

ПРОБЛЕМЫ ИНФОРМАТИКИ № 4 (65) 2024 г.

Журнал выходит ежеквартально, издается с 2008 г.

Учредитель журнала — Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН.

Редакционный совет

Председатель — акад. НАН РК М. Н. Калимолдаев,
акад. РАН А. Л. Асеев, проф. В. А. Васенин, акад. РАН С. Н. Васильев,
проф. В. М. Вишневецкий, акад. РАН С. С. Гончаров, акад. РАН Н. А. Колчанов,
акад. РАН Н. А. Кузнецов, акад. РАН А. П. Кулешов, проф. РАН М. А. Марченко,
проф. А. Г. Марчук, А. Ю. Пальянов, проф. Б. Я. Рябко, акад. РАН И. А. Соколов,
проф. А. Н. Сотников, чл.-кор. РАН Ю. А. Флеров.

Редколлегия

Главный редактор — проф. В. Э. Малышкин,
Д. А. Афонников, Д. Ж. Ахмед-Заки, А. Г. Вострецов, Б. С. Гольдштейн, В. И. Гужов,
Ю. А. Загорулько, В. А. Иванисенко, С. Д. Каракозов, В. Н. Касьянов, О. В. Кибис,
В. В. Корнеев, И. В. Котенко, И. М. Куликов, М. Г. Курносов, С. А. Лашин, Т. П. Любимова,
А. Н. Ляхов, Ю. Г. Матушкин, В. В. Окольников, Б. В. Поллер, М. П. Пономаренко,
А. С. Родионов (зам. гл. редактора), А. Н. Савостьянов, М. А. Сонькин, В. В. Шахов (зам. гл.
редактора), М. С. Хайретдинов, И. Г. Черных, Moonseong Kim (Korea), V. D. Nguyen (Vietnam),
Michele Pagano (Italy).

Редакция: отв. секретарь М. С. Делидович, системный администратор В. А. Перепелкин,
верстка Д. В. Лазуткин, логист Л. В. Трофимова.

Адрес редакции, издателя: 630090, г. Новосибирск, просп. Академика Лаврентьева, д. 6,
ИВМ и МГ СО РАН
тел. (383) 330-96-43; e-mail: problem-info@sscc.ru, <http://www.problem-info.sccc.ru>.

Журнал зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере массовых коммуникаций,
связи и охраны культурного наследия. Свидетельство ПИ № ФС77-32088 от 27 мая 2008 г.
Журнал распространяется по подписке. Оформление подписки на сайте «Объединенного
каталога „Пресса России“» https://www.ppressa-rf.ru/cat/1/edition/y_e69980/, подписной
индекс 69980, и через интернет-магазин «Пресса по подписке»
https://www.akc.ru/itm/problemu_i-informatiki/. Цена свободная. Журнал
распространяется на территории России.

**Журнал включен в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов,
рекомендованных для публикаций Высшей аттестационной комиссией.**

Все права авторов сохранены. Использование материалов журнала возможно только
с разрешения редакции и авторов.

Отпечатано в типографии «АЛЕКСПРЕСС» ИП Малыгин Алексей Михайлович.
Адрес: 630090, Новосибирск, пр-т Академика Лаврентьева, 6/1, оф. 104, тел. +7 (383) 217-43-46.
Формат 60 × 84 1/8. Усл. печ. л. 11,63. Печать офсетная.
Тираж 50 экз. Заказ № 941. Подписано в печать 16.12.2024 г. Выход в свет 22.12.2024 г.

© Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 2024

JOURNAL “PROBLEMS OF INFORMATICS”. No. 4 (65) 2024

Publisher: Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics of Siberian Branch of Russian Academy of Sciences.

Editorial Council

Chairman Academician of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan

M. N. Kalimoldayev

Full Member of the RAS A. L. Aseev, Professor V. A. Vasenin, Full Member of RAS C. N. Vassilyev,

Professor V. M. Vishnevsky, Full Member of RAS S. S. Goncharov, Full Member of RAS

N. A. Kolchanov, Full Member of RAS N. A. Kuznetsov, Full Member of RAS A. P. Kuleshov,

Professor of RAS M. A. Marchenko, Professor A. G. Marchuk, A. YU. Palyanov, Professor

B. Y. Ryabko, Full Member of RAS I. A. Sokolov, Professor A. N. Sotnikov, Corr. Member RAS

Y. A. Flerov.

Editorial board

The Editor-in-Chief Professor V. E. Malyshkin

Associate Editors-in-Chief: A. S. Rodionov, V. V. Shakhov

D. A. Afonnikov D. Zh. Akhmed-Zaki, A. G. Vostretsov, B. S. Goldstein, V. I. Guzhov,

Y. A. Zagorulko, V. A. Ivanisenko, S. D. Karakozov, V. N. Kasyanov, O. V. Kibis, V. V. Korneev,

I. V. Kotenko, I. M. Kulikov, M. G. Kurnosov, S. A. Lashin, T. P. Lyubimova, A. I. Lyakhov,

V. V. Okolnishnikov, B. V. Poller, M. P. Ponomarenko, A. N. Savostyanov, M. A. Sonkin,

M. S. Khairtdinov, I. G. Chernykh, Moonseong Kim (Korea), Van Duc Nguyen (Vietnam),

Michele Pagano (Italy).

Editorial staff: Managing Editor M. S. Delidovich, System Administrator V. A. Perepelkin,

Maker-up D. V. Lazutkin, Logistician L. V. Trofimova.

Address of the editorial office: 630090, pr. Lavrentieva, 6, Novosibirsk, Russia, Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics of SB RAS.

Phone: +7 (383) 330-96-43; e-mail: problem-info@sscc.ru, <http://www.problem-info.sssc.ru>.

The journal has been registered in accordance with Legislation of the Russian Federation. Certificate of Mass Media Registration: ПИИ № ФС77-32088, of 27 May, 2008, ISSN 2073-0667. The journal is distributed in Russia.

The journal “Problems of Informatics” is in the List of Peer-Reviewed Scientific Journals for publication of scientific results of Ph.D. and Dr. of Sci.

All rights reserved. The journal contents may only be used by the permission of editors and authors.

Предисловие

С начала массового секвенирования геномов началась разработка обширного арсенала методов биоинформатики для анализа структурно-функциональной организации геномов, генов и кодируемых ими РНК и белков, а также методов системной компьютерной биологии, ориентированной на реконструкцию, анализ и моделирование генных сетей, контролирующих формирование фенотипических признаков организмов на основе информации, закодированной в геномах, и функционирующих на различных иерархических уровнях организации живых систем (начиная с геномов, генов, белков, метаболических путей и генных сетей, включая клетки и ткани и заканчивая целостными организмами). Методы биоинформатики и системной компьютерной биологии прочно вошли в арсенал современной науки, в том числе и потому, что они необходимы не только для проведения фундаментальных исследований, но и для решения широкого круга практических задач в интересах сельского хозяйства, биомедицины, фармакологии, биотехнологий, экологии, биобезопасности и множества других направлений в науках о жизни и междисциплинарных исследованиях.

Однако в последнее десятилетие их значимость еще более возросла: в связи со стремительным развитием омиксных технологий (геномики, транскриптомики, протеомики, метаболомики) и других высокопроизводительных методов экспериментального исследования молекулярно-генетических систем и процессов в генетике произошел информационный взрыв, и она стала главным источником больших данных, перегнав по темпам роста все другие науки и технологии.

Огромные объемы и сложность накапливаемых в настоящее время больших генетических данных требуют создания информационно-программных комплексов, основанных на новом поколении методов биоинформатики и системной компьютерной биологии, использующих вычислительные конвейеры, реализующих сложные сценарии анализа и интегрирующих большое количество разнообразных программных продуктов и баз данных, в том числе — основанных на использовании методов искусственного интеллекта.

Отвечая на запрос времени, журнал «Проблемы информатики» посвятил очередной выпуск вопросам биоинформатики, системной компьютерной биологии и анализа больших генетических данных. Это не случайный эпизод в издательской политике журнала, а новая долгосрочная стратегия, отражающая ключевую роль наук о жизни в современном естествознании и их интеграцию с точными науками — математикой и информатикой.

*Академик РАН Н. А. Колчанов,
Профессор РАН М. А. Марченко*

СОДЕРЖАНИЕ

Прикладные информационные технологии. Биоинформатика

<i>Вензель А. С., Иванисенко Т. В., Деменков П. С., Иванисенко В. А.</i> Программный конвейер предсказания влияния мутаций на стабильность пространственных структур белков с использованием методов оценки изменения свободной энергии и искусственного интеллекта	6
<i>Вензель А. С., Клименко А. И., Иванисенко Т. В., Деменков П. С., Лашин С. А., Иванисенко В. А.</i> Метод предсказания количества белка в клетках дрожжей на основе их геномных последовательностей	17
<i>Деменков П. С., Мухин А. М., Иванисенко В. А., Лашин С. А., Колчанов Н. А.</i> Цифровая платформа «Микробиотех»: архитектура и назначение	27
<i>Иванисенко Т. В., Деменков П. С., Иванисенко В. А.</i> Комбинированный подход к реконструкции ассоциативных сетей: объединение GraphSAGE и статистики совместной встречаемости	37
<i>Лахова Т. Н., Казанцев Ф. В., Хлебодарова Т. М., Матушкин Ю. Г., Лашин С. А.</i> Программный модуль для исследования регуляции метаболических путей бактерии методами математического моделирования	46
<i>Лашин С. А., Казанцев Ф. В., Лахова Т. Н., Матушкин Ю. Г.</i> DynMicrobiotech: программный модуль для автоматической реконструкции фреймовых динамических моделей генных сетей микроорганизмов	56
<i>Мухин А. М., Ощепков Д. Ю., Лашин С. А.</i> Вычислительный конвейер по распознаванию сайтов связывания транскрипционных факторов в бактериальных геномах <i>de novo</i> ...	69
Алфавитный указатель авторов за 2024 год	84
Правила представления и подготовки рукописей для публикации в журнале «ПРОБЛЕМЫ ИНФОРМАТИКИ»	87

На сайте «Объединенного каталога "Пресса России"» www.pressa-rf.ru
можно оформить подписку на печатную версию журнала
«Проблемы информатики» по подписному индексу 69980,
а также подписаться через интернет-магазин
«Пресса по подписке» www.akc.ru

CONTENTS

Applied Information Technologies. Bioinformatics

<i>Venzel A. S., Ivanisenko T. V., Demenkov P. S., Ivanisenko V. A.</i> Software Pipeline for Predicting the Impact of Mutations on the Stability of Protein Spatial Structures Using Free Energy Change Estimation Methods and Artificial Intelligence	6
<i>Venzel A. S., Klimenko A. I., Ivanisenko T. V., Demenkov P. S., Lashin S. A., Ivanisenko V. A.</i> An Approach for Predicting Protein Abundance in Yeast Cells Based on their Genomical Sequences	17
<i>Demenkov P. S., Mukhin A. M., Ivanisenko V. A., Lashin S. A., Kolchanov N. A.</i> The “Microbitech” Digital Platform: Architecture and Purpose	27
<i>Ivanisenko T. V., Demenkov P. S., Ivanisenko V. A.</i> Combined Approach to Associative Network Reconstruction: Integrating GraphSAGE and Co-occurrence Statistics	37
<i>Lakhova T., Kazantsev F., Khlebodarova T., Matushkin Yu., Lashin S.</i> Software Module for Studying the Regulation of Bacterial Metabolic Pathways by Mathematical Modeling Methods	46
<i>Lashin S., Kazantsev F., Lakhova T., Matushkin Yu.</i> DynMicrobiotech: a Software Module for Automatic Reconstruction of Frame-based Dynamic Models of Microbial Gene Networks ..	56
<i>Mukhin A., Oschepkov D., Lashin S.</i> A Computational Pipeline for <i>de novo</i> Recognition of Transcription Factor Binding Sites in Bacterial Genomes	69
Authors by Alphabetical Order Published in 2024	84
Rules of Presentation and Preparation of Manuscripts Offered for Publication	87