

ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В РЕШЕНИИ
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ
ПРОБЛЕМ И
ПРИКЛАДНЫХ
НАУЧНЫХ ЗАДАЧ



COMPUTER
APPLICATIONS
IN SCIENTIFIC RESEARCHES

**СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
ИВТН - 2003**

**PROCEEDINGS OF
THE IVTN - 2003**

В сборнике материалов ИВТН-2003 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 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.

**ГЛАВНЫЙ ОРГАНИЗАТОР
NC Group/НВК "ВИСТ"**

**СПОНСОРЫ
Корпорация AMD
Корпорация Oracle
Компания "Зенон Н.С.П."**

**ИНФОРМАЦИОННЫЕ СПОНСОРЫ
Агентство "ИнформНаука"
Издательство "Открытые системы"
Интернет-портал "www. Rusbiotech.ru"**

**MAIN ORGANIZER
NC Group/NVK "VIST"**

**SPONSORS
AMD Corporation
Oracle Corporation
Zenon N.S.P. Company**

**INFORMATION SPONSORS
Russian Science News Agency "InformNauka"
"Open Systems" publishing house
Internet-portal "Rusbiotech.ru"**

Организационный комитет выражает большую благодарность всем спонсорам ИВТН-2003

The Organizing committee thanks all the sponsors of the IVTN-2003

Руководитель проекта ИВТН.ru *Габусу Полина*
Исполнительный секретарь ИВТН.ru *Пивоварчук Елена*

IVTN.ru Project Leader *Gabusu Paulina*
IVTN.ru Executive Secretary *Pivovarchuk Elena*

© NC Group / НВК «Вист»
© NC Group / NVK «VIST»

Геометрические и энергетические параметры молекулярного комплекса $C_6H_6 \cdot N=C-C_4H_3O$	Просочкина Т.Р., Костин М.А., Шамсутдинова М.В., Кантор Е.А.		Тезисы
Гепатит С: молекулярно-биологические и медико-социальные аспекты проблемы. Общедоступный ресурс в Интернете	Степанчикова А.В., Соболев Б.Н., Колесанова Е.Ф., Оленина Л.В., Лагунин А. А., Николаева Л.И., Поройков В.В.	Расширенный доклад	Тезисы
Гидратационный микроскоп. интернет-ресурс для визуализации микроскопической структуры гидратации макромолекул	Тихонов Д.А., Павлышев С.В Павлов А.Н.	Расширенный доклад	
Интеграция информационных и вычислительных ресурсов в центре компьютерного обеспечения химических исследований ИОХ РАН	Кузьминский М.Б., Аникин Н.А., Мускатин А.Ю., Мендкович А.С.		Тезисы
Интернет-система: анализ работы и создание электронной конференции	Садым А.В., Лагунин А.А., Филимонов Д.А.	Расширенный доклад	Тезисы
Информационная система для обработки, накопления и статистического анализа изображений кровеносных сосудов	Миронов С.В., Дудкин К.Н., Шуваева В.Н.	Расширенный доклад	Тезисы
Информационно-вычислительные технологии в химии и химическом образовании. Принципы построения обучающих программ по квантовой химии	Зеленцов С.В.	Расширенный доклад	Тезисы
Использование искусственных нейронных сетей в цитогенетических исследованиях	Руанет В.В., Хетагурова А.К., Бадаева Е.Д.	Расширенный доклад	Тезисы
Исследование гидратации малых пептидов методами интегральных уравнений теории жидкостей. База данных по расчетам гидратации пептидов	Тихонов Д.А., Павлов А.Н., Тюльбашева Г.Э., Устинин М.Н., Лахно В.Д.	Расширенный доклад	
Исследование комплексообразования в системе медь(II) . аминокислоты методом анализа полной формы линии спектра ЭПР	Болотин С.Н., Крюкова Н.П., Стаценко О.В., Колечко Д.В., Панюшкин В.Т.	Расширенный доклад	Тезисы
Исследования по экистероидам: использование в медицине, Интернет-ресурсы, источники и биологическая активность	Тимофеев Н.П.	Расширенный доклад	Тезисы
К вопросу применения ВТ-методов при выработке рекомендаций для облегчения реальной реструктуризации предприятий	Семенова Д.А., Вовк О.С.		Тезисы
К основам кодирования в молекулярной биологии	Эйнгорин М.Я.	Расширенный доклад	Тезисы
Квантовохимическое исследование процесса адсорбции 2-бутин-1,4-диола на цинке	Макрушин Н.А., Медведев Г.И., Дубенков А.Н., Ларин Е.А., Ермаков А.И.	Расширенный доклад	
Квантовохимическое моделирование хемиллюминесцентного термоллиза диоксетанов и тетроксидов. Надежность полуэмпирических и неэмпирических расчетов	Васильев Р.Ф.	Расширенный доклад	Тезисы
Классификация алкалоидов с использованием геометрических и электронных параметров молекул	Погребняк А.В., Глушко А.А., Богдашев Н.Н.	Расширенный доклад	Тезисы
Комбинированный метод прогнозирования биологической активности на основе сравнительного анализа молекулярного поля и метода потенциальных функций (MSpace)	Погребняк А.В., Глушко А.А.	Расширенный доклад	Тезисы
Комбинированный подход к анализу биологической активности соединений	Гришина М.А., Потемкин В.А., Микушина К.М., Пожиленкова Г.В.	Расширенный доклад	Тезисы
Компьютерная цейтраферная видеосъемка фракции изолированных вакуолей	Нурминский В.Н., Корзун А.М., Розинов С.В., Салаяев	Расширенный доклад	Тезисы

**ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС УЧЕТА ВЛИЯНИЯ
ФОНОВЫХ ЭЛЕКТРОЛИТОВ НА КОНСТАНТЫ
УСТОЙЧИВОСТИ КОМПЛЕКСНЫХ СОЕДИНЕНИЙ С
ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕОРИИ СПЕЦИФИЧЕСКИХ
ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ (SIT) . АДАПТАЦИЯ
АНГЛИЙСКОЙ ВЕРСИИ**

Сухно И.В., Бузько В.Ю.

Кубанский государственный университет
Sukhno@chem.kubsu.ru

Осуществлена русскоязычная адаптация программного комплекса "Ionic Strength Corrections using Specific Interaction Theory" (L.Pettit, Academic Software, UK) под Windows 9x/NT/2000/XP. Программный комплекс позволяет рассчитывать ионные коэффициенты активности; конвертировать концентрации в моляльной и молярной шкалах; экстраполировать константы равновесий к нулевой ионной силе; оценивать параметры SIT комплексных соединений по экспериментальным данным

<http://www.ivtn.ru/2-session/enter/paper.phtml?r=7>

**SOFTWARE PACKAGE OF THE CALCULATION OF
THE ELECTROLYTE BACKGROUND INFLUENCE ON
THE STABILITY CONSTANTS BY SPECIFIC
INTERACTIONS THEORY (SIT) . RUSSIAN
ADAPTATION OF THE ENGLISH VERSION**

Sukhno I.V., Buzko V.Y.

Kuban State University
Sukhno@chem.kubsu.ru

The Russian adaptation of the software package "Ionic Strength Corrections using Specific Interaction Theory" (L.Pettit, Academic Software, UK) under Windows 9x/NT/2000/XP was carried out. The software package allows to calculate the ionic activity coefficients; to convert the concentration within molal and molar scales; to extrapolate the stability constants to zero ionic strength; to estimate the SIT-parameters of complex on experimental data

http://www.ivtn.ru/2-session/enter/paper_e.phtml?r=7

**ИССЛЕДОВАНИЯ ПО ЭКДИСТЕРОИДАМ:
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ В МЕДИЦИНЕ, ИНТЕРНЕТ-
РЕСУРСЫ, ИСТОЧНИКИ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ
АКТИВНОСТЬ**

Тимофеев Н.П.

КХ "Био"
timfbio@atnet.ru

Имеются различные возможности использования экдистероидов: 1) интеграция с современными компьютерными технологиями - в молекулярных системах переключения генов; 2) в качестве адаптогенных и иммуно-модулирующих средств. Химически изолированные экдистероиды востребованы главным образом в наукоемких исследованиях. В фармацевтической промышленности перспективны сложные составы Rhaponticum carthamoides, биологическая активность которых на 3-4 порядка выше изолированных экдистероидов (0,5-10 мкг/кг против 5-50 мкг/кг).

<http://www.ivtn.ru/2-session/enter/paper.phtml?r=63>

**RESEARCHES ON ECDYSTEROIDS: USE IN
MEDICINE, INTERNET - RESOURCES, ORIGIN
AND BIOLOGICAL ACTIVITY**

Timofeev N.P.

CF "BIO", с. Koryazhma
timfbio@atnet.ru

There are various possibility of use ecdysteroids: 1) integration with modern computer technologies - in molecular systems of switching of genes; 2) in quality adaptogens and immuno-modulating drugs. Chemically isolated ecdysteroids are claimed mainly in the high technology researches. In a farmaceutical industry complex compounds Rhaponticum carthamoides are perspective, which biological activity is higher 3-4 order isolated ecdysteroids (0,5-10 mkg/kg against 5-50 mg/kg).

http://www.ivtn.ru/2-session/enter/paper_e.phtml?r=63

**ИССЛЕДОВАНИЕ ГИДРАТАЦИИ МАЛЫХ
ПЕПТИДОВ МЕТОДАМИ ИНТЕГРАЛЬНЫХ
УРАВНЕНИЙ ТЕОРИИ ЖИДКОСТЕЙ. БАЗА
ДААННЫХ ПО РАСЧЕТАМ ГИДРАТАЦИИ ПЕПТИДОВ**

**Тихонов Д.А., Павлов А.Н., Тюльбашева Г.Э.,
Устинин М.Н., Лакно В.Д.**

Институт математических проблем биологии РАН

dimatikhonov@yandex.ru

Мы рассчитали гидратацию ряда малых пептидов (до 900 атомов) методами теории жидкостей в приближении RISM (Reference Interaction Site Model). В качестве силового поля использовался набор потенциалов CHARMM22, учитывающий взаимодействие всех атомов пептида с молекулами воды. Расчитаны термодинамические и структурные характеристики гидратации. По результатам расчетов создана WEB – база данных, которая содержит детальную информацию о рассчитанных корреляционных функциях и термодинамических величинах гидратации для каждого пептида. Имеются возможность трехмерной визуализации и анимации картины гидратации непосредственно в браузере с использованием MDL Chime plugin.

<http://www.ivtn.ru/2-session/enter/paper.phtml?r=32>

**STUDIES OF THE SMALL PEPTIDES HYDRATION BY
METHODS OF INTEGRAL EQUATION THEORY OF
LIQUIDS. PEPTIDES HYDRATION CALCULATIONS
DATABASE**

**Tikhonov D.A., Pavlov A.N., Tulbasheva G.E., Ustinin
M. N., Lakhno V.D.**

Institute of Mathematical Problems of Biology Russian
Academy of Sciences

dimatikhonov@yandex.ru

We have calculated the hydration of small peptides (up to 900 atoms each) by the method of integral equation theory of liquids in the RISM (Reference Interaction Site Model). The all-atom CHARMM22 parameter set was used as forcefield taking into account the interaction of all atoms of peptide with water atoms. As a result of calculations, the WEB database was created, containing detailed information about correlation functions and thermodynamical values of hydration for every peptide. It has a possibility of 3D visualization and animation of hydration picture directly in Internet browser, using MDL Chime plugin.

http://www.ivtn.ru/2-session/enter/paper_e.phtml?r=32

ИССЛЕДОВАНИЯ ПО ЭКИДИСТЕРОИДАМ: ИСПОЛЬЗОВАНИЕ В МЕДИЦИНЕ, ИНТЕРНЕТ-РЕСУРСЫ, ИСТОЧНИКИ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ

Тимофеев Н.П.

КХ "БИО"; Коряжма, Россия

Тимофеев Н.П.
КХ "БИО"
timfbio@atnet.ru

Изучение экидистероидов – направление биологии, открывающее широкий простор для фундаментальных исследований и прикладных разработок. Имеются различные возможности использования экидистероидов: 1) интеграция с современными компьютерными технологиями – в молекулярных системах переключения генов; 2) в качестве адаптогенных и иммуно-модулирующих средств. Наука по экидистероидам широко представлена в Интернете, включает исследования как проблем генетики, клеточной и молекулярной биологии, физиологии человека, животных и растений, так и коммерческие предложения, направленные на решение реальных задач в области химии, биотехнологии, фармакологии, медицины, энтомологии и ряда областей сельского хозяйства.

Результаты научных исследований последних 35 лет систематизированы и представлены в виде описаний статей из печатных изданий (abstract) на таких крупных серверах, как *Ingenta* (*ingenta.com*), *NCBI* (*ncbi.nlm.nih.gov*), *Synergy* (*blackwell-synergy.com*), *PubMed*, *Medline*, *BioMedNet* (*bmn.com*). Из российских Интернет-ресурсов достаточно много разнообразного материала сосредоточено на сервере *ЦНСХБ* (*Центральная научная сельскохозяйственная библиотека; cnsxb.ru*) – по разделам общей биологии, биохимии, физиологии растений, биотехнологии, ботанике, ветеринарии. В *РФФИ* (*Российский фонд фундаментальных исследований; elibrary.ru*) тема представлена весьма ограниченно, электронная библиотека практически не содержит ссылок по русскоязычным источникам, нет доступа к полным версиям документов. На сервере *ЦНМБ* (*Центральная научная медицинская библиотека; scsml.rssi.ru*) в режиме поиска не удалось найти источников по экидистероидам. База данных экидистероид содержащих растений, произрастающих во флоре Европейского Севера, приведена на сервере Института биологии Коми НЦ УрО РАН (<http://ib.komisc.ru/biochem/ecdysteroids>).

Исходя из происхождения, источники получения экидистероидов принято подразделять на фито-, зоо- и микоэкидистероиды (т.е растения, насекомые с ракообразными и нематодами, грибы). Зооэкидистероиды, в виду чрезвычайно низких уровней содержания в членистоногих, не могут служить источниками промышленного выделения. Ни в одном из млекопитающих видов экидистероиды не обнаружены. Искусственный химический синтез возможен только в отношении вторичных, биологически неактивных или малоактивных продуктов, путем химической трансформации основных экидистероидов.

Из всего многообразия экидистероидных молекул в организмах млекопитающих наиболее активны три – *ponasterone A*, *muristerone A* и *ecdysterone*. Структурные формулы их различаются только количеством и расположением гидроксильных ОН-групп. Первые два экидистероида нехарактерны для высших цветковых растений. *Ponasterone* встречается у отдельных представителей папоротникообразных (в т.ч. папоротник-орляк), грибов семейства *Paxillaceae* (свинуха толстая), а также выделен из реликтовых растений семейства подокарповых – *Podocarpaceae* и тисовых – *Taxaceae*. *Muristerone* обнаружен только у видов р. *Ipotoea* (вьюнок пурпурный). *Ecdysterone*, хотя и несколько менее активен, но распространен массово среди высших цветковых растений.

Последними исследованиями установлено, что практически все наземные и водные растения имеют гены синтеза экидистероидов. Различия в уровнях концентрации достигают огромных величин – 8-9 порядков (от 20-300 нг/кг до 20-30 г/кг). Обычное содержание составляет очень малую величину – сотые и тысячные доли процента от сухого веса. Но встречаются растения, у которых отдельные органы в узком возрастном и вегетационном диапазоне могут концентрировать значительные количества экидистероидов. В среднем один вид-сверхконцентратор приходится на несколько тысяч других видов. К числу

важнейших растений, служащими промышленными источниками получения экидистероидов, относятся *Rhaponticum carthamoides* (Willd.) Пјin – левзея сафлоровидная и *Serratula coronata* L. – серпуха венценосная.

Химически изолированные экидистероиды чрезвычайно дороги и востребованы главным образом в наукоемких исследованиях. При массовом использовании экидистероидов в фармацевтической промышленности перспективно использование сложных составов *Rhaponticum carthamoides*, не обладающих токсичностью и не требующих высокочрезвычайно затратных технологий переработки. Ведутся разработки нового класса фармпрепаратов с использованием надземных частей *Rhaponticum carthamoides*, выращиваемых по особой технологии в условиях агропопуляций. Биологическая активность лекарственного сырья, применяемого при их изготовлении, позволяет многократно снизить используемые в настоящее время дозы – на 3-4 порядка в расчете на *ecdysterone*. Например, эффективные дозы фармпрепарата “Биоинфузин” составляют 0,5-10,0 мкг/кг биомассы (10^{-12} - $2 \cdot 10^{-13}$ М) против 5-50 мг/кг химически изолированных экидистероидов.

Особенность механизма действия новых фармпрепаратов – стимулирующая активность малых и ингибирующее действие больших доз на пролиферативные процессы в организме. Даже однократное введение их способно вызвать существенный анаболический и иммуно-стимулирующий эффект на клеточном и гуморальном уровне. При 7-и дневном курсе применения достигается значительный иммуно-стимулирующий эффект последствия, который сохраняется на высоком уровне в течение 30 дней. Устойчивые результаты сопоставимых доз получены в экспериментах по биотестам, опытах с лабораторными животными и в условиях широкомасштабных производственных условий.