

# PLANTA+

НАУКА, ПРАКТИКА ТА ОСВІТА

SCIENCE, PRACTICE AND EDUCATION

28-29 січня 2025 р.  
м. Київ, Україна

January 28-29, 2025  
Kyiv, Ukraine

Том 2  
Volume 2

20  
25



МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ  
МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ  
НАЦІОНАЛЬНИЙ МЕДИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ О.О. БОГОМОЛЬЦЯ  
ІНСТИТУТ БОТАНІКИ ІМ. М.Г. ХОЛОДНОГО НАН УКРАЇНИ  
НАЦІОНАЛЬНИЙ ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

**«PLANTA+. НАУКА, ПРАКТИКА ТА ОСВІТА»**

**Матеріали**  
**V Науково-практичної конференції з міжнародною участю,**  
**присвяченої пам'яті доктора хімічних наук,**  
**професорки Ніни Павлівни Максютіної**  
**(до 100-річчя від дня народження)**

*Том 2*

**28-29 січня 2025 року**  
**м. Київ**

MINISTRY OF HEALTH OF UKRAINE  
MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF UKRAINE  
NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF UKRAINE  
BOGOMOLET'S NATIONAL MEDICAL UNIVERSITY  
M.G. KHOLODNY INSTITUTE OF BOTANY  
NATIONAL UNIVERSITY OF PHARMACY

**«PLANTA+. SCIENCE, PRACTICE AND EDUCATION»**

**The proceedings  
of the Fifth Scientific and Practical Conference with International  
Participation, dedicated to the memory of Doctor of Chemistry  
Professor Nina Pavlivna Maksyutina  
(on her 100th birthday)**

*Volume 2*

**28-29 January 2025  
Kyiv**

УДК 615.322.03:001.891](477+100)(082)

**P71**

**РЕДАКЦІЙНА КОЛЕГІЯ**

**Мінарченко В. М.**, доктор біологічних наук, професор

**Карнюк У. В.**, доктор фармацевтичних наук, професор

**Махиня Л. М.**, кандидат біологічних наук, доцент

**Підченко В. Т.**, кандидат фармацевтичних наук, доцент

**Чолак І. С.**, кандидат фармацевтичних наук, доцент

**Ковальська Н. П.**, кандидат фармацевтичних наук, доцент

**Ольшанський І.Г.**, кандидат біологічних наук

**P71 PLANTA+. НАУКА, ПРАКТИКА ТА ОСВІТА:** матеріали V науково-практичної конференції з міжнародною участю, присвяченої пам'яті доктора хімічних наук, професорки Ніни Павлівни Максютіної (до 100-річчя від дня народження) (Київ, 28-29 січня 2025 р.). Київ : Паливода А. В., 2025. Т.2. 302 с.

ISBN 978-966-437-807-6 (Повне зібрання)

ISBN 978-966-437-784-0 (Том 2)

Збірник містить матеріали V науково-практичної конференції з міжнародною участю, присвяченої пам'яті доктора хімічних наук, професорки Ніни Павлівни Максютіної (до 100-річчя від дня народження) «PLANTA+. НАУКА, ПРАКТИКА ТА ОСВІТА». У збірнику опубліковано результати наукових досліджень провідних вчених України та іноземних фахівців з питань фітохімічного аналізу, стандартизації лікарської рослинної сировини, інтродукції, ресурсознавства лікарських рослин. висвітлено питання технології та аналізу лікарських засобів рослинного походження, дієтичних добавок, лікувально-профілактичних та косметичних засобів. представлені фармакологічні дослідження з питань безпечності та застосування у клінічній практиці лікарських засобів рослинного походження. Розглянуто проблеми модернізації навчального процесу та орієнтації на дистанційне навчання у закладах освіти.

Матеріали представляють інтерес і можуть бути корисними для широкого кола наукових та науково-педагогічних працівників наукових установ, закладів вищої освіти фармацевтичного, медичного, біологічного профілю, докторантів, аспірантів, студентів, співробітників фармацевтичних підприємств та громадських організацій.

*Друкується в авторській редакції. відповідальність за достовірність наданого для видання матеріалу несуть автори одноосібно. будь-яке відтворення тексту без згоди авторів забороняється. матеріали пройшли антиплагіатну перевірку за допомогою програмного забезпечення strikeplagiarism.*

**ISBN 978-966-437-807-6 (Повне зібрання)**

**ISBN 978-966-437-784-0 (Том 2)**

© Національний медичний університет  
імені О. О. Богомольця, 2025

© Колектив авторів, 2025

# ПРОГНОЗУВАННЯ БІОДОСТУПНОСТІ ЛІКАРСЬКИХ РЕЧОВИН НА ОСНОВІ ЇХ ХІМІЧНОЇ СТРУКТУРИ

Пушкарьова Я.М., Тимченко І.І.

Національний медичний університет імені О.О. Богомольця,  
м. Київ, Україна

yaroslava.pushkarova@gmail.com, inaraakperova5@gmail.com

Ключові слова: дизайн лікарських засобів, фармація, молекулярний дескриптор, множинна регресія, нейронна мережа

**Вступ.** Прогнозування біологічної доступності є важливим етапом у розробці лікарських засобів, оскільки від нього залежить як ефективність, так і безпека лікарського препарату. Біодоступність характеризує кількість активної речовини, що досягає системного кровотоку в незміненому вигляді, та швидкість цього процесу [3]. Сучасні підходи та технології (машинне навчання, хемометричні методи, штучні нейронні мережі тощо) активно трансформують фармацевтичну галузь, впливаючи на всі етапи – від досліджень і розробки лікарських засобів до їх виробництва та впровадження на ринок [1].

**Матеріали та методи.** Досліджена вибірка: 145 лікарських речовин для перорального застосування. Методи: розрахунок молекулярних дескрипторів, множинна регресія, нейронна мережа прямого поширення сигналу. Програмне забезпечення: ChemOffice 2020, Matlab R2024b (trial license). Експериментальні значення біологічної доступності досліджених лікарських речовин наведені у літературі [2].

**Результати та їх обговорення.** Визначено доцільний набір із 7 молекулярних дескрипторів для ефективного прогнозування біодоступності лікарських речовин для перорального застосування. З'ясовано, що наявність 16 прихованих нейронів у структурі нейронної мережі прямого поширення сигналу забезпечує її найкраще навчання. Реалізовану нейронну мережу застосували для прогнозування значень біодоступності нових (невдомих для нейронної мережі) лікарських речовин.

**Висновки.** Результати свідчать, що запропонована процедура прогнозування біологічної доступності є дієвою і може бути корисною при плануванні експериментальних досліджень та розробці лікарських засобів.

## Перелік посилань

1. Pushkarova Y., Zaitseva G., Saker M. A. Prediction of Toxicity of Phenols Using Artificial Neural Networks. *2022 12th International Conference on Advanced Computer Information Technologies (ACIT)*, Slovakia, 26–28 September 2022.
2. Turner J. V., Glass B. D., Agatonovic-Kustrin S. Prediction of drug bioavailability based on molecular structure. *Analytica Chimica Acta*. 2003. Vol. 485, no. 1. P. 89–102.
3. Yang Q., Fan L., Hao E., Hou X., Deng J., Xia Z., Du Z. Construction of An Oral Bioavailability Prediction Model Based on Machine Learning for Evaluating Molecular Modifications. *Journal of Pharmaceutical Sciences*. 2024. Vol. 113, no. 5. P. 1155–1167.