BRANCH DEFECT ON SHAPE AND SIZE OF DENDRIMERS

Bessonov V.V., Mazo M.A., Balabaev N.K.

Institute of Mathematical Problems of Biology Russian
Academy of Sciences

Influence of a single branch defect on shape, size and density of dendrimers was investigated using molecular dynamics method. Eight poly(propylene imine) dendrimers of the 7 generation with different extent of breakdown are studied at bad solvent and good one. It.s showed that the presence of a single defect doesn.t practically influence on molecule size. At good solvent the density of molecule was slightly decreased only for most strong breakdowns, but dendrimers form compact globules with equal density at bad solvent

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=319

МОДЕЛИ ЧАСТИЦ МЕТОКСИНА**Клюев С.А., Рыжова И.Е.**

Белгородский государственный университет

Методом PM3 оптимизированы модели частиц метоксатина, таких как молекула, анион-радикал и анионы (моно-, ди-, три-). Затем они были сопоставлены с данными рентгеноструктурного анализа из . The Protein Data Bank . для метоксатиновых частиц в белках

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=342>**MODELS OF METHOXATIN PARTICLES****Kluev S.A., Ryjova I.E.**

Belgorog State University

Models of methoxatin particles such as molecule, anion-radical and anions (mono-, di-, tri-) were optimized by PM3 method. Then the models were compared with X-ray data from .The Protein Data Bank. for the particles of methoxatin in proteins

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=342**МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РАСПОЗНАВАНИЯ ПРОТИВОЯЗВЕННОЙ АКТИВНОСТИ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ****Бетелина И.Б., Кирлан С.А., Тюрин Л.А.**

Уфимский государственный нефтяной технический университет

Сформирована и апробирована математическая модель распознавания противоязвенной активности гетероциклических соединений. В рамках созданной модели выявлены наиболее значимые структурные признаки, связанные с проявлением низкой и высокой противоязвенной активности. Полученные зависимости могут быть использованы при конструировании методами молекулярного дизайна новых соединений

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=320>**MATHEMATICAL MODEL FOR RESPONSE OF ANTIULCER ACTIVITY OF HETEROCYCLIC COMPOUNDS****Betelina I.B., Kirlan S.A., Tyurina L.A.**

Ufa State Technical Oil University

Mathematical model for response of antiulcer activity of heterocyclic compounds was researched and approved. In terms of the model, the most important structural features, associated with high and low antiulcer activity were discovered. The result dependences could be applied for molecular design and construction of new compounds.

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=320**ПОЛНОАТОМНАЯ КОМПЬЮТЕРНАЯ МОДЕЛЬ БИСЛОЙНОЙ МЕМБРАНЫ ИЗ ДИПАЛЬМИТОИЛФОСФАТИДИЛХОЛИНА****Смолинская Ю.Ю., Веселовский А.В., Иванов А.С.**

ГУ НИИ Биомедицинской химии им.В.Н.Ореховича РАН

В работе выполнено компьютерное моделирование фрагмента бислойной мембраны из дипальмитойлфосфатидилхолина (ДПФХ). Модель ДПФХ сконструирована на основе кристаллических структур холина и глицерофосфата с последующим достраиванием двух жирнокислотных остатков. Молекула ДПФХ была размножена и из полученных копий построена модель бислоя, содержащая 338 липидных молекул. Моделирование молекулярной динамики в водном окружении в течение 3,5 нс выполняли с оптимизированной структурой бислоя. Равновесие системы было достигнуто после 1,3 нс молекулярной динамики. Сопоставление ряда структурных параметров, рассчитанных из модели бислоя, с экспериментальными значениями показало их хорошее соответствие. С целью проверки возможности использования построенной модели бислоя для моделирования топологии мембранных белков в нее был встроен мембранный белок моноаминоксидаза А (МАО А), трехмерная структура и мембранная топология которого известны. Система, состоящая из липидного бислоя, белка и воды, оптимизирована с применением молекулярной динамики в течение 3,0 нс. Равновесная пространственная структура МАО А и её положение в мембране хорошо согласуются с кристаллической структурой этого фермента

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=307>**ALL-ATOM LIPID BILAYER OF DIPALMITOYLPHOSPHATIDYLCHOLINE****Smolinskaya J.Yu., Veselovskiy A.V., Ivanov A.S.**

V.N.Orekhovich Institute of Biomedical Chemistry of Russian Academy of Medical Sciences

Molecular dynamics simulations of 3.5 ns were performed on a system consisting of bilayer of 338 molecules of the lipid dipalmitoylphosphatidylcholine and 30715 water molecules. Structural parameters including volume of lipid, area of lipid, order parameter of the fatty acyl carbons and density profiles generated by the molecular dynamic simulation agreed perfectly with the experimental values

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=307

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОТОХИМИЧЕСКИХ
ПРЕВРАЩЕНИЙ СЛОЖНЫХ МОЛЕКУЛ****Баранов В.И., Завалий М.В.**Институт геохимии и аналитической химии
им. В.И.Вернадского РАН

На основе компьютерных экспериментов показана возможность изучения тонких особенностей процессов фотохимических превращений с помощью развитого метода моделирования таких процессов. В частности, показано, что ход фотохимического процесса существенно зависит от величин молекулярных параметров и может качественно меняться в относительно малой области вариации их значений. Это коррелирует с экспериментальными данными о высокой чувствительности таких процессов к небольшим изменениям молекулярных структур или внешним воздействиям

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=306>**MODELING OF COMPLEX MOLECULES
PHOTOCHEMICAL TRANSFORMATIONS****Baranov V.I., Zavaliy M.V.**V.I.Vernadsky Institute of Geochemistry and Analytical
Chemistry of Russian Academy of Sciences

The opportunity of study of molecular photochemical transformations fine features on the basis of computer experiments with the use of developed method of modeling such processes was shown. In particular, it was demonstrated that the course of photochemical process essentially depends on molecular parameters. values and can qualitative changed under their small variations. This theoretical result correlates with experimental facts

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=306**МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ВИБРОННЫХ
СПЕКТРОВ ДИФЕНИЛПОЛИЕНОВ: ВТОРОЕ
ПРИБЛИЖЕНИЕ ПАРАМЕТРИЧЕСКОГО МЕТОДА****Баранов В.И., Соловьев А.Н.**Институт геохимии и аналитической химии
им. В.И.Вернадского РАН

В рамках второго приближения параметрического метода вычислены структуры электронно-колебательных спектров и возбужденных состояний ряда молекул дифенилполиенов. Получено хорошее согласие со спектральным экспериментом. Показана высокая степень переносимости полиеновых и аценовых параметров, адекватность полученных моделей реальному строению молекул и возможность проведения предсказательных расчетов

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=300>**MODELLING OF STRUCTURE AND VIBRONIC
SPECTRA OF DIPHENYLPOLYENES: SECOND
APPROXIMATION OF PARAMETRIC METHOD****Baranov V.I., Solovyev A.N.**V.I.Vernadsky Institute of Geochemistry and Analytical
Chemistry of Russian Academy of Sciences

Structures of excited states and vibronic spectra of diphenylpolyenes were calculated by parametric method in second approximation. Theoretical results are in a good agreement with spectral experiment. High-level transferability of polyenes and acenes parameters, adequacy of the theoretical models to objective molecular structure and the possibility of predicted calculations are shown

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=300**ХИНОНЫ: КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
МОЛЕКУЛ, РАДИКАЛОВ, АНИОН-РАДИКАЛОВ И
ДИАНИОНОВ****Клюев С.А.**

Белгородский государственный университет

Проведено компьютерное моделирование таких частиц, как молекулы, радикалы, анион-радикалы и дианионы в ряду хинонов. Показано, что восстановление хинонов изменяет их параметры. При определении сродства к электрону этих соединений, исходя из данных квантово-химических расчетов, доказана аддитивность эффектов некоторых заместителей. В этом случае возможна оценка сродства простым алгебраическим способом. Проанализированы пути превращения всех анион-радикалов

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=299>**QUINONES: COMPUTER MODELLING MOLECULES,
RADICALS, ANION-RADICALS AND DIANIONS****Kluev S.A.**

Belgorog State University

Computer modelling such particles as molecules, radicals, anion-radicals and dianions in a number of quinones was carried out. It is shown that reduction of the quinones changes of their parameters. At the electron affinity determination of these compounds from the quantum-chemical method data, the additivity of effects for some substitutes was proved. In this case, the affinity can be estimated by a simple algebraical procedure. Pathways of the transformation for all anion-radicals were analysed

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=299

**PM3 ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ СВОЙСТВ
ОСНОВНЫХ КОНФОРМЕРОВ 20 ПРИРОДНЫХ L-
АМИНОКИСЛОТ**

**Кондратьев М.С., Самченко А.А., Комаров В.М.,
Кабанов А.В.**

Институт биофизики клетки РАН

С целью изучения влияния отдельных аминокислотных остатков на процесс фолдинга α -спирали выполнены полуэмпирические квантово-химические расчеты нейтральных аминокислот и их цвиттер-ионов, в изолированном состоянии и в водном окружении (растворитель учитывался явным образом). Особое внимание уделено рассмотрению роли структурных и термодинамических факторов в определении предпочтительных конформеров аминокислот, обуславливающих, в процессе роста цепи, спиральную организацию олигопептидов. В работе делаются выводы о различной термодинамической устойчивости нейтральных и цвиттер-ионных форм аминокислот, а также о высокой лабильности этих молекул. Показано, что наиболее термодинамически выгодный (в газовой фазе) конформер не удовлетворяет стерическим условиям α -спирали. Структура цвиттер-ионной аминокислоты, рассчитанная с учетом ближайшего водного окружения, оказывается уже весьма близкой к структуре аминокислотных остатков, формирующих α -спираль, что подтверждает влияние связанной воды на формирование спиральной организации аминокислотных остатков

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=331>

**QUANTUM-CHEMICAL INVESTIGATION OF
STRUCTURAL PROPERTIES OF BASIC
CONFORMERS OF TWENTY NATURAL L-AMINO-
ACIDS**

**Kondratev M.S., Samchenko A.A., Komarov V.M.,
Kabanov A.V.**

Institute of Cell Biophysics of Russian Academy of
Sciences

With the purpose of studying of influence of selected amino-acid residues on folding of α -spiral, semi-empirical quantum-chemical calculations of neutral amino-acids and their zwitterions in isolated state and in hydro environment (dissolvent was evidently considered) were carried out.

The principle concern is the role of structure and thermodynamic factors in detecting preferable amino-acids conformers determining spiral build-up during chain growth. The report includes conclusions about different thermodynamic steadiness of neutral and zwitterion forms of amino-acids, as well as conclusions about high lability of these molecules. It is shown that the most thermodynamically favorable (in gas phase) conformer does not satisfy steric conditions of α -spiral. The structure of amino-acids zwitterions, calculated subject to nearest hydro environment, turned out to be alike the structure of amino-acid residua, forming α -spiral, and this justifies the influence of adhesive water on forming of spiral organization of amino-acid residua.

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=331

**В КАКОЙ ФОРМЕ БИКАРБОНАТ СВЯЗЫВАЕТСЯ В
ВОДООКИСЛЯЮЩЕМ КОМПЛЕКСЕ
ФОТОСИСТЕМЫ 2? МОДЕЛЬНЫЙ ПОДХОД**

Горбикова Е.А.

Институт фундаментальных проблем биологии
Российской Академии Наук

Методами молекулярной механики MM+, используя подход гибкий лиганд/жесткий сайт связывания, показано, что бикарбонат в водоокисляющем комплексе (ВОК) фотосистемы 2 предпочтительнее связывается в форме HCO_3^- , стабилизируя «околомарганцевый» сайт. Определено несколько локальных минимумов потенциальной энергии для двух форм бикарбоната (БК), что показывает возможность лигандирования молекул БК в ВОК в различном количестве и различных ионных формах

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=356>

**WHAT FORM OF BICARBONATE IS LIGATED IN
WATER-OXIDIZING COMPLEX OF PHOTOSYSTEM 2?
A MODEL APPROACH**

Gorbikova E.A.

Institute of Fundamental Problems of Biology of Russian
Academy of Sciences

Bicarbonate (BC) in Water-Oxidizing Complex (WOC) of Photosystem 2 (PS2) is more preferably ligating in form of HCO_3^- and stabilizes near-manganese site. Several local minima of potential energy for both BC forms inside WOC were defined. It evidences possibility for bicarbonate molecules to be bound in different number and ionic forms. Molecular mechanics method MM+, flexible ligand/rigid binding site approach were used for structure construction and geometry optimization

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=356

**МОЛЕКУЛЯРНО-МЕХАНИЧЕСКАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ
ВОДООКСИЛЯЮЩЕГО КОМПЛЕКСА
ФОТОСИСТЕМЫ 2 В СОСТОЯНИИ S1 В
ПРИСУТСТВИИ БИКАРБОНАТА**

Горбикова Е.А.

Институт фундаментальных проблем биологии
Российской Академии Наук

Ряд экспериментальных данных показывает необходимость бикарбоната для максимальной функциональной активности фотосистемы 2 (ФС2) высших растений. Предположительно, ион бикарбоната связывается в водоокисляющем комплексе ФС2. Возможные сайты связывания данного лиганда были определены из полуэмпирических квантово-химических расчетов в параметризации ZINDO/1, а также с помощью молекулярно-механической оптимизации MM+, используя подход – гибкий лиганд/фиксированный сайт связывания

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=351>

**MOLECULAR MECHANICS OPTIMIZATION OF
WATER-OXIDIZING COMPLEX OF PHOTOSYSTEM 2
IN S1-STATE IN PRESENCE OF BICARBONATE**

Gorbikova E.A.

Institute of Fundamental Problems of Biology of Russian
Academy of Sciences

A raw of experimental data shows necessity of bicarbonate for maximal functional activity of photosystem 2 (PS2) of higher plants. Presumably, bicarbonate ion ligates inside water-oxidizing complex of PS2. Possible sites of binding of this ligand were defined from semi-empirical quantum-chemical calculations in parameterization ZINDO/1 and by molecular mechanics optimization MM+ (flexible ligand/rigid binding site approach)

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=351

**ОСОБЕННОСТИ РАСЧЕТОВ АНИОН-РАДИКАЛОВ
ПОЛИНИТРОПРОИЗВОДНЫХ БЕНЗОЛА
МЕТОДАМИ НЕЭМПИРИЧЕСКОЙ КВАНТОВОЙ
ХИМИИ**

**Михайлов М.Н., Кузьминский М.Б., Мендкович
А.С., Капранов В.А., Русаков А.И.**

Институт органической химии им. Н.Д.Зелинского
РАН

Методами квантовой химии исследованы конформационные изменения в молекулах замещенных анион радикалах динитробензола (АР). Адекватное описание электронного строения АР требует использования метода CASSCF(9,9). Результаты расчетов показывают, что АР существуют в виде нескольких изомеров, отличающихся локализацией неспаренного электрона на одной или другой нитрогруппе, а также поворотом одной из нитрогрупп по отношению к бензольному кольцу. Произведены оценки энергий конформеров и активационных барьеров с учетом динамической электронной корреляции (MRMP2)

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=363>

**PECULIARITIES OF THE CALCULATION OF THE
ANIION-RADICALS OF THE POLY-NITRO
DERIVATIVES OF BENZOLE USING METHODS OF
NON-EMPIRICAL QUANTUM CHEMISTRY**

**Mihailov M.N., Kuzminsky M.B., Mendkovitch A.S.,
Kapranov V.A., Rusakov A.I.**

N.D.Zelinsky Institute of Organic Chemistry of Russian
Academy of Sciences

Using the methods of quantum chemistry, the conformational changes in molecules of substituted anion-radicals of denitrobenzole (AR) were studied. Adequate description of the electron structure of AR demands using CASSCF (9, 9) method. The results show that AR are exist in several forms of isomers, differed by localization of unpaired electron in one or another nitro group, by the turn of one of the nitro group respectively to benzole ring. Valuations of conformers and activation barriers energies were made, taking into account dynamic electron correlation (MRMP2).

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=363

**МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДИЗАЙН ПРОСТЕЙШИХ
НАНОРОБОТОВ**

Шайтан К.В.

Московский государственный университет
им. М.В.Ломоносова

Обсуждаются динамические подходы к молекулярному моделированию и дизайну нано- и биоструктур для выполнения функций селективной доставки молекулярных объектов и разрушения надмолекулярных структур. Рассмотрен пример простейшего наноробота – наношприца, сконструированного из углеродной нанотрубки, пептида и нескольких молекул «взрывчатки». Показана возможность самосборки таких структур. Рассчитана динамика нановыстрела в воду и в биомембрану

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=385>

**MOLECULAR DESIGN OF THE SIMPLE
NANOROBOTS**

Shaytan K.V.

M.V.Lomonosov Moscow State University

Dynamical approaches for molecular design of nano- and biostructures for molecular objects selective delivery and destruction of supramolecular structures are discussed. Example of simple nanorobot – nanosyringe, constructed from carbon nanotube, oligopeptide and few molecules of "explosives" is examined. The self-construction of such structures is shown. Dynamics of nanoshots into water and membrane has been simulated

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=385

**БИОИНФОРМАТИКА И КОМПЬЮТЕРНОЕ
КОНСТРУИРОВАНИЕ ЛЕКАРСТВ: НЫНЕШНЕЕ
СОСТОЯНИЕ И ОБОЗРИМЫЕ ПЕРСПЕКТИВЫ****Поройков В.В.**ГУ НИИ Биомедицинской химии им.В.Н.Ореховича
РАМН

В докладе будет проанализировано современное состояние работ в области биоинформатики и компьютерного конструирования лекарств и оценены перспективы развития этих исследований в обозримом будущем

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=386>

**BIOINFORMATICS AND COMPUTER-AIDED DRUG
DESIGN: CURRENT STATE AND VISIBLE FUTURE
TRENDS****Poroikov V.V.**V.N.Orekhovich Institute of Biomedical Chemistry of
Russian Academy of Medical Sciences

State-of-the-art of bioinformatics and computer-aided drug discovery will be overviewed in the presentation, and also a visible future trends will be considered

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=386

**АНАЛИЗ ЗАВИСИМОСТИ МЕЖДУ
ГЕПАТОЗАЩИТНОЙ ДЕТОКСИЦИРУЮЩЕЙ
АКТИВНОСТЬЮ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ И ИХ
МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРОЙ, С
ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КВАНТОВОХИМИЧЕСКИХ
ДЕСКРИПТОРОВ****Кабанкин А.С., Габриелян Л.И.**Центр теоретических проблем физико- химической
фармакологии РАН

Методами линейного дискриминантного анализа и К ближайших соседей была исследована зависимость гепатозащитной детоксицирующей активности производных адамантана и индола от структуры молекул с использованием 2D- и 3D-дескрипторов различного типа (подструктурных, топологических, автокорреляционных, геометрических, WHIM, GETAWAY). Среди рассмотренных молекулярных дескрипторов только подструктурные дескрипторы и часть геометрических дескрипторов позволяют содержательно интерпретировать полученные зависимости в привычных для химика физико-химических понятиях

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=358>

**ANALYSIS OF MOLECULAR STRUCTURE-
HEPATOPROTECTIVE DETOXICATIVE ACTIVITY
RELATIONSHIPS FOR CHEMICAL COMPOUNDS
WITH THE USE OF QUANTUM CHEMICAL
DESCRIPTORS****Kabankin A.S., Gabrielyan L.I.**Center of theoretical problems of Physical and Chemical
Pharmacology of the Russian Academy of Science

Dependence of hepatoprotective detoxicative activity of derivatives adamant and indol from structure of molecules with using of 2D-and 3D-descriptors of various type (substructural, topological, autocorrelation, geometrical, WHIM, GETAWAY) was investigated by methods of the linear discriminant analysis and K-nearest neighbours. Among of considered molecular descriptors only substructural descriptors and a part of geometrical descriptors allow to interpret the received dependences completely thru habitual for chemist physical chemical terms

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=358

СЕКЦИЯ 4**ВИЗУАЛИЗАЦИЯ В НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ****SECTION 4****VISUALIZATION IN SCIENTIFIC RESEARCHES**

**ПРОГРАММА РАСЧЕТА СЕЛЕКТИВНЫХ
ДВУМЕРНЫХ ЯМР СПЕКТРОВ**
Савченко С.В., Волынкин В.А., Черныш Ю.Е.
Кубанский государственный университет

**THE PROGRAM OF SIMULATION SELECTIVE TWO-
DIMENSIONAL NMR SPECTRA**
Savchenko S.V., Volynkin V.A., Chernysh Yu.E.
Kuban State University

Разработанная компьютерная программа позволяет рассчитывать двумерные спектры ЯМР для разных последовательностей, включающих как селективные, так и неселективные импульсы в различных комбинациях

The developed computer program allows to simulate 2D NMR spectra for various pulse sequences including both selective and nonselective pulses

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=327>

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=327

**РАЗРАБОТКА МЕТОДА АВТОМАТИЧЕСКОЙ
ОБРАБОТКИ МИКРОФОТОГРАФИЙ
ПОВЕРХНОСТИ ИОНООБМЕННЫХ МЕМБРАН**
Рытухин Д.С., Письменская Н.Д., Никоненко В.В.
Кубанский государственный университет

**DEVELOPING OF THE METHOD FOR AUTOMATIC
PROCESSING OF MICRO PHOTOS OF THE SURFACE
OF ION-EXCHANGE MEMBRANES**
Rituhin D.S., Pismenskaya N.D., Nikonenko V.V.
Kuban State University

Разработана оригинальная компьютерная программы Image Analysis версия 1.00 для анализа цветных и черно-белых изображений органических и неорганических мембран и биологических объектов. Для реализации программы использован метод выделения контура проводящей поверхности путем пошагового обхода по ее периметру. С использованием разработанной программы были обработаны микрофотографии поверхностей сухих и набухших ионообменных мембран и рассчитаны площади проводящей и непроводящей поверхностей

The original software Image Analysis v 1.00 was developed, intended for analysis of color and black-and-white images of organic and non-organic membranes and biological objects. For software realization we use the method of extracting the contour of conductive surface and step-by-step travel through the perimeter. With the help of the developed program the micro photos of the surface of dry and turgent ion-exchange membranes were processed and the squares of conductive and non conductive surfaces were calculated

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=362>

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=362

СЕКЦИЯ 5

ОБРАБОТКА ДАННЫХ, БАЗЫ ДАННЫХ, АНАЛИЗ ДАННЫХ

SECTION 5

DATA PROCESSING, DATABASES AND DATA ANALYSIS

**УЧАСТИЕ НЕКОТОРЫХ ИЗВЕСТНЫХ
ПОВТОРЯЮЩИХСЯ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ В
ОРГАНИЗАЦИИ И ФУНКЦИОНИРОВАНИИ
МЕЙОТИЧЕСКОЙ ХРОМОСОМЫ**

Гришаева Т.М., Дадашев С.Я., Богданов Ю.Ф.
Институт общей генетики им. Н.И.Вавилова РАН

Ранее мы разработали метод поиска *in silico* в геноме человека специфических мейотических повторяющихся последовательностей (ПП). В настоящей работе мы выявили несколько классов известных ПП, которые, возможно, участвуют в прикреплении хроматина к синаптонемному комплексу и способствуют инициации мейотической рекомбинации

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=290>

**PARTICIPATION OF SOME KNOWN REPETITIVE
SEQUENCES IN ORGANIZATION AND FUNCTIONING
OF MEIOTIC CHROMOSOME**

Grishaeva T.M., Dadashev S.Ya., Bogdanov Yu.F.
V.I. Vavilov Institute of General Genetics of Russian
Academy of Sciences

Recently we have devised the method of searching *in silico* for specific meiotic repetitive sequences (RS) in human genome. In present investigation we have revealed some RS classes, possibly involved in the attachment of chromatin to synaptonemal complexes and contributing to the initiation of meiotic recombination

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=290

**СВЯЗЬ ФУНКЦИИ ГЕНА С ЕГО МОЛЕКУЛЯРНОЙ
ОРГАНИЗАЦИЕЙ. IN SILICO ИССЛЕДОВАНИЕ**

**Дадашев С.Я., Бичев С.Н., Ву Хуан Чанг,
Женавчук О.Ф., Каганова Н.Л.,
Нурутдинова А.С., Шарапова Е.И.**

Институт общей генетики им. Н.И.Вавилова РАН

Ранее нами был разработан компьютерный метод выявления мейДНК, отвечающей за присоединение хроматина к синаптонемному комплексу. Мы предположили, что мейДНК может регулировать работу мейотических генов и исследовали наличие мейДНК в генах мейоза и митоза. Показали, мейДНК в генах мейоза достоверно больше чем в генах митоза ($p=0.041$). Таким образом, наше предположение о возможном участии мейДНК в регуляции работы генов активных в мейозе, поддерживается настоящим исследованием

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=285>

**GENE FUNCTIONS DEPENDING ON ITS MOLECULAR
STRUCTURE. IN SILICO RESEARCH**

**Dadashev S.Ya., Bichev S.N., Vu Khuan Chang,
Zhenavchuk O.F., Kaganova N.L.,
Nurutdinova A.S., Sharapova E.I.**

V.I. Vavilov Institute of General Genetics of Russian
Academy of Sciences

Previously, we've developed computer methods of discovering of meiDNA, response for connection of chromatin to synaptonemal complex. We've supposed that meiDNA would regulate functioning of meiotic genes and researched the presence of meiDNA in genes of meiosis and mitosis. It was shown, that the quantity of meiDNA in genes of meiosis is, for sure, more than in genes of mitosis. Thus, our assumption about possible participating of meiDNA in regulating of genes functioning is totally confirmed by this research.

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=285

**РАЗРАБОТКА ИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ
КОЛЛЕКЦИИ КУЛЬТУР ПРИРОДНЫХ
СВЕТЯЩИХСЯ БАКТЕРИЙ**

Котов Д.А., Медведева С.Е. Родичева Э.К.
Институт биофизики Сибирского Отделения РАН

**DEVELOPMENT OF INFORMATION SYSTEM OF THE
CULTURE COLLECTION OF NATURAL LUMINOUS
BACTERIA**

Kotov D.A., Medvedeva S.E., Rodicheva E.K.
Institute of Biophysics Siberian Branch of Russian
Academy of Sciences Siberian Branch of Russian
Academy

Разрабатываемая информационная система Коллекции Культур ИБСО содержит: Web-портал «Биолюминесценция и светящиеся организмы», базу данных природных светящихся микроорганизмов "BIOLUMBASE", электронный каталог культур, хранящихся в КК ИБСО, прикладные программы. Биолюминесценция является основным признаком для включения в информационную систему сведений о явлении или организмах. База данных "BIOLUMBASE" хранит разнообразную информацию о содержащихся объектах, а также документы, созданные другими приложениями. Информационная система создана для обеспечения экспериментальных и теоретических разработок по фундаментальным и прикладным проблемам, связанным с использованием светящихся организмов и их биолюминесцентных систем и доступна через сеть Internet (<http://bl.ibp.ru>). Работа выполняется при поддержке РФФИ (грант 05-07-90157) и программы фундаментальных исследований СО РАН (проект 38) <http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=324>

The developed information system of the Culture Collection IBSO contains: the Web-portal «Bioluminescence and luminous organisms», the database "BIOLUMBASE" of natural luminous microorganisms, the electronic catalogue of cultures maintained in CCIBSO, and applied programs. The bioluminescence is the basic attribute to include the data on the phenomenon or organisms into information system. The database "BIOLUMBASE" stores the various information about included objects, and also the documents created by other appendices. The information system is created for providing the experimental and theoretical development on the fundamental and applied problems connected with using of luminous organisms and their bioluminescent systems. It is accessible through network Internet (<http://bl.ibp.ru>). Work is carried out at support of the grant 05-07-90157 RFBR and the project 38 on programs of basic researches of the SB RAS

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=324

РРПСВ КАК РАСПРЕДЕЛЕНИЕ МИКРООБЪЕКТОВ

Стариков В.Н.
Мичуринский государственный педагогический институт

**DISTRIBUTION OF THE POISSON.S RANDOM
VARIABLES DEFFERERCE AS A MICROBIOOBJECTS
DISTRIBUTION**

Starikov V.N.
Michurinsk State Pedagogical Institute

Одностороннее (ОС) распределение разности пуассоновых случайных величин (РРПСВ) определяется при высоком уровне по критерию хи-квадрат соответствует опытному распределению 148 подвыборок (по 200 хромосом самцов дрозофилы в каждой, облученных дозой 3000 Р) по числу в них радиационно-мутировавших хромосом (данные Лучника), опытному распределению 400 квадратов счетной камеры по числу дрожжевых клеток, попавших в них (данные Стюдента), а также, опытному распределению 60 чашек Петри с агаром, содержащих фаг Т1, по числу колоний бактерии Escherihia coli в них, ставших устойчивыми к фагу Т1 в результате спонтанной мутации (Айала Ф., Кайгер Дж.) <http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=340>

One-sided distribution of the Poisson.s random variables differerence approximated experimental distribution of 148 subsamples (in 200 chromosomes of the each Drosophilla males irradiated with dose 3000 R) ralativitely of number of the radiation-mutation chromosomes in them (Lutchnik.s data), experimental distribution of 400 squares of the counting camera ralativitely of number of the yeast cells falled in them (Student.s data), and also experimental distribution of 60 Petri.s cups with agar containing phague T1 ralativitely of number of the colonies of the Escherihia coli bacteria in them gived resistense to phague T1 in result of the spontaneous mutation (Ayala F., Kayger J.) at high level of chi-squared test goodness-of-fit

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=340

**ИДЕНТИФИКАЦИЯ ХИРАЛЬНЫХ ЦЕНТРОВ В
МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУРАХ****Бутыгина О.Ю., Филимонов Д.А.**ГУ НИИ Биомедицинской химии им.В.Н.Ореховича
РАМН

Мы провели идентификацию хиральных центров в молекулярных структурах с экспериментально подтвержденными активностями (principal compounds) из базы данных MDDR фирмы MDL. 89% молекул в MDDR являются хиральными, 81% всех хиральных центров составляют атомы С, 17% - атомы N, заметно присутствие четырехкоординированных серы и фосфора (0,93 и 0,3 % соответственно), тогда как более редкие случаи хиральных центров (пятивалентный P, Te, Se, As и др.) в MDDR практически не представлены

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=341>**IDENTIFICATION OF CHIRAL CENTERS IN
MOLECULAR STRUCTURES****Butygina O.Yu., Filimonov D.A.**V.N.Orekhovich Institute of Biomedical Chemistry of
Russian Academy of Medical Sciences

We performed the identification of chiral centers in molecular structures of principal compounds in MDL MDDR database. 89% of the molecules in MDDR are chiral, 81% of all chiral centers are C atoms, 17% - N atoms. There are tracks of 4-coordinated S and P (0.93 % and 0.3 % correspondingly), while more uncommon cases of chiral 5-coordinated P, and other elements (Te, Se, As, etc.) exist in just a few cases

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=341**БАЗА ДАННЫХ ЛИТЕРАТУРНЫХ ИСТОЧНИКОВ ПО
КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЮ ИОНОВ
РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ И 5F-ЭЛЕМЕНТОВ****Ковалева И.А., Бузько В.Ю., Полушин А.А.,
Сухно И.В.**

Кубанский государственный университет

Создана база данных литературных источников по комплексообразованию ионов редкоземельных и 5F-элементов с органическими и неорганическими лигандами в водных и водно-органических средах, морских водах, искусственных, натуральных и технологических флюидах по данным различных физико-химических методов и математического моделирования. Предназначена для специалистов в области координационной химии, радиохимии, магнитного резонанса, гидрохимии и геоэкологии

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=293>**THE LITERATURE DATABASE ON COMPLEXATION
OF THE IONS OF RARE-EARTH AND 5F-ELEMENTS****Kovaleva I.A., Buzko V.Yu., Polushin A.A.,
Sukhno I.V.**

Kuban State University

The literature database was created. The following database deal with complexation of the ions of rare-earth and 5F-elements with organic and non-organic ligands in aquatic and aquatic-organic environments, sea-water, artificial, natural and technological fluids according to the results of different physicochemical methods and mathematical simulation. It is intended for specialists in coordinating chemistry, radiochemistry, magnetic resonance, hydrochemistry and geoecology.

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=293**OXYGEN SOLUBILITY - ПРОГРАММА РАСЧЕТА
РАСТВОРИМОСТИ КИСЛОРОДА В ЧИСТОЙ ВОДЕ,
МОРСКИХ ВОДАХ, РАССОЛАХ, БИОЛОГИЧЕСКИХ
ЖИДКОСТЯХ, СИНТЕТИЧЕСКИХ ФЛЮИДАХ И
ЭЛЕКТРОЛИТНЫХ РАСТВОРАХ****Бузько В.Ю., Сухно И.В., Полушин А.А.**

Кубанский государственный университет

В 2004 году в рамках проекта 2000-003-1-500 IUPAC (Analytical Chemistry Division V) "Aqueous Solutions" выпущен пакет прикладных программ "The Adjustment, Estimation and Uses of Equilibrium Reaction Constants in Aqueous Solutions" для ученых, занимающихся проблемами окружающей среды, для специалистов промышленной химии и ученых-химиков. Oxygen Solubility - одна из программ этого пакета, продукт творческого партнерства Aqua Solution Software (Sukhno I., Buzko V., Polushin A., Russia)

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=297>**OXYGEN SOLUBILITY – IS APPLICATION FOR
CALCULATING SOLUBILITY OF OXYGEN IN PURE
WATER, SEA-WATER, BRINES, BIOLOGICAL FLUIDS,
SYNTHETIC FLUIDS AND ELECTROLYTIC
SOLUTIONS****Buzko V.Yu., Sukhno I.V., Polushin A.A.**

Kuban State University

In 2004, in terms of the project 2000-003-1-500 IUPAC (Analytical Chemistry Division V) "Aqueous Solutions", the package of applied software was developed and released. The package, named "The Adjustment, Estimation and Uses of Equilibrium Reaction Constants in Aqueous Solutions" was intended for scientists engaged in problems of environment, industrial chemistry specialists and chemists. Oxygen Solubility – is one of applications included into the package, it is the product of the joint partnership Aqua Solution Software (Sukhno I., Buzko V., Polushin A., Russia)

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=297

ПРОГРАММА КОРРЕКЦИИ ЗНАЧЕНИЙ КОНСТАНТ ИОННЫХ РАВНОВЕСИЙ ПРИ ИЗМЕНЕНИИ ИОННОЙ СИЛЫ СРЕДЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕОРИИ СПЕЦИФИЧЕСКИХ МЕЖИОННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ SIT. ВЕРСИЯ 2.0

Сухно И.В., Бузько В.Ю., Полушин А.А.
Кубанский государственный университет

В 2004 году в рамках проекта 2000-003-1-500 IUPAC (Analytical Chemistry Division V) "Ionic Strength Corrections for Stability Constants" выпущена версия 2.0 программы с одноименным названием (MS Windows 9x/NT/2000/XP). Программа предназначена для коррекции значений констант ионных равновесий при изменении ионной силы среды с использованием теории специфических межйонных взаимодействий SIT

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=296>

THE SOFTWARE FOR CORRECTION OF CONSTANTS OF IONIC BALANCE DURING THE CHANGING OF IONIC FORCE OF THE ENVIRONMENT, USING THE THEORY OF SPECIFIC INTERION INTERACTIONS SIT, VERSION 2.0

Sukhno I.V., Buzko V.Yu., Polushin A.A.
Kuban State University

In 2004, in terms of the project 2000-003-1-500 IUPAC (Analytical Chemistry Division V) "Ionic Strength Corrections for Stability Constants" the 2.0 version of software of the same name was developed and released (MS Windows 9x/NT/2000/XP). The application is destined for correction of constants of ionic balance during the changing of ionic force of the environment, using the theory of specific interion interactions SIT

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=296

ELECTROLYTES - ПРОГРАММА РАСЧЕТА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ ЭЛЕКТРОЛИТОВ (СРЕДНЕИОННЫХ КОЭФФИЦИЕНТОВ АКТИВНОСТИ, ИОННЫХ КОЭФФИЦИЕНТОВ АКТИВНОСТИ, ОСМОТИЧЕСКИХ КОЭФФИЦИЕНТОВ, АКТИВНОСТИ ВОДЫ)

Сухно И.В., Бузько В.Ю., Полушин А.А.
Кубанский государственный университет

В 2004 году в рамках проекта 2000-003-1-500 IUPAC (Analytical Chemistry Division V) "Aqueous Solutions" выпущен пакет прикладных программ "The Adjustment, Estimation and Uses of Equilibrium Reaction Constants in Aqueous Solutions" для ученых, занимающихся проблемами окружающей среды, для специалистов промышленной химии и ученых-химиков. Electrolytes - одна из программ этого пакета, продукт творческого партнерства Aqua Solution Software (Sukhno I., Buzko V., Polushin A., Russia)

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=295>

ELECTROLYTES – IS SOFTWARE FOR CALCULATING THERMODYNAMIC FEATURES OF AQUA SOLUTIONS OF ELECTROLYTES (MEDIUM-IONIC ACTIVITY RATIO, IONIC ACTIVITY RATIO, OSMOTIC ACTIVITY RATIO)

Sukhno I.V., Buzko V.Yu., Polushin A.A.
Kuban State University

In 2004, in terms of the project 2000-003-1-500 IUPAC (Analytical Chemistry Division V) "Aqueous Solutions", the package of applied software was developed and released. The package, named "The Adjustment, Estimation and Uses of Equilibrium Reaction Constants in Aqueous Solutions" was intended for scientists engaged in problems of environment, industrial chemistry specialists and chemists. Electrolytes – is one of applications included into the package, it is the product of the joint partnership Aqua Solution Software (Sukhno I., Buzko V., Polushin A., Russia)

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=295

ACID BASE - ПРОГРАММА РАСЧЕТА КИСЛОТНО-ОСНОВНЫХ РАВНОВЕСИЙ В ЭЛЕКТРОЛИТНЫХ РАСТВОРАХ, МОРСКИХ ВОДАХ И ГИДРОХИМИЧЕСКИХ ФЛЮИДАХ

Полушин А.А., Бузько В.Ю., Сухно И.В.
Кубанский государственный университет

В 2004 году в рамках проекта 2000-003-1-500 (Analytical Chemistry Division V) "Aqueous Solutions" выпущен пакет прикладных программ "The Adjustment, Estimation and Uses of Equilibrium Reaction Constants in Aqueous Solutions" для ученых, занимающихся проблемами окружающей среды, для специалистов промышленной химии и ученых-химиков. Acid Base - одна из программ этого пакета, продукт творческого партнерства Aqua Solution Software (Sukhno I., Buzko V., Polushin A., Russia)

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=294>

ACID BASE – IS SOFTWARE FOR CALCULATING OF ACID-BASE BALANCE IN ELECTROLYTIC SOLUTIONS, SEA-WATER AND HYDROCHEMICAL FLUIDS

Polushin A.A., Buzko V.Yu., Sukhno I.V.
Kuban State University

In 2004, in terms of the project 2000-003-1-500 (Analytical Chemistry Division V) "Aqueous Solutions", the package of applied software was developed and released. The package, named "The Adjustment, Estimation and Uses of Equilibrium Reaction Constants in Aqueous Solutions" was intended for scientists engaged in problems of environment, industrial chemistry specialists and chemists. ACID BASE – is one of applications included into the package, it is the product of the joint partnership Aqua Solution Software (Sukhno I., Buzko V., Polushin A., Russia)

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=294

**TEMPERATURE EFFECTS - ПРОГРАММА РАСЧЕТА
ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ
ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ****Бузько В.Ю., Сухно И.В., Полушин А.А.**
Кубанский государственный университет

В 2004 году в рамках проекта 2000-003-1-500 IUPAC (Analytical Chemistry Division V) "Aqueous Solutions" выпущен пакет прикладных программ "The Adjustment, Estimation and Uses of Equilibrium Reaction Constants in Aqueous Solutions" для ученых, занимающихся проблемами окружающей среды, для специалистов промышленной химии и ученых-химиков. Temperature Effects - одна из программ этого пакета, продукт творческого партнерства Aqua Solution Software (Sukhno I., Buzko V., Polushin A., Russia)

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=298>

**TEMPERATURE EFFECTS - IS APPLICATION FOR
CALCULATING THERMODYNAMIC PARAMETERS OF
CHEMICAL REACTIONS****Buzko V.Yu., Sukhno I.V., Polushin A.A.**
Kuban State University

In 2004, in terms of the project 2000-003-1-500 IUPAC (Analytical Chemistry Division V) "Aqueous Solutions", the package of applied software was developed and released. The package, named "The Adjustment, Estimation and Uses of Equilibrium Reaction Constants in Aqueous Solutions" was intended for scientists engaged in problems of environment, industrial chemistry specialists and chemists. Temperature Effects – is one of applications included into the package, it is the product of the joint partnership Aqua Solution Software (Sukhno I., Buzko V., Polushin A., Russia)

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=298

**СПОСОБ ИДЕНТИФИКАЦИИ ДЕЙСТВУЮЩИХ
ВЕЩЕСТВ ПРЕПАРАТИВНЫХ ФОРМ
ХЛОРООРГАНИЧЕСКИХ ПЕСТИЦИДОВ ПО МАСС-
СПЕКТРАМ НИЗКОГО РАЗРЕШЕНИЯ****Буков Н.Н., Абрамов Е.И., Богатов Н.М.,
Ларионов К.В., Репная Л.Ф., Панюшкин В.Т.**
Кубанский государственный университет

В рамках создания оригинальных программ идентификации сложных органических молекул по масс-спектрам низкого разрешения [2], разработана программа распознавания действующих веществ хлорорганических пестицидов по мультиплетной структуре сигналов молекулярного иона. В основе программы лежит структурная зависимость интенсивностей сигналов мультиплета молекулярного иона от количества входящих в состав молекулы атомов хлора. На примере ДДТ показано хорошее соответствие результатов работы программы с экспериментальными данными

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=367>

**WAY OF IDENTIFICATION OF OPERATING
SUBSTANCES OF PREPARATIVE FORMS OF
CHLORORGANIC PESTICIDES ON MASS-SPECTRA
OF THE LOW SANCTION****Bukov N.N., Abramov E.I., Bogatov N.M.,
Larionov K.V., Repnaya L.F., Panushkin V.T.**
Kuban State University

Within the limits of creation of original programs of identification of complex organic molecules on mass-spectra of the low sanction [2], the program of recognition of operating substances chlororganic pesticides on multiple structure of signals of a molecular ion is developed. In a basis of the program structural dependence intensities signals of multiplet a molecular ion from quantity of atoms of chlorine a part of a molecule lays. On example DDT good conformity of results of work of the program with experimental data is shown

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=367

СЕКЦИЯ 6

ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ И ТЕХНОЛОГИИ (ПРИНЯТИЕ РЕШЕНИЙ, ЭКСПЕРТНЫЕ СИСТЕМЫ И Т.Д.)

SECTION 6

INTELLIGENCE SYSTEMS AND TECHNOLOGIES (DECISION-MAKING, EXPERT SYSTEM ETC.)

ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ТЕХНОЛОГИЯ АВТОМАТИЗИРОВАННОЙ МЕДИЦИНСКОЙ ДИАГНОСТИКИ

**Богомолов А.В., Чикова С.С., Зуева Т.В.,
Михеев О.В., Габусу П.А.**

Государственный научно-исследовательский
испытательный институт МО РФ

IT TECHNOLOGY OF AUTOMATED MEDICAL DIAGNOSTICS

**Bogomolov A.V., Chikova S.S., Zueva T.V.,
Mikheyev O.V., Gabusu P.A.**

The State Science and Research Experimental Institute of
Ministry of Defence of the Russian Federation

Изложена информационно-вычислительная технология автоматизированной медицинской диагностики, основанная на использовании методов нечеткой логики. На основании результатов апробации разработанных решений при синтезе системы автоматизированной диагностики артериальной гипертензии показана эффективность использования методов нечеткой логики и обработки экспертной информации для автоматизированной диагностики преморбидных нарушений состояния обследуемого – широко распространенных и достаточно сложных для диагностики и детального описания симптоматики ввиду их высокой неопределенности, динамичности и «обратимости»

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=374>

The IT technology of automated medical diagnostics based on methods of fuzzy logic is set forth. Basing on the results of approving of developed solutions during the synthesis of the system of automated diagnostics of arterial hypertension, the effectiveness of using the methods of fuzzy logic and processing of the experimental data for automated diagnostics of the premorbid abnormalities of the patient condition are shown. These methods are widely used but complex enough for diagnostics and detailed description of symptomatic, considering their high indeterminacy, dynamics and invertibility

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=374

КЛАССИФИКАЦИЯ ПАТОЛОГИЧЕСКИХ ПАТТЕРНОВ МЭГ ПРИ ПАРКИНСОНИЗМЕ

Дергузов А.В., Махортых С.А.

Институт математических проблем биологии РАН

PARKINSON'S PATHOLOGY MEG PATTERNS CLASSIFICATION

Derguzov A.V., Makhortykh S.A.

Institute of Mathematical Problems of Biology Russian
Academy of Sciences

Предлагается метод классификации типа активности в записях магнитной энцефалографии (МЭГ) для задач локализации источников патологии в областях коры головного мозга. Данная работа основана на использовании обобщенного спектрально – аналитического метода, который предполагает проведение полной обработки исследуемого объекта в пространстве коэффициентов Фурье разложения сигнала по сферическим гармоникам. Рассматриваются основные положения метода и результаты его приложения в реальных записях МЭГ для случая болезни Паркинсона

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=312>

We've offered classifying method for types of activity in magneto-encephalography (MEG) patterns for problems of localization of pathology sources in cerebral cortex. This research is based on using of generalized spectrum-analytical method, supposing the complete study of researched object in the space of Fourier coefficients for spherical harmonics expansion of the signal. The main regulations of the method are considered as well as the results of application for Parkinson's pathology MEG patterns.

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=312

**РАЗРАБОТКА МЕТОДА КОЛИЧЕСТВЕННОГО
ПРОГНОЗА АКТИВНОСТИ СОЕДИНЕНИЙ,
ВЛИЯЮЩИХ НА КЛЕТОЧНЫЙ ЦИКЛ, НА ПРИМЕРЕ
ИНГИБИТОРОВ CDK1**

**Захаров А.В., Лагунин А.А., Филимонов Д.А.,
Поройков В.В.**

ГУ НИИ Биомедицинской химии им.В.Н.Ореховича
РАМН

Разработан метод количественного прогноза на основе представления структуры химических соединений в виде MNA дескрипторов и самосогласованной регрессии, который был апробирован на примере ингибиторов циклинзависимых киназ (CDK1). Для тестирования метода использовались данные о 58 структурных формулах и величинах полуэффективной концентрации (IC50) ингибиторов CDK1, собранные из литературных источников. Для данной выборки были получены статистические характеристики $R^2=0.95$, $Q^2=0.77$

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=348>

**DEVELOPING OF THE METHOD FOR QUANTITATIVE
FORECAST OF COMPOUND ACTIVITY, INFLUENCING
ON CELL CYCLE, BY THE EXAMPLE OF CDK1
INHIBITORS**

**Zaharov A.V., Lagunin A.A., Filimonov D.A.,
Poroykov V.V.**

V.N.Orekhovich Institute of Biomedical Chemistry of
Russian Academy of Medical Sciences

The method for quantitative forecast based on conception of chemical compounds as MNA descriptors and self-consistent regression was developed, and approved by the example of inhibitors of cyclin dependent kinases (CDK1). For testing of the method we've used data about 58 structural formulas and magnitudes of semi-effective concentration (IC50) of CDK1 inhibitors, gathered from literature. For this sampling the static characteristics were the following: $R^2=0.95$, $Q^2=0.77$

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=348

**К ВОПРОСУ РАННЕЙ ДИАГНОСТИКИ
ОНКОЛОГИЧЕСКИХ ЗАБОЛЕВАНИЙ ПЕЧЕНИ С
ПРИМЕНЕНИЕМ ИНФОРМАЦИОННО
АНАЛИТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ DIAGNOSTIC**

Шляхов Г.Г.

Пермская государственная медицинская академия
МЗ РФ

Нами разработана информационно аналитическая система (ИАС) DIAGNOSTIC, предназначенная для анализа, диагностики и управления лечением при заболеваниях гепато-билиарного тракта

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=359>

**TO A QUESTION OF EARLY DIAGNOSTICS OF
ONCOLOGICAL DISEASES OF A LIVER WITH
APPLICATION IT IS INFORMATION ANALYTICAL
SYSTEM "DIAGNOSTIC"**

Shlyahov G.G.

Perm State Academy of Medicine of Health Care Ministry
of the Russian Federation

We've developed informational analytical system (IAS) DIAGNOSTIC, intended for analysis, diagnostics and management of the medical treatment during the diseases of the hepatobiliary tract

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=359

СЕКЦИЯ 7**ОПТИМАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ, ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА****SECTION 7****OPTIMUM PROCEDURES AND DESIGN OF EXPERIMENTS****АПРИОРНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВЕРОЯТНОСТИ
РЕАКЦИИ РАЗЛОЖЕНИЯ ОРГАНИЧЕСКОГО
СОЕДИНЕНИЯ СРЕДСТВАМИ МОЛЕКУЛЯРНОГО
МОДЕЛИРОВАНИЯ****Дементьев В.А.**Институт геохимии и аналитической химии
им. В.И.Вернадского РАН

Показано, что для вычисления вероятности реакции разложения сложной органической молекулы можно пользоваться разработанными ранее приемами моделирования реакций изомерных превращений. С помощью таких приемов находятся матрицы соотношения Грибова-Душинского между нормальными координатами исходной и предраспадной молекулярной модели. Это соотношение используется для вычисления интеграла перекрывания колебательных волновых функций двух моделей. При нормировке волновых функций впервые используются данные о температуре и плотности среды, в которой происходит реакция разложения

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=308>**FIRST PRINCIPLE CALCULATION OF PROBABILITY
OF A PARTING REACTION OF ORGANIC COMPOUND
WITH AID OF MOLECULAR MODELING****Dementiev V.A.**V.I.Vernadsky Institute of Geochemistry and Analytical
Chemistry of Russian Academy of Sciences

Calculation of probability of a parting reaction of organic compound may be performed as a special case of reaction of isomerization with aid of molecular modeling. Previously we need calculate the overlapping integral of vibrational wave functions of whole and parted models using Gribov-Dushinsky equation. Wave function of parted model we have normalized taking into account temperature and density of environment

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=308**СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ В ОБЛАСТИ
ПРОГНОЗИРОВАНИЯ БИОЛОГИЧЕСКОЙ
АКТИВНОСТИ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ****Погребняк А.В.**Пятигорская государственная фармацевтическая
академия

В обзорном докладе рассмотрены основные наиболее перспективные методы изучения связи «структура-активность» и дизайна биологически активных веществ. Приведен перечень физико-химических и топахимических дескрипторов молекулярной структуры используемых для прогнозирования биологической активности и молекулярного дизайна. Рассмотрены возможности, преимущества и недостатки различных методов прогнозирования биологической активности. Подчеркивается важность использования широкого круга дескрипторов молекулярной структуры и методов их анализа. Особое внимание уделяется квантово-химическому описанию молекул. Обсуждаются перспективы развития методов молекулярного дизайна. Список литературы – 228 источников

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=134>**CURRENT STATE OF FORECASTS OF BIOLOGICAL
ACTIVITY OF ORGANIC COMPOUNDS****Pogrebnyak A.V.**

Pyatigorsk State Pharmaceutical Academy

The present review is deal with the basic and the most prospective methods of studying the structure-activity relationships and design of biologically active substances. The list of physical-chemical and topochemical descriptors of molecular structure used for biologic activity forecasts and molecular design is available. The opportunities, advantages and disadvantages of different methods of biological activity forecasts are examined. The importance of using wide range of descriptors of molecular structure and analysis methods are underscored in particular. The principal concern is the quantum-chemical description of the molecules. The prospects of evolution of molecular design methods are discussed. The list of the literature counts 228 sources

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=134

**СПЕКТРАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ КОРРЕКЦИИ
НЕПОЛНОТЫ ДАННЫХ****Дергузов А.В., Куликова Л.И., Махортых С.А.**
Институт математических проблем биологии РАН

Задача экстраполяции является классической некорректной проблемой обработки экспериментальных данных. Ярким примером ситуации с неполнотой данных является анализ записей пространственного распределения поля в задачах медицинской энцефалографии. Для корректного применения спектральных методов анализа распределений данных на сфере необходимо знание значений функции на всей сфере, однако, в описанных задачах энцефалографии на «шейной» и «лицевой» частях сферы измерения обычно не проводятся и в результате на 1/3 части сферы исходные данные отсутствуют. Оставаясь в рамках спектрального анализа сигналов целесообразно строить в рамках выбранного способа описания также процедуры экстраполяции. В докладе приводятся примеры реализации предлагаемых методов восстановления данных на части области определения изучаемой функции для случаев одномерных модельных данных и двумерных распределений магнитного поля при анализе МЭГ

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=313>

**SPECTRAL METHODS FOR DATA LACK
CORRECTION****Derguzov A.V., Kulikova L.I., Makhortykh S.A.**
Institute of Mathematical Problems of Biology Russian
Academy of Sciences

Extrapolation problem is classical incorrect problem of experimental data analysis. Vivid example of data incompleteness is the analysis of spatial field distribution in problems of medical encephalography. For proper application of spectrum methods for analysis of spherical data distribution we should know the function magnitude for the whole sphere, but for the described encephalography problems the calculations on neck and exterior part of the sphere are usually avoided, and thus there is data lack for 1/3 of the sphere.

The report deals with the examples of the methods for data restoring for one-dimensional datum and two-dimensional magnetic field distributions during MEG.

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=313

**МОДЕЛИ, МАТЕМАТИКА И ПОНЯТИЕ ТОЧНОСТИ В
КВАНТОВОЙ ХИМИИ****Грибов Л.А.**Институт геохимии и аналитической химии
им. В.И.Вернадского РАН

Эта статья имеет своей целью обратить внимание на целый ряд важных методических особенностей, которые нужно учитывать при любых попытках воспользоваться результатами квантово-химических расчётов, выполняемых с помощью получающих всё большее распространение высоко сервисных программ для ПК [1-4]. Легкость задания исходных данных делает эти программы очень привлекательным инструментом при решении самых разнообразных проблем, создавая, однако, иллюзию простоты и отсутствия необходимости глубоко разбираться в тех приближениях и моделях, которые и составляют основу вычислительных алгоритмов. Опасность усугубляется и тем, что в большинстве руководств по квантовой химии и теории спектров [5-20] главное внимание обращается именно на математическую формулировку решения проблемы и не акцентируется достаточное внимание на базовых представлениях теории и методики её применения

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=372>

**MODELS, MATH AND ACCURACY NOTION IN
QUANTUM CHEMISTRY****Gribov L.A.**V.I.Vernadsky Institute of Geochemistry and Analytical
Chemistry of Russian Academy of Sciences

The report is aimed to draw an attention to the whole number of important methodical peculiarities, which should be considered in any case when we use the results of quantum-chemical calculations, obtained with the help of service software for PC, being more and more popular nowadays. The easiness of initial data input makes these programs very attractive for solving different problems; however we should realize the illusion of the easiness and understand that there is no need to examine the models and approximations forming the algorithm. The risk is aggravated by the fact that in the most manuals on quantum chemistry and spectrum theory [5-20] the main attention is focused exactly on mathematical formulation of the solution and the basis presentation of the theory and methods for its applications are not accented adequately

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=372

**РЕАЛИЗАЦИЯ МЕТОДА REMD С
ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЖЕСТКИХ ФРАГМЕНТОВ**
**Московский А.А., Вановский В.В., Конюхов С.С.,
Немухин А.В.**

Московский государственный университет
им. М.В.Ломоносова

В работе проведена реализация метода молекулярной динамики с жёсткими фрагментами, в рамках которого молекула рассматривается в виде набора твердых тел. Реализованы методика проведения моделирования при постоянной температуре и процедура глобальной оптимизации. В ходе работы проверена корректность реализации алгоритмов на примере расчета динамики белка бактериородопсина, сферических капель воды, малых кластеров воды, а также исследования пространственных конформаций белка виллина.

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=368>

**AN IMPLEMENTATION OF REPLICA-EXCHANGE
MOLECULAR DYNAMICS WITH RIGID BODIES**
**Moskovskiy A.A., Vanovsky V.V., Konukhov S.S.,
Nemukhin A.V.**

M.V.Lomonosov Moscow State University

The paper described an implementation of rigid body molecular dynamics code. The software is capable to conduct constant-temperature molecular dynamics, as well as global optimization heuristic procedure. The program has been tested with simulations of bacteriorhodopsin, villin dynamics, spherical water nanodroplets, as well as conformations study for small water clusters and vi

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=368

**ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ БАЗИСНЫХ
ФУНКЦИЙ В РАМКАХ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ
ПРОГРАММ HYPERCHEM И GAMESS**
Белоусов В.В., Юрова И.В., Ермаков А.И.

Новомосковский институт Российского химико-технологического университета им. Д.И. Менделеева

Учет релаксации орбиталей в неэмпирических квантово-химических расчетах основан на получении оптимальных параметров базисных функций, используемых для построения молекулярных орбиталей. Для проведения оптимизации предлагается использовать методы Нелдера-Мида и Розенброка. В ходе множества расчетов атомов и молекул элементов второго периода и водорода была показана приемлемость этих методов для решения поставленной задачи. Программная реализация методов оптимизации была выполнена для квантово-химических программ HyperChem и Gamess.

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=323>

**OPTIMIZATION OF BASIS FUNCTION PARAMETERS
IN TERMS OF QUANTUM-CHEMICAL PROGRAMS
HYPERCHEM AND GAMESS**

Belousov V.V., Yurova I.V., Ermakov A.I.

Novomoskovsk institute of D.I.Mendeleev University of Chemical Technology of Russia

Account of relaxation of orbitals in nonobservational quantum-chemical calculations is based on obtaining of optimum parameters of basis functions, used for design of molecular orbitals.

For optimization process the methods of Nelder-Mid and Rosenbrok are suggested. During a great number of calculating of atoms and molecules of Group 2 elements and hydrogen the described methods were approved. Software implementation of optimization methods was realized for quantum-chemical programs HyperChem and Gamess.

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=323

СЕКЦИЯ 8**ДОКЛАДЫ, НЕ ВОШЕДШИЕ В ОСНОВНЫЕ СЕКЦИИ****SECTION 8****THE REPORTS, WHICH ARE NOT INCLUDED IN THE BASIC SECTIONS****ДИНАМИКА СИНТЕЗА АПОПТОЗ-АССОЦИИРОВАННЫХ БЕЛКОВ BAX И MCL-1 В НЕЙРОСЕКРЕТОРНОЙ СИСТЕМЕ МОЛОДЫХ И СТАРЫХ МЫШЕЙ****Бажанова Е.Д., Павлов К.И., Боткина К.Ю., Белостоцкая Г.Б.**

Институт эволюционной физиологии и биохимии им. И.М.Сеченова РАН

DYNAMICS OF SYNTHESIS OF THE APOPTOSIS-ASSOCIATED PROTEINS BAX AND MCL-1 IN NEUROSECRETORY SYSTEM IN YOUNG AND OLD MICE**Bazhanova E.D., Pavlov K.I., Botkina K.Yu., Belostotskaya G.B.**

I.M.Sechenov Institute for Evolutional Physiology and Biochemistry of Russian Academy of Sciences

С помощью иммунофлюоресцентной реакции изучена экспрессия антиапоптотического белка Mcl-1 и проапоптотического белка Bax в супраоптическом и паравентрикулярном ядрах гипоталамуса у старых и молодых мышей, в сравнении с уровнем апоптоза. Для анализа изображений использована программа ВидеоТест-Мастер Морфология 4.0. Установлено, что причиной возрастания клеточной гибели НСК при старении является дисбаланс апоптоз-регулирующих белков; механизмы регуляции апоптоза в изучаемых ядрах примерно одинаковы у молодых животных, однако различаются при старении

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=301>

Using immunofluorescence method we studied expression of antiapoptotic (Mcl-1) and proapoptotic (Bax) proteins in supraoptical and paraventricular hypothalamic nuclei in young and old mice, comparing apoptosis level. We used VideoTest MasterMorphology 4.0 soft for image analysis. We obtained the cause of high apoptosis level in ageing was the misbalance of apoptosis-associated proteins. Furthermore, mechanisms of apoptosis regulation are same in studied nuclei in young animals, and various in old ones

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=301**КОМПЬЮТЕРНАЯ ПРОГРАММА «ЗАНИМАТЕЛЬНАЯ ХИМИЯ»****Сафонова Э.Р., Ямалеева Н., Комиссаров Р.**
Средняя общеобразовательная школа №165,
г.Казани**SOFTWARE PACKAGE "AMUSING CHEMISTRY"****Safonova E.R., Yamaleyeva N., Komissarov R.**
165 Kazan Secondary School

Российская образовательная система школы ежегодно претерпевает изменения. Наряду с большими возможностями при обучении учащиеся сталкиваются также и с различными трудностями. Сегодня в школе отдается приоритет вопросу профильного обучения, положительное решение которого зависит от создания соответствующих условий в любом общеобразовательном учреждении. Очень важно установить сотрудничество между педагогом и учащимися, именно оно должно стать гарантией для успешного и эффективного достижения образовательных целей и задач. Педагогическая практика неоднократно подтверждала, что только сотрудничество приводит к развитию логики ребенка и раскрытию его творческих способностей. Большую помощь в этом педагогам и учащимся оказывают компьютерные технологии

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=334>

The Russian secondary school education system changes annually. Along with wide opportunities for educating, students face with various difficulties during studying. Nowadays the priority problem is the profile education, and solving of this problem depends on creation of corresponding conditions for studying in any school. It is extremely important to establish cooperation between the teacher and the student; just this should be the guarantee for successful and effective achievement of education aims and goals. The educational work confirmed repeatedly that only cooperation leads to developing of child logics and revealing of his talents. Computers and applied software greatly help teachers and students in this cooperation

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=334

НА ПУТИ К БИОГЕОГРАФИЧЕСКОЙ МЕДИЦИНЕ**Шадури М.И.**

Центр Биогеографии

О том, что нужно лечить не болезнь, а конкретного больного говорят все, даже медики. Что же мешает им перейти от слов к делу? Ответ прост: для получения достоверной и полноценной информации о состоянии целостного организма, пациенту нужно потратить много денег и времени - сделать кучу анализов, «пообщаться» со многими узкими специалистами и обследоваться с помощью относительно дорогостоящих инструментальных методов. Это далеко не каждому по карману. Каков выход из этого положения?

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=375>

HEADING TOWARD TO BIOHOLOGRAPHIC MEDICINE**Shaduri M.I.**

Bioholography Centre

The fact that particular patient should be treated instead of the disease is broadly discussed by everyone, including doctors. So, what does impede them to perform the words in deed? The answer is very simple: for obtaining reliable and value information about the entire organism, the patient should spend a lot of money and time for making a huge number of analyses, talking to a number of particular specialists and being verified with the help of relatively expensive methods. Not everybody could afford this. So what is the way out?

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=375

АДАПТАЦИЯ ЮНЫХ СПОРТСМЕНОВ К НАЧАЛУ ОБУЧЕНИЯ В ОБЩЕОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ШКОЛЕ**Проскурякова Л.А.**

Кемеровский государственный университет

Исследованы показатели функционального состояния организма детей, занимающихся спортивной гимнастикой, в динамике первого учебного года в общеобразовательной школе. Установлено, что сочетание начала школьного обучения с интенсивными физическими нагрузками приводит к тому, что к середине первой четверти у многих юных гимнастов развивается напряжение регуляторных механизмов, и отмечаются более выраженные признаки утомления. К концу первого полугодия и далее в течение учебного года первоклассники, занимающиеся спортом, характеризуются меньшим напряжением систем вегетативной регуляции и лучшими показателями внимания и скорости зрительно-моторного реагирования, чем дети контрольной группы, что отражает в целом благоприятное влияние систематических занятий спортом на адаптацию к первому году обучения в школе. Полученные результаты свидетельствуют о необходимости разработки дифференцированного подхода к обучению первоклассников-спортсменов, а также, по возможности, снижения спортивных нагрузок в первой четверти

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=137>

ADAPTATION OF YOUNG SPORTSMEN TO THE BEGINNING OF TRAINING IN A COMPREHENSIVE SCHOOL**Proskuryakova L.A.**

Kemerov State University

Parameters of a functional condition of an organism of children engaged in sports gymnastics, in dynamics of the first academic year in a comprehensive school are investigated. It is established, that the combination of the beginning of school training to intensive physical loadings results to that to the middle of the first quarter at many young gymnasts the pressure regulation mechanisms develops, and more expressed attributes of exhaustion are marked. By the end of the first half-year and further within one academic year the first-graders engaged in sports, are characterized by a smaller pressure of systems of vegetative regulation and the best parameters of attention and speed of visual - motor reaction, than children of control group that reflects as a whole beneficial effect of regular employment by sports on adaptation to the first year of training at school. The received results testify to necessity of development of the differentiated approach to training first-graders - sportsmen, and also, whenever possible, decrease in sports loadings in the first quarter

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=137

**ЭКДИСТЕРОИДЫ И ИХ БИОЛОГИЧЕСКАЯ
АКТИВНОСТЬ: ФИЗИОЛОГИЧЕСКИЕ ДЕЙСТВИЯ,
МОЛЕКУЛЯРНЫЕ МЕХАНИЗМЫ, КОМПЬЮТЕРНЫЕ
МОДЕЛИ И КОФАКТОРЫ (ОБЗОР)**

Тимофеев Н.П.

Био, КХ

Экдистероиды – самый распространенное и многочисленное семейство стероидных веществ в биосфере, механизмы проявления активности которых остаются неясными. Компьютерные модели, позволяя делать доступные для проверки опытом предсказания, имеют значительный потенциал для виртуального просеивания продуктов нового химического синтеза с целью предварительной идентификации соединений с фармакологической, инсектицидной или противопаразитарной активностью

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=365>

**ECDYSTEROIDS AND THEIR BIOLOGICAL ACTIVITY:
PHYSIOLOGICAL ACTIONS, MOLECULAR
MECHANISMS, COMPUTER MODELS AND
COFACTORS (REVIEW)**

Timofeev N.P.

CF "BIO"

Ecdysteroids is the most common and numerous families of the steroid substances in bio-sphere, but the mechanism of their activity is not clear yet. Computer simulating, allowing to obtain some forecasts that could be examined experimentally, has a great potential for virtual bolting of the new products of chemical synthesis with the aim to identify preliminary the compounds with pharmacological, insecticidal and antiparasitic activities.

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=365

**СВЕТО-ЗВУКОВЫЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ,
ФОРМИРУЕМЫЕ НА ОСНОВЕ БИОПОТЕНЦИАЛОВ
МОЗГА ПАЦИЕНТА, ВЛЕЧЕНИИ СТРЕСС-
ВЫЗВАННЫХ РАССТРОЙСТВ**

**Федотчев А.И., Бондарь А.Т., Семенов В.С.,
Соин А.Г.**

Институт биофизики клетки РАН

Представлена концепция резонансного биоуправления с обратной связью (БОС) по ЭЭГ, основанная на использовании процессов амплитудной модуляции, резонансных и адаптационных ЭЭГ реакций в процедурах БОС. В отличие от традиционных методов БОС, предлагаемый подход использует дополнительный контур обратной связи – уникальный контур резонансной стимуляции с частотой доминирующего у пациента узкочастотного альфа-ЭЭГ осциллятора для его активации. Экспериментальное тестирование метода показало, что проводимые лечебные процедуры вызывают явные психофизиологические эффекты релаксационного типа, сопровождаемые значимым увеличением самооценок настроения. Представлен создаваемый в настоящее время портативный прибор “Нейрорезонанс”, который реализует описанный метод, обладает рядом достоинств и может найти применение в реабилитационных мероприятиях широкого профиля

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=355>

**LIGHT-SOUND STIMULI, GENERATED ON THE BASE
OF PATIENT'S BRAIN BIOPOTENTIALS, IN THE
TREATMENT OF STRESS-INDUCED DISORDERS**

**Fedotchev A.I., Bondar A.T., Semenov V.S.,
Soin A.G.**

Institute of Cell Biophysics of Russian Academy of Sciences

The method of resonance EEG biofeedback is presented which is based on utilization of the processes of amplitude modulation and resonance activation in the EEG biofeedback paradigm. Unlike the traditional methods, proposed approach uses additional feedback contour, i.e. the contour of resonance stimulation with the frequency of patient's dominant alpha EEG oscillator for its resonance activation. During experimental testing of the described approach the pronounced relaxation-like psychophysiological effects have been observed together with significant enhancement of mood self-ratings. A standalone device “Neuroresonance” is also presented. It has a number of advantages to realize the resonance EEG biofeedback method and could be effectively used in different fields of rehabilitation and human functional state correction

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=355

**ФУНКЦИОНАЛЬНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ГЕНОВ
ВХОДЯЩИХ В СИНТЕННЫЕ ГРУППЫ****Дадашев С.Я., Абраменко Е.Д., Женавчук О.Ф.,
Каганова Н.Л., Нурутдинова А.С., Стефанов Ю.Э.,
Шарапова Е.И.,**

Институт общей генетики им. Н.И.Вавилова РАН

**FUNCTIONAL CHARACTERISTIC OF GENES
INCLUDED IN SYNTENIC GROUPS****Dadashev S.Ya., Abramenko E.D., Zhenavchuk O.F.,
Kaganova N.L., Nurutdinova A.S., Stefanov Y.E.,
Sharapova E.I.**V.I. Vavilov Institute of General Genetics of Russian
Academy of Sciences

Явление синтении используется в филогенетике. Но формирование синтенных групп генов можно объяснить двояко, как результат дивергенции видов и как следствие структурно-функциональной организации генома (СФОГ). Исследовали вклад СФОГ. Для этого анализировали синтенные группы (человек-мышь) на наличие функционального сходства у генов входящих в синтенную группу. Показали, что большая часть синтенных групп может быть объяснена исходя из СФОГ.

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=303>

The synteny is used in Phylogenetics. But the building-up of the syntenic groups of genes may be explained in two ways, as a result of divergence of species, and as a consequence of structure and functional organization of genome. The structure and functional organization was researched by analyzing syntenic groups (human-mouse) for functional analogy. As a result, the greater part of syntenic groups could be explained using structure and functional organization of genome

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=303

**ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ
ТЕХНОЛОГИИ В ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ И
ПРИКЛАДНЫХ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ
ИССЛЕДОВАНИЯХ**



**COMPUTER APPLICATIONS IN FUNDAMENTAL
AND APPLIED PHYSICS**

СЕКЦИЯ 1

ОБЩИЕ ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ И КОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В НАУКЕ

SECTION 1

GENERAL PROBLEMS AND PROSPECTS OF COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENCE

СВОЙСТВА АЛГОРИТМОВ И МАТЕМАТИЧЕСКИ ЭКВИВАЛЕНТНЫЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ

Воеводин В.В.

Институт вычислительной математики РАН

В современном мире компьютеры, особенно персональные, настолько широко внедрились в нашу повседневную жизнь, науку и образование, что их использование давно уже стало привычным и даже в какой-то мере обыденным делом. Тем не менее, при решении любых задач, в том числе самых простых, в компьютерах реализуются очень сложные процессы. Они настолько трудны для понимания, что рядовой пользователь даже не пытается в них разобраться. Не всегда в них легко разбираться и подготовленному специалисту. К тому же, программная среда, в которой приходится работать, как правило, весьма дружелюбна и настолько удачно маскирует происходящие в компьютере процессы, что мысли о необходимости их изучать и не появляются

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=350>

ALGORITHM'S FEATURES AND MATHEMATICALLY EQUIVALENT TRANSFORMATIONS

Voevodin V.V.

Institute of Numerical Mathematics

Nowadays, computers and especially PC's have took root in our everyday life, science and education so much that using them became usual and even ordinary. Nevertheless, during solving different problems, including the most simple, processes take place in computer could be very complex. These processes are so difficult to understand that average user doesn't even try to realize them. Even technicians sometimes couldn't clear up emerged problems. Moreover the software environment is usually friendly and disguises the processes taking place in computer that you don't even have an idea to understand the process.

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=350

АНАЛИЗ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ПРИКЛАДНЫХ ПРОГРАММ В ОБУЧЕНИИ СТУДЕНТОВ МАШИНОСТРОИТЕЛЬНЫХ СПЕЦИАЛЬНОСТЕЙ

Балакина Н.А.

Нижегородский государственный технический университет

Статья посвящена прикладным программам, разработанным на кафедрах НГТУ для обучения студентов машиностроительных специальностей. Подробно представлены программа автоматизированного проектирования инструментальных блоков (TOOL) и программа расчета работоспособности шпинделя (Shpindel). Разработка прикладных программ остается актуальной, так как помогает ориентировать студентов на научно-исследовательскую работу, позволяет создать экспериментальный и теоретический задел, необходимый для продолжения научной деятельности

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=315>

THE ANALYSIS OF USE OF THE APPLIED PROGRAMS IN TRAINING THE STUDENTS OF MACHINEBUILDING SPECIALITIES

Balakina N.A.

Nizhny Novgorod State Technical University

The article deals with the applied software developed on faculties NGTU for training of the students of machinebuilding specialities. Are detailed submitted the program of the automated designing of tool blocks [TOOL] and program of account of a spindle serviceability [Shpindel]. The development of the applied programs remains urgent, as helps to focus the students on research work, allows to create some experimental and theoretical has touched, necessary for continuation of scientific activity

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=315

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИНФОРМАЦИОННЫХ
ТЕХНОЛОГИЙ В ПРОЕКТНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ
УЧАЩИХСЯ****Яковенко Т.В.**Средняя общеобразовательная школа №165,
г.Казани**USING OF IT IN STUDENT'S PROJECT ACTIVITY****Yakovenko T.V.**

165 Kazan Secondary School

Педагогический дизайн неотъемлемая часть любой педагогической технологии, являясь процедурным механизмом, благодаря которому эта педагогическая технология доходит до реального применения в учебно-воспитательном процессе. Широкое поле для творчества педагогов элективные курсы. В таких курсах отсутствует оценочная система. Решить эту проблему позволяет проектный метод в сочетании с информационными технологиями. Курс невозможно провести в стандартных условиях, не прибегая к помощи информационным средствам обучения, позволяющего сократить время, сделать материал ярким, наглядным

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=360>

Pedagogical design is an essential part of any educational technology, it is procedure mechanism, with the help of which, and educational technology could be really applied in teaching and educational process. Elective courses are a wide field for teacher's creative work. Thus courses avoid marking system. For solving this problem there is a project method coupled with IT. Course could not be carried in standard conditions, without help of IT resources for educating, allowing to cut down the time, and to make materials more vivid and understandable.

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=360

СЕКЦИЯ 2**КОМПЬЮТЕРНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ, ИХ ОРГАНИЗАЦИЯ (СЕТИ И ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ
ВЫЧИСЛЕНИЯ)****SECTION 2****COMPUTING AND COMPUTING MANAGEMENT (NETWORKS AND PARALLEL
COMPUTATION)****МНОГОМЕРНОЕ ВРАЩЕНИЕ ЯКОБИ ДЛЯ
ДИАГОНАЛИЗАЦИИ КОЛЕБАТЕЛЬНОГО
ГАМИЛЬТОНИАНА ПРОТЯЖЕННОЙ
МОЛЕКУЛЯРНОЙ СРЕДЫ В РЕЖИМЕ
ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ****Дементьев В.А.**Институт геохимии и аналитической химии
им. В.И.Вернадского РАН**MULTIDIMENSIONAL JACOBY ROTATION METHOD
OF DIAGONALIZATION OF VIBRATIONAL
GAMILTONIAN OF LARGE IRREGULAR MOLECULAR
SPACE WITH PARALLEL CALCULATIONS****Dementiev V.A.**V.I.Vernadsky Institute of Geochemistry and Analytical
Chemistry of Russian Academy of Sciences

Показано, что для вычисления частот и форм при решении задачи о колебательных состояниях протяженной молекулярной среды наиболее подходящим является метод вращений Якоби. Однако эта процедура является очень медленной. Для ее ускорения предложено отыскивать ортогональное преобразование не одномерного, а многомерного вращения при максимально возможной его мерности. Описана методика распараллеливания предложенного алгоритма и ее реализация на суперкомпьютере МВС-1000

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=336>

Jacoby rotation method of calculation of eigenvalues and eigenvectors of vibrational gamiltonian is suitable in the case of large irregular molecular spaces. But it is very slow method. In the paper it is proposed multidimensional rotation method as a fast clone of Jacoby plane rotation method. Pointed out a way of transformation of new method for using in regime of parallel calculations

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=336**ИНСТРУМЕНТАЛЬНЫЕ СРЕДСТВА ВЫЯВЛЕНИЯ
ПАРАЛЛЕЛИЗМА****Стефанов К.С.**Научно-исследовательский вычислительный центр
московского государственного университета
им.М.В.Ломоносова (НИВЦ МГУ)**TOOL FOR PARALLELISM DISCOVERING****Stefanov C.S.**Research Computing Center of the M.V.Lomonosov
Moscow State University

В докладе описывается автономная система анализа структуры программ. Данная система ориентирована на адаптацию последовательных программ для исполнения на параллельных вычислительных системах

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=361>

In the paper an autonomous system for analysis of information structure of programs is described. The system is intended for adaptation of sequential programs for running on parallel computing systems

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=361**КОМПЬЮТЕРНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ
Воеводин В.В.**Московский государственный университет
им. М.В.Ломоносова**COMPUTER CALCULATIONS
Voevodin V.V.**

M.V.Lomonosov Moscow State University

Задача этой секции – обсудить новые технологические элементы цепи, удачные примеры решения вычислительно сложных задач, опыт использования новых вычислительных ресурсов и организации вычислительных сервисов, т.е. все то, что делает компьютер не только мощным, но и удобным инструментом. До встречи на конференции

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=371>

The aim of this section is to discuss new technological elements, successful examples of solving complex calculating problems, experience of using new recourses and calculating services; in other words everything that make computer not only powerful but also a convenient tool. See you in the conference

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=371

**МЕТОДЫ ЭКСПЕРТНОЙ ОЦЕНКИ КАЧЕСТВА
РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЯ ПРОГРАММНЫХ
КОМПЛЕКСОВ****Фролов А.В.**

Институт вычислительной математики РАН

**METHODS OF EXPERT APPRAISAL OF QUALITY OF
SOFTWARE PARALLELING****Frolov A.V.**

Institute of Numerical Mathematics

При практическом распараллеливании программных комплексов важным оказывается вопрос, насколько качественно было выполнено это само распараллеливание, и насколько близко полученное на конкретной параллельной вычислительной системе ускорение к теоретически возможному. В данном докладе предлагается новый подход к получению цифр теоретических пределов распараллеливания. Подход апробирован при выполнении распараллеливания на архитектуре кластерного типа, при проведении расчетов на кластере ИВМ РАН

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=373>

During the software paralleling in practice the following question is found to be very important. To what extent of quality the paralleling itself was made, and to what extent the acceleration obtained with certain parallel software is closed to the theoretical one? The present report proposes the new approach how to obtain the numbers of theoretical limits of paralleling. The approach was approved by paralleling on cluster architecture, during the calculations made on the cluster of Institute of Numerical Mathematics of Russian Academy of Sciences

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=373

СЕКЦИЯ 3**МОДЕЛИРОВАНИЕ, ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ****SECTION 3****COMPUTER SIMULATION****ДИНАМИКА БУРИЛЬНОЙ КОЛОННЫ ПРИ
РАСШИРЕНИИ ПИЛОТНОЙ СКВАЖИНЫ****Хакимов А.Г.**

Институт механики Уфимского Научного Центра РАН

**DYNAMIC OF THE DRILLING SHAFT, DURING THE
REAMING OF THE PILOT BOREHOLE****Khakimov A.G.**Institute of Mechanics of the Ufa Branch of Russian
Academy of Sciences

Наклонно–направленное бурение широко применяется при строительстве подводных переходов трубопроводов через естественные и искусственные преграды. Одной из проблем при расширении пилотной скважины является слом бурильной трубы и разрушение забойного инструмента. Рассматривается динамика бурильной колонны в наклонно направленной скважине при проведении технологического процесса расширения пилотной скважины. Такая задача возникает при оценке ресурса работы бурильных труб по теории малоциклового усталости. Полученная методика и программа расчета позволяет проводить моделирование технологического процесса расширения пилотной скважины и проводить расчеты для различных значений плотностей бурового раствора, коэффициента трения скольжения колонны о стенки скважины, параметров профиля скважины и технической колонны и усилия, прикладываемого в устье скважины

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=321>

Deviating drilling is widely used during building underwater transition of pipe duct through natural and artificial obstruction. One of the problems during the reaming of the pilot borehole is the destruction of drill pipe and bottomhole tools. We examine dynamic of the drilling shaft in deviating borehole during the reaming of the pilot borehole. This problem appears by estimating of resources of drill pipe according to the theory of low-cycle fatigue. The result methodic and calculating program allows us simulate the process of the reaming of the pilot borehole and perform calculations for different magnitudes of drilling agent density, constant of sliding friction between drilling shaft and borehole sides, parameters of borehole profile, and exertion applied in borehole collar

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=321**НАНОЧАСТИЦЫ КРЕМНИЙ-УГЛЕРОД-ВОДОРОД
СО СТРУКТУРОЙ АЛМАЗОИДА****Свечников А.Б.**

Российский научный центр "Курчатовский Институт"

**SILICON-CARBON-HYDROGEN NANOPARTICLES
WITH THE DIAMOND STRUCTURE****Svechnikov A.B.**

The Russian Research Centre Kurchatov Institute

На основании ab initio расчетов сделан вывод об устойчивости наночастиц со структурой алмазоида, образованных атомами углерода и кремния. Исследованы энергетические параметры, характеризующие процесс испарения атомов водорода с поверхности алмазоида. Рассмотрен вопрос о возможности использования исследованных наночастиц в качестве источников водородного топлива

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=309>

The results of ab initio investigation have clearly shown the stability of nanoparticles with the diamond structure formed by silicon and carbon atoms. The values of activation energies and heat balance were calculated for the process of hydrogen evaporation from the surface of Si-C-H nanoparticle. The most effective application of the nanoparticles could be their usage as hydrogen fuel cells

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=309

К МОДЕЛИРОВАНИЮ РАБОТЫ БИОЛОГИЧЕСКОГО НАСОСА

Хакимов А.Г., Салман С.А.

Институт механики Уфимского Научного Центра РАН

Рассматриваются статическая и динамическая модель биологического насоса с целью нахождения определяющих зависимостей, характеризующих его работу. В статической модели не учитываются силы инерции жидкости и материала оболочки. В простейшей динамической модели биологического насоса также не учитываются силы инерции жидкости и материала оболочки а движение жидкости определяется перепадами давлений в полостях. В простой динамической модели биологического насоса также не учитываются силы инерции жидкости и движение жидкости определяется перепадами давлений в полостях. Для интегрирования уравнений движения оболочки применяется метод конечных разностей типа Уилкинса. В полной динамической модели биологического насоса учитываются силы инерции жидкости и элементов оболочки. Для интегрирования уравнений движения оболочки и жидкости применяется метод конечных разностей типа Уилкинса

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=322>

FOR SIMULATING OF BIOLOGICAL PUMP OPERATING

Khakimov A.G., Salman S.A.

Institute of Mechanics of the Ufa's Scientific Center of Russian Academy of Sciences

The static and dynamic models of biological pump are considered, aiming to find the dependences that characterize its operating. The static model avoids inertia forces of liquid and envelope material. The simplest dynamic model of biological pump also avoids inertia forces of liquid and envelope material, and the flow determined by pressure differences in cavities. For integration of envelope motion equation we've used Wilkins finite differences method. In complete dynamic model inertia forces of liquid and envelope material are considered. For integration of envelope and fluid motion equations Wilkins finite differences method was also used.

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=322

АЛГОРИТМ ВЫЧИСЛЕНИЯ ФРАКТАЛЬНОЙ РАЗМЕРНОСТИ

Смирнов В.В.

Бийский технологический институт

Разработанный алгоритм вычисления фрактальной размерности базируется на клеточном методе и эффективен для фрактальных границ, заданных двумерной графической матрицей. Соответствующая компьютерная программа реализована средствами системы Maple. Погрешность вычисления размерности при рассмотрении некоторых классических фракталов с использованием данной программы находится в пределах 3 %. Полученные результаты позволяют судить об адекватности алгоритма для анализа произвольных фрактальных границ на плоскости

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=346>

ALGORITHMIC CALCULATION OF FRACTAL DIMENSION

Smirnov V.V.

Biysk Tehnological Institute

On the basis of a cellular method the algorithm of calculation of fractal dimension is developed. The algorithm is effective for borders of fractals which are set by a two-dimension graphic matrix. The corresponding computer program is realized by means of system Maple. The error of calculation of dimension for some classical fractals is within the limits of 3 %. The received results allow to judge of adequacy of algorithm for the analysis of any fractals on a plane

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=346

ЗАДАЧИ АКУСТИЧЕСКОЙ ЭКОЛОГИИ ГОРОДА

Махортых С.А.

Институт математических проблем биологии РАН

Повышенные уровни шума и вибрации являются важными экологическими проблемами для города. Наличие многообразных интенсивных источников (транспорт, строительные механизмы) приводит к акустическому загрязнению среды и необходимости контролировать ее состояние. В докладе приводятся основные задачи акустической экологии и методы оценки состояния среды и возможные способы его нормализации. Представленная методика протестирована в расчетах на Московском метрополитене

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=329>

ACOUSTICS ECOLOGY PROBLEMS OF THE CITY

Makhortikh S.A.

Institute of Mathematical Problems of Biology Russian Academy of Sciences

The raised noise levels and vibrations are the important environmental problems for the city. Presence of diverse intensive sources (transport, building mechanisms) leads to acoustic pollution of environment and necessity to supervise its condition. In the report the primary goals of acoustic ecology and methods of an environment condition estimation and possible ways of its normalization are resulted. The presented technique is tested in calculations on Moscow underground railways

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=329

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ВТ-МЕТОДОВ ПРИ ИССЛЕДОВАНИЯХ ПАРАПРОВОДИМОСТИ МОНОКРИСТАЛЛОВ YBaCuO В УСЛОВИЯХ ПРИЛОЖЕНИЯ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ

Вовк Р.В., Оболенский М.А., Бондаренко А.В., Самойлов А.В.

Харьковский национальный университет им В.Н.Каразина

USING OF IT-METHODS FOR RESEARCHES OF PARACONDUCTIVITY YBaCuO SINGLE CRYSTALS UNDER HIGH PRESSURE

Vovk R.V., Obolenskii M.A., Bondarenko A.V., Samoilov A.V.

V.N.Karazin Kharkov National University

В работе исследовано влияние высокого гидростатического давления до 14 кбар на флуктуационную проводимость совершенных монокристаллов YBaCuO. Анализ данных с применением метода МНК показал, что 3D-2D кроссовер хорошо описывается теоретическими моделями, предполагающими низкую степень дефектности структуры исследуемых образцов и позволил идентифицировать различные режимы на каждом температурном интервале существования области флуктуационной проводимости. Получены значения длины когерентности перпендикулярно аб-плоскости $\xi_c(0)$ в интервале приложенных давлений

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=378>

The effects of high hydrostatical pressure up to 14 kbar on mode of the fluctuation conductivity of perfect YBaCuO single crystals are investigated. The data analysis by MMS method shown that 3D-2D crossover is satisfactory described by theoretical models supposing the low defect structure of the development type. Different modes of fluctuation conductivity on the respective temperature intervals are discerned. The values of coherent length $\xi_c(0)$ in ab-planes for all interval applied pressures are got

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=378

ОПРЕДЕЛЕНИЕ РАЗМЕРНОСТИ СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ ФЛУКТУАЦИОННОЙ ПОДСИСТЕМЫ МОНОКРИСТАЛЛОВ YBa₂Cu₃O_{7-x} С ПРИМЕСЯМИ АЛЮМИНИЯ И ПРАЗЕОДИМА МЕТОДОМ МНК

Вовк Р.В., Оболенский М.А., Бондаренко А.В., Гулатис И.Л.

Харьковский национальный университет им В.Н.Каразина

DETERMINATION OF DIMENSION OF SUPERCONDUCTIVITY FLUCTUATION SUBSYSTEM YBa₂Cu₃O_{7-x} SINGLE CRYSTALS WITH ADMIXTURES OF ALUMINIUM AND PAZEODIMA BY MMS METHOD

Vovk R.V., Obolenskii M.A., Bondarenko A.V., Goulatis I.L.

V.N.Karazin Kharkov National University

В работе исследована флуктуационная проводимость оптимально допированных кислородом монокристаллов YBa₂Cu_{3-y}Al_yO_{7-x} и Y_{1-z}Pr_zBa₂Cu₃O_{7-x}. Применение ВТ-методов и, в частности метода МНК с использованием в качестве подгоночных параметров длины когерентности в направлении с-оси, критической температуры и характерного размера двумерного слоя, позволило определить значения в точке 2D-3D кроссовера и идентифицировать различные режимы флуктуационной проводимости. Температурная зависимость флуктуационной парапроводимости наиболее удовлетворительно описывается в рамках теоретической модели Лоренца-Дониаха. Показано, что примеси Al и Pr являются эффективными центрами рассеяния нормальных и флуктуационных носителей

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=377>

In present work the conductivity of YBa₂Cu_{3-y}Al_yO_{7-x} и Y_{1-z}Pr_zBa₂Cu₃O_{7-x} single crystals in the normal and superconductivity state are investigated. Application of MMS-method method by using of coherent length, critical temperature and characteristic size of two-dimensional layer as the fitting parameters allowed to define values in the point of 2D-3D crossover and to identify different regimes of fluctuation conductivity. It is shown that paraconductivity satisfactory described by Lawrence-Doniach model.. The Al and Pr admixtures are the effective scattering centers of normal and fluctuation carriers

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=377

**КОМПЛЕКС ПРОГРАММ RADIOCHROM-E ДЛЯ
МОДЕЛИРОВАНИЯ И ОПТИМИЗАЦИИ
ЭКСТРАКЦИОННО-ХРОМАТОГРАФИЧЕСКИХ
ПРОЦЕССОВ РАЗДЕЛЕНИЯ РАДИОНУКЛИДОВ**
Трехонин С.В.

Федеральное государственное унитарное
предприятие "ГНЦ РФ НИИ Атомных Реакторов"

Описывается программный комплекс RadioChrom-E, предназначенный для моделирования и оптимизации препаративного разделения радионуклидов, осуществляемого методом экстракционной хроматографии. Комплекс предназначен для использования в среде операционной системы Windows 9X/NT/XP.

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=304>

**PROGRAM SYSTEM RADIOCHROM-E INTENDED FOR
SIMULATING AND OPTIMIZATION OF EXTRACTION
CHROMATOGRAPHIC PROCESSES OF
RADIONUCLIDE DECAY**
Trekhonin S.V.

Federal State Unitary Enterprise "State Scientific Centre
of The Russian Federation Research Institute of Atomic
Reactors"

Program system RadioChrom-E intended for simulating and optimization of preparative separation of radionuclide, using methods of extraction chromatography. The system is compatible with Windows 9X/NT/XP.

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=304

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ
ОБНАРУЖИВАЕМОЙ ЛИДАРОМ КОНЦЕНТРАЦИИ
NO₂ КАК ФУНКЦИИ ДАЛЬНОСТИ**

Стариков В.Н., Исаченков Ф.Н.

Мичуринский государственный педагогический
институт

Мы оцифровали координаты 77 эмпирических точек графика Орлова Д.А. [1, с.198, рис. 2.12] зависимости порога обнаружения лидаром концентрации c_i (в 10^{18} м⁻³) газа NO₂ как функцию дальности R_i (в м), определяемой по формуле $R_i = 361,15 + 14,978(i-1)$, где $i=1,2,3,\dots,77$ – номер точки. Опытные концентрации c_i , представленные на графике для 77 экспериментальных точек моделировались Орловым Д.А. линейной моделью теоретических концентраций k_i^n , определяемых нами 3-параметрической линейной моделью по формуле $k_i^n = 0,003876275(361,15 + 14,978(i-1) - 1,325)$, дающей минимальную сумму квадратов отклонений от опытных концентраций c_i , равную $\sum_{i=1}^{77} (c_i - k_i^n)^2 = 8,59867126 \cdot 10^{36}$ м⁻⁶. Однако опытные концентрации c_i лучше всего аппроксимировались нелинейной экспоненциально-синусоидальной моделью Шмидта В.М. [2, с. 64], определяемой по формуле $k_i^h = a(361,15 + 14,978(i-1) - h + \exp(b(d - (361,15 + 14,978(i-1)))) \sin(r(361,15 + 14,978(i-1))^g)$, $a = 0,002753075$, $b = 0,000803105$, $d = -627,33$, $g = 2,734955$, $h = 0,23096$, $r = 0,00000000921035$. Минимальная сумма квадратов отклонений опытных концентраций c_i от модельных k_i^h была равна $3,98375852 \cdot 10^{36}$ м⁻⁶.

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=326>

**MODELING OF THE LIDAR DETECTING NO₂-
CONCENTRATION AS A FUNCTION OF DISTANCE**

Starikov V.N., Isachenkov F.N.

Michurinsk State Pedagogical Institute

77 experimental points of graph of the lidar detecting NO₂- concentration c_i (в 10^{18} м⁻³) as a function of distance $R_i = 361,15 + 14,978(i-1)$ (meters) are approximated by model $k_i^h = a(361,15 + 14,978(i-1) - h + \exp(b(d - (361,15 + 14,978(i-1)))) \sin(r(361,15 + 14,978(i-1))^g)$, $a = 0,002753075$, $b = 0,000803105$, $d = -627,33$, $g = 2,734955$, $h = 0,23096$, $r = 0,00000000921035$, i - number of point. Least sum squares of deviations between model and experimental points equal $3,98375852 \cdot 10^{36}$ м⁻⁶. Best 3-parametric linear model give least sum squares of deviations $8,59867126 \cdot 10^{36}$ м⁻⁶.

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=326

СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ**Четверушкин Б.Н.**

Институт математического моделирования РАН

Математическое моделирование является эффективным средством исследования, позволяющим, не прибегая к непосредственному изучению объекта, получить интересующую информацию о его свойствах и поведении в той или иной ситуации. Методологическую основу математического моделирования составляет удачно сформулированная академиком А.А. Самарским триада «модель-алгоритм-программа». При этом все три компоненты триады рассматриваются нераздельно: математическая модель, с одной стороны, адекватно описывающая процесс, а с другой, допускающая реализацию с помощью существующей вычислительной техники; эффективный численный алгоритм, позволяющий на основе модели провести на доступных компьютерах расчет; программная реализация алгоритма, дающая возможность в числовом виде получить, а затем и обработать для окончательного потребления, например, с помощью визуализации, информацию

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=349>

MODERN PROBLEMS OF MATHEMATICAL MODELING**Chetverushkin B.N.**

Institute for Mathematical Modelling of Russian Academy of Sciences

Mathematical modeling is an effective research tool, which allows obtaining needed information about object features and behavior in this or that situation, without direct investigation of the object. The methodic base of mathematical modeling is so-called "model-algorithm-program" triad well-formulated by academician A.A. Samarsky. All the three components of the triad are concerned together: the mathematical model sufficiently describing the process from one hand, and allowing modern hardware realization from the other; effective numerical algorithm that permits to perform the calculations using the model; and the program or software, enabling to get the numeric information for future processing and visualizing

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=349

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЭФИЦИЕНТА УСИЛЕНИЯ ЛИДАРНОГО ФЭУ КАК ФУНКЦИИ ДАЛЬНОСТИ**Стариков В.Н., Исаченков Ф.Н.**

Мичуринский государственный педагогический институт

График (из дисс. Орлова Д.А., 2001 г., с.197, рис. 2.9) нормированного коэффициента усиления (КУ) с у ФЭУ как функция дальности R (м) аппроксимировался теоретическими значениями этой функции по лучшей (из рассмотренных) теоретической формуле $cm=k(R+a)r$ при $a=2,95$, $r=0,5092$ и $k=0,01713$. Параметры а и г оценены минимизацией суммы квадратов разностей отклонений теоретических и опытных значений КУ, которая оказалась равна 0,01775478. Параметр k определялся условием, чтобы при $R=2940$ было $c=1$.

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=339>

MODELING OF THE AMPLIFICATION COEFFICIENT FOR THE LIDAR PHOTOMULTIPLIER TUBE AS A FUNCTION OF DISTANCE**Starikov V.N., Isachenkov F.N.**

Michurinsk State Pedagogical Institute

The graph of the amplification coefficient c for the lidar photomultiplier tube as a function of distance R (m) are approximated by best theoretical model $cm=k(R+a)r$ при $a=2,95$, $r=0,5092$ и $k=0,01713$. Parameters a and r are estimated by the method of the least sum squares of deviations (LSSD) between model and experimental points. LSSD is equal 0,01775478.

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=339

НОВЫЕ ГЕКСАГОНАЛЬНЫЕ СТРУКТУРЫ КАРБИДА КРЕМНИЯ**Свечников А.Б.**

Российский научный центр "Курчатовский Институт"

Результаты ab initio расчетов в кластерном приближении подтвердили гипотезу о существовании устойчивых гексагональных, плоских структур карбида кремния. С помощью ab initio зонных расчетов в приближении полного потенциала LMTO была произведена коррекция равновесных параметров кристаллической решетки исследованных структур, определены величины полных энергий, зонные структуры и оптические характеристики. Показано, что кристаллические структуры с симметрией P63/mmc A9 и Bk относятся к полупроводникам

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=316>

THE NEW STRUCTURES OF HEXAGONAL CRYSTALS OF SILICON CARBIDE**Svechnikov A.B.**

The Russian Research Centre "Kurchatov Institute"

The results of ab initio investigation in cluster approximation have proved the idea of existence and stability of the hexagonal flat silicon carbide crystal structures. Full potential LMTO band structure calculations were carried for correction of the structure parameters and estimation of total energy values, band structure and optics. It was shown that crystal structures with symmetry P63/mmc A9 and Bk are semiconductors

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=316

**ПОИСК СКРЫТОЙ ПЕРИОДИЧНОСТИ В
НУКЛЕОТИДНЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЯХ ДНК
С ПОМОЩЬЮ ВЕЙВЛЕТ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ**

Федосеев С.В.

Московский инженерно физический институт

Предложен новый метод поиска скрытой периодичности в нуклеотидных последовательностях ДНК. Метод основан на вейвлет преобразованиях. Метод применяется для анализа 22-ой хромосомы человека

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=314>

**THE SEARCH FOR LATENT PERIODICITY IN DNA
NUCLEOTIDE SEQUENCES USING WAVELET
CONVERSION.**

Fedoseev S.V.

Moscow Engineering Physics Institute (State University)

The new method for searching for latent periodicity in DNA nucleotide sequences is proposed. The method is based on wavelet conversion and applied for the analysis of human chromosome 22.

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=314

**РЕШЕНИЕ ОБЩЕЙ ЗАДАЧИ ОДНОМЕРНОЙ
ДИФФУЗИИ РЕКУРРЕНТНО-ОПЕРАТОРНЫМ
МЕТОДОМ**

Пирниязова Ф.М.

Институт кибернетики Академии Наук Республики
Узбекистан

В этой статье рассматривается общее решение задачи одномерной диффузии рекуррентно-операторным методом

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=353>

**ABOUT SOLVING SINGLE-MEASURE PROBLEM OF
DIFFUSION**

Pirniyazova F.M.

Institute of Cybernetics of Uzbekistan Republic Academy
of Sciences

In this article examining common solving of differential equalizing of diffusion, for the single-measure problem of diffusion which is solving by analytic method, in particular by new recurrent-operating method

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=353

**ФУНКЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ И РОСТ ЧАСТИЦ
КОНДЕНСИРОВАННОЙ ФАЗЫ В
СВОБОДНОМОЛЕКУЛЯРНОМ РЕЖИМЕ**

**Москаленко Ф.В., Гаврилов А.И., Гаврилов И.А.,
Хайрюзова Е.В.**

Кубанский государственный технологический
университет

Моделируется кинетика изотермической нуклеации в свободномолекулярном режиме на основании феноменологического подхода и требования квазипостоянства массы вещества

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=384>

**THE DISTRIBUTION FUNCTION AND THE
CONDENSABLE PHASE FRACTIONS GROWTH
UNDER FREE MOLECULAR CONDITIONS**

**Moskalenko F.V., Gavrilov A.I., Gavrilov I.A.,
Hairjuzova E.V.**

Kuban State University of Technology

There is modeled kinetics of exothermic nucleation in a free-molecular mode condition based on phenomenological approach and requirements of quasi constant conditions of the substance mass

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=384

**ИССЛЕДОВАНИЕ МОДЕЛЕЙ ФЕРРОМАГНИТНОГО
ГАДОЛИНИЯ МЕТОДАМИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ
ФИЗИКИ**

Магомедов М.А., Муртазаев А.К.

Институт физики Дагестанского научного центра РАН

Используя высокоэффективный одно-кластерный алгоритм Вульфа метода Монте-Карло проведены высокоточные исследования статических критических свойств моделей реального ферромагнитного гадолиния. Рассчитаны все основные статические критические индексы моделей гадолиния и показано, что на характер критического поведения гадолиния значительное влияние оказывают изотропные диполь-дипольные взаимодействия

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=317>

**INVESTIGATION OF MODELS OF FERROMAGNETIC
GADOLINIUM BY METHODS OF COMPUTATION
PHYSICS**

Magomedov M.A., Murtazaev A.K.

Institute of physics of the Dagestan centre of science of
Russian Academy of Science

Using high-efficiency single-cluster Woolf's algorithm of the Monte-Carlo method are carried out high-accuracy investigation of static critical properties of models of real ferromagnetic gadolinium. The all-main static critical exponents of models of gadolinium are calculated, and are shown, that on character of critical behaviors of gadolinium the significant role is played the isotropic dipole-dipole interaction

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=317

СЕКЦИЯ 4

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ В НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

SECTION 4

VISUALIZATION IN SCIENTIFIC RESEARCHES

О СПЕКТРАЛЬНОМ АЛГОРИТМЕ РАСПОЗНАВАНИЯ КОНТУРНЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ

Куликова Л.И., Махортых С.А.

Институт математических проблем биологии РАН

ABOUT SPECTRAL ALGORITHM FOR CONTOUR IMAGES RECOGNITION

Kulikova L.I., Makhortykh S.A.

Institute of Mathematical Problems of Biology Russian
Academy of Sciences

Данная работа основана на использовании обобщенного спектрально – аналитического метода, который предполагает проведение полной обработки данных в пространстве коэффициентов Фурье. Последние вычисляются при разложении в ортогональные ряды с использованием модифицированных классических ортонормированных полиномов и функций. Предлагается алгоритм выбора оптимальных условий аналитического описания контурных объектов в задачах анализа изображений и распознавания образов. Рассматриваются основные положения алгоритма и результат их приложения на примере распознавания букв латинского алфавита

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=305>

Presented work is based on the generalized spectral-analytical method use which assumes carrying out of full data processing in Fourier coefficients space. The last are calculated in classical orthogonal polynomial series decomposition. The algorithm of a choice of optimum conditions of the planimetric objects analytical description in image analysis problems and image recognition is offered. Substantive provision of algorithm and the results of their application in the case of Latin letters recognition are considered

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=305

СРЕДСТВО ВИЗУАЛИЗАЦИИ ГРАФА ЛОГИЧЕСКИХ ОТНОШЕНИЙ МЕЖДУ СТАТЬЯМИ ЭЛЕКТРОННОЙ ЭНЦИКЛОПЕДИИ

Брызгалов П.А.

Московский государственный университет
им. М.В.Ломоносова

VISUALIZATION SYSTEM FOR LOGIC RELATIONS BETWEEN ARTICLES IN ONLINE ENCYCLOPEDIA

Brizgalov P.A.

M.V.Lomonosov Moscow State University

В докладе описывается Java-апплет, входящий в состав системы для создания электронных энциклопедий «Ареола», предназначенный для отображения и работы с графами логических отношений между статьями энциклопедии. Описываются такие функции апплета, как отображение графов в ярусно-параллельной и в «плавающей» форме, ограничение количества видимых вершин, взаимодействие с функциями JavaScript-а и другие.

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=357>

The report deals with the description of the Java applet included in the system for creating electronic encyclopedia "Areola", and intended for representation and working with columns of logical relations between articles of the encyclopedia. The following features of the applet are described: displaying of columns as a multilevel structure and in "floating" form, limitation of number of visible apexes, interaction with Java Script functions and so on

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=357

СЕКЦИЯ 5**ОБРАБОТКА ДАННЫХ, БАЗЫ ДАННЫХ, АНАЛИЗ ДАННЫХ****SECTION 5****DATA PROCESSING, DATABASES AND DATA ANALYSIS****КРУПНЫЕ ПРОБЛЕМЫ И ТЕКУЩИЕ ЗАДАЧИ
ИССЛЕДОВАНИЙ В ОБЛАСТИ БАЗ ДАННЫХ
Кузнецов С.Д.**

Институт системного программирования РАН

В сообществе баз данных не слишком принято индивидуально анализировать и прогнозировать направления исследований. На это отваживаются лишь немногие (одним из исключений является Джим Грей [1]). Обычно же подобная работа выполняется на сравнительно регулярных собраниях наиболее авторитетных представителей исследовательского сообщества, которые обмениваются мнениями и, по мере возможности, вырабатывают общую точку зрения. В результате таких собраний формулируется отчет, в котором фиксируется представление сообщества о путях развития исследований. Хорошо известны отчет собрания в Лагуна-Бич (1989 г.) [2] и Асилмарский отчет (1996 г.) [3]. Общий обзор этих материалов можно найти в [4]. Последнее подобное собрание состоялось в 2003 г. в г. Лоуэлл, штат Массачусетс. Лоуэллский отчет до сих пор официально не опубликован, хотя обсуждался на панельной дискуссии конференции SIGMOD в 2003 г. [5]. Однако предварительная версия отчета доступна в Internet [6], и я начну свою статью с его краткого обсуждения. Во второй части я приведу некоторые собственные рассуждения по поводу более практических текущих потребностей, не претендуя на обобщения

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=347>**THE LARGE AND PRESENT-DAY PROBLEMS IN
RESEARCHING OF DATABASES
Kuznetsov S.D.**

The Institute for System Programming of the Russian Academy of Sciences

In database community it is not usual to analyze and forecast the exploration trends for individual researchers. Only few venture to perform this (one of these exceptions is Jim Gray). Usually such work is carried out on relatively regular meetings of the most authoritative representatives of the research community; they exchange their opinions, and as far as possible, elaborate the common point of view. As the result of such meetings the report is formed, deal with the community notion of the research trends. Some of these reports are well-known, for instance the report of the meeting in Laguna Beach (1989) and Asilomar report (1996). The coverage of these materials is available in [4]. The recent meeting was held in 2003 in Lowell, MA. The report has not been published yet, although it was discussed in panel debates on SIGMOD conference in 2003 [5]. The preliminary text of the report is available via web [6], and I'll start my article with a short argument of this report. The second part of my article is devoted to my own objections on current applied needs.

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=347**НЕКОТОРЫЕ АСПЕКТЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ
ИНФОРМАЦИОННЫХ СИСТЕМ ДЛЯ
СОВЕРШЕНСТВОВАНИЯ УПРАВЛЕНИЯ
ПРЕДПРИЯТИЕМ****Вовк О.С., Семенова Д.А.**Харьковский национальный университет им
В.Н.Каразина

Обсуждается важная роль программного обеспечения в деятельности крупного предприятия. Показано, что введение в практику автоматизированных систем обработки данных позволяет комплексно решать разнообразный спектр экономических задач

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=381>**SOME ASPECTS USING OF THE INFORMATIVE
SYSTEMS FOR PERFECTION OF MANAGEMENT OF
THE ENTERPRISES****Vovk O.S., Semenova D.A.**

V.N.Karazin Kharkov National University

The important role of software in activity of major concern comes into question. It is shown that introduction to practice of the automated integrated systems of account, control and audit and distributed systems of the data processing allows complex to decide tasks not only on an account but also to the control, analysis and audit

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=381

СЕКЦИЯ 6

ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ И ТЕХНОЛОГИИ (ПРИНЯТИЕ РЕШЕНИЙ, ЭКСПЕРТНЫЕ СИСТЕМЫ И Т.Д.)

SECTION 6

INTELLIGENCE SYSTEMS AND TECHNOLOGIES (DECISION-MAKING, EXPERT SYSTEM ETC.)

ВИРТУАЛЬНО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ЛАБОРАТОРИЯ, КАК НОВОЕ ИНТЕГРИРОВАННОЕ ПРОГРАММНОЕ СРЕДСТВО ДЛЯ РЕШЕНИЯ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИХ ЗАДАЧ ГОРНОГО ДЕЛА

Попов С.Е.

Институт угля и углехимии СО РАН

VIRTUAL-COMPUTING LABORATORY, AS THE NEW INTEGRATED SOFTWARE FOR THE DECISION OF SCIENTIFIC AND TECHNICAL PROBLEMS OF MINING

Popov S.E.

Institute of Coal and Coal-Chemical of the Siberia Branch
of Russian Academy of Sciences

В работе рассмотрен программный комплекс «Виртуально-вычислительная лаборатория», как новое интеграционное инструментальное средство решения научно-технических задач горного дела в распределенном режиме. Сформулированы основные требования к научно-техническим задачам и к программному комплексу ВВЛ, для интеграции их в единое распределенное информационное пространство. Программный комплекс «Виртуально-вычислительная лаборатория» представлен в виде распределенных собственных компонент с возможностью их интеграции с компонентами сторонних разработчиков, ориентированных на предметную область в горном деле. Построена непротиворечивая UML-модель и сформировано дерево объектов РПК «ВВЛ». Продемонстрированы примеры интеграции расчетных модулей с системами управления картографией в online-режиме

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=136>

The program complex "Virtual-computing laboratory", as new integration tool means of the decision of scientific and technical problems of mining in the distributed mode is considered. The basic requirements to scientific and technical problems and to program complex VCL, for their integration into the uniform distributed information space are formulated. The program complex "Virtual-computing laboratory" is submitted as distributed own a component with an opportunity of their integration with components of the foreign developers focused on a subject domain in mining. Consistent UML-model of DPC "VCL" is constructed. Examples of integration of settlement modules with control systems of cartography in an online-mode are shown

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=136

ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ТЕХНОЛОГИЯ АВТОМАТИЗИРОВАННОЙ МЕДИЦИНСКОЙ ДИАГНОСТИКИ

**Богомолов А.В., Чикова С.С., Зуева Т.В.,
Михеев О.В., Габусу П.А.**

Государственный научно-исследовательский
испытательный институт МО РФ

IT TECHNOLOGY OF AUTOMATED MEDICAL DIAGNOSTICS

**Bogomolov A.V., Chikova S.S., Zueva T.V.,
Mikheyev O.V., Gabusu P.A.**

The State Science and Research Experimental Institute of
Ministry of Defence of the Russian Federation

Изложена информационно-вычислительная технология автоматизированной медицинской диагностики, основанная на использовании методов нечеткой логики. На основании результатов апробации разработанных решений при синтезе системы автоматизированной диагностики артериальной гипертензии показана эффективность использования методов нечеткой логики и обработки экспертной информации для автоматизированной диагностики преморбидных нарушений состояния обследуемого – широко распространенных и достаточно сложных для диагностики и детального описания симптоматики ввиду их высокой неопределенности, динамичности и «обратимости»

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=374>

The IT technology of automated medical diagnostics based on methods of fuzzy logic is set forth. Basing on the results of approving of developed solutions during the synthesis of the system of automated diagnostics of arterial hypertension, the effectiveness of using the methods of fuzzy logic and processing of the experimental data for automated diagnostics of the premorbid abnormalities of the patient condition are shown. These methods are widely used but complex enough for diagnostics and detailed description of symptomatic, considering their high indeterminacy, dynamics and invertibility

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=374

СЕКЦИЯ 8**ДОКЛАДЫ, НЕ ВОШЕДШИЕ В ОСНОВНЫЕ СЕКЦИИ****SECTION 8****THE REPORTS, WHICH ARE NOT INCLUDED IN THE BASIC SECTIONS****ФИЗИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДВИЖЕНИЯ СПУТНИКА
ЮПИТЕРА СИНОПЕ****Островский Н.В.**

Вятский государственный университет

В Солнечной системе существует ряд явлений, которые не могут быть описаны с использованием уравнения всемирного тяготения Ньютона, которое строго соответствует лишь гравитационному взаимодействию двух тел. С его использованием нельзя, например, объяснить движение Луны вокруг Земли, поскольку Луна находится в сфере тяготения Солнца. Сходная ситуация имеется и в случае внешних спутников Юпитера – Пасифе, Синопе, Карме и Анаке. В данной работе использовано предложенное автором оригинальное обобщённое уравнение гравитационного взаимодействия для построения физической и на его основе математической модели орбитального движения спутника Юпитера Синопе

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=286>**PHYSICAL MODEL OF MOVEMENT OF JUPITER
SATELLITE SINOPE****Ostrovskiy N.V.**

Vyatka State University

In Solar system exists some phenomena's, which can be not described with use of the Newton equation of worldwide gravity Newton, which strictly corresponds to gravitational interaction of two body only. With its use it is impossible to explain, for example, moving the Moon around Land since Moon inheres in sphere of Sun gravity. Cognate situation there is in the event of external satellites of Jupiter - Pasiphe, Sinope, Karme and Ananke. In given work is used offered by author original generalised equation of gravitational interactions for building physical and on its base - mathematical model of orbital moving the of Jupiter satellite - Sinope

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=286**ОБ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ВТ-МЕТОДОВ В ПРОЦЕССЕ
РЕАЛИЗАЦИИ ПРОГРАММ ПРИВАТИЗАЦИИ****Вовк О.С., Рябченко А.Д., Семенова Д.А.**Харьковский национальный университет
им В.Н.Каразина

Рассматривается возможность участия банков в реализации программы приватизации. При этом подчеркивается важная роль ВТ-методов, которые не только позволяют проанализировать экономическую ситуацию для каждого конкретного случая с учетом сколь угодно большого числа различных факторов и параметров, но и во много раз уменьшает время, нужное для этого

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=382>**ABOUT USING OF IT-METHODS FOR REALIZATION
OF THE PRIVATIZATION PROGRAMS****Vovk O.S., Ryabchenko A.D., Semenova D.A.**

V.N.Karazin Kharkov National University

Possibilities of participation of banks in realization of the program of privatization are discussed. In this case IT-methods have very important role. IT-methods allow analyzing an economic situation for every concrete case with an account very large number of different factors and parameters and minimize time necessary for it

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=382

**СВОЙСТВА ЦТС-СЕГНЕТОКЕРАМИК ПРИ
РАЗЛИЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ****Петренко А.Г.**

Донецкий национальный университет

Изучены физические свойства ЦТС-сегнетоэлектриков в широком интервале температур и частот. Показано, что дефекты кристаллической структуры влияют на движение доменных стенок опосредствовано через связанные с ними локальные и электрические поля. Фазовый переход при 163К в области СВЧ смещается в сторону низких температур на 3-8К

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=379>

**THE PROPERTIES OF FERROCERAMICS AT
DIFFERENT TEMPERATURES****Petrenko A.G.**

Donetsk National University

The physical properties of ferroceramics in the wide interval of temperatures and frequencies are investigated. It is shown that the defects of crystalline structure influence on motion of blast-furnace walls mediated through the local and electric fields related to them. Phase transition at 163K in area of SHF is displaced to low temperatures on 3-8K

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=379

**МЕТОД ОПТИМИЗАЦИИ КВАДРАТИЧНЫХ
СТОХАСТИЧЕСКИХ ОПЕРАТОРОВ****Шамсиддинов Н.Б.**Ташкентский институт ирригации и мелиорации
Республики Узбекистан

В данной работе показан метод оптимизации квадратно стохастических операторов путем сокращения относительно равенства

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=135>

**METHOD OF OPTIMIZATION OF SQUARE-LAW
STOCHASTIC****Shamsiddinov N.B.**Tashkent Institute of Irrigation and Melioration of the
Republic of Uzbekistan

The method of optimization of the square-law stochastic operators by a way reduction about equality is shown

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=135

РРПСВ КАК РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЧИСЛА КОРНЕЙ**Стариков В.Н., Беляченко Ю.Г.**Мичуринский государственный педагогический
институт

Двухстороннее (ДС) распределение разности пуассоновых случайных величин (РРПСВ) при высоком уровне по критерию хи-квадрат соответствует опытному распределению 10-14-дневных проростков гибрида ячменя по числу 1,2,3,4,5,6 и более видимых корней у них. Нормальное и биномиальное теоретические распределения отвергались для тех же данных при любом уровне больше или равном 0,0001

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=325>

**DISTRIBUTION OF THE POISSON'S RANDOM
VARIABLES DIFFERERCE AS A ROOTS NUMBER
DISTRIBUTION****Starikov V.N., Belyachenko Yu.G.**

Michurinsk State Pedagogical Institute

Distribution of the Poisson.s random variables differerce approximated experimental distribution of the 10-14-days-seedlings of the barley hybrids depending on the visible roots number at hight level of chi-squared test goodness-of-fit

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=325

**РРПСВ КАК РАСПРЕДЕЛЕНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ
ЭЛЕКТРО- И РАДИОДЕТАЛЕЙ****Стариков В.Н.**Мичуринский государственный педагогический
институт

Одностороннее (ОС) распределение разности пуассоновых случайных величин (РРПСВ) при высоком уровне по критерию хи-квадрат соответствует опытному распределению различного числа электроламп, радио- или электродеталей по срокам их службы через равные интервалы времени в часах (А.И.Кибзун и др., А.И.Карасев и др., А.П.Иванов; В.Е.Гмурман; В.И.Романовский; С.Э.Маркович; др.)

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=338>

**DISTRIBUTION OF THE POISSON.S RANDOM
VARIABLES DIFFERERCE AS A ELECTRO- AND
RADIOELEMENTS DISTRIBUTION****Starikov V.N.**

Michurinsk State Pedagogical Institute

One-sided distribution of the Poisson.s random variables differerce approximated experimental distribution of various numbers of the electrotubes, electro- and radioelements ralativetely of the life-times taked in form of the equal class-intervals in hours (A.I.Kibzun et al., A.I.Karasev et al., A.P.Ivanov; V.E.Gmurman; V.I.Romanovski; S.E.Markovich; et al.)

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=338

ВЛИЯНИЕ НЕЭКВИДИСТАНТНОСТИ РЯДА НА СПЕКТР ИССЛЕДУЕМОЙ ВЕЛИЧИНЫ И ОЦЕНКА ДОСТОВЕРНОСТИ ПОЛУЧАЮЩЕГОСЯ СПЕКТРА**Хрусталеv А.Б.**

Институт физики Земли им.Г.А.Гамбурцева РАН

Целью настоящей работы является исследование влияния неэквидистантности ряда на спектр исследуемой величины и оценка достоверности полученного спектра в зависимости от входных данных

<http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper.php?p=310>

INFLUENCE OF NON-EQUIDISTANCE OF ROW ON THE SPECTRUM OF STUDIED MAGNITUDE, AND ESTIMATION OF RELIABILITY OF THE RESULT SPECTRUM**Khrustalev A.B.**

G.A.Gamburtsev Institute of Physics of the Earth of the Russian Academy of Science

The aim of the research is to study the influence of non-equidistance of row on the spectrum of studied magnitude and estimation of reliability of the result spectrum, depending on input data.

http://www.ivtn.ru/2005/biomedchem/enter/paper_e.php?p=310

СОДЕРЖАНИЕ**CONTENTS****ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В РЕШЕНИИ
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ НАУЧНЫХ ПРОБЛЕМ И ПРИКЛАДНЫХ ЗАДАЧ ХИМИИ,
БИОЛОГИИ, ФАРМАЦЕВТИКИ, МЕДИЦИНЫ****COMPUTER APPLICATIONS IN FUNDAMENTAL
AND APPLIED CHEMISTRY, BIOLOGY,
PHARMACEUTICS AND MEDICINE****СЕКЦИЯ 1**

Общие проблемы и перспективы использования информационных и компьютерных технологий в науке

SECTION 1

General problems and prospects of computer applications in science

8**СЕКЦИЯ 2**

Компьютерные вычисления, их организация (сети и параллельные вычисления)

SECTION 2

Computing and computing management (networks and parallel computation)

10**СЕКЦИЯ 3**

Моделирование, численные эксперименты

SECTION 3

Computer simulation

12**СЕКЦИЯ 4**

Визуализация в научных исследованиях

SECTION 4

Visualization in scientific researches

24**СЕКЦИЯ 5**

Обработка данных, базы данных, анализ данных

SECTION 5

Data processing, databases and data analysis

25**СЕКЦИЯ 6**

Интеллектуальные системы и технологии (принятие решений, экспертные системы и т.д.)

SECTION 6

Intelligence systems and technologies (decision-making, expert system etc.)

30**СЕКЦИЯ 7**

Оптимальные методы, планирование эксперимента

SECTION 7

Optimum procedures and design of experiments

32**СЕКЦИЯ 8**

Доклады, не вошедшие в основные секции

SECTION 8

The reports, which are not included in the basic sections

35

**ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В РЕШЕНИИ
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ И ПРИКЛАДНЫХ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ
ИССЛЕДОВАНИЯХ**

**COMPUTER APPLICATIONS IN FUNDAMENTAL
AND APPLIED PHYSICS**

СЕКЦИЯ 1

Общие проблемы и перспективы использования информационных и компьютерных технологий в науке

SECTION 1

General problems and prospects of computer applications in science 40

СЕКЦИЯ 2

Компьютерные вычисления, их организация (сети и параллельные вычисления)

SECTION 2

Computing and computing management
(networks and parallel computation) 42

СЕКЦИЯ 3

Моделирование, численные эксперименты

SECTION 3

Computer simulation 44

СЕКЦИЯ 4

Визуализация в научных исследованиях

SECTION 4

Visualization in scientific researches 50

СЕКЦИЯ 5

Обработка данных, базы данных, анализ данных

SECTION 5

Data processing, databases and data analysis 51

СЕКЦИЯ 6

Интеллектуальные системы и технологии (принятие решений, экспертные системы и т.д.)

SECTION 6

Intelligence systems and technologies (decision-making, expert system etc.) 52

СЕКЦИЯ 8

Доклады, не вошедшие в основные секции

SECTION 8

The reports, which are not included in the basic sections 53

ЗАЯВКА НА УЧАСТИЕ В РАБОТЕ ИВТН-2006

Для принятия участия в работе конференции заполните и направьте, пожалуйста, в оргкомитет ИВТН.ru форму заявки. Тезисы и/или расширенный доклад перешлите по адресу: org@ivtn.ru

Вы можете заполнить эту форму на сайте по адресу: <http://www.ivtn.ru/application.html>

Электронная Конференция	
Фамилия:	
Имя-Отчество:	
Организация:	
Подразделение: (факультет, отдел, лаборатория)	
Должность:	
Ученая степень:	
Телефон:	
Факс:	
E-mail:	
URL:	
Страна:	
Индекс:	
Почтовый адрес:	
Название доклада на русском языке:	
** Название доклада на английском языке:	
Соавторы:	
Тезисы доклада (имя файла):	
* Расширенный доклад (имя файла):	
Краткая аннотация на русском языке (не более 500 символов)	
** Краткая аннотация на английском языке (не более 500 символов)	

* Призами и дипломами будут отмечены работы участников, приславших расширенные доклады.

** Если у Вас возникнут трудности с переводом, оставьте в данном поле сообщение "трудности с переводом". Наши переводчики решат эту проблему.

Координаты организационного комитета: Тел./Факс: +7 095 995-8017, E-mail: org@ivtn.ru

IVTN-2006 APPLICATION FORM

For participating in conference you have to send the filled application form to IVTN.ru Organizing Committee.

Your theses and/or enlarged report please send by E-mail: org@ivtn.ru.

You can also fill the application form on web-site: http://www.ivtn.ru/application_e.html

Online Conference	
Surname:	
Name:	
Company/Organization:	
Department:	
Job position:	
Scientific degree:	
Phone:	
Fax:	
E-mail:	
URL:	
Country:	
Zip/Postal Code:	
Postal address:	
** Title of the report: (in Russian)	
Title of the report: (in English)	
Co-authors:	
Theses of the report: (file name)	
* Enlarged report: (file name)	
** Short abstract in Russian (no more than 500 symbols)	
Short abstract in English: (no more than 500 symbols)	

* The best reports will be awarded with prizes and diplomas, but it concerns only Enlarged Reports.

** If you will have some difficulties with translation, put in this field the message "difficulties with translation". Our translators will decide this problem.

Organizing committee coordinates: Tel./Fax: +7 095 995-8017, E-mail: org@ivtn.ru

**ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В РЕШЕНИИ
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ И ПРИКЛАДНЫХ НАУЧНЫХ ЗАДАЧ
Сессия ИВТН-2005**

**COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENTIFIC RESEARCHES
IVTN-2005 Session**

Сборник материалов
The Proceedings

Ответственные за выпуск

Компьютерная верстка: *Пшеничникова Н.*

Перевод: *Акулов А.*

Дизайн обложки: *Котельников Д.*

Редактор: *Габусу П.*

Editorial board

Make-up: *Pshenichnikova N.*

Translators: *Akulov A.*

Design: *Kotelnikov D.*

Editor: *Gabusu P.*