

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0226U004119

Державний реєстраційний номер: 0125U003376

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 01-07-2026

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Наука про дані: машинне навчання та нейронні мережі як засіб розробки нових лікарських засобів

Початок етапу: 01.2025

Закінчення етапу: 06.2026

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Пругло Євген Сергійович

Код за ЄДРПОУ: 3148419736

Місцезнаходження: вул. Фестивальна, 8, кв.5, м. Чернівці, Чернівецька обл., 58025, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380674949250

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Управління справами
Апарату Верховної Ради України

Код за ЄДРПОУ: 20064120

Місцезнаходження: вул. Грушевського, буд. 5, м. Київ, 01008, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Верховна Рада України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442552856, 380442553166, 380442552784

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрямок фінансування: 2.7 - інше

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 0111010

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 181.680
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Наука про дані: машинне навчання та нейронні мережі як засіб розробки нових лікарських засобів

Назва роботи англійською:

Data science: machine learning and neural networks as tools for developing new drugs

Реферат українською:

За результатами проведеного дослідження вперше реалізовано інтегровану обчислювальну стратегію пошуку біологічно активних сполук одночасно для трьох терапевтичних напрямів (цукровий діабет 2-го типу, атеросклероз та гострих лейкозів). На основі структурних даних DrugBank v6.0 побудовано та валідовано тринадцять класифікаторів на двох дескрипторних просторах, причому порівняльний аналіз уперше показав залежність якості прогнозу протидіабетичної активності від типу молекулярних ознак і обраного алгоритму. Засобами генеративної нейронної мережі Char-RNN/LSTM згенеровано ряд валідних SMILES-послідовностей, а структурно-орієнтованою генерацією (Pocket2Mol) сформовано серії лігандів для HMG-CoA-редуктази й CETP (237 сполук) та для PBX1, MEIS1 і менін-MLL1 (313 і 199 сполук відповідно). Аналіз залежності «хімічна структура — фармакологічна активність» за допомогою ProLIF-фінгерпринтів показав, що фармакофорна релевантність кандидатів визначається відтворенням ключових контактів у каталітичних і алостеричних сайтах відповідних мішеней. Серед відібраних сполук синтезовано пріоритетний кандидат — 5-(бутилсульфаніл)-4-(гідроксиметил)-2-феніл-1-(пропан-2-іл)-1H-пірол-3-карбонову кислоту, будову якої підтверджено спектральними методами, а гіпоглікемічну активність оцінено в пероральному тесті толерантності до глюкози, що забезпечило експериментальну верифікацію обчислювального конвеєра. Розроблено модульний конвеєр dockpipe з оцінкою області застосовності за відстанню Махаланобіса (порогові значення $D_M = 43,89$ для простору Mordred і $49,82$ для ClassyFire). Отримані дані свідчать про працездатність запропонованої стратегії на всіх трьох терапевтичних напрямках і створюють передумови для подальшого поглибленого вивчення найбільш активних речовин. У процесі аналізу подальших результатів доклінічного дослідження необхідно оцінити ADMET-профіль відібраних сполук, провести молекулярно-динамічне моделювання та визначити доцільність їх використання в практичній медицині.

Реферат англійською:

The study presents, for the first time, an integrated computational strategy for the discovery of biologically active compounds across three therapeutic directions (type 2 diabetes mellitus, atherosclerosis, and acute leukaemias). Using structural data from DrugBank v6.0, thirteen classifiers were trained and validated across two descriptor spaces; the comparative analysis showed, for the first time, that the predictive quality for antidiabetic activity depends on both the type of molecular features and the chosen algorithm. A Char-RNN/LSTM generative neural network produced a set of valid SMILES strings, while structure-based generation (Pocket2Mol) yielded ligand series for HMG-CoA reductase and CETP (237 compounds) and for PBX1, MEIS1, and menin-MLL1 (313 and 199 compounds, respectively). Structure-activity relationship analysis by means of ProLIF interaction fingerprints showed that the pharmacophore relevance of the candidates is governed by reproduction of the key contacts within the catalytic and allosteric sites of the respective targets. Among the selected compounds, a priority candidate — 5-(butylsulfanyl)-4-(hydroxymethyl)-2-phenyl-1-(propan-2-yl)-1H-pyrrole-3-carboxylic acid — was synthesised, its structure confirmed by spectral methods, and its hypoglycaemic activity assessed in an oral glucose tolerance test, providing experimental verification of the computational pipeline. A modular dockpipe workflow was developed with applicability-domain estimation based on the Mahalanobis distance (thresholds $D_M = 43.89$ for the Mordred space and 49.82 for ClassyFire). The data obtained confirm the viability of the proposed strategy across all three directions and provide a basis for further in-depth investigation of the most active compounds. Subsequent preclinical analysis should evaluate the ADMET profile of the selected compounds,

perform molecular dynamics simulations, and determine the expediency of their use in practical medicine.

Індекс УДК: 004.8.032.26, 577.29:615, 615.017:616.079;615.2/.3.001.37, 57:007].001.57, 573.6;57.089:616-7, 615.1

Коди тематичних рубрик: 28.23.37, 34.15.63, 34.45.05, 34.55.15, 34.57, 76.31.29.15

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Пругло Євген Сергійович

Науковий ступінь: д. фармац. н.

Вчене звання: доц.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Модульний обчислювальний конвеєр для віртуального скринінгу та структурно-орієнтованого дизайну біологічно активних сполук «dockpipe»

Назва НТП англійською: Modular computational pipeline for virtual screening and structure-based design of biologically active compounds (dockpipe)

НТП, яку передбачалося створити: Створено

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії, гіпотези, Програмні продукти, програмно-технологічна документація

Галузь застосування: комп'ютерна фармацевтична хімія; медична хімія; біомедична інформатика; раціональний дизайн лікарських засобів; науковий і навчальний процес закладів вищої медичної та фармацевтичної освіти

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: «dockpipe» — модульний програмний конвеєр для інтегрованого комп'ютерного пошуку біологічно активних сполук, що поєднує машинне навчання, генеративні нейронні мережі та структурно-орієнтований дизайн. Конвеєр забезпечує розрахунок молекулярних дескрипторів, побудову та валідацію класифікаторів активності, генерацію лігандів у сайті зв'язування (Pocket2Mol), молекулярний докінг (AutoDock Vina), аналіз білок-лігандних взаємодій (ProLIF) та оцінку області застосовності моделей за відстанню Махаланобіса. Апробовано на трьох терапевтичних напрямках — цукровий діабет 2-го типу, атеросклероз і дисліпідемії, гострі лейкози. Реалізовано мовою Python із застосуванням RDKit, PyTorch, MGLTools, Meeko, Gemmi, UCSF ChimeraX

Соціально-економічна спрямованість НТП: Підвищення продуктивності праці, Поліпшення якості життя та здоров'я населення, ефективності діагностики та лікування хворих

Вплив НТП на довкілля: Прямий вплив на довкілля відсутній: НТП є програмним продуктом. Опосередковано сприяє зниженню витрат реактивів і кількості піддослідних тварин завдяки обчислювальному відбору пріоритетних сполук на ранніх етапах розробки.

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2025

Закінчення етапу: 06.2026

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Pruhlo Y., Iurchenko I., Tomenko A. Modeling of New Agents with Potential Antidiabetic Activity Based on Machine Learning Algorithms. *AppliedChem*. 2025. Vol. 5, no. 4. Art. 30. DOI: 10.3390/appliedchem5040030.

Prediction of Antidiabetic Properties of Chemical Compounds Using the Anatomical Therapeutic Chemical (ATC) and a Molecular Descriptor Calculator / Y. Pruhlo, I. Iurchenko, B. Rasulev, A. Tomenko. Ninth Annual NDSU-Kagoshima University Symposium on Biomaterials (Fargo, ND, USA, October 14–15, 2024). Fargo: NDSU Memorial Union, 2024. P. 43. DOI:10.13140/RG.2.2.24974.27209

Transformer-Driven De Novo Molecule Generation Through Fine-Tuning LLMs for Molecular Design / Y. Pruhlo, I. Iurchenko, K. Lokovei, V. Horetskyi. *Досягнення та перспективи розвитку медицини та фармації. Погляд молодих вчених: матеріали Всеукр. наук.-практ. конф. з міжнар. участю (м. Чернівці, 5–6 листопада 2025 р.)*. Чернівці: БДМУ, 2025. 99 с.

Pruhlo Y. appliedchem-3624702: відкритий репозиторій навчених моделей машинного навчання, наборів даних та Jupyter-ноутбуків для пошуку нових протидіабетичних агентів. URL: [https://github.com/pruhlo/appliedchem-3624702]

Pruhlo Y. dockpipe: модульний обчислювальний конвеєр для пакетного молекулярного докінгу білок-ліганд та аналізу взаємодій ProLIF. URL: [https://github.com/pruhlo/dockpipe]

Квантово-хімічний аналіз енергетичного профілю реакції перенесення протону / Є. С. Пругло, В. О. Чорноус, А. М. Грозав, Л. І. Атанасе. Матеріали XX Міжнародної наукової конференції, присвяченої 150-річчю Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича та 120-річчю від дня народження Ервіна Чаргаффа (м. Чернівці, 27–30 жовтня 2025 р.). Чернівці, 2025. С. 244.

Iurchenko I., Pruhlo Y. Emerging frontiers in drug development of all-trans retinoic acid and its derivatives. *Retinoic Acids in Cancer Therapy* / ed. by S. Ghavami, A. Zarrabi, M. Cordani. Academic Press, 2026. Vol. 23. P. 15–37. (Cancer Sensitizing Agents for Chemotherapy). DOI: https://doi.org/10.1016/B978-0-443-22305-1.00009-6.

Томенко А. О. Моделювання нових агентів з потенційною протидіабетичною активністю на основі алгоритмів машинного навчання : магістер. кваліфікац. робота : спец. 226 «Фармація, промислова фармація» / А. О. Томенко ; наук. кер. Є. С. Пругло ; Буковинський державний медичний університет, кафедра фармації. Чернівці, 2025. 122 с.

Горецький В. О. In silico скринінг інгібіторів NOXA9 та його комплексів з Meis1/PBX1 для терапії гострого мієлоїдного лейкозу із застосуванням методів машинного навчання та молекулярного докінгу : магістер. кваліфікац. робота : спец. 226 «Фармація, промислова фармація» / В. О. Горецький ; наук. кер. Є. С. Пругло ; Буковинський державний медичний університет, кафедра фармації. Чернівці, 2026. 158 с.

Локовей К. В. Скринінгові дослідження нових гіполіпідемічних агентів серед інгібіторів ГМГ-КоА редуктази та СЕТР із застосуванням методів машинного навчання та молекулярного докінгу : магістер. кваліфікац. робота : спец. 226 «Фармація, промислова фармація» / К. В. Локовей ; наук. кер. Є. С. Пругло ; Буковинський державний медичний університет, кафедра фармації. Чернівці, 2026. 131 с.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Геруш Ігор Васильович

к. мед. н., 03.00.04

Перелік осіб-виконавців

Грозав Аліна Миколаївна

(к. х. н., доц., 02.00.03)

Чорноус Віталій Олександрович

(д. х. н., професор, 02.00.03)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

StypendiaVR-MV-2025

Телефон

0442553368

Реєстратор

Юрченко Тетяна Анатоліївна

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**



Юрченко Тетяна Анатоліївна