

«Утверждаю»

Заместитель директора
по научной работе

Т.О. Плешакова



Me

28 апреля 2024 г.

Календарный график и тематический план

Математическая биология, биоинформатика

2 семестр 2023-2024 учебного года

ЛЕКЦИИ

№	Тема	Лектор	Дата	Количество академических часов (лекций)	Место, время
1.	Экспериментальные и теоретические подходы к поиску и разработке лекарств. Выбор фармакотерапевтических целевых характеристик. Биохимический и фенотипический скрининг. Оценки фармакодинамических и фармакокинетических характеристик лекарственных-подобных соединений <i>in silico</i> . Виртуальный скрининг и конструирование фармакологических веществ с требуемыми свойствами.	д.б.н., проф. Чл.-корр. РАН Поройков В.В.	16.04.2024	2 часа	Компьютерный класс
2.	Структура белка. Методы получения трехмерной структуры белка. Визуализация белковых структур и комплексов. Банк данных пространственных структур белков PDB. Структура PDB файла.	Д.б.н. Веселовский А.В.	19.04.2024	2 часа	Компьютерный класс

3.	Инструменты для интерактивной визуализация белковых структур. Выявления сходных 3-мерных структур белков. Визуализация белковых структур и изучение свойств белковых молекул при помощи программы PyMol.	Д.б.н. Веселовски й А.В.	23/04.2024	2 часа	Компьютерны й класс
4.	Методы предсказания белковых структур по последовательностям аминокислот. Моделирование трехмерной структуры белка методом гомологического моделирования AlphaFold2.	Д.б.н. Веселовски й А.В.	26.04.2024	2 часа	Компьютерны й класс
5.	3D методы в конструировании лекарств на основе структуры лигандов. Фармакофорная модель. 3D-QSAR.	Д.б.н. Веселовски й А.В.	08.05.2024	2 часа	Компьютерны й класс
6.	Анализ белок-лигандного взаимодействия методами молекулярного моделирования. Модели комплексов, силы, участвующие в связывании лигандов, термодинамика и кинетика процесса	Д.б.н. Веселовски й А.В.	14.05.2024	2 часа	Компьютерны й класс
7.	Поиск и конструирование новых лигандов. Молекулярный докинг, конструирование <i>de novo</i> , оптимизация лигандов.	Д.б.н. Веселовски й А.В.	17.05.2024	2 часа	Компьютерны й класс
8.	Моделирование молекулярной динамики, что из нее можно получить	Д.б.н. Веселовски й А.В.	21.05.2024	2 часа	Компьютерны й класс
9.	Коллекции и корпуса текстов. Принципы работы с корпусами	К.б.н. Тарасова О.А.	24.05.2024	2 часа	Компьютерны й класс

	CHEMDNER, CHEMPROT. Корпусы DRUGPROT, GENETAG. Инструменты токенизации. Классификация токенов по принадлежности частям речи. Лемматизация. Python NLTK.				
10	Представление текста для распознавания наименований биологических и химических объектов. N-граммы. Векторное представление текста. One hot encoding. Word embeddings. Python Keras, Gensim. Lingpipe 4.1.2. KNIME text classifier. KNIME text processing.	К.б.н. Тарасова О.А.	28.05.2024	2 часа	Компьютерный класс
11	Предварительная обработка данных о структуре и биологической активности химических соединений в ходе формирования обучающих выборок для (Q)SAR моделирования на примере данных ChEMBL.	К.б.н. Погодин П.В.	31.05.2024	2 часа	Компьютерный класс
12	Машинное обучение. Задача классификации. Одно, двух и многоклассовая классификация. Алгоритмы классификации: деревья решений, Random Forests, наивный Байесовский классификатор, на основе сходства объектов, сходство последовательностей. Метод опорных векторов. Критерии	К.ф.-м.н. Филимонов Д.А.	04.06.2024	2 часа	Компьютерный класс

	качества классификации.				
13	Регрессия, непараметрическая и параметрическая, линейная и нелинейная. Логистическая и мультиномиальная логистическая регрессия. Восстановление зависимостей по эмпирическим данным, методы регуляризации. Самосогласованная регрессия и классификация. Критерии качества зависимостей.	К.ф.-м.н. Филимонов Д.А	07.04.2024	2 часа	Компьютерны й класс
14	Искусственные нейронные сети. Обучение без учителя. Кластеризация. Топологические карты. Валидация результатов машинного обучения.	К.ф.-м.н. Филимонов Д.А	11.06.2024	2 часа	Компьютерны й класс
15	Прогнозирование метаболизма ксенобиотиков <i>in silico</i> .	К.б.н. Рудик А.В.	14.06.2024	2 часа	Компьютерны й класс
16	Оценка межлекарственного взаимодействия <i>in silico</i> .	К.б.н. Дмитриев А.В..	18.06.2024	2 часа	Компьютерны й класс
17	Анализ регуляторных сигнальных сетей с целью выявления наиболее перспективных фармакологических мишеней и оценки фармакотерапевтически х и нежелательных побочных эффектов.	К.б.н. Иванов С.М.	21.06.2024	2 часа	Компьютерны й класс
18	Репозиционирование лекарств.	д.б.н., проф. Чл.-корр. РАН Поройков В.В.	25.06.2024	2 часа	Компьютерны й класс

СЕМИНАРЫ

№	Тема	Лектор	Дата	Количество академических часов (лекций)	Место, время
1.	Построение моделей с применением (1) наивного байесовского классификатора, (2) условных случайных полей (conditional random fields), (3) искусственных нейронных сетей и глубокого обучения для распознавания наименований химических соединений с применением корпусов CHEMDNER, CHEMPROT. Оценка точности моделей для распознавания наименований биологических и химических объектов методами пятикратной кросс-валидации, перекрестной валидации с исключением по одному	К.б.н. Тарасова О.А.	29.05.2024	4 часа	Компьютерный класс
2.	Представление текста для распознавания наименований биологических и химических объектов. N-граммы. Векторное представление текста. One hot encoding. Word embeddings. Python Keras, Gensim. Lingpipe 4.1.2. Knime text classifier. Knime text Proctssing	К.б.н. Тарасова О.А.	05.06.2024	4 часа	Компьютерный класс
3.	Построение моделей с применением (1) наивного байесовского классификатора. (2) условных случайных полей (conditional random fields),(3)	К.б.н. Тарасова О.А.	19.06.2024	4 часа	

	искусственных нейронных сетей и глубокого обучения для распознавания наименований химических соединений с применением корпусов CHEMDNER, CHEMPROT. Оценка точности для распознавания наименований биологических и химических объектов методом пятикратной кросс-валидации. Перекрестной валидации с исключением по одному.				
--	--	--	--	--	--

Аспиранты

Сухачев Владислав Сергеевич
withstanding@yandex.ru

Лекторы:

Поройков Владимир Васильевич
vladimir.poroikov@ibmc.msk.ru; vvp1951@yandex.ru

Веселовский Александр Владимирович
veselov@ibmh.msk.su

Тарасова Ольга Александровна
olga.a.tarasova@gmail.com; fioland@yandex.ru;

Погодин Павел Викторович
pogodinpv@gmail.com;

Филимонов Дмитрий Александрович
dmitry.filimonov@ibmc.msk.ru; Dmitry.Alekseevich.Filimonov@gmail.com;

Рудик Анастасия Владимировна
rudik_anastassia@mail.ru;

Дмитриев Александр Викторович

a.v.dmitriev@mail.ru;

Иванов Сергей Михайлович

smivanov7@gmail.com; sergey.ivanov@ibmc.msk.ru