



COLLECTION OF SCIENTIFIC PAPERS



ISSUE
№59

3RD INTERNATIONAL SCIENTIFIC
AND PRACTICAL CONFERENCE

**ADVANCED
TECHNOLOGIES
IN SCIENTIFIC
RESEARCH**

FEBRUARY 25-27, 2026
ROTTERDAM, NETHERLANDS





ISU

INTERNATIONAL SCIENTIFIC UNITY

3rd International Scientific and Practical Conference
**«Advanced Technologies in Scientific
Research»**

Collection of Scientific Papers

February 25-27, 2026,
Rotterdam, Netherlands

UDC 001(08)

Advanced Technologies in Scientific Research: Collection of Scientific Papers with Proceedings of the 3rd International Scientific and Practical Conference. International Scientific Unity. February 25-27, 2026, Rotterdam, Netherlands.

ISBN 979-8-89704-977-6 (series)
DOI 10.70286/ISU-25.02.2026

The conference is included in the Academic Research Index ReserchBib International catalog of scientific conferences.

The materials of the collection are presented in the author's edition and printed in the original language. The authors of the published materials bear full responsibility for the authenticity of the given facts, proper names, geographical names, quotations, economic and statistical data, industry terminology, and other information.

The materials of the conference are publicly available under the terms of the CC BY-NC 4.0 International license.

ISBN 979-8-89704-977-6



© Participants of the conference, 2026
© Collection of Scientific Papers "International Scientific Unity", 2026
Official site: <https://isu-conference.com/>

ЕВОЛЮЦІЯ ТА ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ QSAR

Ворожко Поліна Романівна

здобувач вищої освіти

Фармацевтичний факультет

Пушкарьова Ярослава Миколаївна

канд. хім. наук, доцент

Кафедра аналітичної, фізичної та колоїдної хімії

Національний медичний університет

імені О.О. Богомольця, Україна

Вступ. У сучасній токсикології та фармакології методи комп'ютерного моделювання стали фундаментальною основою для проведення наукових досліджень. Особливе місце серед них займає методологія QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship – кількісні співвідношення «структура–активність»). Методи QSAR дозволяють прогнозувати біологічну активність та ключові фізико-хімічні властивості нових сполук ще до їхнього фізичного синтезу та проведення дорогих, етично суперечливих і тривалих експериментів *in vivo*. Отже, метою роботи є комплексний огляд еволюції концепції QSAR та аналіз її теоретичних основ, що забезпечують можливість математичного передбачення властивостей активних фармацевтичних інгредієнтів та оцінки їхньої потенційної безпеки [1, 2].

Основна частина. Історія розвитку QSAR демонструє еволюцію наукової думки від простих спостережень до сучасних високотехнологічних моделей. Перші кроки у розумінні зв'язку будови молекули та її біологічної дії належать А. Крум-Брауну та Т. Фрейзеру (1868 р.), які сформулювали постулат про те, що фізіологічна активність речовини є математичною функцією її хімічної конституції. У 1893 році Ш. Ріше виявив зворотну логарифмічну залежність між токсичністю органічних сполук та їхньою розчинністю у воді. Справжнім концептуальним проривом на зламі століть стали дослідження Г. Мейєра та Ч. Овертона (1899–1901 рр.), які експериментально довели прямий зв'язок між ліпофільністю речовин та їхнім наркотичним ефектом. Ці ранні роботи заклали основу для подальшого формування кількісного підходу до оцінки біологічної активності сполук.

Сучасний етап розвитку, або класичний QSAR, розпочався у 1964 році завдяки працям К. Ганша та Т. Фуджіти, а також паралельним розробкам С. Фрі та Дж. Вільсона. К. Ганш запропонував багатопараметричне лінійне рівняння, що поєднувало біологічну активність з фізико-хімічними властивостями молекули: ліпофільністю, електронними властивостями та стеричними ефектами. Метод Фрі-Вільсона базувався на адитивному підході – розрахунку індивідуального внеску наявності або відсутності структурних фрагментів у загальну активність [3].

З розвитком обчислювальної техніки QSAR еволюціонувала від плоских 2D-моделей до тривимірних 3D QSAR (методи CoMFA та CoMSIA), де ключову

роль відіграє просторове розташування атомів та розрахунок полів взаємодії молекули з віртуальним рецептором. Сьогодні використовують багатовимірні моделі (4D–6D QSAR), що враховують конформаційну рухливість молекул, вплив розчинника та складні термодинамічні аспекти індукованої відповіді рецептора.

Теоретичною основою QSAR є перетворення хімічної структури у числовий формат. Це здійснюється за допомогою молекулярних дескрипторів – кількісних характеристик, що відображають специфічні властивості молекули, включаючи структурні, електронні та просторові параметри.

Для виявлення закономірностей між дескрипторами та експериментальними даними використовують складний математичний апарат. Раніше застосовували множинну лінійну регресію (MLR) та метод часткових найменших квадратів (PLS). Сьогодні на перший план виходять алгоритми машинного навчання (SVM, k-NN, Random Forest), які дозволяють ефективно виявляти нелінійні залежності та одночасно працювати з тисячами дескрипторів. Глибинне навчання (Deep Learning) та графові нейронні мережі (GNN) дозволяють моделі навчатися на структурі графу молекули без ручного розрахунку дескрипторів, що підвищує точність прогнозування специфічних видів активності, зокрема токсичних механізмів на клітинному рівні [4].

Висновки. Методологія QSAR пройшла шлях від простих емпіричних спостережень до сучасних потужних *in silico* систем на базі штучного інтелекту. Її теоретичні основи ґрунтуються на інтеграції хімії, квантової фізики, статистики та інформатики. Сьогодні QSAR – це практична необхідність для фармацевтичної галузі. Вона дозволяє прискорити та здешевити розробку інноваційних лікарських засобів, а також забезпечує надійний інструмент превентивної оцінки біологічної активності та потенційної токсичності.

Список використаних джерел

1. Cherkasov, A., Muratov, E. N., Fourches, D., Varnek, A., Baskin, I. I., Cronin, M., ... & Tropsha, A. (2014). QSAR modeling: where have you been? Where are you going to? *Journal of medicinal chemistry*, 57(12), 4977-5010.
2. Pushkarova, Y., & Izmailov, R. (2025, September). QSPR Prediction of Aqueous Solubility of Organic Compounds: Active Pharmaceutical Ingredients and Excipients. In *2025 15th International Conference on Advanced Computer Information Technologies (ACIT)* (pp. 232-235). IEEE.
3. Dearden, J. C. (2016). The history and development of quantitative structure-activity relationships (QSARs). *International Journal of Quantitative Structure-Property Relationships (IJQSPR)*, 1(1), 1-44.
4. Wu, Z., Zhu, M., Kang, Y., Leung, E. L. H., Lei, T., Shen, C., ... & Hou, T. (2021). Do we need different machine learning algorithms for QSAR modeling? A comprehensive assessment of 16 machine learning algorithms on 14 QSAR data sets. *Briefings in bioinformatics*, 22(4), bbaa321.