

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Ястребов Олег Александрович
Должность: Ректор
Дата подписания: 23.04.2026 11:33:24
Уникальный программный ключ:
ca953a0120d891083f939673078ef1a989dae18a

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы»**

Медицинский институт

(наименование основного учебного подразделения (ОУП)-разработчика ОП ВО)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КСЕНОБИОТИКОВ

(наименование дисциплины/модуля)

Рекомендована МССН для направления подготовки/специальности:

06.04.01 БИОЛОГИЯ

(код и наименование направления подготовки/специальности)

Освоение дисциплины ведется в рамках реализации основной профессиональной образовательной программы высшего образования (ОП ВО):

БИОФАРМАЦЕВТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ

(наименование (профиль/специализация) ОП ВО)

2026 г.

1. ЦЕЛЬ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Дисциплина «Компьютерное моделирование ксенобиотиков» входит в программу магистратуры «Биофармацевтический анализ» по направлению 06.04.01 «Биология» и изучается в 3 семестре 2 курса. Дисциплину реализует Кафедра фармацевтической и токсикологической химии. Дисциплина состоит из 4 разделов и 10 тем и направлена на изучение возможностей применения современного моделирования QSAR, методов моделирования и репрезентативного представления молекул лекарственных средств.

Целью освоения дисциплины является формирование компетенций в области QSAR modeling для биофармацевтического применения.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Освоение дисциплины «Компьютерное моделирование ксенобиотиков» направлено на формирование у обучающихся следующих компетенций (части компетенций):

Таблица 2.1. Перечень компетенций, формируемых у обучающихся при освоении дисциплины (результаты освоения дисциплины)

Шифр	Компетенция	Индикаторы достижения компетенции (в рамках данной дисциплины)
УК-1	Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, выработать стратегию действий	УК-1.1 Знать способы решения проблемных задач и выявлять их составляющие и связи между ними; УК-1.3 Владеть стратегией решения проблемной ситуацией на основе системного и междисциплинарного подходов;
ПК-1	Готовность к проведению работ по исследованиям лекарственных средств	ПК-1.3 Владеет фармакопейными методами анализа, используемыми для испытаний лекарственных средств;

3. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОП ВО

Дисциплина «Компьютерное моделирование ксенобиотиков» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений блока 1 «Дисциплины (модули)» образовательной программы высшего образования.

В рамках образовательной программы высшего образования обучающиеся также осваивают другие дисциплины и/или практики, способствующие достижению запланированных результатов освоения дисциплины «Компьютерное моделирование ксенобиотиков».

Таблица 3.1. Перечень компонентов ОП ВО, способствующих достижению запланированных результатов освоения дисциплины

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
УК-1	Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, выработать стратегию действий	Биоэтика; Введение в биофармацевтический анализ; Информационно-поисковые системы в биологии, медицине и фармации;	Иммуноферментный анализ;
ПК-1	Готовность к проведению	Научно-исследовательская	Преддипломная практика;

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
	работ по исследованиям лекарственных средств	практика в биофармацевтическом анализе; Физико-химические основы анализа биоматериалов и лекарственных средств; Основы биотехнологии; Введение в биофармацевтический анализ; Фармакопейный анализ субстанций и готовых лекарственных форм; Информационно-поисковые системы в биологии, медицине и фармации; Атомная и молекулярная спектроскопия в биологии и фармации;	Основы клинической фармакологии;

* - заполняется в соответствии с матрицей компетенций и СУП ОП ВО

** - элективные дисциплины /практики

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Общая трудоемкость дисциплины «Компьютерное моделирование ксенобиотиков» составляет «2» зачетные единицы.

Таблица 4.1. Виды учебной работы по периодам освоения образовательной программы высшего образования для очной формы обучения.

Вид учебной работы	ВСЕГО, ак.ч.		Семестр(-ы)
			3
<i>Контактная работа, ак.ч.</i>	48		48
Лекции (ЛК)	16		16
Лабораторные работы (ЛР)	32		32
Практические/семинарские занятия (СЗ)	0		0
<i>Самостоятельная работа обучающихся, ак.ч.</i>	18		18
<i>Контроль (экзамен/зачет с оценкой), ак.ч.</i>	6		6
Общая трудоемкость дисциплины	ак.ч.	72	72
	зач.ед.	2	2

5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 5.1. Содержание дисциплины (модуля) по видам учебной работы

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Наименование темы		Содержание темы	Вид учебной работы*
Раздел 1	Introduction to QSAR. QSAR tutorials	1.1	Principal Components Analysis Tutorial	Introduction to Principal Component Analysis (PCA) as a dimensionality reduction technique in QSAR, used to identify patterns in data and reduce the number of variables while preserving most of the variation. Focus on data pre-processing, eigenvalue extraction, and interpretation of principal components in molecular descriptor sets.	ЛК, ЛР
		1.2	Hierarchical Clustering Tutorial. Clustering Methods Tutorial	Overview of hierarchical clustering and other clustering methods (e.g., k-means) for grouping chemical compounds based on similarity of molecular descriptors or biological activity. Emphasis on dendrogram interpretation and selection of optimal clusters in QSAR data sets.	ЛК, ЛР
		1.3	CoMFA Tutorial. CoMSIA Tutorial. Conformer Columns Tutorial. EVA Tutorial	Tutorials on 3D-QSAR techniques: CoMFA (Comparative Molecular Field Analysis) and CoMSIA (Comparative Molecular Similarity Indices Analysis) for modeling steric, electrostatic, and other fields; Conformer Columns for handling multiple conformers; EVA (Eigenvector Analysis) for spectral data analysis in QSAR.	ЛК, ЛР
Раздел 2	SAMPLS and Advanced CoMFA Tutorials	2.1	SAMPLS Tutorial	Tutorial on SAMPLS (Simplified Molecular Input Line Entry System Partial Least Squares), a method combining SMILES notation with PLS regression for QSAR modeling. Focus on descriptor generation from SMILES strings and PLS-based activity prediction.	ЛК, ЛР
		2.2	Region Focusing Tutorial	Guide to Region Focusing — a technique for identifying the most relevant molecular regions or substructures that contribute to biological activity in QSAR models. Includes visualization tools and statistical validation of focused regions.	ЛК, ЛР
		2.3	Optimizing QSAR Tutorial	Step-by-step guide to optimizing QSAR models: variable selection, cross-validation strategies (k-fold), model validation metrics (R^2 , Q^2 , RMSE), and overfitting prevention. Emphasis on improving predictive power and robustness of QSAR equations.	ЛК, ЛР
Раздел 3	QSAR Theory	3.1	Concepts Associated With QSAR	Key QSAR concepts: molecular descriptors (2D/3D), activity cliffs, training and test sets, validation principles (internal/external), applicability domain, and the relationship between chemical structure and biological activity. Foundation for building reliable	ЛК, ЛР

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Наименование темы		Содержание темы	Вид учебной работы*
				predictive models.	
		3.2	CoMFA Theory. CoMSIA Theory	Theoretical foundations of 3D-QSAR methods: CoMFA based on steric and electrostatic field calculations around aligned molecules; CoMSIA extending the approach with additional fields (hydrophobic, hydrogen-bonding) and Gaussian functions for smoother descriptor generation.	ЛК, ЛР
		3.3	QSAR Techniques	Overview of QSAR modeling techniques: linear and non-linear (random forest) methods; 2D- and 3D-QSAR approaches. Comparison of applicability, advantages, and limitations for drug discovery and toxicity prediction.	ЛК, ЛР
Раздел 4	QSAR Graphical Interface	4.1	QSAR Command	Introduction to command-line tools and software commands for executing QSAR workflows: data input, descriptor calculation, model building, validation, and output interpretation. Focus on automation and reproducibility of QSAR analyses.	ЛК, ЛР

* - заполняется только по **ОЧНОЙ** форме обучения: ЛК – лекции; ЛР – лабораторные работы; СЗ – практические/семинарские занятия.

6. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 6.1. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Тип аудитории	Оснащение аудитории	Специализированное учебное/лабораторное оборудование, ПО и материалы для освоения дисциплины (при необходимости)
Лекционная	Аудитория для проведения занятий лекционного типа, оснащенная комплектом специализированной мебели; доской (экраном) и техническими средствами мультимедиа презентаций.	Технические средства: видеопроектор Xiaomi Miija Laser Projection; Ноутбук Toshiba Satellite A 350-20J; Microsoft Office профессиональный плюс 2007 № RQ6Q2-K4P9M-TK48W-KMK4J-GTDRB; Wundows Vista (TM) Home Premium № 6DG3Y-99KMR-JQMWD-2QJRJ-RJ-RJ34F
Лаборатория	Аудитория для проведения лабораторных работ, индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оснащенная комплектом специализированной мебели и оборудованием.	Лазерная установка динамического светорассеяния Zetasizer Nano ZSP производства Malvern Instruments Ltd; Спектрофлуориметр Cary Eclipse производства Agilent Technologies Inc.; Рентгенофлуоресцентный энергодисперсионный спектрометр EDX-7000; ИК-фурье спектрометр Cary-630 IR; Спектрофотометр Cary-60; Поляриметр цифровой POL-1/2 с контролем температуры по принципу Пельтье
Для самостоятельной работы	Аудитория для самостоятельной работы обучающихся (может использоваться для проведения семинарских занятий и консультаций), оснащенная комплектом специализированной мебели и компьютерами с доступом в ЭИОС.	Периодическая система химических элементов Д.И. Менделеева, доска магнитно-маркерная

* - аудитория для самостоятельной работы обучающихся указывается **ОБЯЗАТЕЛЬНО!**

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература:

1. Statistical Modelling of Molecular Descriptors in QSAR/QSPR. Matthias Dehmer, Kurt Varmuza, Danail Bonchev. John Wiley & Sons Limited, 2018, 458 стр.
2. Ligand-Based Design Manual. QSAR. SYBYL and related Tripos modules © Copyright 1991-1999 Tripos, Inc. pp. 383.
3. Best Practices for QSAR Model Development, Validation, and Exploitation. Alexander Tropsha. DOI: 10.1002/minf.201000061.

Дополнительная литература:

1. Review on: quantitative structure activity relationship (QSAR) modeling. Umma Muhammad, Adamu Uzairu, David Ebuka Arthur. 2018. DOI: 10.15406/japlr.2018.07.00232

2. QSAR Modeling: Where have you been? Where are you going to? 2013, DOI: 10.1021/jm4004285

- <https://www.fkkt.um.si/ukemat/Tropsha-QSPR.pdf>

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

1. ЭБС РУДН и сторонние ЭБС, к которым студенты университета имеют доступ на основании заключенных договоров

- Электронно-библиотечная система РУДН – ЭБС РУДН

<http://lib.rudn.ru/MegaPro/Web>

- ЭБС «Университетская библиотека онлайн» <http://www.biblioclub.ru>

- ЭБС Юрайт <http://www.biblio-online.ru>

- ЭБС «Консультант студента» www.studentlibrary.ru

- ЭБС «Троицкий мост»

2. Базы данных и поисковые системы

- электронный фонд правовой и нормативно-технической документации

<http://docs.cntd.ru/>

- поисковая система Яндекс <https://www.yandex.ru/>

- поисковая система Google <https://www.google.ru/>

- реферативная база данных SCOPUS

<http://www.elsevierscience.ru/products/scopus/>

Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся при освоении дисциплины/модуля:*

1. Курс лекций по дисциплине «Компьютерное моделирование ксенобиотиков».

* - все учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся размещаются в соответствии с действующим порядком на странице дисциплины **в ТУИС!**

РАЗРАБОТЧИК:

Доцент кафедры
фармацевтической и
токсикологической химии

Должность, БУП

Колдина Алёна
Михайловна

Фамилия И.О.

Подпись

РУКОВОДИТЕЛЬ БУП:

Заведующий кафедрой

Должность БУП

Сыроешкин Антон
Владимирович

Фамилия И.О.

Подпись

РУКОВОДИТЕЛЬ ОП ВО:

Заведующий кафедрой
фармацевтической и
токсикологической химии,
д.б.н., профессор

Должность, БУП

Сыроешкин Антон
Владимирович

Фамилия И.О.

Подпись