

Математика в биологии

Ларюшкин Денис Павлович:
ИБК РАН, ИТЭБ РАН, Школа 3, MS&DECISIONS

Чем мы сегодня займемся?

Мы постараемся ответить на следующие вопросы:

1. Что такое вычислительная биология?
2. Где она применима или кто этим занимается?
3. Что ждет будущие науки?

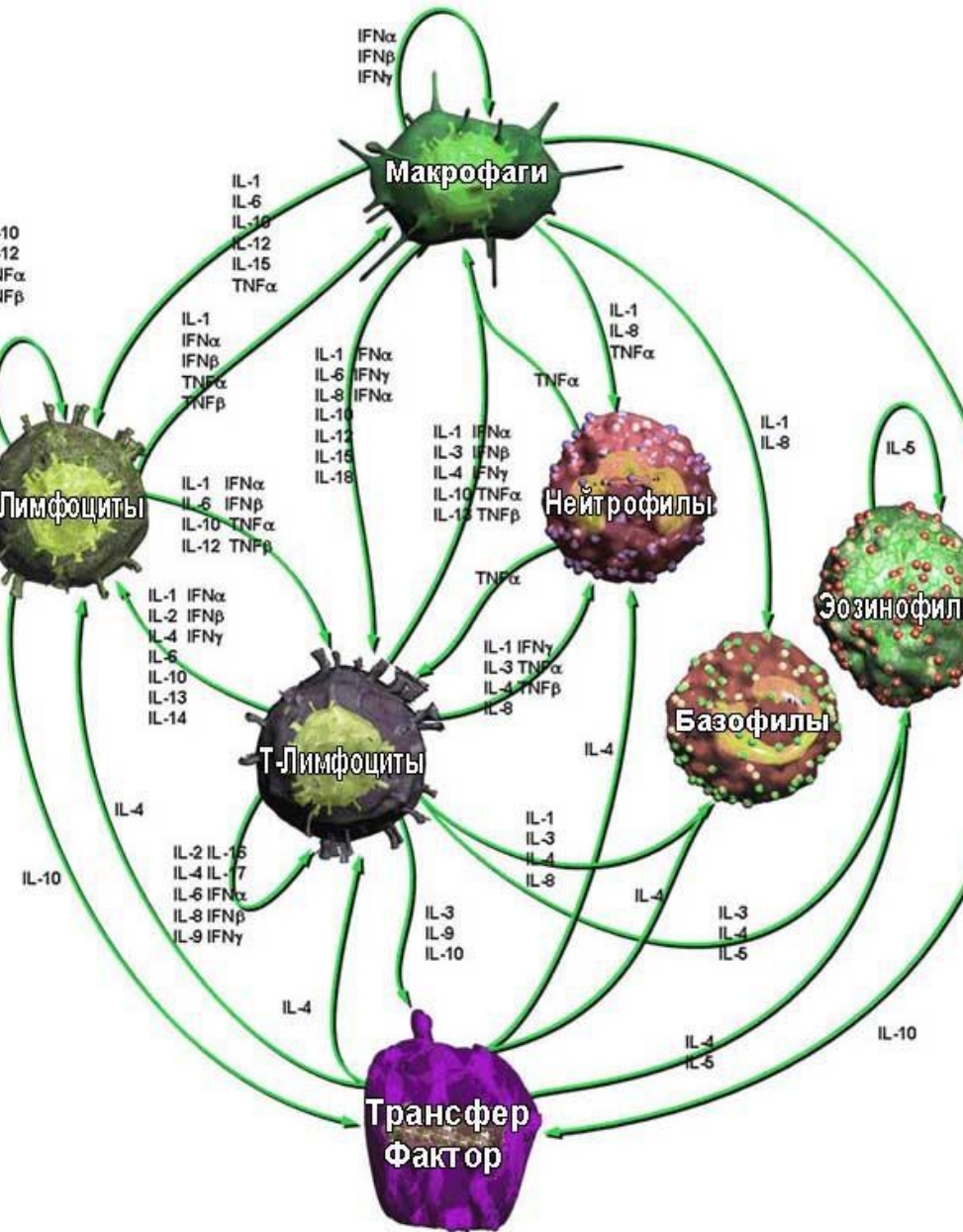
Но сначала ...



..... Сначала

Скажите, а что
знаете о
математике в
биологии?

Вычислительная биология или к чему приводят **ошибки**?

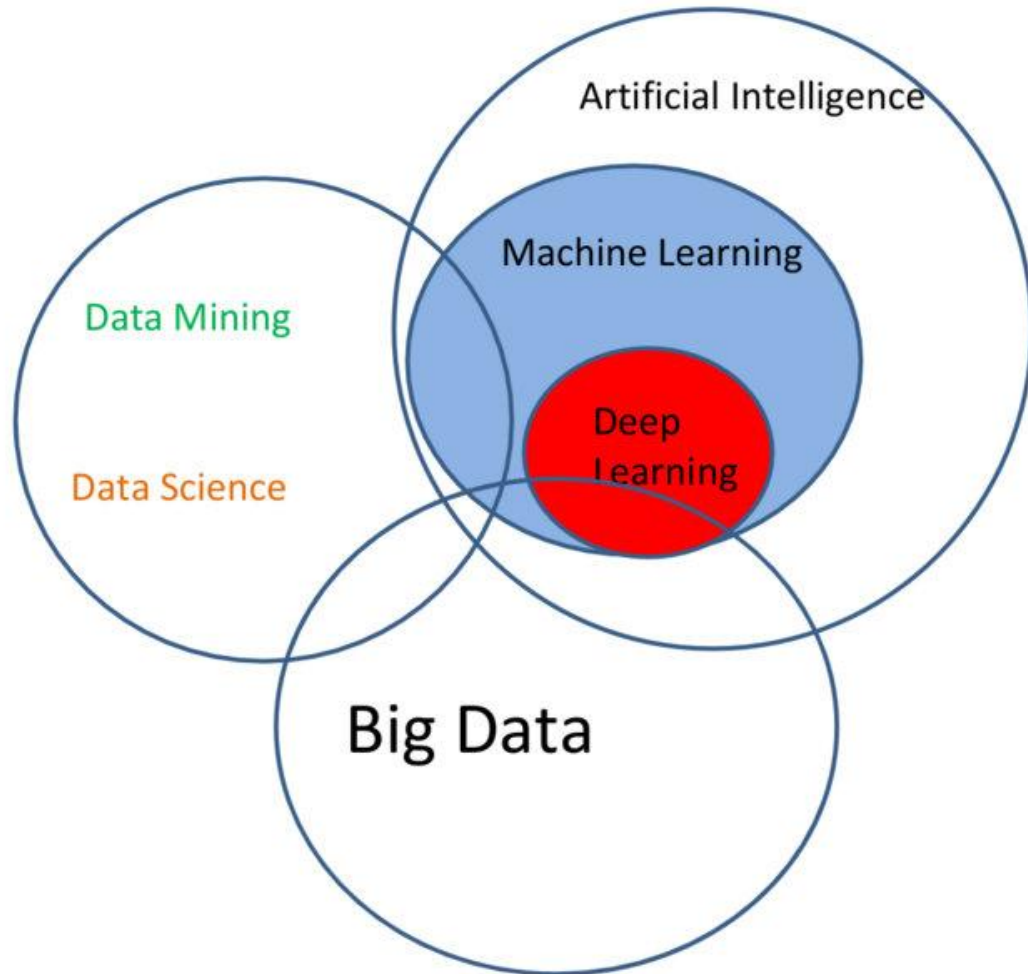


- *0.00001*
- *0.000001*



Без чего не обойдется ни одна крупная фармкомпания

Чем занимаюсь я?

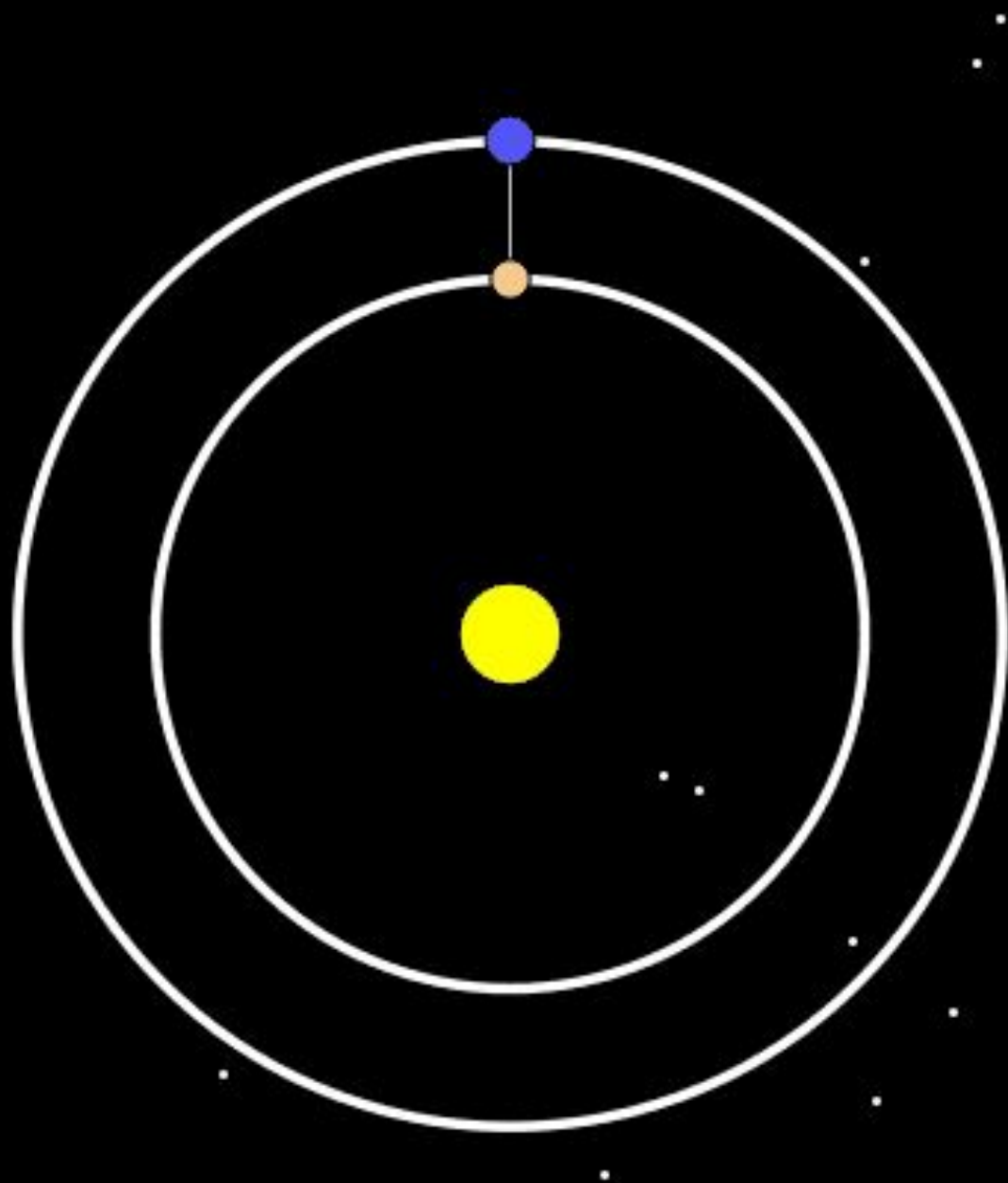


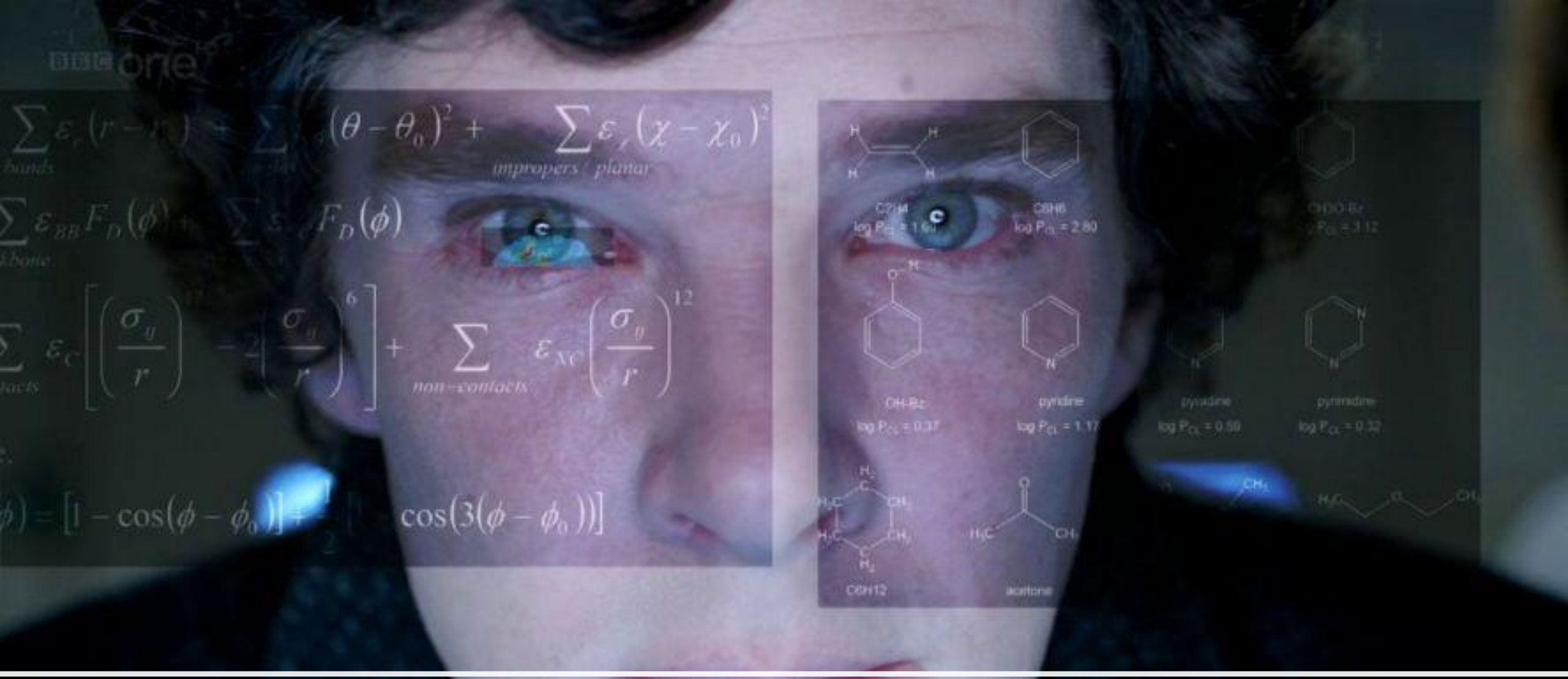
$$+IIN+IH+INa+ISK+IBK+Ileak+mu)/C;$$

- $dxdt(2)=(mA8-mA)/tmA;$
- $dxdt(3)=(hA8-hA)/thA;$
- $dxdt(4)=(n8-n)/tn;$
- $dxdt(5)=(mT8-mT)/tmT;$
- $dxdt(6)=(hT8-hT)/thT;$
- $dxdt(7)=(mL8-mL)/tmL;$
- $dxdt(8)=(hL8-hL)/thL;$
- $dxdt(9)=(mN8-mN)/tmN;$
- $dxdt(10)=(hN8-hN)/thN;$
- $dxdt(11)=(mBK8-mBK)/tmBK;$
- $dxdt(12)=(mSK8-mSK)/tmSK;$
- $dxdt(13)=(mH8-mH)/tmH;$
- $dxdt(14)=(mNa8-mNa)/tmNa;$
- $dxdt(15)=(hNa8-hNa)/thNa;$
- $dxdt(16)=-CSF/2/F/v*(IL+IN)*(1-PB)-Ks*Cai/(Cai+Km);$

Пара примеров:







$$\sum_{\text{bonds}} \epsilon_r (r - r_0)^2 + \sum_{\text{impropers/planar}} \epsilon_r (\chi - \chi_0)^2$$
$$\sum_{\text{contacts}} \epsilon_{BB} F_D(\phi) + \sum_{\text{non-contacts}} \epsilon_{XC} \left(\frac{\sigma_y}{r} \right)^6 + \sum_{\text{non-contacts}} \epsilon_{XC} \left(\frac{\sigma_y}{r} \right)^{12}$$
$$V(\phi) = \left[1 - \cos(\phi - \phi_0) \right]^2 + \left[1 - \cos(3(\phi - \phi_0)) \right]^2$$



Так, что же такое вычислительная биология?

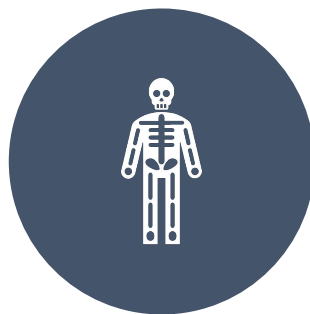
Где это
востребовано
?



ИССЛЕДОВАНИЕ И
ПОСТРОЕНИЕ
МОДЕЛЕЙ



ФАРМАКОЛОГИЯ



РЕГУЛЯТОРНЫЕ
ОРГАНЫ



ТЕХ.ПОДДЕРЖКА

Что ждет науку в будущем?



Но без вычислительных экспериментов она
не обойдется

Спасибо за внимание!