

УТВЕРЖДАЮ

Заместитель директора  
по научной работе



Т.О. Плешакова

2026 г.

**Календарный график и тематический план по  
математической биологии, биоинформатике**

4 семестр 2025-2026 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.	08.04.2026	2 часа	Компьютерный класс
2.	Структура белка. Методы получения трехмерной структуры белка. Визуализация белковых структур и комплексов. Банк данных пространственных структур белков PDB.	Д.б.н. Веселовский А.В.	17.04.2026	2 часа	Компьютерный класс

	Структура PDB файла.				
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. Веселовский А.В.	21.04.2026	2 часа	Компьютерный класс
4.	Методы предсказания белковых структур по последовательностям аминокислот. Моделирование трехмерной структуры белка методом гомологического моделирования AlphaFold2.	Д.б.н. Веселовский А.В.	24.04.2026	2 часа	Компьютерный класс
5.	3D методы в конструировании лекарств на основе структуры лигандов. Фармакофорная модель. 3D-QSAR.	Д.б.н. Веселовский А.В.	28.04.2026	2 часа	Компьютерный класс
6.	Анализ белок-лигандного взаимодействия методами молекулярного моделирования. Модели комплексов, силы, участвующие в связывании лигандов, термодинамика и кинетика процесса	Д.б.н. Веселовский А.В.	05.05.2026	2 часа	Компьютерный класс
7.	Поиск и конструирование новых лигандов. Молекулярный докинг, конструирование <i>de novo</i> , оптимизация лигандов.	Д.б.н. Веселовский А.В.	08.05.2026	2 часа	Компьютерный класс
8.	Моделирование молекулярной динамики, что из нее можно получить	Д.б.н. Веселовский А.В.	12.05.2026	2 часа	Компьютерный класс
9.	Коллекции и корпуса текстов. Принципы	К.б.н. Тарасова	15.05.2026	2 часа	Компьютерный класс

	<p>работы с корпусами CHEMDNER, CHEMPROT. Корпусы DRUGPROT, GENETAG. Инструменты токенизации. Классификация токенов по принадлежности частям речи. Лемматизация. Python NLTK.</p>	О.А.			
10	<p>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.</p>	К.б.н. Тарасова О.А.	19.05.2026	2 часа	Компьютерный класс
11	<p>Предварительная обработка данных о структуре и биологической активности химических соединений в ходе формирования обучающих выборок для (Q)SAR моделирования на примере данных ChEMBL.</p>	К.б.н. Погодин П.В.	22.05.2026	2 часа	Компьютерный класс
12	<p>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</p>	К.ф.-м.н. Филимонов Д.А.	26.05.2026	2 часа	Компьютерный класс

	векторов. Критерии 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	29.05.2026	2 часа	Компьютерный класс
14	Искусственные нейронные сети. Обучение без учителя. Кластеризация. Топологические карты. Валидация результатов машинного обучения.	К.ф.-м.н. Филимонов Д.А	02.06.2026	2 часа	Компьютерный класс
15	Прогнозирование метаболизма ксенобиотиков <i>in silico</i> .	К.б.н. Рудик А.В.	05.06.2026	2 часа	Компьютерный класс
16	Оценка межлекарственного взаимодействия <i>in silico</i> .	К.б.н. Дмитриев А.В..	09.06.2026	2 часа	Компьютерный класс
17	Анализ регуляторных сигнальных сетей с целью выявления наиболее перспективных фармакологических мишеней и оценки фармакотерапевтических и нежелательных побочных эффектов.	К.б.н. Иванов С.М.	11.06.2026	2 часа	Компьютерный класс
18	Репозиционирование лекарств.	д.б.н., проф. Чл.-корр. РАН Поройков В.В.	16.06.2026	2 часа	Компьютерный класс