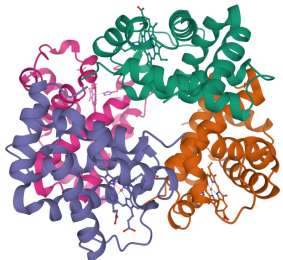
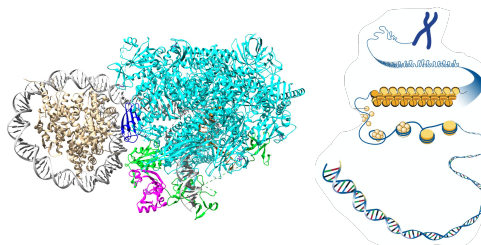
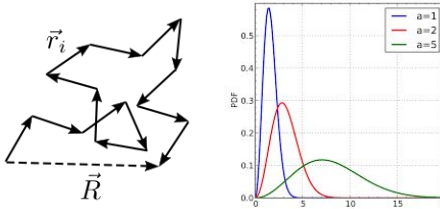
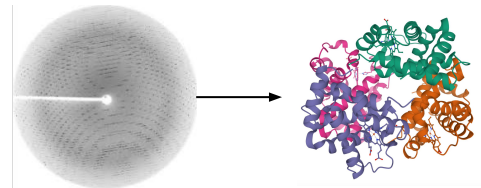
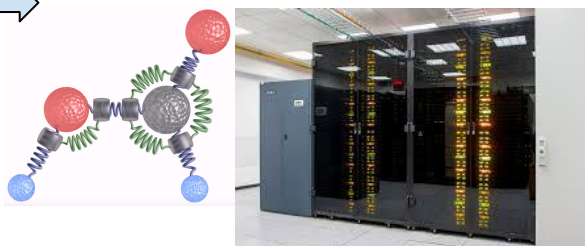


а)  Представление молекулярных систем	<u>Механистическое представление</u>    Глобулярные белки, небольшие комплексы	<u>Комбинированные подходы</u>    Неупорядоченные белки, макромолекулярные комплексы, хроматин и т.д.	<u>Статистическое представление</u>    Жидкости, растворы, газы, синтетические полимеры ...
б)  Подход к моделированию	<div><div><u>“Molecular modeling”</u>  Решение оптимизационных задач на основе экспериментальных данных  </div><div><u>“Molecular simulations”</u>  Численное моделирование на основе элементарных взаимодействий между атомами  </div><div><b>Интегративное моделирование</b></div></div>		
в)  Входные данные	Данные высокого информационного содержания для конкретной системы (~ кол-ву атомов) РСА, ЯМР, криоЭМ, ...	Данные низкого информационного содержания (расстояние между метками, химическое расщепление/сшивание, данные рассеяния на малых углах, ...)	“Ab initio” подходы, эмпирические силовые поля.