**Пальянов Андрей Юрьевич Методы и алгоритмы для решения ряда актуальных задач в области вычислительной нейробиологии, биомеханики и молекулярной биологии**

ОГЛАВЛЕНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

доктор наук Пальянов Андрей Юрьевич

Введение

Глава 1. О проблемах и перспективах компьютерного моделирования процессов, лежащих в основе нервной деятельности и поведения живых организмов

1.1. О роли нервной системы в жизни многоклеточных организмов

1.2. О гипотетических возможностях компьютерной симуляции механизмов функционирования биологического мозга

1.3. Об энергоэффективности работы и плотности хранения информации в живых клетках и в компьютерных системах

1.4. О современном состоянии исследований, направленных на создание искусственных разумных систем и решение проблемы обратной инженерии мозга

1.5. О необходимом уровне детализации моделей

1.6. Современные достижения в области компьютерного моделирования: синтез белка на рибосоме

1.7. Современные достижения в области компьютерного моделирования: первая электронная клетка

1.8. О биологических нейронах и взаимодействиях между ними

1.9. О проекте «The Blue Brain»

1.10. О роли нематоды Caenorhabditis elegans в решении проблемы обратной инженерии нервной системы

1.11. О перспективах дальнейших исследований

Глава 2. Организм Caenorhabditis elegans в контексте задач моделирования его нервной активности и поведения

2.1. Общие сведения о Caenorhabditis elegans

2.2. Нервная система

2.3. О диаграмме связности нервной системы C. elegans

2.3.1. О динамике активности нейронов C. elegans

2.3. Сенсорная система

2.4. Мышечная система

2.5. Биомеханика движения C. elegans

2.6. О методах компьютерного моделирования систем, образующих организм C. elegans

2.6.1. Тело и мышечная система, моделирование движения

2.6.2. О проблемах в области изучения и моделирования нервной деятельности С. elegans

2.6.3. О методах и программных средствах моделирования динамики нейронной активности

Глава 3. Механистическая 3D-модель тела С. elegans под управлением фрагмента нервной системы

3.1. Моделирование тела и мышечной системы

3.2. Моделирование нейронов и связей между ними

3.4. Моделирование движения тела и его взаимодействия с поверхностью

3.5. Моделирование нейронов и связей между ними

3.6. Значение созданной программной системы и её применение в научной и преподавательской деятельности

Глава 4. Sibemetic - симулятор нового поколения, ориентированный на задачи в области биомеханики беспозвоночных

4.1. Моделирование динамики несжимаемой жидкости методом PCISPH

4.2. Алгоритм поиска соседей

4.3. Моделирование эластичных объектов одновременно с жидкостью

4.3.1. Базовый эластичный материал

4.3.2. Водонепроницаемые эластичные пленки

4.3.3. Моделирование мышечных клеток

4.4. Создание модели тела и мышечной системы С. elegans

4.5. Численные эксперименты по симуляции движения С. elegans в различных режимах и средах

4.5.1. Определение фактической вязкости моделируемой жидкости

4.5.2. Моделирование плавания в жидкостях с низкой вязкостью

4.5.3. О влиянии шага интегрирования по времени на результаты вычислений

4.5.4. Плавание в двухчастотном режиме. Воспроизведение результатов эксперимента в симуляции

4.5.5. Зависимость фактической вязкости жидкости от значения коэффициента вязкости в симуляции

4.5.6. Биомеханика ползания по поверхности агара

4.5.7. Моделирование ползания по поверхности агара в Sibernetic

4.6. Об особенностях параллельной реализации и вычислительной производительности Sibernetic

4.7. О связи между активностью кальция в мышечных клетках C. elegans в процессе ползания, их сокращением и формой тела

Глава 5. На пути к биологически обоснованному моделированию динамики нейронной активности в нервной системе C. elegans

5.1. Об архитектуре нервной системы C. elegans

5.2. Об электрофизиологии нейронов C. elegans

5.3. О генерации периодических сигналов в нервно-мышечной системе C. elegans

5.4. Генерация периодических сигналов мышечной клеткой глоточной системы C. elegans

5.4.1. Электрофизиология и ионные каналы мышечной клетки pm3

5.4.2. Подготовка к моделированию электрофизиологической активности мышечной клетки pm3

5.4.3. Потенциал покоя глоточной мышечной клетки

5.4.4. Проводимость утечки через мембрану и потенциал покоя

5.4.5. Ионные каналы: кальциевый канал L-типа EGL-19

5.4.6. Калиевый ионный канал Kv-типа EXP-2

Глава 6. Развитие «гидродинамического» подхода к анализу процесса формирования белковой структуры

6.1. Объект и методы исследования

6.2. Гидродинамический подход

6.3. Стандартный анализ на основе поверхности свободной энергии

5.4. Анализ на основе гидродинамического подхода

5.5. Итоги

Заключение