

**МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
КАФЕДРА ФІЗИЧНОЇ РЕАБІЛІТАЦІЇ І ЗДОРОВ'Я**



**VIII науково-практична internet-конференція
з міжнародною участю**

**«МЕХАНІЗМИ РОЗВИТКУ ПАТОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ І
ХВОРОБ ТА ЇХ ФАРМАКОЛОГІЧНА КОРЕКЦІЯ»**

**20 жовтня 2025 р.
ХАРКІВ – Україна**

	ВИКИДУ ЛІВОГО ШЛУНОЧКА У ПАЦІЄНТІВ ІЗ ЦУКРОВИМ ДІАБЕТОМ 2 ТИПУ Сапожниченко Л. В., Овчаренко К. А.	
90	ВЕДЕННЯ ВАГІТНИХ ІЗ СЕРЦЕВО-СУДИННИМИ ЗАХВОРЮВАННЯМИ: МУЛЬТИДИСЦИПЛІНАРНИЙ ПІДХІД ТА СУЧАСНІ РЕКОМЕНДАЦІЇ Сапожниченко Л. В., Ходжоян О. Г.	204
91	ПРОГРЕС ДОСЛІДЖЕНЬ ВПЛИВУ АНТИБІОТИКІВ НА РЕПРОДУКТИВНУ СИСТЕМУ Селюкова Н. Ю.	206
92	СТРАТЕГІЇ ПОКРАЩЕННЯ ЯКОСТІ ЖИТТЯ В МЕНОПАУЗІ Селюкова Н. Ю.	209
93	ВІКОВІ ОСОБЛИВОСТІ ВПЛИВУ НОВОГО КОМБІНОВАНОГО ПРЕПАРАТУ МЕЛАРГІНІН НА ФУНКЦІЮ МІОКАРДА ЩУРІВ ПРИ АДЕКВАТНІЙ КОРОНАРНІЙ ПЕРФУЗІЇ, ІШЕМІЇ ТА РЕПЕРФУЗІЇ Сикало Н. В.	210
94	СУЧАСНІ МЕТОДИ ФІЗИЧНОЇ ТЕРАПІЇ ПРИ ТРАВМАХ ВІЙНИ Сіренко Д. С.	213
95	ІННОВАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ ЕРГОТЕРАПІЇ ДЛЯ ВІДНОВЛЕННЯ ФУНКЦІОНАЛЬНОЇ АКТИВНОСТІ ПАЦІЄНТІВ Сіренко Д. С.	215
96	РЕАБІЛІТАЦІЯ ПАЦІЄНТІВ ІЗ ХРОНІЧНОЮ ОБСТРУКТИВНОЮ ХВОРОБОЮ ЛЕГЕНЬ Сіренко Д. С.	217
97	ПАТОГЕНЕЗ АНЕМІЇ ТА ДЕФЦИТУ ЗАЛІЗА У ПАЦІЄНТІВ ІЗ ХРОНІЧНОЮ СЕРЦЕВОЮ НЕДОСТАТНІСТЮ Скороходова В. І., Сапожниченко Л. В.	219
98	ФАРМАЦЕВТИЧНА ДОПОМОГА ПРИ НАЯВНОСТІ ПСИХІЧНИХ РОЗЛАДІВ, ПОВ'ЯЗАНИХ З ТРАВМОЮ ТА СТРЕСОМ Сметаніна К. І.	222
99	ІНТЕГРАЦІЯ ТЕХНОЛОГІЙ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ У ПРОЦЕС РОЗРОБКИ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБІВ Смойловська Г. П., Малюгіна О. О.	224
100	ПРОФІЛАКТИЧНЕ ЗАСТОСУВАННЯ ВІТАМІНУ D3 ТА/АБО ЕКСТРАКТУ ПЛОДІВ ПАЛЬМИ САБАЛЬ ЩОДО РЕПРОДУКТИВНОЇ СИСТЕМИ САМЦІВ ІЗ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЮ ДОБРОЯКІСНОЮ ГІПЕРПЛАЗІЄЮ ПЕРЕДМІХУРОВОЇ ЗАЛОЗИ Смоленко Н. П., Коренева Є. М., Белкіна І. О., Мараховський І. О., Бондаренко В. О.	226

ІНТЕГРАЦІЯ ТЕХНОЛОГІЙ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ У ПРОЦЕС РОЗРОБКИ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБІВ

Смойловська Г. П., Малюгіна О. О.

*Запорізький державний медико-фармацевтичний університет,
м. Запоріжжя, Україна
smoilovskaj@ukr.net*

Вступ. Штучний інтелект (ШІ) стає ключовою інноваційною технологією в охороні здоров'я, зокрема у фармацевтичній промисловості, де він здатний радикально трансформувати процес розробки лікарських засобів. Традиційні підходи до створення нових препаратів характеризуються високою вартістю, значними часовими витратами та високим ризиком невдачі на етапах клінічних досліджень. Вони зазвичай починаються з ідентифікації терапевтичної мішені або підбору хімічної речовини, що потребує трудомістких лабораторних експериментів та складного аналізу механізмів дії.

Методи штучного інтелекту, – глибокі нейронні мережі, машинне та глибинне навчання та ансамблеві алгоритми, – відкривають нові можливості для прискорення й оптимізації цього процесу – від пошуку молекулярних мішеней до прогнозування фармакологічних властивостей і результатів клінічних випробувань. Моделі штучного інтелекту інтегрують різноманітні типи даних та виявляють тонкі, нелінійні зв'язки, що не тільки покращує точність прогнозування, але й оптимізує обробку даних, прискорюючи процес розробки ліків.

Мета. Провести аналітичне дослідження сучасних підходів до інтеграції технологій штучного інтелекту в процес розробки лікарських засобів на різних етапах фармацевтичних досліджень.

Матеріали та методи. Для аналізу було використано рецензовані публікації (2022–2025 рр.) із баз PubMed, Scopus, Web of Science та Google Scholar, присвячені застосуванню машинного навчання у фармацевтичній розробці. Відбір джерел здійснювали за PRISMA-протоколом; проведено контент-, порівняльний та бібліометричний аналіз.

Результати. Штучний інтелект активно використовується на всіх етапах розробки лікарських засобів - від ідентифікації терапевтичних мішеней до управління клінічними випробуваннями. При ідентифікації молекулярних мішеней, однією з ключових його переваг є здатність аналізувати великі та складні набори даних. Алгоритми ШІ можуть обробляти геномні, протеомні та транскриптомні дані для ідентифікації значущих біомаркерів (білків, генів) та мішеней, що піддаються лікуванню медикаментами. Дослідники виявляють закономірності та визначають потенційні мішені на основі їх біологічної значущості та лікарської здатності з використанням моделей навчання на основі нейронів, генеративних мереж тощо. Лікарська здатність стосується ймовірності того чи буде біологічна мішень модулюватися малою хімічною молекулою або біологічним препаратом. В останні роки розроблені моделі глибинних нейронних мереж на основі 3D-структури, атомних взаємодій або поверхні білків для виявлення потенційних місць зв'язування в терапевтичних мішенях.

Віртуальний скринінг є ключовим етапом у розробці ліків, під час якого аналізуються великі хімічні бібліотеки для ідентифікації сполук, які найімовірніше взаємодіють з певною біологічною мішенню. Використовується структурний віртуальний скринінг (Structure-Based Virtual Screening, SBVS); віртуальний скринінг, що базується на знаннях лігандів (Ligand-Based Virtual Screening, LBVS); глибокий QSAR-аналіз (Quantitative Structure-Activity Relationship) тощо.

Розробка ліків de novo є інноваційним застосуванням штучного інтелекту. Генеративні моделі штучного інтелекту використовуються для створення абсолютно нових молекулярних структур з потрібними властивостями, які ніколи раніше не синтезувалися та не ідентифікувалися. Генеративні змагальні мережі (Generative Adversarial Network, GAN) та варіаційні автоенкодери (Variational Autoencoder, VAE), використовуються для створення нових хімічних структур шляхом навчання на існуючих даних.

Оптимізація сполук-лідерів – критичний етап розробки ліків, під час якого вдосконалюється структура лідируючої сполуки для підвищення її ефективності, зниження токсичності та покращення її фармакокінетичних властивостей. Штучний інтелект прогнозує, як модифікації молекулярної структури вплинуть на її загальні лікарські властивості. Молекулярно-динамічне моделювання використовується для прогнозування стабільності препарату при зв'язуванні з мішенню, а також його взаємодії з біологічними мембранами, ферментами або транспортерами. За допомогою деяких моделей (наприклад, на основі аналізу генетичної інформації) можна ідентифікувати сполуки, які з більшою ймовірністю викликають токсичність або інші побічні ефекти у пацієнтів.

Штучний інтелект все частіше використовується для управління клінічними випробуваннями, оптимізуючи ключові завдання, такі як написання протоколів, набір пацієнтів та аналіз великих масивів клінічних даних для підвищення точності діагностики, оцінки ефективності та побічних реакцій тощо.

Таким чином, підходи на основі штучного інтелекту можуть бути інтегровані на різних етапах ранньої розробки ліків, прискорюючи терміни та підвищуючи точність відбору пацієнтів та клінічного прогресу.

Висновки. Використання штучного інтелекту значно підвищує ефективність процесу відкриття та розробки лікарських засобів. Алгоритми глибинного навчання дають змогу аналізувати великі обсяги біомедичних даних, оптимізувати структуру сполук і прогнозувати фармакологічні властивості. Упровадження штучного інтелекту в управління клінічними дослідженнями сприяє підвищенню точності відбору пацієнтів і скороченню тривалості випробувань.

Ключові слова: розробка лікарських засобів, штучний інтелект, мішені.