

911

ОТ РЕДАКТОРА

*Н.А. Колчанов, Т.А. Бухарина*

## Компьютерная геномика

913

ОРИГИНАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

Отражение процессов повреждения ДНК в эволюции G-трактов в геномах.

*И.Р. Грин, Д.О. Жарков*

925

ОРИГИНАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

Связь иерархической классификации транскрипционных факторов по структуре ДНК-связывающего домена и вариативности мотивов сайтов связывания этих факторов.

*В.Г. Левицкий, Т.Ю. Ватолина, В.В. Радица*

940

ОРИГИНАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

Программа PlantReg 1.1: анализ взаимного расположения сайтов связывания транскрипционных факторов в промоторах генов-мишеней для уточнения молекулярных механизмов их активности в регуляторных сетях.

*В.В. Лавреха, Н.А. Омелянчук, А.Г. Богомолов, Ю.А. Рябов, П.К. Мукебенова, Е.В. Землянская*

952

ОРИГИНАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

База знаний FlyDEGdb по дифференциально экспрессирующимся генам *Drosophila melanogaster* – модельного объекта биомедицины.

*О.А. Подкольная, М.А. Дерюженко, Н.Н. Твердохлеб, К.А. Золотарева, Ю.В. Маковка, Н.Л. Подкольный, В.В. Сулов, И.В. Чадаева, Л.А. Федосеева, А.А. Серяпина, Д.Ю. Ощепков, А.Г. Богомолов, Е.Ю. Кондратьев, О.Е. Редина, А.Л. Маркель, Н.Е. Грунтенко, М.П. Пономаренко*

## Системная компьютерная биология

963

ОРИГИНАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

Реконструкция и анализ генной сети регуляции апоптоза при гепатоцеллюлярной карциноме на основе данных scRNA-seq и базы знаний ANDSystem.

*А.В. Адамовская, И.В. Яцык, М.А. Клещев, П.С. Деменков, Т.В. Иванисенко, В.А. Иванисенко*

978

ОРИГИНАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

Сигнальный путь Hedgehog у человека: описание в базе знаний HH\_Signal\_pathway\_db.

*Т.А. Бухарина, А.М. Бондаренко, Д.П. Фурман*

990

ОРИГИНАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

Выявление белков, регулирующих фенотип-ассоциированные гены макрофагов группы M2: биоинформатический анализ.

*Е.А. Антропова, И.В. Яцык, П.С. Деменков, Т.В. Иванисенко, В.А. Иванисенко*

1000

ОРИГИНАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

Компьютерная реконструкция генной сети цитокиновой регуляции генов и белков, ассоциированных с PAC.

*Н.М. Леванова, Е.Г. Вергунов, А.Н. Савостьянов, И.В. Яцык, В.А. Иванисенко*

1009

ОРИГИНАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

Генная сеть и база знаний по терморегуляции организма человека.

*Е.В. Игнатьева, П.С. Деменков, А.Г. Богомолов, Р.А. Иванов, С.А. Лашин, А.Д. Михайлова, А.Е. Алексеева, Н.С. Юдин*

1020

ОРИГИНАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

Применение программно-информационной системы ANDSystem для поиска мишеней таргетной терапии ревматоидного артрита на основе анализа биологических процессов.

*Е.Л. Мищенко, И.В. Яцык, П.С. Деменков, А.В. Адамовская, Т.В. Иванисенко, М.А. Клещев, В.А. Иванисенко*

1031

ОБЗОР

Математические модели метаболизма железа: структура и функции.

*Н.И. Мельченко, И.Р. Акбердин*

1041

ОРИГИНАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

Идентификация и анализ сетевой структуры связей между компонентами иммунной системы у детей.

*Д.С. Гребенников, А.П. Топтыгина, Г.А. Бочаров*

1051

ОРИГИНАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

Самообучающиеся виртуальные организмы в физическом симуляторе: об оптимальном разрешении их зрительной системы, архитектуре нервной системы и вычислительной сложности задачи.

*М.С. Зенин, А.П. Девятериков, А.Ю. Пальянов*

## Структурная компьютерная биология

1062

ОРИГИНАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

Молекулярно-динамический анализ функциональной роли аминокислотных остатков V99, F124 и S125 ДНК-диоксигеназы человека ABH2.

*М. Чжао, Т.Е. Тюгашев, А.Т. Давлетгильдеева, Н.А. Кузнецов*

1073

## ОРИГИНАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

Структурные основы влияния фосфорамидной *N*-бензимидазольной группы на эффективность удлинения модифицированного праймера Taq ДНК-полимеразой.

*А.А. Бердюгин, В.М. Голышев, А.А. Ломзов*

1084

## ОРИГИНАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

Предсказание взаимодействий белка ORF3a SARS-CoV-2 с низкомолекулярными лигандами с использованием когнитивной платформы ANDSystem, графовых нейронных сетей и молекулярного моделирования.

*Т.В. Иванисенко, П.С. Деменков, М.А. Клещев, В.А. Иванисенко*

1097

## ОРИГИНАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

Влияние димерных бисбензимидазолов на активность ферментов репарации ДНК тирозил-ДНК-фосфодиэстераз 1 и 2 и поли(АДФ-рибоза)полимераз 1 и 2.

*Н.С. Дырхеева, И.А. Чернышова, А.Ф. Арутюнян, А.Л. Захаренко, М.М. Кутузов, К.Н. Наumenко, А.С. Вензель, В.А. Иванисенко, С.М. Деев, А.Л. Жузе, О.И. Лаврик*

## Экологическая и популяционная генетика

1109

## ОРИГИНАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

Компьютерное моделирование пространственной динамики и первичной генетической дивергенции в системе популяций на кольцевом ареале.

*М.П. Кулаков, О.Л. Жданова, Е.Я. Фрисман*

## Эволюционная биоинформатика

1122

## ОРИГИНАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

Асимметрия нуклеотидных замен в тРНК свидетельствует об общем происхождении современных организмов от термофильного предка.

*И.И. Тутов*

## Медицинская биоинформатика

1129

## ОРИГИНАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

Оценка зависимости показателей мозговой активности от индивидуальной однонуклеотидной варибельности генетических маркеров большого депрессивного расстройства с использованием анализа главных компонент.

*К.А. Зорина, А.А. Кривецкий, В.С. Карманов, А.Н. Савостьянов*

1137

## ОРИГИНАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

Старение кожи связано с локальным дисбалансом в Т-клеточном иммунитете.

*К.С. Матвеева, С.К. Колмыков, Т.С. Соколова, Д.Р. Салимов, Д.В. Шевырев*

## Инструментальные средства биоинформатики

1145

## ОРИГИНАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

OrthoML2GO: предсказание функций белков по гомологии с использованием ортогрупп и алгоритмов машинного обучения.

*Е.В. Малюгин, Д.А. Афонников*

- 911 **FROM THE EDITOR**  
*N.A. Kolchanov, T.A. Bukharina*

## Computational genomics

- 913 **ORIGINAL ARTICLE**  
DNA damage reflected in the evolution of G-runs in genomes. *I.R. Grin, D.O. Zharkov*
- 925 **ORIGINAL ARTICLE**  
Linking hierarchical classification of transcription factors by the structure of their DNA-binding domains to the variability of their binding site motifs. *V.G. Levitsky, T.Yu. Vatolina, V.V. Raditsa*
- 940 **ORIGINAL ARTICLE**  
PlantReg 1.1 identifies the mutual arrangement of transcription factor binding sites in the target promoters for the elucidation of molecular mechanisms within regulatory networks. *V.V. Lavrekha, N.A. Omelyanchuk, A.G. Bogomolov, Y.A. Ryabov, P.K. Mukebenova, E.V. Zemlyanskaya*
- 952 **ORIGINAL ARTICLE**  
FlyDEGdb knowledge base on differentially expressed genes of *Drosophila melanogaster*, a model object in biomedicine. *O.A. Podkolodnaya, M.A. Deryuzhenko, N.N. Tverdokhlebo, K.A. Zolotareva, Yu.V. Makovka, N.L. Podkolodny, V.V. Suslov, I.V. Chadaeva, L.A. Fedoseeva, A.A. Seryapina, D.Yu. Oshchepkov, A.G. Bogomolov, E.Yu. Kondratyuk, O.E. Redina, A.L. Markel, N.E. Gruntenko, M.P. Ponomarenko*

## Systems computational biology

- 963 **ORIGINAL ARTICLE**  
Reconstruction and analysis of the gene network regulating apoptosis in hepatocellular carcinoma based on scRNA-seq data and the ANDSystem knowledge base. *A.V. Adamovskaya, I.V. Yatsyk, M.A. Kleshchev, P.S. Demenkov, T.V. Ivanisenko, V.A. Ivanisenko*
- 978 **ORIGINAL ARTICLE**  
Hedgehog signaling in humans: the HH\_Signal\_pathway\_db knowledge base. *T.A. Bukharina, A.M. Bondarenko, D.P. Furman*

- 990 **ORIGINAL ARTICLE**  
Identification of proteins regulating phenotype-associated genes of M2 macrophages: a bioinformatic analysis. *E.A. Antropova, I.V. Yatsyk, P.S. Demenkov, T.V. Ivanisenko, V.A. Ivanisenko*

- 1000 **ORIGINAL ARTICLE**  
*In silico* reconstruction of the gene network for cytokine regulation of ASD-associated genes and proteins. *N.M. Levanova, E.G. Vergunov, A.N. Savostyanov, I.V. Yatsyk, V.A. Ivanisenko*

- 1009 **ORIGINAL ARTICLE**  
The gene network and knowledge base on human thermoregulation. *E.V. Ignatieva, P.S. Demenkov, A.G. Bogomolov, R.A. Ivanov, S.A. Lashin, A.D. Mikhailova, A.E. Alekseeva, N.S. Yudin*

- 1020 **ORIGINAL ARTICLE**  
Searching for biological processes as targets for rheumatoid arthritis targeted therapy with ANDSystem, an integrated software and information platform. *E.L. Mishchenko, I.V. Yatsyk, P.S. Demenkov, A.V. Adamovskaya, T.V. Ivanisenko, M.A. Kleshchev, V.A. Ivanisenko*

- 1031 **REVIEW**  
Mathematical models of iron metabolism: structure and functions. *N.I. Melchenko, I.R. Akberdin*

- 1041 **ORIGINAL ARTICLE**  
Identification and analysis of the connection network structure between the components of the immune system in children. *D.S. Grebennikov, A.P. Toptygina, G.A. Bocharov*

- 1051 **ORIGINAL ARTICLE**  
Self-learning virtual organisms in a physics simulator: on the optimal resolution of their visual system, the architecture of the nervous system and the computational complexity of the problem. *M.S. Zenin, A.P. Devyaterikov, A.Yu. Palyanov*

## Structural computational biology

- 1062 **ORIGINAL ARTICLE**  
Molecular dynamic analysis of the functional role of amino acid residues V99, F124 and S125 of human DNA dioxygenase ABH2. *M. Zhao, T.E. Tyugashev, A.T. Davletgildeeva, N.A. Kuznetsov*

- 1073 **ORIGINAL ARTICLE**  
Structural basis of the phosphoramidate *N*-benzimidazole group's influence on modified primer extension efficiency by Taq DNA polymerase.  
*A.A. Berdugin, V.M. Golyshev, A.A. Lomzov*

- 1084 **ORIGINAL ARTICLE**  
Prediction of interactions between the SARS-CoV-2 ORF3a protein and small-molecule ligands using the ANDSystem cognitive platform, graph neural networks, and molecular modeling. *T.V. Ivanisenko, P.S. Demenkov, M.A. Kleshchev, V.A. Ivanisenko*

- 1097 **ORIGINAL ARTICLE**  
The effect of dimeric bisbenzimidazoles on the activity of DNA repair enzymes TDP1, TDP2, PARP1 and PARP2.  
*N.S. Dyrkheeva, I.A. Chernyshova, A.F. Arutyunyan, A.L. Zakharenko, M.M. Kutuzov, K.N. Naumenko, A.S. Venzel, V.A. Ivanisenko, S.M. Deyev, A.L. Zhuze, O.I. Lavrik*

## Ecological and population genetics

- 1109 **ORIGINAL ARTICLE**  
Computer modeling of spatial dynamics and primary genetic divergence for a population system in a ring areal.  
*M.P. Kulakov, O.L. Zhdanova, E.Ya. Frisman*

## Evolutionary bioinformatics

- 1122 **ORIGINAL ARTICLE**  
Asymmetry of nucleotide substitutions in tRNAs indicates common descent of modern organisms from a thermophilic ancestor. *I.I. Titov*

## Medical bioinformatics

- 1129 **ORIGINAL ARTICLE**  
Assessing the dependence of brain activity on individual single-nucleotide variability of genetic markers of major depressive disorder using principal component analysis. *K.A. Zorina, A.A. Kriveckiy, V.S. Karmanov, A.N. Savostyanov*

- 1137 **ORIGINAL ARTICLE**  
Senescent cell accumulation is associated with T-cell imbalance in the skin.  
*K.S. Matveeva, S.K. Kolmykov, T.S. Sokolova, D.R. Salimov, D.V. Shevyrev*

## Bioinformatics tools

- 1145 **ORIGINAL ARTICLE**  
OrthoML2GO: homology-based protein function prediction using orthogroups and machine learning.  
*E.V. Malyugin, D.A. Afonnikov*