

## Направление «Моделирование биомолекул»

Куратор: **Макшакова Ольга Николаевна**, к.б.н., в.н.с. лаборатории биофизической химии наносистем КИББ ФИЦ КазНЦ РАН

<b>ДАТА: 10 ИЮЛЯ (ПН) ВРЕМЯ: 12:00-20:00</b>				
<b>Время</b>	<b>Тема</b>	<b>Форма</b>	<b>Лектор</b>	<b>Место</b>
12:00-12:45	Молекулярное моделирование, как компьютерный микроскоп	Лекция	<u>Макшакова Ольга Николаевна</u> к.б.н., в.н.с. КИББ ФИЦ КазНЦ РАН. Казань, Россия	Технопарк IT-Park им. Башира Рамеева
12:45-12:55	<b>ПЕРЕРЫВ</b>			
12:55-14:00	Современные подходы к многомасштабному моделированию биомолекул	Лекция	<u>Макшакова Ольга Николаевна</u> к.б.н., в.н.с. КИББ ФИЦ КазНЦ РАН. Казань, Россия	Технопарк IT-Park им. Башира Рамеева
14:00-15:00	<b>ОБЕД</b>			
15:00-15:45	GROMACS	Воркшоп	<u>Макшакова Ольга Николаевна</u> к.б.н., в.н.с. КИББ ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия	Технопарк IT-Park им. Башира Рамеева
15:45-15:55	<b>ПЕРЕРЫВ</b>			
15:55-16:40	GROMACS. Препроцессинг	Практическое занятие	<u>Макшакова Ольга Николаевна</u> к.б.н., в.н.с. КИББ ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия	Технопарк IT-Park им. Башира Рамеева
16:40-17:10	Анализ траекторий	Практическое занятие	<u>Макшакова Ольга Николаевна</u> к.б.н., в.н.с. КИББ ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия  <u>Антонова Мария Игоревна</u> м.н.с. лаборатории биофизической химии наносистем КИББ ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия	Технопарк IT-Park им. Башира Рамеева
17:10-17:25	<b>ПЕРЕРЫВ</b>			
17:25-18:00	Продвинутое методы молекулярной динамики	Лекция	<u>Макшакова Ольга Николаевна</u> к.б.н., в.н.с. КИББ ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия	Технопарк IT-Park им. Башира Рамеева
18:00-18:30	Машинное обучение в молекулярной динамике	Лекция	<u>Антонова Мария Игоревна</u> м.н.с. лаборатории биофизической химии наносистем КИББ ФИЦ КазНЦ РАН. Казань, Россия	Технопарк IT-Park им. Башира Рамеева
18:30-18:40	<b>КОФЕ-БРЕЙК</b>			
18:40-20:00	Продвинутое методы молекулярной динамики. Моделирование химерных белков: предсказание стабильности структуры	Мастер-класс	<u>Антонова Мария Игоревна</u> м.н.с. лаборатории биофизической химии наносистем КИББ ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия	Технопарк IT-Park им. Башира Рамеева

**ДАТА: 11 ИЮЛЯ (ВТ)    ВРЕМЯ: 09:00-13:00**

<b>Время</b>	<b>Тема</b>	<b>Форма</b>	<b>Лектор</b>	<b>Место</b>
9:00-10:30	Количественные модели взаимосвязи структура-активность малых молекул к белку	Лекция	<u>Хакимова Айгуль Айратовна</u> специалист по анализу данных в группе вычислительной химии в компании «Биокад», Санкт-Петербург, Россия	Технопарк IT-Park им. Башира Рамеева
10:30-10:45	<b>ПЕРЕРЫВ</b>			
10:45-12:30	Практика по машинному обучению для создания моделей взаимосвязи структура-активность	Практическое занятие	<u>Хакимова Айгуль Айратовна</u> специалист по анализу данных в группе вычислительной химии в компании «Биокад», Санкт-Петербург, Россия	Технопарк IT-Park им. Башира Рамеева