Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0825U000543

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 17-02-2025

Статус: Запланована

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гурбич Олександр Вікторович
2. Oleksandr Gurbych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 122

Назва наукової спеціальності: Комп’ютерні науки

Галузь / галузі знань: інформаційні технології

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: 122 Комп'ютерні науки

Дата захисту: 10-07-2023

Спеціальність за освітою: 122 Комп'ютерні науки

Місце роботи здобувача:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): PhD 1669

Повне найменування юридичної особи: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. Степана Бандери, буд. 12, Львів, 79013, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. Степана Бандери, буд. 12, Львів, 79013, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 28.23.29

Тема дисертації:

1. Методи та засоби аналізу хімічних сполук засобами штучного інтелекту
2. Methods and tools for analyzing chemical compounds using artificial intelligence

Реферат:

1. Дисертаційна робота присвячена розробці методів та засобів штучного інтелекту для комп'ютерної генерації та відбору найбільш перспективних молекул-кандидатів у лікарські речовини. Незважаючи на вдосконалення таких технологій як високопродуктивний скринінг, біотехнологія та комбінаторна хімія, вартість виведення на ринок нового препарату з поправкою на інфляцію подвоюється кожні дев'ять років. Рентабельність фармацевтичних досліджень невпинно спадає. Тому гостро постає потреба оптимізації процесу розробки нових ліків, зокрема, методами штучного інтелекту. Запропоновані у роботі методи поєднуються у єдину інформаційну систему для розробки лікарських речовин із заданими фізико-хімічними та біологічними властивостями, а також прогнозуванням придатності до синтезу у лабораторії.

2. The dissertation is devoted to the development of methods and tools of artificial intelligence for computer generation and selection of the most promising candidate molecules for medicinal substances. Despite the improvement of technologies such as high-throughput screening, biotechnology and combinatorial chemistry, the cost of bringing a new drug to the market, adjusted for inflation, doubles every nine years. The profitability of

pharmaceutical research is constantly decreasing. Therefore, there is an urgent need to optimize the process of developing new drugs, in particular, using artificial intelligence methods. The methods proposed in the work are combined into a single information system for the development of medicinal substances with specified physicochemical and biological properties, as well as predicting their suitability for synthesis in the laboratory.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Інформаційні та комунікаційні технології

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності: Розвиток сучасних інформаційних, комунікаційних технологій, робототехніки

Підсумки дослідження: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- Dzvenymyra Yarish, Sofiya Garkot, Oleksandr Grygorenko, Dmytro Radchenko, Yurii Moroz, and Oleksandr Gurbych. “Advancing molecular graphs with descriptors for the prediction of chemical reaction yields”. Journal of Computational Chemistry 43.28 (2022), pp. 1887–1935.
- Tymofii Nikolaienko, Oleksandr Gurbych, and Maksym Druchok. “Complex machine learning model needs complex testing: Examining predictability of molecular binding affinity by a graph neural network”. Journal of Computational Chemistry 43.10 (2022), pp. 728–739.
- Maksym Druchok, Dzvenymyra Yarish, Sofiya Garkot, Tymofii Nikolaenko, and Oleksandr Gurbych. “Ensembling machine learning models to boost molecular affinity prediction”. Computational Biology and Chemistry 93 (2021)
- Maksym Druchok, Dzvenymyra Yarish, Oleksandr Gurbych, and Mykola Maksymenko. “ Toward efficient generation, correction, and properties control of unique drug-like structures”. Journal of Computational Chemistry 42.11 (2021), pp. 746–760.
- Grygoriy Dolgonos, Alexey Tsukanov, Sergey Psakhie Psakhie, Oleg Lukin, Oleksandr Gurbych, and Alexander Shivanyuk Shivanyuk. “Theoretical studies of capsular complexes of C2V-symmetrical re- sorcin[4]arene tetraesters with tetramethylammonium cation”. Computational and Theoretical Chemistry 1159 (2019), pp. 12–17.
- Oleksandr Gurbych and Maksym Prymachenko. “Method for reductive pruning of neural networks and its applications”. Computer Systems and Information Technologies 3 (2022), pp. 40–48.
- Олександр Гурбич. “Метод машинного навчання для створення нових лікарських речовин із заданими властивостями”. Наук. вісник Ужгород. ун-ту 40.1 (2022), pp. 126–145.
- Олександр Гурбич. “Метод мета-навчання для визначення молекулярної спорідненості”. Вісник Хмельницького національного університету 307.2 (2022), pp. 14–24.

Наукова (науково-технічна) продукція: методи, теорії, гіпотези; програмні продукти, програмно-технологічна документація

Соціально-економічна спрямованість: забезпечення промисловості чи населення новим видом інформаційно-комунікаційних послуг

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Впроваджено

Зв'язок з науковими темами: 0119U002257

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Матвійчук Ярослав Миколайович

2. Yaroslav Matviichuk

Кваліфікація: д. т. н., професор, 05.09.05

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. Степана Бандери, буд. 12, Львів, 79013, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Комар Мирослав Петрович

2. Myroslav P. Komar

Кваліфікація: д. т. н., проф., 05.13.06

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Західноукраїнський національний університет

Код за ЄДРПОУ: 33680120

Місцезнаходження: вул. Львівська, буд. 11, Тернопіль, Тернопільський р-н., 46009, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гнатушенко Володимир Володимирович

2. Volodymyr Hnatushenko

Кваліфікація: д. т. н., професор, 05.01.01

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Національний технічний університет "Дніпровська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02070743

Місцезнаходження: проспект Дмитра Яворницького, буд. 19, Дніпро, Дніпровський р-н., 49005, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Теслюк Василь Миколайович
2. Vasyl M. Tesliuk

Кваліфікація: д. т. н., професор, 05.13.06

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-5974-9310

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. Степана Бандери, буд. 12, Львів, 79013, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Виклюк Ярослав Ігорович
2. Vyklyuk Yaroslav I.

Кваліфікація: д. т. н., професор, 01.05.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. Степана Бандери, буд. 12, Львів, 79013, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Шаховська Наталія Богданівна
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Шаховська Наталія Богданівна
Відповідальний за підготовку облікових документів	Батюк Анатолій Євгенович
Реєстратор	УкрІНТЕІ
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Тетяна Анатоліївна