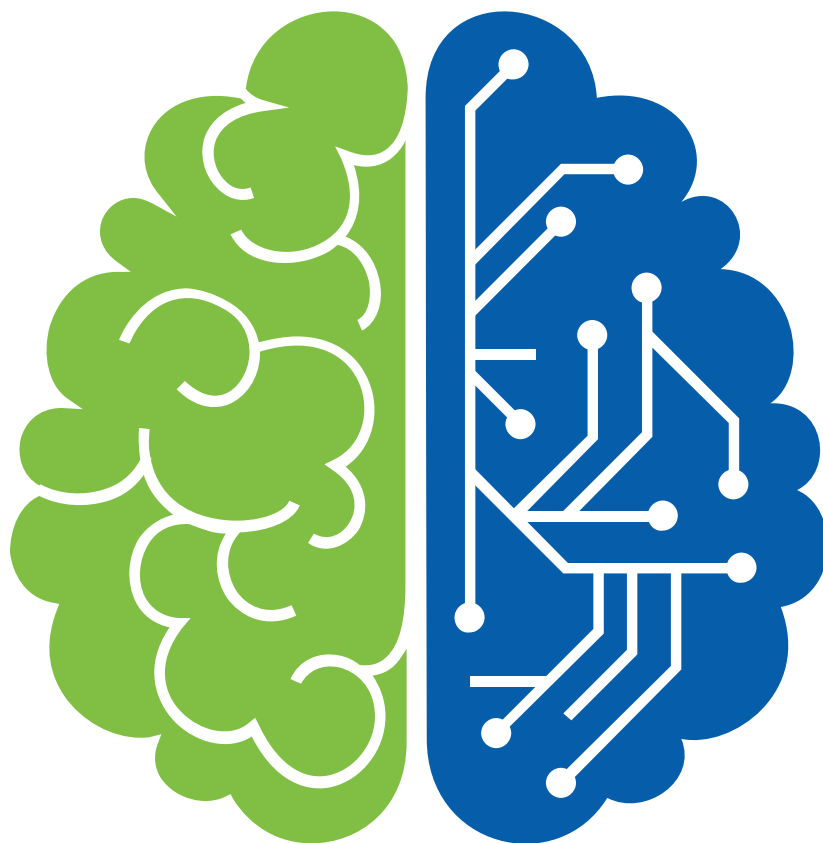




РЕГИОНАЛЬНЫЙ
НАУЧНО-
ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЙ
МАТЕМАТИЧЕСКИЙ
ЦЕНТР



ТОМСКИЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ



МАТЕМАТИКА В МЕДИЦИНЕ

28-29 мая 2021 г.
г. Томск

Научная конференция «Математика в медицине» организована Томским политехническим университетом (ТПУ) и Региональным научно-образовательным математическим центром Томского государственного университета (НОМЦ ТГУ).

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

А.Ю. Веснин	д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН, директор НОМЦ ТГУ;
М.А. Гузев	д.ф.-м.н., академик, директор Института прикладной математики ДВО РАН;
И.А. Тайманов	д.ф.-м.н., академик, заведующий лабораторией Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН;
М.Е. Трусова	д.х.н., директор ИШХБМТ ТПУ;
Е.Л. Чойнзонов	д.м.н., академик, директор НИИ онкологии Томского НИМЦ;
М.С. Юсубов	д.х.н., проректор по науке ТПУ;
А.А. Яковлев	д.ф.-м.н., врио ректора ТПУ.

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

А.А. Барт	к.ф.-м.н., заместитель декана ММФ ТГУ;
Л.В. Гензе	к.ф.-м.н., декан ММФ ТГУ;
Т.А. Козловская	к.ф.-м.н., старший научный сотрудник НОМЦ ТГУ;
М.А. Морозова	к.х.н., эксперт ОО ИШХБМ;
А.С. Челнокова	инженер НОМЦ ТГУ.

В программу конференции включены доклады, принятые программным комитетом для участия в научной конференции «Математика в медицине».

Конференция и издание сборника поддержаны в рамках программы развития ТПУ и программы развития НОМЦ ТГУ.

Web-сайт: <http://mim.rmc.math.tsu.ru/>

E-mail: morozovama@tpu.ru

Телефон: +7-913-846-41-12

© Национальный исследовательский Томский государственный университет, 2021

© Национальный исследовательский Томский политехнический университет, 2021

© Авторы статей, 2021

ПРОГРАММА КОНФЕРЕНЦИИ

28 мая 2021г. Конференц-зал МКЦ ТПУ (ул. Усова, 13В) Трансляция: https://youtu.be/vXds9_Qmygw		
9:00–9:15	Регистрация участников	
9:15–9:30	Открытие. Вступительное слово врио ректора ТПУ А.А. Яковлева и директора НОМЦ ТГУ А.Ю. Веснина	
Время	Докладчик	Председатель
9:30–10:00	Гузев Михаил Александрович Исторические сюжеты моделей в эпидемиологии	Михаил Александрович Гузев
10:00–10:30	Шишленин Максим Александрович Обратные задачи в медицинской акустической томографии	
10:30–11:00	Криворотько Ольга Игоревна Моделирование и построение сценариев развития эпидемии COVID-19 в регионах Российской Федерации в условиях карантинных мер	
11:00–11:30	Кофе-брейк	
11:30–12:00	Старченко Александр Васильевич Применение некоторых математических методов при решении задачи электроимпедансной томографии	Михаил Александрович Гузев
12:00–12:30	Чудновский Владимир Михайлович Фундаментальные аспекты перспективных лазерных медицинских технологий	
12:30–13:00	Абушкин Иван Алексеевич Технологии лазерно-индуцированного кипения в хирургии	
13:00–14:30	Обед	
14:30–15:00	Подольский Владимир Евгеньевич Математические задачи и методы в инструментальной интраоперационной тактильной диагностике	Искандер Асанович Тайманов
15:00–15:30	Василевский Юрий Викторович Персонализированная вычислительная гемодинамика	
15:30–16:00	Романюха Алексей Алексеевич Агентный подход к моделированию эпидемических процессов	
16:00–16:30	Кофе-брейк	

16:30–17:00	Паршин Даниил Васильевич Математическое моделирование гемодинамики и реологии кровеносных сосудов головного мозга	Искандер Асанович Тайманов
17:00–17:30	Чернов Андрей Александрович Особенности роста парового пузырька при лазерном воздействии на биологическую жидкость	
29 мая 2021г. Конференц-зал МКЦ ТПУ (ул. Усова, 13В) Трансляция: https://youtu.be/rXbogaFbiNw		
9:00–9:25	Бразовский Константин Станиславович Численное исследование и прогнозирование иммуностимулирующей активности биомолекул природного происхождения	Константин Станиславович Бразовский
9:25–9:50	Андрюков Константин Вячеславович Регрессионный анализ в изучении количественной зависимости «структура-активность» производных антраниловой кислоты	
9:50–10:20	Громов Василий Александрович Применение методов анализа формальных понятий для анализа временных рядов тока крови для гемодиализных больных	
10:20–10:40 <i>online</i>	Кабаев Евгений Михайлович Совместная обработка данных Con-trex и снимков МРТ для целей эффективной послеоперационной реабилитации	
10:40–11:10	Кофе-брейк	
11:10–11:40	Молочков Александр Валентинович Нелинейная динамика протеинов: калибровочная симметрия и топология	Константин Станиславович Бразовский
11:40–12:05	Сурменева Мария Александровна Экспериментальное изучение механического поведения ячеистых металлоконструкций медицинского назначения и сравнение полученных результатов с результатами компьютерного моделирования напряженно-деформационного состояния	
12:05–12:30	Бразовская Наталия Георгиевна Постановка задач и подготовка данных для статистического моделирования при построении прогнозных моделей течения и исхода заболеваний	

12:30–12:50 <i>online</i>	Иванов Федор Федорович Обоснование применения виртуальных контейнеров при создании медицинских информационных систем на примере системы сбора флебологических данных	
12:50–14:00	Обед	
14:00–14:30 <i>online</i>	Поройков Владимир Васильевич Компьютерная оценка спектров биологической активности фармакологических веществ	Ольга Михайловна Гергет
14:30–14:50	Грубова Ирина Юрьевна Первопринципное моделирование физико-механических свойств сплава с эффектом памяти формы системы Ti-Nb	
14:50–15:10	Попов Александр Сергеевич Применение нейронных сетей при диагностике заболеваний	
15:10–15:30 <i>online</i>	Вольф Данияр Александрович Оценка ВМІ интерфейса	
15:30–16:00	Кофе-брейк	
16:00–16:30 <i>online</i>	Сарьян Вильям Карпович Организация междисциплинарных исследований студентов различных факультетов университета на примере направлений медицины и математики	Ольга Михайловна Гергет
16:30–16:50	Овчаренко Евгений Андреевич Концепция роботизированного малоинвазивного протезирования клапана аорты	
16:50–17:10 <i>online</i>	Урманцева Нелли Руслановна Проблемы применения искусственных нейронных сетей в решении задачи диагностики хронических заболеваний вен (ХЗВ) по фотографиям нижних конечностей пациента	
17:10–17:30 <i>online</i>	Кенц Анжелика Станиславовна Геометрических анализ текстурных особенностей снимков КТ легких с COVID-19 для ранней диагностики осложнений (фиброз)	

АННОТАЦИИ ДОКЛАДОВ



ИСТОРИЧЕСКИЕ СЮЖЕТЫ МОДЕЛЕЙ В ЭПИДЕМИОЛОГИИ

Гузов Михаил Александрович

*академик, д.ф.-м.н., Институт прикладной
математики ДВО РАН, Владивосток*

В докладе представлена краткая история формирования некоторых аспектов математических моделей в эпидемиологии.



ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ В МЕДИЦИНСКОЙ АКУСТИЧЕСКОЙ ТОМОГРАФИИ

Шишленин Максим Александрович

*д.ф.-м.н., Институт вычислительной математики и
математической геофизики СО РАН, Новосибирск*

В докладе будут рассмотрены обратные задачи для двумерной гиперболической системы акустики. Коэффициентная обратная задача заключается в определении плотности среды, скорости распространения звука и акустического затухания в среде и сводится к задаче минимизации целевого функционала градиентным методом. Задача моделирования диаграмм направленности источников волн формулируется как задача управления. Приведены результаты численных расчетов.



**МОДЕЛИРОВАНИЕ И ПОСТРОЕНИЕ
СЦЕНАРИЕВ РАЗВИТИЯ ЭПИДЕМИИ COVID-
19 В РЕГИОНАХ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
В УСЛОВИЯХ КАРАНТИННЫХ МЕР**

Криворотько Ольга Игоревна

*к.ф.-м.н., Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН, Новосибирск*

Соавторы: С.И. Кабанихин, М.И. Сосновская,
И.А. Ващенко, М.А. Шишленин

В работе построены и проанализированы две математические модели распространения новой коронавирусной инфекции, вызванной вирусом SARS-CoV-2, для Новосибирской, Томской, Омской областей и Алтайского края на основе решения задач идентификации неизвестных параметров по дополнительной информации о количестве ежедневно выявленных, протестированных и умерших случаев.

Первая модель SEIR-типа описывается системой из 7 обыкновенных дифференциальных уравнений, в которой вся популяция разделена на 7 групп: восприимчивые, инфицированные с симптомами и без, госпитализированные, критические, выздоровевшие и умершие, связанных между собой вероятностями перехода (коэффициенты модели) [1]. Задача определения неизвестных 8 параметров (5 коэффициентов и 3 начальных условия) по дополнительным измерениям количества выявленных и умерших случаев была сведена к задаче минимизации целевого квадратичного функционала, которая в свою очередь была решена методом Парзеновских оценок в комбинации с градиентными методами. Была получена формула градиента целевого функционала, связанного с решением соответствующей сопряженной задачи. В рамках данной модели не учитывались возраст, вакцинация, карантинные меры (закрытие школ, ношение масок, массовые мероприятия) за исключением самоизоляции граждан. Смоделированы основные пики заболеваемости COVID-19 и поведение кривой выявленных случаев в регионах РФ.

Вторая агентно-ориентированная модель основана на случайных графах, соединяющих агентов в структуре модели (домохозяйства, учебные заведения, рабочие и публичные места) согласно их возрасту, эпидемиологическому статусу, пребыванию на карантине и др. [2-3] В рамках данной модели были восстановлены 4 неизвестных параметра (контагиозность и время изменения, начальное количество инфицированных, параметр тестирования) на каждом временном промежутке, согласованном с ограничительными мерами в регионах по дополнительным измерениям количества ежедневно выявленных, протестированных и умерших случаев. Проведен анализ идентифицируемости агентной модели и уточнены границы неизвестных параметров. Задача уточнения параметров была сведена к задаче минимизации целевого функционала, которая была решена методами, указанными выше. Модель верифицирована на исторических данных по количеству выявленных случаев. Построены сценарии развития эпидемии в регионах при введении и снятии ограничений. Проведено качественное сравнение двух моделей и обозначено область применимости.

Работа частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований и Лондонским Королевским Обществом (проект № 20-51-10003) и грантом Президента Российской Федерации (МК-4994-2021.1).

Литература:

[1] Krivorotko O.I., Kabanikhin S.I., Zyat'kov N.Yu., Prikhod'ko A.Yu., Prokhoshin N.M., Shishlenin M.A. Mathematical modeling and forecasting of COVID-19 in Moscow and Novosibirsk region. *Numer. Analysis Applications*. 13(4): 332-348 (2020). DOI 10.1134/S1995423920040047.

[2] Kerr C., Stuart R., Mistry D., Abeysuriya R., Hart G., Rosenfeld K., Selvaraj P., Nunez R., Hagedorn B., George L., Izzo A., Palmer A., Delport D., Bennete C., Wagner B., Chang S., Cohen J., Panovska-Griffiths J., Jastrzebski M., Oron A., Wenger E., Famulare M., Klein D.: Covasim: an agent-based model of COVID-19 dynamics and interventions. *Medverix* (2020). 10.1101/2020.05.10.20097469

[3] Krivorotko O.I., Kabanikhin S.I., Sosnovskaya M.I., Andornaya D.V. Sensitivity and identifiability analysis of COVID-19 pandemic models. *Vavilov journal of genetics and breeding*. 25(1): 82-91 (2021). DOI 10.18699/VJ21.010



**ПРИМЕНЕНИЕ НЕКОТОРЫХ
МАТЕМАТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ПРИ
РЕШЕНИИ ЗАДАЧИ ЭЛЕКТРОИМПЕДАНСНОЙ
ТОМОГРАФИИ**

Старченко Александр Васильевич

*д.ф.-м.н., Томский государственный
университет, Томск*

Электроимпедансная томография (ЭИТ) – это перспективный неинвазивный метод визуализации в медицинской томографии. Метод ЭИТ восстанавливает неизвестное распределение или оценивает несколько параметров электрической проводимости внутри объекта, если измерено электрическое напряжение или сила тока на его границе. При реконструкции внутренней структуры объекта часто необходимо решать последовательность прямых задач ЭИТ: по известному распределению электрической проводимости и напряжения или ток на границе получить поле электрического потенциала.

В докладе представлены аналитические и численные методы на неструктурированных сетках для решения прямых задач ЭИТ, применение некоторых методов машинного обучения для обратных задач ЭИТ.



**ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ АСПЕКТЫ
ПЕРСПЕКТИВНЫХ ЛАЗЕРНЫХ
МЕДИЦИНСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ
Чудновский Владимир Михайлович**

*д.б.н., Тихоокеанский океанологический институт
им. В. И. Ильичева ДВО РАН, Владивосток*

Соавтор: М.А. Гузев

Медицинские манипуляции, основанные на использовании физических явлений и закономерностей, становятся медицинскими технологиями, когда могут быть воспроизводимы независимо от личностных характеристик автора. Это возможно, если медицинские методики допускают формальное описание и инженерную реализацию. В докладе обсуждаются проблемы подхода к реализации лазероиндуцированных медицинских технологий. С физической точки зрения в них используется явление недогретого кипения, которое сопровождается генерацией затопленных струй биологической жидкости. Рассматриваемая технология относится к категории «тепловых», поскольку нагретая до температуры насыщения (кипения) биологическая жидкость в струях эффективно нагревает интиму и стенки патологически изменённых органов, приводя к их последующей физиологической деградаци и устранению. Явление «струйного кипения», возникающее на лазерном нагревательном элементе, обнаружено сравнительно недавно, поэтому в полной мере его описание не представлено в научной литературе и требует дальнейшего внимательного изучения. Тем не менее, практическое применение данного явления в медицине дает возможность проведения хирургического лечения широкого круга сосудистых заболеваний, в частности, сосудистых мальформаций, геморроя, варикозной болезни, гемангиом, кист и других распространённых заболеваний.

**ТЕХНОЛОГИИ ЛАЗЕРНО-
ИНДУЦИРОВАННОГО КИПЕНИЯ
В ХИРУРГИИ**



Абушкин Иван Алексеевич

*д.м.н., Южно-Уральский государственный
медицинский университет, Челябинск*

Соавторы: Д.Н. Моренко, В.И. Юсупов,
Ю.П. Пахалюк, М.А. Гузев, В.М. Чудновский

Появление оптоволоконных лазерных аппаратов с излучением длиной волны 1,5-1,9 мкм, хорошо поглощаемым водой, и их использование в клинике врачами различных хирургических специальностей, позволило по-новому взглянуть на процессы взаимодействия такого излучения на биологические ткани. Было установлено, что одним из основных механизмов возникновения тепла и его передачи тканям является лазериндуцированное кипение. Особенностью такого кипения является формирование затопленных струй разогретой жидкости. На большом экспериментальном и клиническом материале в работе будут представлены медицинские технологии, основанные на эффекте лазериндуцированного кипения, и их возможности в лечении варикозного расширения вен нижних конечностей, геморроя, различных сосудистых аномалий, кист и свищей различной локализации.

**МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ЗАДАЧИ И МЕТОДЫ В
ИНСТРУМЕНТАЛЬНОЙ
ИНТРАОПЕРАЦИОННОЙ ТАКТИЛЬНОЙ
ДИАГНОСТИКЕ**



Подольский Владимир Евгеньевич

*д.ф.-м.н., Московский центр фундаментальной
и прикладной математики (МЦФuПМ),
Московский государственный университет
им. М.В. Ломоносова, Москва*

В докладе будут обсуждаться методы получения, оцифровки, обработки тактильной информации и использования результатов в медицинской практике.

**ПЕРСОНАЛИЗИРОВАННАЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ
ГЕМОДИНАМИКА**



Василевский Юрий Викторович

*чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., Институт вычислительной
математики им. Г.И. Марчука РАН,
Первый Московский государственный медицинский
университет им. И.М. Сеченова,
Московский физико-технический институт Москва*

Персонализированные численные модели основаны на персонализированных дискретных геометрических моделях, которые задаются анатомически корректными расчетными сетками. Такие сетки можно построить на основе сегментации трехмерных медицинских изображений, прежде всего, компьютерной томографии. Сегментация изображения представляет собой разметку вокселей большого трехмерного массива, задающего изображение, согласно их принадлежности разным тканям и/или органам. Таким образом,

автоматическая сегментация трехмерных медицинских изображений и автоматическая генерация неструктурированных сеток, отражающих реальную анатомию, являются важными составляющими математической технологии построения персонализированных моделей. Помимо геометрических моделей, персонализированные модели гемодинамики используют уравнения с параметрами, характеризующими пациент-специфические свойства модели. Эти параметры должны определяться в клинике, поэтому модели должны опираться только на измеримые в клинической практике параметры. Как правило, уравнения с такими параметрами являются редуцированными версиями классических уравнений гидродинамики. Применение методов сегментации медицинских изображений, генерации реалистичных расчетных сеток и гемодинамических моделей продемонстрировано на примере трех биомедицинских приложений: неинвазивная оценка гемодинамической значимости стенозов коронарных артерий, моделирование кровотока в левом желудочке сердца, моделирование реконструкции аортального клапана.



АГЕНТНЫЙ ПОДХОД К МОДЕЛИРОВАНИЮ ЭПИДЕМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Романюха Алексей Алексеевич

*д.ф.-м.н., Институт вычислительной математики
им. Г.И. Марчука РАН, Москва*

Агентные модели представляют моделируемую систему как совокупность автономных, взаимодействующих между собой и со средой агентов. Такой подход позволяет исследовать свойства системы в зависимости от свойств и законов взаимодействия составляющих её элементов. Агентные модели применяются во многих областях физики, биологии, социологии, экономики, для решения прикладных задач управления.

Использование агентных моделей эпидемиологических процессов позволяет учесть спектр индивидуальные характеристики иммунной и неспецифической

защиты, реалистично описать демографию и социальную структуру населения, сети контактов в различных социальных и возрастных группах, описать влияние особенности поведения на распространение возбудителей в популяции.

Учет распространённости сопутствующих заболеваний позволяет уточнить распределение тяжести и исходов заболевания. Важным результатом создания агентной модели эпидемического процесса является создание модели виртуальной популяции, воспроизводящей характеристики населения.



**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ГЕМОДИНАМИКИ И РЕОЛОГИИ
КРОВЕНОСНЫХ СОСУДОВ
ГОЛОВНОГО МОЗГА**

Паршин Даниил Васильевич

*к.ф.-м.н., Институт гидродинамики
им М.А. Лаврентьева СО РАН, Новосибирский
государственный университет, Новосибирск*

Соавтор: А.П. Чупахин

Исследование головного мозга человека является одной из самых приоритетных задач современной науки, имеющей как фундаментальное, так и прикладное, медицинское значение. Изучение законов движения крови играет при этом очень важную роль, поскольку активизация тех или иных функциональных зон мозга происходит вследствие перераспределения объемов крови, несущих мозгу кислород и питательные вещества. Излечение сосудистых аномалий мозга (церебральные аневризмы, артерио-венозные мальформации и другие) во многом сводится к восстановлению нормального кровотока, нарушенного этой аномалией. При этом одинаково значимым является исследование, как гемодинамики (гидродинамики крови), так и реологии стенок сосудов.

В докладе будет рассказано о некоторых результатах совместных работ ученых Института гидродинамики СО РАН и медиков из ФИЦ Клиника им. ак. Мешалкина, Федерального центра нейрохирургии, Томографического центра СО РАН.

1. Мониторинг кровотока во время нейрохирургических операций на базе приборного компьютеризированного комплекса Volcano Combo Map.
2. Исследование реологии стенок кровеносных сосудов методами лазерной флюоресценции и strain-stress испытаниями.

ОСОБЕННОСТИ РОСТА ПАРОВОГО ПУЗЫРЬКА ПРИ ЛАЗЕРНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ НА БИОЛОГИЧЕСКУЮ ЖИДКОСТЬ



Чернов Андрей Александрович

*проф. РАН, д.ф.-м.н., Институт теплофизики
им. С.С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирский
государственный университет, Новосибирск*

Соавторы: А.А. Пильник, М.А. Гузев,
В.М. Чудновский, А.А. Левин

На данный момент времени лазерный источник энергии для нагрева различных веществ, в том числе биологических тканей и жидкостей, находит широкое применение в различного рода практических задачах и приложениях, в частности, в эндоскопических и пункционных хирургических вмешательствах, которые являются наиболее безопасными и перспективными. Одним из достоинств такого метода является высокая интенсивность теплового воздействия, преимущественно локализованного, а также достаточно хорошая степень контролируемости. Суть метода заключается в следующем. Лазерное излучение подается через оптоволокно, которое контактирует с биологическими тканями или жидкостями (кровью, лимфой, жидким содержимым кист и др.). Вблизи торца оптоволоконна осуществляется быстрый разогрев жидкости.

Иницируется ее взрывное вскипание. Так как жидкость в целом существенно недогрета, кипение сопровождается не только ростом, но и коллапсом парогазовых пузырьков, сопровождающимся формированием горячих затопленных струй. Этими струями и осуществляется деструктивное воздействие на патологические образования. Несмотря на то, что исследованию процесса кипения посвящено огромное количество работ, до сих пор остается множество вопросов, требующих своего решения. В частности, это касается процесса кипения локально перегретой (в условиях общего недогрева) жидкости.

В работе представлена математическая модель роста парового пузырька в перегретой жидкости, одновременно учитывающая как динамические, так и тепловые эффекты и включающая в себя известные классические уравнения уравнение Рэлея и уравнение энергии, записываемые применительно к рассматриваемой задаче с учетом специфики, связанной с процессом испарения жидкости. Показано, что представленная задача сводится к решению системы из трех обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка. Полученное решение хорошо согласуется с прямыми численными расчетами в широком диапазоне перегревов и на всех стадиях процесса, включая переходную, учет которой крайне необходим, если рассматривать рост пузырька в сильно перегретой жидкости, в особенности, на начальной стадии.

Выполнено численное моделирование динамики парового пузыря на торце оптоволокна, образующегося в результате поглощения энергии лазерного излучения водой. Построенная модель опирается на применение Level-set модели, позволяющей описать движение двух фаз (вода и пар) и положение межфазной границы. В качестве замыкающих соотношений использовались данные экспериментов по изучению явления формирования кумулятивной струи в результате образования, роста и последующего схлопывания парогазового пузыря на торце оптоволокна. Показано, что высказанная нами ранее гипотеза об определяющем влиянии гидродинамической картины на данный процесс (формирования кумулятивной струи), и введенного нами определяющего параметра: отношения максимального размера пузыря и диаметра оптоволокна, подтверждается численными расчетами.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (проект № 19-19-00122).



**ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ И
ПРОГНОЗИРОВАНИЕ
ИММУНОСТИМУЛИРУЮЩЕЙ АКТИВНОСТИ
БИОМОЛЕКУЛ ПРИРОДНОГО
ПРОИСХОЖДЕНИЯ**

Бразовский Константин Станиславович

*д.т.н., Томский политехнический
университет, Томск*

Большинство органических соединений природного происхождения обладает широким спектром биологических эффектов, что делает их привлекательными кандидатами на роль новых лекарственных субстанций. Однако низкая специфичность взаимодействия молекул-кандидатов с компонентами метаболических путей приводит к слабой воспроизводимости ожидаемых эффектов и высокой вероятности проявления побочных. В докладе обсуждается один из подходов к численному исследованию механизмов реализации биологической активности, основанный на построении иерархии моделей от молекулярного уровня (QM/MM, молекулярный докинг) до метаболических путей, описываемых системой кинетических уравнений.



**РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ В ИЗУЧЕНИИ
КОЛИЧЕСТВЕННОЙ ЗАВИСИМОСТИ
«СТРУКТУРА-АКТИВНОСТЬ» ПРОИЗВОДНЫХ
АНТРАНИЛОВОЙ КИСЛОТЫ**

Андрюков Константин Вячеславович

*к.фарм.н., Пермская государственная
фармацевтическая академия, Пермь*

Регрессионные исследования «структура-активность» позволяют провести целенаправленный синтез и сократить временные и материальные затраты на виртуальный скрининг биологически активных веществ. Изучена количественная зависимость «структура-активность» с использованием экспериментальных значений биологической активности проведением множественного линейного регрессионного анализа. Выполнен отбор значимых уравнений с наибольшими значениями коэффициента множественной регрессии (R), критерия Фишера (F) и критерия оценки методом перекрестного контроля исключением по одному (Q2LOO) и проведена проверка на независимой выборке.



**ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ АНАЛИЗА
ФОРМАЛЬНЫХ ПОНЯТИЙ ДЛЯ АНАЛИЗА
ВРЕМЕННЫХ РЯДОВ ТОКА КРОВИ ДЛЯ
ГЕМОДИАЛИЗНЫХ БОЛЬНЫХ**

Громов Василий Александрович

*д.ф.-м.н., Научно-исследовательский университет
«Высшая школа экономики», Москва*

Соавторы: С.О. Кузнецов, Ю.Н. Бесчастнов

В докладе рассматриваются подходы к прогнозированию на основе кластеризации, опирающиеся на методологию анализа формальных понятий. Методология применяется для кластеризации участков временного ряда с целью выделения характерных участков (мотивов), отвечающих больным с различной степенью засорённости фистулы.



**СОВМЕСТНАЯ ОБРАБОТКА ДАННЫХ
CON-TREX И СНИМКОВ МРТ ДЛЯ ЦЕЛЕЙ
ЭФФЕКТИВНОЙ ПОСЛЕОПЕРАЦИОННОЙ
РЕАБИЛИТАЦИИ**

Кабаяев Евгений Михайлович

*Федеральный Сибирский научно-клинический
центр ФМБА, Красноярск*

Соавтор: К.В. Симонов

Демонстрация возможности использования биомеханической роботизированной механотерапии на комплексе CON-TREX в реабилитационном лечении пациентов после артроскопических операций на плече. Визуализация данных МРТ с использованием методов спектральной декомпозиции (шеарлет-преобразование и контрастирование цветовым кодированием).



**НЕЛИНЕЙНАЯ ДИНАМИКА ПРОТЕИНОВ:
КАЛИБРОВОЧНАЯ СИММЕТРИЯ И
ТОПОЛОГИЯ**

Молочков Александр Валентинович

*д.ф.-м.н., Дальневосточный федеральный
университет, Владивосток*

Динамика белка при различных взаимодействиях и влиянии среды — это пример очень сложного физического процесса, который пока не поддается детальному исследованию традиционными методами молекулярной динамики. Одним из путей решения этой проблемы — применение эффективной теории поля. Например, такой динамический процесс как сворачивание отдельного белка может происходить разными путями, но лежащий в основе механизм всегда регулируется одними и теми же универсальными биофизическими принципами. В докладе представлен подход, основанный на принципах эффективной теории поля, для анализа динамических свойств белков. Этот подход наиболее эффективен при моделировании тех динамических процессов, которые имеют универсальный характер. Соответствующая модель теории поля основана на фундаментальных принципах локальной локальной и глобальной симметрии белков, динамически определяющих третичную структуру белков.



**ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЧЕСКОГО
ПОВЕДЕНИЯ ЯЧЕИСТЫХ МЕТАЛЛОКОНСТРУКЦИЙ
МЕДИЦИНСКОГО НАЗНАЧЕНИЯ И СРАВНЕНИЕ
ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ С РЕЗУЛЬТАТАМИ
КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НАПРЯЖЕННО-
ДЕФОРМАЦИОННОГО СОСТОЯНИЯ**
Сурменова Мария Александровна

к.ф.-м.н., Томский политехнический университет, Томск

Ячеистые металлоконструкции медицинского применения с регулярной и градиентной структурой были получены аддитивным методом электронно-лучевого плавления. Выполнено теоретическое и экспериментальное исследование закономерностей механического поведения от характерных особенностей их пространственной организации. Наглядно продемонстрирована роль структуры и морфологии поверхности ячеистого материала, образующийся в процессе послойного электронно-лучевого синтеза в зарождении и распространении деформационных дефектов различного масштабного уровня, определяющих характер деформации и последующее разрушение материала, а, следовательно, его механические свойства. Проведена корреляция между результатами численного моделирования методом конечных элементов и экспериментальными результатами исследований, что позволяет оптимизировать способы получения трехмерных конструкций с заранее заданными свойствами аддитивными методами.



**ПОСТАНОВКА ЗАДАЧ И ПОДГОТОВКА
ДАНЫХ ДЛЯ СТАТИСТИЧЕСКОГО
МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРИ ПОСТРОЕНИИ
ПРОГНОЗНЫХ МОДЕЛЕЙ ТЕЧЕНИЯ И
ИСХОДА ЗАБОЛЕВАНИЙ**

Бразовская Наталия Георгиевна

*к.м.н., Сибирский государственный медицинский
университет, Томск*

Рассматриваются вопросы статистического моделирования в медицине. Представлены подходы к повышению качества исходных данных путем предварительной обработки: выявление артефактов, логическая проверка, трансформация признаков. Описаны особенности, условия и ограничения постановки задач статистического моделирования прогноза течения и исхода заболеваний.



**ОБОСНОВАНИЕ ПРИМЕНЕНИЯ ВИРТУАЛЬНЫХ
КОНТЕЙНЕРОВ ПРИ СОЗДАНИИ
МЕДИЦИНСКИХ ИНФОРМАЦИОННЫХ
СИСТЕМ НА ПРИМЕРЕ СИСТЕМЫ СБОРА
ФЛЕБОЛОГИЧЕСКИХ ДАННЫХ**

Иванов Федор Федорович

к.т.н., Сургутский государственный университет, Сургут

Соавторы: Н.Р. Урманцева, Д.В. Хитрень

Рассматривается применение виртуальных контейнеров, которые позволяют повысить эффективность обработки данных и дают клиентам возможность быстро осуществлять развертывание инновационных решений для модернизации приложений и использования облачных приложений на основе микросервисов. Доказывается, что контейнеризация обеспечивает

переносимость между гибридными и мультиоблачными средами, а также позволяет сократить инфраструктурные, эксплуатационные затраты. Описывается концепция медицинской информационной системы сердечно-сосудистого хирурга-флеболога с применением виртуальных контейнеров, а также ее реализованный в двух вариантах модуль – система сбора флебологических данных.



**КОМПЬЮТЕРНАЯ ОЦЕНКА СПЕКТРОВ
БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ
ФАРМАКОЛОГИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ**

Поройков Владимир Васильевич

чл.-корр. РАН, д.б.н., к.ф.-м.н., Научно-исследовательский институт биомедицинской химии им. В.Н. Ореховича, Москва

Каждое фармакологическое вещество может оказывать как терапевтическое, так и нежелательное побочное и токсическое действие, особенно с учетом его биотрансформации в организме человека. Вся совокупность возможных, проявляющихся при определенных условиях, биологических эффектов лекарственно-подобного вещества может быть названа его спектром биологической активности. Компьютерная оценка спектра биологической активности дает возможность осуществить отбор наиболее перспективных молекул для синтеза, определить наиболее перспективные направления для тестирования фармакологического действия конкретных веществ и отсеять потенциально опасные молекулы на ранних стадиях исследований. В докладе будут рассмотрено современное состояние развития методов машинного обучения, применяемых для оценки спектров биологической активности фармакологических веществ *in silico*, и представлен обзор свободно доступных в сети Интернет веб-сервисов (<http://www.way2drug.com/dr/>), обеспечивающих возможность получения такой оценки на основе структурной формулы изучаемого соединения.



**ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ
СПЛАВА С ЭФФЕКТОМ ПАМЯТИ ФОРМЫ
СИСТЕМЫ Ti-Nb**

Грубова Ирина Юрьевна

*к.ф.-м.н., Томский политехнический
университет, Томск*

В ходе работы были получены результаты систематических исследований структурных и электронных свойств различных составов сплавов на основе β -Ti с помощью проведения расчётов в рамках теории функционала плотности (ТФП), реализованных в компьютерном коде VASP-4.6. Данные расчёта структурных параметров показали, что постоянная решетки сплавов Ti-Nb увеличивается почти линейно с увеличением содержания Nb. Исследования стабильности системы сплава Ti-Nb были проведены с помощью расчёта энергии формирования. Показано, что значения энергии формирования при 0 К, уменьшаются с увеличением концентрации Nb для бинарных сплавов Ti-Nb, подтверждая, что легирующие атомы Nb являются стабилизаторами β -фазы.



**ПРИМЕНЕНИЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ПРИ
ДИАГНОСТИКЕ ЗАБОЛЕВАНИЙ**

Попов Александр Сергеевич

Томский государственный университет, Томск

Соавторы: В.И. Сачков, В.И. Чернов,
Д.Е. Кульбакин, А.В. Обходский, Е.В. Обходская

Технология «электронный нос», включающая технические и программные средства анализа газовой смеси, является перспективной для диагностики различных заболеваний. В докладе представлены результаты исследований по анализу образцов выдыхаемого воздуха у здоровых людей и пациентов с патологиями. Анализ проводился с помощью газоаналитического комплекса, включающего пробоотборное устройство с 14 металлооксидными датчиками и ПК для обработки данных.



ОЦЕНКА ВМІ ИНТЕРФЕЙСА

Вольф Данияр Александрович

к.т.н., Институт проблем управления РАН, Москва

Исследуется возможность создания нового класса систем управления авиационной техникой с использованием доступных на рынке медицинских измерительных приборов и беспилотных летательных аппаратов. Извлекаются и расшифровываются электрофизиологические ритмы ЭЭГ и ЭОГ, применяется метод классификации полученных электрофизиологических сигналов с помощью сверточной нейронной сети.



ОРГАНИЗАЦИЯ МЕЖДИСЦИПЛИНАРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ СТУДЕНТОВ РАЗЛИЧНЫХ ФАКУЛЬТЕТОВ УНИВЕРСИТЕТА НА ПРИМЕРЕ НАПРАВЛЕНИЙ МЕДИЦИНЫ И МАТЕМАТИКИ

Сарьян Вильям Карпович

*академик НАН РА, д.т.н., Российский научно-
исследовательский институт радио
им. М.И. Кривошеева, Москва*

Соавтор: Р.В. Мещеряков

В докладе будут представлены результаты исследований авторов по формированию глобального гиперсвязанного мира (ГСМ), который обусловлен стремительным развитием инфокоммуникационных технологий, для которого характерны:

– потеря локальной изоляции объектов экономического и социального взаимодействия, включая человека, которое ведет к ослаблению существующих устойчивых институтов институциональной матрицы общества;

– возникновение новых объектов взаимодействия, таких как Интернет вещей (IoT), Искусственный интеллект (AI) и Машинное обучение (ML);

– изменение свойств существующих и новых объектов ГСМ, которого делает осуществимыми задачи цифровизации медицины. Однако глобальный размах до масштабов пандемии биолого-социальная ЧС – COVID19 и возникшие проблемы с ее идентификацией и мерами по ликвидации, и главным образом вызванный и не затухающий до сих пор информационный шторм, пожалуй, первый раз в новейшей истории обратили серьезное и, главное, долгое внимание государственных деятелей как развитых, так и развивающихся стран на необходимость предварительной междисциплинарной подготовки к развитию ситуаций при ЧС глобального масштаба и необходимости прислушиваться к разработкам ученых. Мы все наблюдали захватывающие воображение академические междисциплинарные семинары и круглые столы, где наряду с вирусологами и медиками, выступали и физики, даже физики-ядерщики, и математики, и химики, и социологи, и экономисты.

Дело в том, что кризис заставил мыслить глобально, заставил нас ощутить возросшую взаимосвязанность и уязвимость мира и, на наш взгляд, он показал необходимость поиска «точки сбора» всех проводимых научных исследований. Оказалось, что нам не хватает целостного знания, нам необходима тотальная междисциплинарность. Для этого надо собрать все информационные результаты проводимых отдельно научных исследований в единую базу знаний, найти «точку сбора» этих данных, необходимо определить единую цель и объект этой тотальной междисциплинарности, сформировать метасистему – новую системную конструкцию, в которую уже сложившиеся системы входят как составные части и при этом обеспечивается сочетание определенной самостоятельности множества центров принятия решений и их скоординированное участие в решение главной задачи – достижение устойчивого жизнеобеспечения социума .

Мы предлагаем рассматривать устойчивое жизнеобеспечение социума как результат достижения устойчивого существования и развития каждого человека-абонента современной инфокоммуникационной среды (ИКС), поэтому в качестве цели и объекта функционирования создаваемой метасистемы будут определены как:

– повышение адаптационных возможностей абонента ИКС и

– индивидуализированная экспертная система абонента для любого времени и для любого места нахождения абонента, обеспечивающей его устойчивое существование. современный человек почти утрачивает адаптационные возможности взаимодействия с окружающей средой из-за возросшей антропогенной нагрузки на природу, связанной с тенденцией концентрации населения в мегаполисах, увеличения темпов жизни и мобильности населения, быстрого изменения технологий без должного анализа его последствий и т. д.

Поэтому адаптация, как приспособление человека к изменяющимся условиям существования, представляет собой узловой момент его жизнедеятельности, поскольку состояние здоровья человека во многом определяется именно его адаптационными резервами способностями–потенциалом и, особенно, активизацией их в критический момент возникновения ЧС. Причем адаптация, в общем случае, подразумевает и взаимодействие человека с обществом (негативные социальные, экономические и др. аспекты). Мы предлагаем повысить индивидуальный адаптационный потенциал абонента до необходимого уровня за счет использования достижений инфокоммуникационных технологий.

В докладе будет представлена одобренная Международным Союзом Электросвязи (Женева) разработанная авторами многоуровневая экспертная система, которая обеспечивает связанность всех проводимых исследований в результате чего в реальном масштабе времени предоставляет индивидуализированное управление адаптивными возможностями любого человека в любом месте и в любое время. Конечно, достижения цифровой медицины входят в нее важной составной частью. Техническая реализуемость такой системы не вызывает сомнения.

Поэтому мы приветствуем начало междисциплинарных исследований медиков и математиков в классическом университете и предлагаем расширить рамки этой кооперации, с тем, чтобы реализовать более общую и очень актуальную задачу обеспечит здоровье населения в текущих условиях среды его проживания, в том числе и расширяя использования системы на случай возникновения любого вида ЧС, в том числе и эпидемий.

Поскольку эта работа на перспективу, то целесообразно, на наш, с самого начала организовать в рамках университета междисциплинарную лабораторию,

на основе которой может родиться креативная коллаборация молодых ученых, которым будут по плечу решение сложных задач.

Авторы могли бы участвовать в разработке программы в рамках своей компетенции и выступить с лекцией перед такой аудиторией.



**КОНЦЕПЦИЯ РОБОТИЗИРОВАННОГО
МАЛОИНВАЗИВНОГО ПРОТЕЗИРОВАНИЯ
КЛАПАНА АОРТЫ**

Овчаренко Евгений Андреевич

*к.т.н., Научно-исследовательский институт
комплексных проблем сердечно-сосудистых
заболеваний, Кемерово*

Соавторы: К.Ю. Клышников, П.С. Онищенко

В докладе отражены основные моменты, связанные с исследованием и разработкой концепции роботизированного малоинвазивного протезирования клапана аорты; созданием кибернетических основ роботизированного управления эндоваскулярными медицинскими устройствами; разработкой алгоритмов системы визуального ассистирования процедуры имплантации транскатетерного протеза клапана аорты на базе нейронных сетей.



**ПРОБЛЕМЫ ПРИМЕНЕНИЯ ИСКУССТВЕННЫХ
НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ В РЕШЕНИИ ЗАДАЧИ
ДИАГНОСТИКИ ХРОНИЧЕСКИХ ЗАБОЛЕВАНИЙ ВЕН
(ХЗВ) ПО ФОТОГРАФИЯМ НИЖНИХ КОНЕЧНОСТЕЙ
ПАЦИЕНТА**

Урманцева Нелли Руслановна

Сургутский государственный университет, Сургут

Соавторы: В.А. Громов, Р.С. Сазиков

Искусственные нейронные сети (НС) в настоящий момент активно используются для решения задач классификации графических и видео-изображений. В докладе представлены результаты экспериментов по диагностике ХЗВ на основании фотографий нижних конечностей пациента: при решении задачи используется 2 подхода к работе с НС, показаны результаты неэффективного решения задачи диагностики полученными НС. В докладе также обсуждаются причины низкой эффективности применения НС для указанной выше задачи. В заключении описывается потенциальный способ разрешения проблемы путем разработки системы поддержки принятия решений сердечно-сосудистого хирурга-флеболога.



**ГЕОМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ТЕКСТУРНЫХ
ОСОБЕННОСТЕЙ СНИМКОВ КТ ЛЕГКИХ
С COVID-19 ДЛЯ РАННЕЙ ДИАГНОСТИКИ
ОСЛОЖНЕНИЙ (ФИБРОЗ)**

Кенц Анжелика Станиславовна

*Федеральный Сибирский научно-клинический
центр ФМБА, Красноярск*

Соавтор: К.В. Симонов

Исследование направлено на использование разработанного алгоритмического обеспечения в комплексе с текстурным (геометрическим) анализом для выделения показателей, характеризующих клиническое состояние пациента. Исходными данными являются КТ изображения легких пациентов с COVID-19. Обработка направлена на решение диагностических задач, таких как выделение и контрастирование объектов интереса.

