



Sherman Oaks California (USA), 2025



MODERN ASPECTS OF SCIENCE AND EDUCATION

COLLECTIVE MONOGRAPH

MODERN ASPECTS OF SCIENCE
AND EDUCATION

Compiled by
VIKTOR SHPAK

Chairman of the Editorial Board
STANISLAV TABACHNIKOV

GS Publishing Services
Sherman Oaks
2025

The collective monograph is a scientific and practical publication that contains scientific articles by doctors and candidates of sciences, doctors of philosophy and art, graduate students, students, researchers and practitioners from European and other countries. The articles contain research that reflects current processes and trends in world science.

Text Copyright © 2025 by the Publisher «GS Publishing Services» and authors.

Illustrations © 2025 by the Publisher «GS Publishing Services» and authors.

Cover design © 2025 Publisher «GS Publishing Services».

Authors: Marina Azhazha, Olena Berezinska, Yaroslav Chkana, Dmytro Hetmanm, Liliia Kotsan, Kateryna Kovalova, Yuliya Kovalova, Vita Logvinova, Nataliia Lysenko, Natalya Metelenko, Anatoliy Mikhailov, Oleg Mikhailov, Vitalina Nikitenko, Iryna Panova, Oleg Pergat, Mykola Pysarevskiy, Iryna Riabinina, Natalia Riabinina, Oleksandr Romaniuk, Elman Safarov, Yevgenii Shtefan, Mykhailo Sidorov, Igor Strashynskiy, Vira Tymoshenko, Olga Venger, Valentyna Voronkova.

**MEDICAL-PSYCHOLOGICAL, ENVIRONMENTAL AND SOCIO-ECONOMIC
CONSEQUENCES OF THE CHORNOBYL DISASTER**

**based on the materials of the scientific and practical online conference
with international participation April 25, 2025**

Authors: Iryna Andrusyshyna, Olha Biliaieva, Maxim Bilyachenko, Andrii Bitinsh, Halyna Bolshakova, Svitlana Burburska, Tetiana Chastii, Nataliia Dmytrukha, Inna Holub, Olha Holubka, Hrygoriy Hryban, Denis Garmash, Valentyna Groza, Eduard Ivashkevych, Ernest Ivashkevych, Yevhen Kharchenko, Maksym Kovhan, Iryna Kuchma, Anastasiia Kundiieva, Olena Lampeka, Valentyna Movchan, Valentyna Moyseyenko, Nataliia Mykhalchuk, Iryna Nizhenkovska, Oksana Osadcha, Volodymyr Panchenko, Olena Pantus, Serhii Puzik, Svitlana Rodchenko, Evgen Shepetko, Yuliia Shevchenko, Ostap Skoruy, Myroslava Stadnyk, Stanislav Tabachnikov, Pavlo Tkachenko, Tetiana Tovalovych, Olena Velchynska, Anastasia Yasna, Oleksandr Zaporozhets, Mykhailo Zhyvko, Zinaida Zhyvko, Serhii Zozulia.

**MEDICINE AND PHARMACY: CURRENT ISSUES OF GENERAL MEDICAL
AND PHARMACEUTICAL PRACTICE IN WAR TIMES**

**based on the materials of the scientific and practical online conference
with international participation on May 14, 2025**

Authors: Dmytro Bondarenko, Olha Chorna, Oleksandr Chubenko, Tetiana Doroshenko, Serhii Hozhdzinskiy, Natalia Huzenko, Sofia Kharlampovych, Serhii Maksymenko, Yuliia Maksymenko, Iryna Nizhenkovska, Yaroslava Pushkarova, Kateryna Smetanina, Pawel Syta, Yelyzaveta Trotsenko, Tetiana Vartolomeieva, Olena Velchynska, Olena Welchinska, Volodymyr Zaitsev, Halyna Zaitseva. Galyna Zaitseva.

All rights reserved. No part of this publication may be reproduced, distributed or transmitted in any form or by any means, or stored in a database or search engine without the prior written permission of the publisher. The authors are responsible for the content and reliability of their articles. Citation or other use of the monograph is possible only with reference to the publication.

Publisher «GS Publishing Services»
15137 Magnolia Blvd, # D,
Sherman Oaks, CA 91403, USA.

ISBN 979-8-9917519-2-6
DOI: 10.51587/9798-9917-51926-2025-023

Scientific editors-reviewers:
S. Bobrovnyk, Yu. Bondar, A. Cherep, P. Glukhovskiy, P. Hovorov, Yu. Kuznetsov,
V. Lazurenko, V. Moiseienko, L. Omelianiychuk, R. Protsiuk, Zh. Virna.

The monograph is recommended for publication by the Academic Council of the Institute of Adult Education,
Presidium of the National Academy of Sciences of Higher Education of Ukraine.

Modern aspects of science and education : collective monograph / Compiled by V. Shpak; Chairman of the
Editorial Board S. Tabachnikov. Sherman Oaks, California : GS Publishing Services, 2025. 428 p.

Available at: DOI: 10.51587/9798-9917-51926-2025-023

CONTENT

COMPUTER SCIENCE

Oleksandr ROMANIUK

RAY TRACING METHODS FOR FORMING THREE-
DIMENSIONAL GRAPHIC IMAGES.....9

**Oleksandr ROMANIUK,
Yuliya KOVALOVA**

WEB DESIGN DEVELOPMENT CONCEPTS.....30

ECONOMIC SCIENCES

**ВОРОНKOBA Валентина Григорівна,
МЕТЕЛЕНKO Наталя Георгіївна,
НІКІТЕНKO Віталіна Олександрівна,
АЖАЖА Марина Андріївна,
БЕНГЕР Ольга Миколаївна**

ЦИФРОВІ ТЕХНОЛОГІЇ ЯК ЧИННИК СТАЛОГО
РОЗВИТКУ ЕКОЛОГІЧНОГО МЕНЕДЖМЕНТУ,
ЕКОЛОГІЧНОЇ БЕЗПЕКИ ТА ЗЕЛЕНОЇ ЕКОНОМІКИ
В УМОВАХ ГЛОБАЛЬНИХ ВИКЛИКІВ.....95

ГЕТЬМАН Дмитро Володимирович

МОЖЛИВОСТІ ТА ПЕРСПЕКТИВИ ПОДАТКОВОГО
РЕГУЛЮВАННЯ КРИПТОВАЛЮТИ В УКРАЇНІ.....119

Natalia RIABININA

INNOVATIVE TRENDS IN THE PRODUCTION OF MEAT
SUBSTITUTES124

LINGUISTICS

**РЯБІНІНА Ірина Миколаївна,
ЛИСЕНКО Наталія Василівна,
КОВАЛЬОВА Катерина Дмитрівна**

МЕТОДИКА ПЕРЕКЛАДУ НЕНОРМАТИВНОЇ ЛЕКСИКИ
ІНОЗЕМНОЇ ХУДОЖНЬОЇ ЛІТЕРАТУРИ139

Olena BEREZINSKA

USING THE VOICE AS A COMMUNICATION TOOL144

PEDAGOGICAL SCIENCES

ЧКАНА Ярослав Олегович

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ЯК ІНСТРУМЕНТ
РОЗВИТКУ КРИТИЧНОГО МИСЛЕННЯ УЧНІВ
В УМОВАХ НУШ.....150

PHYSICAL AND MATHEMATICAL SCIENCES

***Yevgenii SHTEFAN,
Anatoliy MIKHAILOV,
Oleg MIKHAILOV***

MODELING OF FORMING PROCESSES OF POWDER AND
POROUS MATERIALS PRODUCTS174

POLITICAL AND LEGAL SCIENCES

***Mykola PYSAREVSKIY,
Iryna PANOVA,
Mykhailo SIDOROV***

THE EVOLUTION OF THE CONCEPT OF INTERNATIONAL
SECURITY: THEORETICAL APPROACHES AND POLICY
PRACTICE IN THE 20TH AND 21ST CENTURIES188

ТИМОШЕНКО Віра Іванівна

ПРАВОПОРУШЕННЯ ЯК НАСЛІДОК СОЦІАЛЬНОЇ
НЕСПРАВЕДЛИВОСТІ.....202

PSYCHOLOGY

КОЦАН Лілія Миколаївна

КОУЧИНГ ЯК ГАЛУЗЬ РОЗВИТКУ МОТИВАЦІЇ ТА
ПСИХОЛОГІЧНА ПРОДУКЦІЯ215

TECHNICAL SCIENCES

***Oleg PERGAT,
Igor STRASHYNSKYI***

PROPERTIES OF MODEL MIXED MEAT AND
MEAT-CONTAINING SEMI-FINISHED PRODUCTS
DEPENDING ON THE AMOUNT
OF STRUCTURING AGENT222

САФАРОВ Елман Гасанбей огли

ПОВЕДІНКА МАТЕРІАЛІВ ПРИ ІМПУЛЬСНОМУ
НАВАНТАЖЕННІ.....231

VETERINARY MEDICINE

ЛОГВІНОВА Віта Володимирівна

ВІКОВІ ОСОБЛИВОСТІ ГІСТОАРХІТЕКТОНІКИ
ЛІМФОЇДНИХ УТВОРЕНЬ ТОНКОГО КИШЕЧНИКА
МУСКУСНИХ КАЧОК.....238

MEDICAL-PSYCHOLOGICAL, ENVIRONMENTAL AND SOCIO-ECONOMIC CONSEQUENCES OF THE CHORNOBYL DISASTER

**based on the materials of the scientific and practical
online conference with international participation**

April 25, 2025

ECONOMIC SCIENCES

**ЖИВКО Зінаїда Богданівна,
ПАНЧЕНКО Володимир Анатолійович,
СТАДНИК Мирослава Євгенівна,
ЖИВКО Михайло Олександрович,
РОДЧЕНКО Світлана Сергіївна**

СИНЕРГІЯ УПРАВЛІННЯ БІЗНЕСОМ, ІТ-ТЕХНОЛОГІЯМИ
ТА ЛЮДСЬКИМИ РЕСУРСАМИ: ВИКЛИКИ ТА НАСЛІДКИ
ЧОРНОБИЛЬСЬКОЇ КАТАСТРОФИ263

MEDICINE

**АНДРУСИШИНА Ірина Миколаївна,
ЛАМПЕКА Олена Григорівна,
ГОЛУБ Інна Олександрівна,
ДМИТРУХА Наталія Миколаївна,
МОВЧАН Валентина Олександрівна**

МЕДИЧНІ ТА ЕКОЛОГІЧНІ АСПЕКТИ ДІЇ СВИНЦЮ НА
ЗДОРОВ'Я НАСЕЛЕННЯ ТА СТАН ДОВКІЛЛЯ В РЕАЛІЯХ
СЬОГОДЕННЯ ЧЕРЕЗ ПРИЗМУ НАСЛІДКІВ
ЧОРНОБИЛЬСЬКОЇ КАТАСТРОФИ В УКРАЇНІ276

**БІЛЯЄВА Ольга Олександрівна,
ОСАДЧА Оксана Іванівна,
БІТІНЬШ Андрій Русланович**

ОБГРУНТУВАННЯ ЕФЕКТИВНОСТІ ЗАСТОСУВАННЯ
В КОМПЛЕКСНОМУ ЛІКУВАННІ ПАЦІЄНТІВ З
НЕЙРОІШЕМІЧНОЮ ФОРМОЮ СИНДРОМУ
ДІАБЕТИЧНОЇ СТОПИ.....282

Anastasiia KUNDIIEVA

WORK AND RESEARCH OF THE INSTITUTE THROUGH
THE PRISM OF THE CHORNOBYL CATASTROPHE289

Valentyna MOYSEYENKO

HEALTH STATUS AND RISK OF DEVELOPMENT OF LIVER
LESIONS AMONG THE RESIDENTS OF UKRAINE294

**ТАБАЧНИКОВ Станіслав Ісакович,
ТОВАЛОВИЧ Тетяна Володимирівна**

РОЛЬ І МІСЦЕ ПСИХОТЕРАПІЇ ТА
ПСИХОПРОФІЛАКТИКИ В ЗАБЕЗПЕЧЕННІ
НАДІЙНОСТІ І БЕЗПЕКИ ОПЕРАТИВНОГО
ПЕСОНАЛУ АТОМНИХ ЕЛЕКТРОСТАНЦІЙ
НА ПРИКЛАДІ ЧОРНОБИЛЬСЬКОЇ КАТАСТРОФИ298

**БОЛЬШАКОВА Галина Михайлівна,
ЧАСТІЙ Тетяна Володимирівна,
ШЕВЧЕНКО Юлія Володимирівна,
КУЧМА Ірина Юріївна,
ГОЛУБКА Ольга Вадимівна**

РАДІАЦІЯ ТА МІКРОБІОМ: ПЕРСПЕКТИВИ
ПРОБІОТИЧНОЇ ТЕРАПІЇ308

**Evgen SHEPETKO,
Denis GARMASH,
Svitlana BURBURSKA,
Maxim BILYACHENKO,
Anastasia YASNA**

TOTAL GASTRECTOMY WITH JEJUNOGASTROPLASTY IN
SURGICAL TREATMENT OF ACUTE BLEEDING GASTRIC
CANCER. WAYS TO IMPROVE THE RESULTS314

PHARMACY

**ВЕЛЬЧИНСЬКА Олена Василівна,
НІЖЕНКОВСЬКА Ірина Володимирівна**

ТЕХНОГЕННІ КАТАСТРОФИ: НАПРЯМКИ ХІМІКО-
ТОКСИКОЛОГІЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ КСЕНОБІОТИКІВ319

PSYCHOLOGY

**Nataliia MYKHALCHUK,
Yevhen KHARCHENKO,
Eduard IVASHKEVYCH,
Ernest IVASHKEVYCH**

PHYLOSOFICAL AND PSYCHOLOGICAL MECHANISM
OF SOCIO-ECONOMIC REHABILITATION OF THE
AFFECTED TERRITORIES OF KYIV REGION AS
THE RESULY OF THE ACCIDENT AT THE CHERNOBYL
NUCLEAR POWER PLANT324

SOCIAL SCIENCES

Hrygoriy HRYBAN,
Pavlo TKACHENKO,
Ostap SKORUY,
Olena PANTUS

RADIATION POLLUTION OF THE ENVIRONMENT
 AS A RESULT OF THE CHORNOBYL DISASTER AND
 ITS IMPACT ON HUMAN HEALTH344

TECHNICAL SCIENCES

Serhii PUZIK,
Valentyna GROZA,
Oleksandr ZAPOROZHETS,
Serhii ZOZULIA,
Maksym KOVHAN

REGENERATION OF THE SURFACE OF POLLUTION
 DEPOSITION OF POWER CLEANERS WITH DETERGENT352

**MEDICINE AND PHARMACY: CURRENT ISSUES OF GENERAL
 MEDICAL AND PHARMACEUTICAL PRACTICE IN WAR TIMES**

based on the materials of the scientific and practical
 online conference with international participation
 on May 14, 2025

БОНДАРЕНКО Дмитро Анатолійович,
ДОРОШЕНКО Тетяна Сергіївна,
МАКСИМЕНКО Юлія Андріївна

ЩОДО ПОШИРЕНOSTІ НАДЛИШКОВОЇ МАСИ ТІЛА
 ТА ОЖИРІННЯ СЕРЕД ЖІНОК МОЛОДОГО ТА
 СЕРЕДНЬОГО ВІКУ В ОДЕСЬКІЙ ОБЛАСТІ359

ВАРТОЛОМЕЄВА Тетяна Володимирівна

АКТИВНІ ФАРМАЦЕВТИЧНІ ІНГРЕДІЄНТИ У СКЛАДІ
 ДЕРМАТОЛОГІЧНИХ СУМІШЕЙ: БЕНЗОЇЛПЕРОКСИД,
 ІЗОТРЕТИНОЇН, АЗЕЛАЇНОВА КИСЛОТА363

Olena WELCHINSKA,
Pawel SYSA

STANDARDIZED METHODS FOR ANALYSIS OF THE ACTIVE
 SUBSTANCE TRIAMCINOLOL IN VETERINARY368

ВЕЛЬЧИНСЬКА Олена Василівна,
НІЖЕНКОВСЬКА Ірина Володимирівна

СУЧАСНИЙ ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ АНАЛІЗ: ІМПЛЕМЕНТАЦІЯ
 ВИСОКОЕФЕКТИВНИХ ІНСТРУМЕНТАЛЬНИХ МЕТОДІВ373

**ЗАЙЦЕВА Галина Миколаївна,
ГОЖДЗІНСЬКИЙ Сергій Мартинович,
ПУШКАРЬОВА Ярослава Миколаївна**

НАВЧАЛЬНА ДИСЦИПЛІНА «ОСНОВИ
ПАТЕНТОЗНАВСТВА»: ПРОБЛЕМИ, ВИКЛИКИ
ТА ПЕРСПЕКТИВИ ВПРОВАДЖЕННЯ378

**Volodymyr ZAITSEV,
Galyna ZAITSEVA**

COMPETENCY-BASED APPROACH TO TEACHING
PHYSICO-CHEMICAL METHODS OF ANALYSIS
IN MODERN PHARMACEUTICAL EDUCATION382

**ПУШКАРЬОВА Ярослава Миколаївна,
ЗАЙЦЕВА Галина Миколаївна**

ХЕМОМЕТРИЧНІ МЕТОДИ У СУЧАСНІЙ ФАРМАЦІЇ391

Kateryna SMETANINA

GERIATRIC PATIENTS IN FOCUS OF SPECIALIZED
PHARMACEUTICAL CARE398

ТРОЦЕНКО Єлизавета Павлівна

ВИЗНАЧЕННЯ ФІЗИКО-ХІМІЧНИХ ПАРАМЕТРІВ
СУБСТАНЦІЙ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБІВ
ФАРМАКОПЕЙНИМИ МЕТОДАМИ401

**ХАРЛАМПОВИЧ Софія Андріївна,
ВЕЛЬЧИНСЬКА Олена Василівна**

КОМБІНАЦІЯ МЕТОДІВ ГАЗОВОЇ ХРОМАТОГРАФІЇ–
МАС-СПЕКТРОМЕТРІЇ ДЛЯ ДОСЛІДЖЕННЯ ВМІСТУ
ПЕСТИЦИДІВ У ЛІКАРСЬКІЙ РОСЛИННІЙ СИРОВИНІ406

**ЧУБЕНКО Олександр Владкович,
ГУЗЕНКО Наталя Валеріївна,
ЧОРНА Ольга Володимирівна**

АНАЛІТИЧНА ДІАГНОСТИКА НОВИХ ПСИХОТРОПНИХ
РЕЧОВИН В БІОЛОГІЧНОМУ МАТЕРІАЛІ ЛЮДИНИ –
СУЧАСНІ ВИКЛИКИ410

МАКСИМЕНКО Сергій Дмитрович

МЕНТАЛЬНЕ ПРОТИСТОЯННЯ ЗАГРОЗАМ: ГЕНЕТИЧНИЙ ПІДХІД
ДО ПОДОЛАННЯ НАСЛІДКІВ ЧОРНОБИЛЬСЬКОЇ КАТАСТРОФИ,
ПАНДЕМІЇ COVID-19 ТА ВОЄННИХ ВИКЛИКІВ ЯК ГЛОБАЛЬНОЇ
ЗАГРОЗИ МАЙБУТНЬОМУ ЛЮДСТВА І ШЛЯХИ РЕАБІЛІТАЦІЇ
ЧЕРЕЗ ГЕНЕТИКО-КРЕАТИВНУ СТРАТЕГІЮ416

Conclusion

The competency-based approach is a forward-looking strategy that aligns pharmaceutical education with the needs of a modern, dynamic healthcare environment. By emphasizing demonstrable skills and real-world application, CBE enhances the teaching and learning of physico-chemical methods of analysis. As Ukrainian and international institutions continue to embrace this model, they pave the way for a more responsive, effective, and globally aligned educational system. Emphasizing lifelong learning, interdisciplinary integration, and digital innovation ensures that future pharmacists are well-equipped for the challenges and opportunities of the 21st-century pharmaceutical landscape.

ПУШКАРЬОВА Ярослава Миколаївна,

канд. хім. наук, доцент,
Національний медичний університет
імені О. О. Богомольця
ORCID ID: 0000-0001-9856-7846

ЗАЙЦЕВА Галина Миколаївна,

канд. хім. наук, доцент,
Національний медичний університет
імені О. О. Богомольця
ORCID ID: 0000-0003-3138-6324
Україна

ХЕМОМЕТРИЧНІ МЕТОДИ У СУЧАСНІЙ ФАРМАЦІЇ

У фармацевтичній галузі хемометричні методи набувають дедалі більшого значення. Це алгоритми математичної та статистичної обробки даних, що дозволяють обґрунтовано аналізувати значні обсяги експериментальної інформації¹. Їх застосування сприяє оптимізації процесів контролю якості, розробки нових лікарських форм та удосконаленню аналітичних методик². Завдяки здатності виявляти приховані закономірності, будувати прогностичні моделі та зменшувати ви-

1 Холін, Ю. В., Пушкарьова, Я. М., Пантелеймонов, А. В., & Некос, А. Н. (2016). Хемометричні методи в розв'язанні задач якісного хімічного аналізу та класифікації фізико-хімічних даних.

2 Biancolillo, A., & Marini, F. (2018). Chemometric methods for spectroscopy-based pharmaceutical analysis. *Frontiers in chemistry*, 6, 576.

трати часу й ресурсів, хеометричні підходи стали важливою складовою прикладної фармацевтичної практики на всіх етапах життєвого циклу лікарських засобів³.

Хеометричні методи забезпечують точний і об'єктивний аналіз ключових характеристик препаратів, таких як якість, стабільність, біодоступність, безпечність тощо⁴. Вони відкривають нові можливості для встановлення глибших взаємозв'язків між фізико-хімічними властивостями лікарських засобів і їх терапевтичними ефектами⁵.

Успішне впровадження хеометрії у фармацевтичну діяльність стало можливим завдяки розвитку обчислювальних підходів, що дозволяють виявляти структурні закономірності, класифікувати дані, будувати прогностичні моделі та оптимізувати експериментальні процеси⁶. До найбільш поширених хеометричних алгоритмів належать метод головних компонент, PLS-регресія, метод опорних векторів, Random Forest, кластерний аналіз і штучні нейронні мережі.

Метод головних компонент (Principal Component Analysis, PCA)

Метод головних компонент застосовується у фармацевтичних дослідженнях для зменшення розмірності даних без втрати суттєвої інформації. PCA трансформує корельовані змінні у нові некорельовані (головні компоненти), що дозволяє виявити основні фактори варіації у багатовимірних наборах даних⁷.

PCA демонструє високу результативність у контролі якості при класифікації лікарських засобів за спектральними профілями, виявленні фальсифікатів, оцінці стабільності форм тощо. Також він є корисним інструментом для обробки даних УФ-, ІЧ-, ЯМР- та Раман-спектроскопії⁸.

3 El-Gindy, A., & Hadad, G. M. (2012). Chemometrics in pharmaceutical analysis: an introduction, review, and future perspectives. *Journal of AOAC International*, 95(3), 609-623.

4 Singh, I., Juneja, P., Kaur, B., & Kumar, P. (2013). Pharmaceutical applications of chemometric techniques. *International Scholarly Research Notices*, 2013(1), 795178.

5 Pawar, H. A., & Kamat, S. R. (2014). Chemometrics and its application in pharmaceutical field. *J. Phys. Chem. Biophys*, 4(6), 169.

6 Pushkarova, Y., Zaitseva, G., & Kaliuzhenko, A. (2023, September). Classification of Residual Solvents by Risk Assessment Using Chemometric Methods. In *2023 13th International Conference on Advanced Computer Information Technologies (ACIT)* (pp. 562-565). IEEE.

7 Mertler, C. A., Vannatta, R. A., & LaVenita, K. N. (2021). Advanced and multivariate statistical methods: *Practical application and interpretation*. Routledge.

8 Becht, A., Schollmayer, C., Monakhova, Y., & Holzgrabe, U. (2021). Tracing the origin of paracetamol tablets by near-infrared, mid-infrared, and nuclear magnetic resonance spectroscopy using principal component analysis and linear discriminant analysis. *Analytical and bioanalytical chemistry*, 413, 3107-3118.

PLS-регресія (Partial Least Squares, PLS)

Метод часткових найменших квадратів дозволяє будувати моделі залежності між структурними або спектральними дескрипторами та залежною змінною (наприклад, фармакологічною активністю). PLS ефективно працює зі корельованими, надлишковими або неповними даними⁹. Цей метод активно використовується для побудови QSPR (Quantitative Structure-Property Relationship) та QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship) моделей, що дають змогу прогнозувати властивості нових сполук ще на етапі *in silico* аналізу (водної розчинності¹⁰, біодоступності¹¹ тощо).

PLS також застосовується для валідації біоаналітичних методів, зокрема в хроматографії¹² та спектроскопії¹³, дозволяючи зменшити вплив шуму та покращити точність кількісного визначення активних речовин у біологічних матрицях¹⁴.

Метод опорних векторів (Support Vector Machine, SVM)

Метод опорних векторів є дієвим інструментом для задач класифікації та регресії, особливо в умовах великої розмірності даних. Основна ідея методу полягає в пошуку гіперплощини, яка найкраще розділяє дані на різні класи, максимізуючи відстань між найближчими точками кожного класу (опорними векторами)¹⁵.

SVM застосовується для класифікації препаратів за біофармацевтичними характеристиками (наприклад, відповідно до Biopharmaceutics Classification System¹⁶ або Biopharmaceutical Drug Disposition Clas-

9 Evermann, J., & Rönkkö, M. (2023). Recent developments in PLS. *Communications of the Association for Information Systems*, 52(1), 663-667.

10 Cao, D. S., Xu, Q. S., Liang, Y. Z., Chen, X., & Li, H. D. (2010). Prediction of aqueous solubility of druglike organic compounds using partial least squares, back-propagation network and support vector machine. *Journal of chemometrics*, 24(9), 584-595.

11 Pushkarova, Y., & Tymchenko, I. (2024). Prediction of oral drug bioavailability based on chemical structure. *Сучасна медицина, фармація та психологічне здоров'я*, 104.

12 Vetapalem, R., Yejella, R. P., & Atmakuri, L. R. (2020). Development and validation of a stability indicating RP-HPLC method for simultaneous estimation of teneligliptin and metformin. *Turkish journal of pharmaceutical sciences*, 17(2), 141.

13 Allen, G. I., Peterson, C., Vannucci, M., & Maletić-Savatić, M. (2013). Regularized partial least squares with an application to NMR spectroscopy. *Statistical Analysis and Data Mining: The ASA Data Science Journal*, 6(4), 302-314.

14 Selinger, K., Fung, E. N., & Bryan, P. (2014). Bioanalytical method validation and bioanalysis in regulated settings. In *Specification of Drug Substances and Products* (pp. 325-363). Elsevier.

15 Pisner, D. A., & Schnyer, D. M. (2020). Support vector machine. In *Machine learning* (pp. 101-121). Academic Press.

16 Wu, Z., Wang, N., Ye, Z., Xu, H., Chan, G., & Ouyang, D. (2024). FormulationBCS: A Machine Learning Platform Based on Diverse Molecular Representations for Biopharmaceutical Classification System (BCS) Class Prediction. *Molecular Pharmaceutics*, 22(1), 330-342.

sification System¹⁷), прогнозування фармакологічної активності¹⁸ та токсичності¹⁹.

Random Forest

Random Forest – це ансамблевий метод машинного навчання, заснований на побудові великої кількості дерев рішень (decision trees). Кожне дерево формує окремий прогноз, а остаточний результат визначається шляхом об'єднання рішень усіх дерев²⁰.

Алгоритм Random Forest широко використовується для створення моделей, що дозволяють передбачати біологічну активність молекул на основі їх структурних характеристик. Завдяки здатності ефективно працювати з великим масивом інформації, метод допомагає виявляти молекули з бажаними фармакологічними властивостями *in silico*²¹.

Один із основних напрямів застосування Random Forest у фармації – це прогнозування токсичності молекул²². На основі структурної інформації про сполуки можна створювати системи для передбачення їх потенційної токсичності, що дозволяє вчасно виявити небажані ефекти ще до початку або на ранніх етапах клінічних випробувань²³.

Крім того, Random Forest є ефективним алгоритмом для аналізу важливості молекулярних дескрипторів. Метод дозволяє визначити, які саме характеристики сполук найбільше впливають на прогнозовану властивість або активність, що має ключове значення для раціонального дизайну нових лікарських засобів²⁴.

Кластерний аналіз (Cluster Analysis)

Кластерний аналіз є важливим методом хемометрії, що дозволяє групувати молекули або зразки на основі подібності їхніх характеристик або властивостей²⁵. Це один із основних підходів до виявлення прихованої

17 Khandelwal, A., Bahadduri, P. M., Chang, C., Polli, J. E., Swaan, P. W., & Ekins, S. (2007). Computational models to assign biopharmaceutics drug disposition classification from molecular structure. *Pharmaceutical research*, 24, 2249–2262.

18 Maltarollo, V. G., Kronenberger, T., Espinoza, G. Z., Oliveira, P. R., & Honorio, K. M. (2019). Advances with support vector machines for novel drug discovery. *Expert opinion on drug discovery*, 14(1), 23–35.

19 Yu, X. (2021). Support vector machine-based model for toxicity of organic compounds against fish. *Regulatory Toxicology and Pharmacology*, 123, 104942.

20 Cutler, A., Cutler, D. R., & Stevens, J. R. (2012). Random forests. *Ensemble machine learning: Methods and applications*, 157–175.

21 Afolabi, L. T., Saeed, F., Hashim, H., & Petinrin, O. O. (2018). Ensemble learning method for the prediction of new bioactive molecules. *PloS one*, 13(1), e0189538.

22 Fang, Z., Yu, X., & Zeng, Q. (2022). Random forest algorithm-based accurate prediction of chemical toxicity to *Tetrahymena pyriformis*. *Toxicology*, 480, 153325.

23 Elsayad, A. M., Zeghid, M., Elsayad, K. A., Khan, A. N., Baareh, A. K. M., Sadig, A., ... & Abd El-kader, S. (2025). Machine learning model for random forest acute oral toxicity prediction. *Global Journal of Environmental Science and Management*, 11(1), 21–38.

24 Cano, G., Garcia-Rodriguez, J., Garcia-Garcia, A., Perez-Sanchez, H., Benediktsson, J. A., Thapa, A., & Barr, A. (2017). Automatic selection of molecular descriptors using random forest: Application to drug discovery. *Expert Systems with Applications*, 72, 151–159.

25 Aggarwal, C. C. (2018). An Introduction to Cluster Analysis. *Data Clustering: Algorithms and Applications*, 1.

структури в даних без попереднього маркування або класифікації об'єктів, що робить його особливо корисним у фармацевтичній науці, де працюють з великими наборами молекул і складною інформацією²⁶.

У фармації цей метод широко застосовується для класифікації молекул за фармакологічними властивостями, такими як здатність до зв'язування з певними рецепторами або їх ефективність у лікуванні конкретних захворювань²⁷. Наприклад, кластеризація дозволяє об'єднувати молекули з подібною біологічною активністю, що, у свою чергу, сприяє прогнозуванню характеристик нових лікарських засобів та оптимізації властивостей уже існуючих сполук²⁸.

При вивченні токсичності цей підхід допомагає виявляти молекули з подібними токсичними ефектами, що дозволяє прогнозувати потенційну небезпеку і знижувати ризики на ранніх етапах розробки ліків²⁹.

Одне з ключових застосувань кластерного аналізу – виявлення спільних структурних патернів серед молекул з подібними властивостями³⁰. Це особливо важливо для оптимізації сполук із бажаними характеристиками, наприклад, високою біодоступністю або низьким рівнем токсичності³¹.

Штучні нейронні мережі (Artificial Neural Networks, ANNs)

Штучні нейронні мережі – це інноваційні технології, натхнені будовою й принципом роботи людського мозку, які дають змогу системам навчатися та з часом удосконалювати свої результати³². Основним елементом нейронної мережі є штучний нейрон – своєрідний «обробник інформації», що отримує вхідні дані, обробляє їх і передає результат наступному шару нейронів. Нейрони об'єднуються в шари, кожен із яких виконує свою специфічну функцію в загальному процесі обробки інформації³³.

26 Leonard, S. T., & Droegge, M. (2008). The uses and benefits of cluster analysis in pharmacy research. *Research in Social and Administrative Pharmacy*, 4(1), 1-11.

27 Hameed, P. N., Verspoor, K., Kusljic, S., & Halgamuge, S. (2018). A two-tiered unsupervised clustering approach for drug repositioning through heterogeneous data integration. *BMC bioinformatics*, 19, 1-18.

28 Martin, Y. C., Kofron, J. L., & Traphagen, L. M. (2002). Do structurally similar molecules have similar biological activity?. *Journal of medicinal chemistry*, 45(19), 4350-4358.

29 Martin, T. M., Harten, P., Venkatapathy, R., Das, S., & Young, D. M. (2008). A hierarchical clustering methodology for the estimation of toxicity. *Toxicology mechanisms and methods*, 18(2-3), 251-266.

30 Hadipour, H., Liu, C., Davis, R., Cardona, S. T., & Hu, P. (2022). Deep clustering of small molecules at large-scale via variational autoencoder embedding and K-means. *BMC bioinformatics*, 23(Suppl 4), 132.

31 Malhat, M. G., Mousa, H. M., & El-Sisi, A. B. (2014, December). Clustering of chemical data sets for drug discovery. In *2014 9th international conference on informatics and systems* (pp. DEKM-11). IEEE.

32 Pushkarova, Y., Panchenko, V., & Kholin, Y. (2021, July). Application an Artificial Neural Network for Prediction of Substances Solubility. In *IEEE EUROCON 2021-19th International Conference on Smart Technologies* (pp. 82-87). IEEE.

33 Pushkarova, Y., Zaitseva, G., & Al Saker, M. (2022, September). Prediction of Toxicity of Phenols Using Artificial Neural Networks. In *2022 12th International Conference on Advanced Computer Information Technologies (ACIT)* (pp. 493-496). IEEE.

Нейронні мережі значно полегшують процес розробки нових лікарських засобів, пропонуючи сучасний підхід до вирішення складних фармацевтичних завдань³⁴. Зокрема, їх застосування на етапі прогнозування біологічної активності сполук допомагає з високою точністю оцінити потенційний терапевтичний ефект молекул ще до проведення лабораторних експериментів³⁵.

Моделювання фармакокінетичних і фармакодинамічних профілів за допомогою ANNs дає змогу передбачити, яким чином лікарський засіб взаємодітиме з організмом, включаючи його абсорбцію, розподіл, метаболізм і виведення. Це сприяє суттєвому скороченню обсягу дороговартісних доклінічних та клінічних досліджень, оскільки ключові властивості препарату можуть бути змодельовані за допомогою комп'ютерного прогнозування³⁶.

Крім того, нейронні мережі ефективно застосовуються для прогнозування молекулярної активності нових сполук і автоматизації скринінгу великих бібліотек хімічних структур. Це оптимізує процес відбору кандидатів на роль лікарських засобів і підвищує загальну ефективність відкриття нових ліків³⁷.

Однією з найважливіших переваг використання ANNs є можливість прогнозування побічних ефектів. Завдяки здатності аналізувати великі обсяги різнорідних даних – від клінічних історій та звітів про побічні реакції до молекулярних характеристик препаратів і генетичної інформації пацієнтів – нейронні мережі можуть виявляти потенційні ризики ще до початку клінічних досліджень³⁸.

У фармацевтичній промисловості нейронні мережі також використовуються для контролю якості та виявлення фальсифікатів, оскільки

34 Kaliuzhenko, A., & Pushkarova, Y. (2023). Application of artificial neural networks for solving pharmaceutical issues. *Grail Sci.* 2023;(24): 766-9.

35 Siramshetty, V. B., Xu, X., & Shah, P. (2023). Artificial Intelligence in ADME Property Prediction. In *Computational Drug Discovery and Design* (pp. 307-327). New York, NY: Springer US.

36 Wieder, O., Kuenemann, M., Wieder, M., Seidel, T., Meyer, C., Bryant, S. D., & Langer, T. (2021). Improved lipophilicity and aqueous solubility prediction with composite graph neural networks. *Molecules*, 26(20), 6185.

37 Tosca, E. M., Bartolucci, R., & Magni, P. (2021). Application of artificial neural networks to predict the intrinsic solubility of drug-like molecules. *Pharmaceutics*, 13(7), 1101.

38 Mohsen, A., Tripathi, L. P., & Mizuguchi, K. (2021). Deep learning prediction of adverse drug reactions in drug discovery using open TG-GATES and FAERS databases. *Frontiers in Drug Discovery*, 1, 768792. Cu, O. K., Srinivasan, S., & Pathak, V. (2024). Effective Side Effect Prediction by Modelling Drug-Drug Interaction using Two Input Graph Neural Networks with Self Supervised Pretraining and Ensemble Methods. *IEEE Access*. Krix, S., DeLong, L. N., Madan, S., Domingo-Fernández, D., Ahmad, A., Gul, S., ... & Fröhlich, H. (2023). MultiGML: Multimodal graph machine learning for prediction of adverse drug events. *Heliyon*, 9(9).

навіть незначні порушення у складі або технології можуть впливати на безпеку пацієнтів³⁹. Зокрема, ANNs ефективні для:

- ідентифікації відхилень від стандартів та підозрілих аномалій у препаратах;
- виявлення дефектів у пакуванні та маркуванні;
- порівняння реальних зразків із базами даних оригінальних лікарських засобів;
- розпізнавання фальшивих сертифікатів та супровідної документації.

Отже, хемометрія відіграє ключову роль у сучасній фармації, надаючи ефективні засоби для аналізу та інтерпретації великих масивів даних. Методи, такі як аналіз головних компонент, PLS-регресія, метод опорних векторів, Random Forest, кластерний аналіз та штучні нейронні мережі, дозволяють не лише оптимізувати розробку нових лікарських засобів, а й забезпечити високоточне передбачення параметрів їх фармакокінетики та токсичності.

Застосування цих алгоритмів у фармацевтичному виробництві допомагає вдосконалити технологічні процеси, підвищити якість продукції та зменшити витрати на розробку й випробування препаратів.

Хемометричні методи активно використовуються для класифікації та оцінки біоактивності молекул, що має вирішальне значення для розвитку персоналізованої медицини та індивідуальних стратегій лікування.

Завдяки хемометрії забезпечуються належний контроль якості, що є основою безпеки та результативності лікарських засобів. Інтеграція хемометричних підходів у практику фармацевтичної науки та промисловості гарантує не лише наукову точність, а й практичну цінність, роблячи процеси розробки й виробництва більш керованими, економічно вигідними та орієнтованими на кінцевий терапевтичний результат.

³⁹ Nagy, B., Galata, D. L., Farkas, A., & Nagy, Z. K. (2022). Application of artificial neural networks in the process analytical technology of pharmaceutical manufacturing – a review. *The AAPS Journal*, 24(4), 74. Saha, G. C., Eni, L. N., Saha, H., Parida, P. K., Rathinavelu, R., Jain, S. K., & Haldar, B. (2023). Artificial Intelligence in Pharmaceutical Manufacturing: Enhancing Quality Control and Decision Making. *Rivista Italiana di Filosofia Analitica Junior*, 14(2), 2023. Islam, M. R., Zamil, M. Z. H., Rayed, M. E., Kabir, M. M., Mridha, M. F., Nishimura, S., & Shin, J. (2024). Deep Learning and Computer Vision Techniques for Enhanced Quality Control in Manufacturing Processes. *IEEE Access*. Zope, K., Singh, K., Nistala, S. H., Basak, A., Rathore, P., & Runkana, V. (2019, September). Anomaly detection and diagnosis in manufacturing systems: A comparative study of statistical, machine learning and deep learning techniques. *In Annu. Conf. PHM Soc* (Vol. 11).