



Наукові перспективи
Видавнича група

№ 11(52)

2025

НАУКА і ТЕХНІКА

серія: *право*, серія: *економіка*, серія: *педагогіка*,
серія: *техніка*, серія: *фізико-математичні науки*

СЬОГОДНІ

З Україною

в серці!



Видавнича група «Наукові перспективи»

Всеукраїнська Асамблея докторів наук із державного управління

«Наука і техніка сьогодні»

*(Серія «Педагогіка», Серія «Право», Серія «Економіка»,
Серія «Фізико-математичні науки», Серія «Техніка»)*

Випуск № 11(52) 2025

Київ – 2025

Publishing Group «Scientific Perspectives»

Ukrainian Assembly of Doctors of Sciences in Public Administration

"Science and technology today"
("Pedagogy" series, "Law" series, "Economics" series,
"Physical and mathematical sciences" series, "Technics" series)

Issue № 11(52) 2025

Kyiv – 2025

ISSN 2786-6025 Online
УДК 001.32:1 /3/(477)(02)

DOI:  Crossref
we use DOIs

[https://doi.org/10.52058/2786-6025-2025-11\(52\)](https://doi.org/10.52058/2786-6025-2025-11(52))

**«Наука і техніка сьогодні» (Серія «Педагогіка», Серія «Право», Серія «Економіка»,
Серія «Фізико-математичні науки», Серія «Техніка»):
журнал. 2025. № 11(52) 2025. С. 2990**



*Згідно наказу Міністерства освіти і науки України від 07.04.2022 № 320
журналу присвоєно категорію "Б" із економіки та педагогіки
(спеціальності – 015 - Педагогічні науки; 076 - Економічні науки)*

*Згідно наказу Міністерства освіти і науки України від 06.06.2022 № 530 журналу
присвоєно категорію "Б" із права (спеціальність – 081 Юридичні науки)*

*Згідно наказу Міністерства освіти і науки України від 10.10.2022 № 894 журналу присвоєно
категорію "Б" із техніки (спеціальність - 122 Комп'ютерні науки)*

*Журнал видається за підтримки Міждержавної гільдії інженерів консультантів, Інституту філософії та соціології
Національної Академії Наук Азербайджану (Баку, Азербайджан), громадської організації
«Християнська академія педагогічних наук України» та громадської організації
«Всеукраїнська асоціація педагогів і психологів з духовно-морального виховання»*

*Рекомендовано до видавництва Президією Всеукраїнської Асамблеї докторів наук з державного управління
(Рішення від 24.11.2025 № 8/11-25)*



Журнал включено до міжнародної наукометричної бази Index Copernicus (IC),
міжнародної пошукової системи Google Scholar та до міжнародної наукометричної
бази даних Research Bible



Головний редактор: Сопілко Ірина Миколаївна - доктор юридичних наук,
професор, Відмінник освіти України, Лауреат Премії Президента України для молодих
вчених, Лауреат Премії Верховної Ради України найталановитішим молодим ученим в галузі
фундаментальних і прикладних досліджень та науково-технічних розробок, академік
Академії наук вищої школи України, Заслужений юрист України (Київ, Україна)

Редакційна колегія:

- Бахов Іван Степанович — доктор педагогічних наук, професор, завідувач кафедри іноземної філології та перекладу Міжрегіональної академії управління персоналом (Київ, Україна)
- Будник Вікторія Анатоліївна - кандидат економічних наук, професор, професор кафедри бізнес-логістики та транспортних технологій Державного університету інфраструктури та технологій (Київ, Україна)
- Войтасик Андрій Миколайович – кандидат технічних наук за спеціальністю системи та процеси керування, доцент кафедри електричної інженерії суднових та роботизованих комплексів Національного університету кораблебудування імені адмірала Макарова (м. Миколаїв, Україна), Віце-академік громадської наукової організації «Академія технічних наук України» (Івано-Франківськ, Україна)
- Волк Павло Павлович — доцент кафедри водної інженерії та водних технологій Національного університету водного господарства та природокористування (Рівне, Україна)
- Воробйов Яків Анатолійович – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри математики, інформатики та інформаційної діяльності Ізмайльського державного гуманітарного університету, учасник бойових дій, член громадської організації «Міжнародна фундація науковців та освітян», автор наукових публікацій та навчально-методичних матеріалів у галузі математики, прикладної математики, інформаційних технологій та педагогіки;
- Гирка Ольга Ігорівна - кандидат технічних наук, доцент, доцент кафедри товарознавства, митної справи та управління якістю Львівського торговельно-економічного університету (Львів, Україна)
- Гнатюк Сергій Олександрович - кандидат технічних наук, доцент, заступник декана факультету аеронавігації, електроніки та телекомунікацій Національного авіаційного університету (Київ, Україна)
- Дівізніюк Михайло Михайлович - доктор фізико-математичних наук, професор, Завідувач відділу Відділу цивільного захисту та інноваційної діяльності Державної установи "Інститут геохімії навколишнього середовища Національної академії наук України" (Київ, Україна)
- Дяденчук Альона Федорівна - кандидат технічних наук, старший викладач кафедри вищої математики і фізики Таврійського державного агротехнологічного університету імені Дмитра Моторного (Мелітополь, Україна)
- Забулонов Юрій Леонідович - доктор технічних наук, професор, Член-кореспондент НАН України, директор Державної установи «Інститут геохімії навколишнього середовища Національної академії наук України» (Київ, Україна)
- Ільїн Валерій Юрійович - доктор економічних наук, професор (Київ, Україна)

- Ільїна Анастасія Олександрівна - кандидат економічних наук, доцент, доцент кафедри публічного управління і адміністрування Національного торговельно-економічного університету (Київ, Україна)
- Кардаш Оксана Любомирівна — кандидат економічних наук, доцент кафедри комп'ютерних технологій та економічної кібернетики Навчально-наукового інституту автоматики, кібернетики та обчислювальної техніки Національного університету водного господарства та природокористування (м. Рівне, Україна)
- Квасніков Володимир Павлович — доктор технічних наук, професор, завідувач кафедри комп'ютеризованих електротехнічних систем та технологій Національного авіаційного університету (Київ, Україна)
- Коваленко Валентин Васильович - доктор юридичних наук, професор, провідний науковий співробітник сектору авторського права та суміжних прав лабораторії авторського права та інформаційних технологій Науково-дослідного центру судової експертизи з питань інтелектуальної власності Міністерства юстиції України (Київ, Україна)
- Коваленко Олена Михайлівна - кандидат педагогічних наук, провідний науковий співробітник відділу профільного навчання Інституту педагогіки НАПН України (Київ, Україна)
- Комнатний Сергій Олександрович - докторант кафедри філософії права та юридичної логіки Національної академії внутрішніх справ (Київ, Україна)
- Коробкова Олена Миколаївна - кандидат економічних наук, доцент кафедри «Експлуатація портів і технологія вантажних робіт» Одеського національного морського університету, засновниця Навчального центру з підготовки та підвищення кваліфікації митних брокерів в Україні, експерт з митної справи, член Асоціації митних брокерів в Україні, дійсний Віце академік громадської організації «Академія технічних наук України», Member of International federation of customs brokers association (USA)
- Кравчук Володимир Миколайович — доктор юридичних наук, доцент, доцент кафедри конституційного, адміністративного та міжнародного права Волинського національного університету імені Лесі Українки (Луцьк, Україна)
- Кузьмич Людмила Володимирівна - доктор технічних наук, головний науковий співробітник Інституту водних проблем і меліорації Національної академії аграрних наук України (Київ, Україна)
- Куницький Сергій Олегович - кандидат технічних наук, старший дослідник, провідний науковий співробітник науково-дослідної частини Національного університету водного господарства та природокористування (Рівне, Україна)
- Лук'янчук Олександр Петрович — кандидат технічних наук, доцент, доцент кафедри будівельних, дорожніх, меліоративних, сільськогосподарських машин та обладнання Національного університету водного господарства та природокористування (Рівне, Україна)
- Маджд Світлана Михайлівна - доктор технічних наук, професор, професор кафедри зеленої економіки та економіки природокористування Державної екологічної академії післядипломної освіти та управління (Київ, Україна)
- Мануель Давид Массено - доцент відділу права та захисту даних, старший науковий співробітник і член координаційного комітету лабораторії UbiNET, запрошений член PDPC, член-консультант комісій цифрового права муніципальних адвокатських колегій Кампінаса та Прая-Гранде (Сан-Паулу), а також Комісії з інновацій, управління та технологій муніципальної адвокатської колегії Гуарульоса, коментатор IODA, почесний член IDEIA Institute, член Наукового комітету MICHHR, член EDEN, член-кореспондент RedNAC, член UMAU, член-кореспондент UBAU (Португалія)
- Микитин Тарас Миронович - кандидат технічних наук, завідувач кафедри менеджменту Рівненського державного гуманітарного університету (Рівне, Україна)
- Миргород-Карпова Валерія Валеріївна - кандидат юридичних наук, заступник директора з наукової роботи, старший викладач кафедри адміністративного, господарського права та фінансово-економічної безпеки Сумського державного університету (Суми, Україна)
- Мізюк Вікторія Анатоліївна – кандидат педагогічних наук, доцент, декан факультету управління, адміністрування та інформаційної діяльності Ізмаїльського державного гуманітарного університету (Ізмаїл, Україна)
- Мірошніченко Валентина Іванівна - доктор педагогічних наук, професор, завідувач кафедри психології, педагогіки та соціально-економічних дисциплін Національної академії Державної прикордонної служби України імені Богдана Хмельницького (Хмельницький, Україна)
- Міхальський Томаш — доктор наук, доцент кафедри географії регіонального розвитку Гданського університету (Польща)
- Огієнко Микола Миколайович - кандидат технічних наук, професор кафедри організації авіаційних робіт та послуг Національного авіаційного університету (Київ, Україна)
- Одарченко Роман Сергійович - завідувач кафедри телекомунікаційних та радіоелектронних систем Національного авіаційного університету (Київ, Україна)
- Олексенко В'ячеслав Михайлович – доктор педагогічних наук, кандидат фізико-математичних наук, професор, професор кафедри вищої математики Національного технічного університету «Харківський політехнічний інститут» (Харків, Україна)
- Оніщенко Наталія Миколаївна - доктор юридичних наук, професор, Заслужений юрист України, академік НАПрН України, завідувач відділу теорії держави і права Інституту держави і права ім. В.М.Корецького НАН України (Київ, Україна)
- Опанасенко Володимир Миколайович — доцент кафедри комп'ютеризованих електротехнічних систем та технологій Національного авіаційного університету (Київ, Україна)
- Ордановська Олександра Ігорівна – доктор педагогічних наук, професор, професор кафедри інноваційних технологій та методики навчання природничих дисциплін Державного закладу «Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К. Д. Ушинського» (Одеса, Україна)
- Охріменко (Жмурко) Тетяна Олександрівна - старший науковий співробітник кафедри комп'ютеризованих систем управління Національного авіаційного університету (Київ, Україна)
- Павлов Костянтин Володимирович — доктор економічних наук, професор, завідувач кафедри підприємництва і маркетингу Волинського національного університету імені Лесі Українки (Луцьк, Україна)
- Паскаль Олена Вікторівна - кандидат педагогічних наук, доцент кафедри педагогічних технологій початкової освіти Державного закладу «Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К. Д. Ушинського» (Одеса, Україна)
- Поліщук Віталій Васильович — кандидат сільськогосподарських наук, завідувач відділу зрошення, відділення меліорації Інституту водних проблем і меліорації Національної академії аграрних наук України (Київ, Україна)
- Пономаренко Лілія Петрівна – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри Загальної фізики Фізико-математичного факультету Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського» (Київ, Україна)
- Приходькіна Наталія Олексіївна - доктор педагогічних наук, професор кафедри педагогіки, адміністрування і спеціальної освіти Навчально-наукового інституту менеджменту та психології ДЗВО «Університет менеджменту освіти» НАПН України (Київ, Україна)

- Стахова Анжеліка Петрівна — старший викладач кафедри комп'ютеризованих електротехнічних систем та технологій Національного авіаційного університету (Київ, Україна)
- Турчинова Ганна Володимирівна — кандидат педагогічних наук, доцент, декан факультету природничо-географічної освіти та екології Національного педагогічного університету імені М.П. Драгоманова (Київ, Україна)
- Удодова Яна Вадимівна – кандидат економічних наук, доцент кафедри обліку та оподаткування Запорізького національного університету (Запоріжжя, Україна)
- Фесенко Андрій Олексійович - кандидат технічних наук, асистент кафедри кібербезпеки та захисту інформації Київського національного університету імені Тараса Шевченка. (Київ, Україна)
- Черненко Варвара Петрівна - кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри інформатики і вищої математики Кременчуцького національного університету імені Михайла Остроградського (Кременчук, Україна)
- Чернуха Надія Миколаївна — доктор педагогічних наук, професор, професор кафедри соціальної реабілітації та соціальної педагогіки Київського національного університету імені Тараса Шевченка (Київ, Україна)
- Чумак Оксана Володимирівна - доктор економічних наук, доцент, науковий співробітник відділу статистики і аналітики вищої освіти Державної наукової установи «Інститут освітньої аналітики», (Київ, Україна)
- Шандра Наталія Андріївна - кандидат педагогічних наук, доцент кафедри іноземних мов для природничих факультетів Львівського національного університету імені Івана Франка (Львів, Україна)
- Шеремет Інесса Володимирівна - кандидат педагогічних наук, доцент, доцент кафедри медикобіологічних та валеологічних основ охорони життя і здоров'я Національного педагогічного університету ім. М. П. Драгоманова (Київ, Україна)
- Якимчук Аліна Юріївна - доктор економічних наук, професор, Академік економічних наук України, професор кафедри державного управління, документознавства та інформаційної діяльності Національного університету водного господарства та природокористування (Рівне, Україна)
- Якимчук Олег Феодосійович - керівник групи білінгу Відділу бізнес-систем Департаменту інформаційних технологій ПРАТ «Рівнеобленерго» (Рівне, Україна)
- Яцишин Андрій Васильович - доктор технічних наук, старший науковий співробітник, провідний науковий співробітник Відділу цивільного захисту та інноваційної діяльності Державної установи "Інститут геохімії навколишнього середовища Національної академії наук України" (Київ, Україна)

Статті розміщені в авторській редакції. Відповідальність за зміст та орфографію поданих матеріалів несуть автори.

ЗМІСТ

СЕРІЯ «Право»

Barabanova D.A.	34
<i>PROCEDURAL STATUS OF THE SUSPECT, THE ACCUSED: ESSENCE, STRUCTURE AND TEMPORAL BOUNDARIES</i>	
Havryltsiv M., Povalena M.	46
<i>GENDER EQUALITY IN THE SECURITY AND DEFENSE SECTOR OF UKRAINE: ORGANIZATIONAL AND LEGAL APPROACHES IN THE CONTEXT OF EURO-ATLANTIC INTEGRATION</i>	
Patseva I., Demchuk L., Davydova I., Ustymenko V., Kyrylenko N.	59
<i>GOVERNANCE AND CONTROL MECHANISMS IN EU ENVIRONMENTAL AND MINING LAW: LESSONS FOR THE RESOURCE SECTOR OF UKRAINE</i>	
Айрапетов М.А.	73
<i>ЗАХИСТ КОНТИНУУМУ ПРАВ І СВОБОД ЛЮДИНИ В УМОВАХ ОКУПАЦІЇ. ПОЗИТИВНА ВІДПОВІДАЛЬНІСТЬ ДЕРЖАВ</i>	
Беген В.О.	85
<i>ДОСЛІДЖЕННЯ ІНСТАНЦІЙНОЇ ЮРИСДИКЦІЇ СПРАВ ЗА УЧАСТЮ ВИЩИХ ОРГАНІВ ДЕРЖАВНОЇ ВЛАДИ У ДОКТРИНІ АДМІНІСТРАТИВНОГО СУДОЧИНСТВА</i>	
Бекірова Р.Р., Лашенко В.О., Толубасва К.О.	103
<i>ІМПЛЕМЕНТАЦІЯ ДОГОВОРУ ПРО НЕКОНКУРЕНЦІЮ В ТРУДОВЕ ЗАКОНОДАВСТВО УКРАЇНИ</i>	
Василів С.С.	116
<i>ДО ПИТАННЯ СУДОВОЇ ЮРИСДИКЦІЇ ЦИВІЛЬНИХ СПРАВ</i>	
Кіра С.О., Лесько Н.В.	123
<i>ІНСТИТУЦІЙНІ МЕХАНІЗМИ ВПРОВАДЖЕННЯ ЕЛЕКТРОННО-ГО СУДОЧИНСТВА В ОКРЕМИХ КРАЇНАХ ЄВРОПЕЙСЬКОГО СОЮЗУ</i>	

Шевчук О.Ф., Павлюк П.П., Козловський А.В., 2917
Паночишин Ю.М., Сімончук С.В.

*ІНФОРМАЦІЙНА ТЕХНОЛОГІЯ ОЦІНЮВАННЯ LogP ТА pK_a
ФТОРВМІСНИХ НАСИЧЕНИХ ПОХІДНИХ НА ОСНОВІ
МОДЕЛЕЙ МАШИННОГО НАВЧАННЯ*

Шуптар-Поривасєва Н.Й. 2928

*ВІЙСЬКОВИЙ ШТУЧНИЙ ІНТЕЛЕКТ У ГЛОБАЛЬНОМУ
КОНТЕКСТІ: ПОРІВНЯЛЬНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ УКРАЇНСЬКОГО
ТА МІЖНАРОДНОГО ДОСВІДУ*

Яровий А.А., Шевчук О.Ф., Озеранський В.С., Петришин С.І., 2940
Романенко Н.Б.

*ОСОБЛИВОСТІ РЕАЛІЗАЦІЇ ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ ІНФОРМА-
ЦІЙНОЇ ТЕХНОЛОГІЇ ВИЗНАЧЕННЯ ХВОРОБ РОСЛИН*

Яхненко С.Г. 2953

*ОГЛЯД АЛГОРИТМІВ МАШИННОГО НАВЧАННЯ ДЛЯ
СЕСІЙНИХ РЕКОМЕНДАЦІЙНИХ СИСТЕМ: ПОРІВНЯЛЬНИЙ
АНАЛІЗ ЕФЕКТИВНОСТІ*

СЕРІЯ «ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ»

Мушеник І.М., Марчук Н.А. 2969

*ВИКОРИСТАННЯ АНАЛІТИЧНИХ МЕТОДІВ ВИЩОЇ МАТЕМА-
ТИКИ В ІНТЕЛЕКТУАЛЬНИХ ІНФОРМАЦІЙНИХ СИСТЕМАХ*

Ярова О.А., Скасків Л.В., Черкас Я.П. 2982

*ІСТОРІЯ ВИНИКНЕННЯ ДІЙСНИХ ЧИСЕЛ. ЦІЛА ТА ДРОБОВА
ЧАСТИНИ*

УДК 004.852:547.96

[https://doi.org/10.52058/2786-6025-2025-11\(52\)-2917-2927](https://doi.org/10.52058/2786-6025-2025-11(52)-2917-2927)

Шевчук Олександр Федорович кандидат фізико-математичних наук, доцент, доцент кафедри комп'ютерних наук, Вінницький національний технічний університет, м. Вінниця, <https://orcid.org/0000-0002-8600-0700>

Павлюк Петро Петрович студент факультету інтелектуальних інформаційних технологій та автоматизації, Вінницький національний технічний університет, м. Вінниця

Козловський Андрій Володимирович кандидат технічних наук, доцент, доцент кафедри комп'ютерних наук, Вінницький національний технічний університет, м. Вінниця, <https://orcid.org/0000-0001-9697-1511>

Паночишин Юрій Миколайович кандидат технічних наук, доцент, доцент кафедри комп'ютерних наук, Вінницький національний технічний університет, м. Вінниця, <https://orcid.org/0000-0003-1546-3422>

Сімончук Сергій Володимирович асистент кафедри комп'ютерних наук, Вінницький національний технічний університет, м. Вінниця, <https://orcid.org/0009-0000-7295-5357>

ІНФОРМАЦІЙНА ТЕХНОЛОГІЯ ОЦІНЮВАННЯ LogP ТА pK_a ФТОРВМІСНИХ НАСИЧЕНИХ ПОХІДНИХ НА ОСНОВІ МОДЕЛЕЙ МАШИННОГО НАВЧАННЯ

Анотація. Фізико-хімічні властивості органічних сполук, зокрема ліпофільність (LogP) та кислотно-основні характеристики (pK_a), відіграють вирішальну роль у процесах пошуку лікарських засобів і медичній хімії. Точне прогнозування цих параметрів є необхідним для оцінки біодоступності, розподілу та токсикологічних профілів потенційних лікарських засобів. Проте незважаючи на наявність численних обчислювальних методів, їхня прогностична ефективність суттєво знижується при застосуванні до структурно специфічних та вузьких класів сполук, зокрема насичених фторовмісних похідних. Фторорганічні фрагменти здатні істотно модифікувати електронні, просторові та енергетичні характеристики молекул, однак універсальні моделі машинного навчання, побудовані на гетерогенних наборах даних, не враховують цих особливостей у повному обсязі. Таким чином, в основі розробленої

інформаційної технології оцінювання LogP та pK_a фторвмісних насичених похідних було використано спеціально побудований репрезентативний набір даних відкритого доступу із 183 насичених фторованих та нефторованих сполук, що забезпечував найвищі показники прогностичної валідності. Для прогнозування кислотно-основних властивостей найкращі результати досяглися за допомогою Graph Isomorphism Network ($R^2 \approx 0,989$), тоді як для передбачення LogP оптимальною виявилася Graph Convolutional Network із застосуванням AttentiveFP-дескрипторів ($R^2 \approx 0,955$). Запропонована інформаційна технологія реалізована у вигляді веборієнтованої системи, що включає модуль введення хімічних структур (SMILES, SDF/MOL, інтерактивний редактор), блок автоматизованого розрахунку дескрипторів, інтегровані нейромереві моделі та підсистему візуалізації результатів. Окрім прогнозованих значень pK_a та LogP , система відображає додаткові фізико-хімічні характеристики, такі як молекулярна маса, площа полярної поверхні, дипольний момент та топологічні індекси, що розширює можливості інтерпретації результатів.

Функціональна універсальність рішення забезпечується підтримкою поодинокого завантаження структур, пакетної обробки бібліотек сполук та інтерактивного конструювання молекул. Це дає змогу застосовувати інструмент для віртуального скринінгу, попереднього аналізу, перевірки експериментальних даних, навчальних цілей і наукових досліджень.

Розроблений вебзастосунок не потребує встановлення спеціалізованого програмного забезпечення чи знання мов програмування, що робить його доступним для широкого кола хіміків, фармацевтів і дослідників суміжних галузей.

Ключові слова: інформаційна технологія, прогнозування, машинне навчання, графові нейронні мережі.

Shevchuk Oleksandr Fedorovich Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Associate Professor at the Department for Computer Science, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia, <https://orcid.org/0000-0002-8600-0700>

Pavliuk Petro Petrovych Student of the Department of Intelligent Information Technologies and Automation, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia

Kozlovskiy Andrii Volodymyrovych Candidate of Technical Sciences, Associate Professor, Associate Professor at the Department for Computer Science, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia, <https://orcid.org/0000-0001-9697-1511>

Panochyshyn Yurii Mykolaiovych Candidate of Technical Sciences, Associate Professor, Associate Professor at the Department for Computer Science, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia, <https://orcid.org/0000-0003-1546-3422>

Simonchuk Serhii Volodymyrovych Master of Computer Science, Assistant at the Department for Computer Science, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia, <https://orcid.org/0009-0000-7295-5357>

INFORMATION TECHNOLOGY FOR *LogP* AND *pK_a* PREDICTION OF FLUORINE-CONTAINING SATURATED DERIVATIVES BASED ON MACHINE LEARNING MODELS

Abstract. The physicochemical properties of organic compounds, in particular lipophilicity (*LogP*) and acid–base characteristics (*pK_a*), play a crucial role in drug discovery and medicinal chemistry. Accurate prediction of these parameters is essential for assessing the bioavailability, distribution, and toxicological profiles of potential drug candidates. However, despite the availability of numerous computational methods, their predictive efficiency significantly decreases when applied to structurally specific and narrow classes of compounds, particularly saturated fluorine-containing derivatives. Fluoroorganic fragments can substantially modify the electronic, spatial, and energetic characteristics of molecules, yet universal machine learning models built on heterogeneous datasets do not fully account for these peculiarities.

Therefore, the developed information technology for evaluating *LogP* and *pK_a* of fluorine-containing saturated derivatives was based on a specially constructed representative open-access dataset comprising 183 saturated fluorinated and non-fluorinated compounds, which ensured the highest predictive validity. For acid–base property prediction, the best performance was achieved using a Graph Isomorphism Network ($R^2 \approx 0.989$), whereas for *LogP* prediction the optimal approach was a Graph Convolutional Network with AttentiveFP descriptors ($R^2 \approx 0.955$).

The proposed information technology has been implemented as a web-based system that includes a chemical structure input module (SMILES, SDF/MOL, interactive editor), an automated descriptor calculation block, integrated neural network models, and a results visualization subsystem. In addition to the predicted *pK_a* and *LogP* values, the system displays supplementary physicochemical characteristics such as molecular weight, polar surface area, dipole moment, and topological indices, thereby enhancing interpretability of the results.

The functional versatility of the solution is ensured by its support for single-structure input, batch processing of compound libraries, and interactive molecular

design. This enables its use in virtual screening, preliminary analysis, experimental data verification, educational purposes, and scientific research. The developed web application does not require installation of specialized software or knowledge of programming languages, making it accessible to a broad audience of chemists, pharmacists, and researchers in related fields.

Keywords: information technology, prediction, machine learning, graph neural networks.

Постановка проблеми. Фізико-хімічні властивості сполук, зокрема ліпофільність та кислотно-основні характеристики, відіграють надзвичайно важливу роль у хімії та суміжних науках. У фармацевтичних дослідженнях саме вони значною мірою визначають успішність потенційного лікарського кандидата [1]. Ліпофільність, яку зазвичай оцінюють шляхом вимірювання розподілу сполуки між 1-октанолом і водою ($\log P$), безпосередньо впливає на фармакокінетичні властивості молекули, такі як абсорбція, розподіл, метаболізм, елімінація та токсичність. Підвищена ліпофільність може покращувати проникність крізь клітинні мембрани та біодоступність препарату, проте водночас здатна спричиняти токсичні або побічні ефекти [1], [2]. Навпаки, низька ліпофільність зумовлює схильність молекули до полярного середовища та полегшує виведення із плазми, проте обмежує ефективність абсорбції [1], [3].

Не менш важливим параметром є кислотно-основні властивості, що визначають іонізаційний стан сполук за фізіологічних умов і безпосередньо впливають на біодоступність, розподіл і взаємодію з біологічними мішенями. Для їх кількісного опису використовують значення pK_a – від’ємний логарифм константи кислотно-основної рівноваги. Надійне прогнозування $\log P$ та pK_a є ключовим завданням при розробці нових біоактивних молекул і значно підвищує шанси на успіх під час доклінічних досліджень.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. У зв’язку з розвитком методів штучного інтелекту з’явилася низка робіт, присвячених прогнозуванню фізико-хімічних параметрів молекул [4-12]. Зокрема, були запропоновані графові нейронні мережі [4], ансамблі дерев рішень [5], гаусові процеси [6] та комбіновані методи [7], які показали доволі точні результати прогнозування у випадку великих універсальних наборів даних.

Проте, результати тестування, представлені у дослідженні [13], показали, що ефективність запропонованих моделей значно знижується при їхньому застосуванні до певних вузьких класів сполук. Зокрема, це стосується насичених фторвмісних похідних, які заслуговують особливої уваги через свої специфічні фізико-хімічні властивості.

Фтор має унікальні властивості, які суттєво змінюють електронну структуру, кислотність/основність та ліпофільність молекул. Ці особливості

широко використовуються у медичній хімії, і в окремі роки понад половина нових зареєстрованих лікарських засобів містила саме фторорганічні фрагменти [14], [15]. Попри це, систематизовані дані та прогностичні моделі для насичених фторованих сполук залишалися досі відсутніми, що створювало суттєвий науковий розрив.

У дослідженні [13] було здійснено спробу заповнити цю прогалину шляхом створення машинних моделей прогнозування LogP та pK_a для фторвмісних насичених похідних на спеціально побудованому наборі експериментальних даних, що включав циклоалкани, азетидин, піролідін, піперидин, біциклічні та ациклічні системи із фторвмісними замісниками (CH_2F , CHF_2 , CF_3 , gem- CF_2 тощо), а також відповідні нефторовані аналоги. Використання молекулярних дескрипторів і алгоритмів машинного навчання дозволило побудувати моделі, які демонстрували високу точність та відтворюваність прогнозів, підтверджуючи значимість фторвмісних фрагментів для фізико-хімічних властивостей.

Разом з тим результати цього дослідження мали переважно теоретичний характер. Моделі існували у вигляді програмного коду та вимагали спеціалізованих знань у сфері хімічної інформатики та програмування. Це обмежувало можливість їхнього використання іншими науковцями та практиками.

Саме тому виникла потреба у створенні відповідного програмного інструменту з інтуїтивно зрозумілим інтерфейсом, який забезпечить широкий науковій спільноті простий та відкритий доступ до розроблених моделей. Такий інструмент дозволить інтегрувати отримані результати у практичні дослідження, сприяючи швидшій валідації гіпотез і підвищенню ефективності розробки нових молекул.

Мета статті – є розроблення інформаційної технології для прогнозування кислотно-основних властивостей (pK_a) та ліпофільності (LogP) насичених фторвмісних похідних на основі моделей машинного навчання.

Виклад основного матеріалу. У дослідженні використано унікальний набір із 183 насичених фторвмісних та нефторованих похідних, для яких експериментально визначено значення pK_a та LogP . До вибірки увійшли первинні та вторинні аміни, а також карбонові кислоти, представлені моноциклічними, біциклічними (містковими, спіро- та злитими) та ациклічними системами. Структури включали фрагменти CH_2F , CHF_2 , CF_3 , CF_2 , gem- CF_2 , а також відповідні нефторовані аналоги.

Для забезпечення коректного навчання моделі його було поділено на 80 % тренувальної та 20 % тестової підмножини за принципом стратифікованого розподілу. Для уникнення перетину структурно подібних молекул між підмножинами використовувалася перевірка за коефіцієнтом схожості Танімото ($\geq 90\%$) [16], після чого подібні сполуки переносилися в одну групу

зі збереженням цільових пропорцій. Під час попередньої обробки було вилучено аномальні значення, а також відібрано релевантні дескриптори.

Дескриптори формувалися на основі топологічних, електронних та підструктурних характеристик із використанням RDKit [10] та суміжних бібліотек [9], [17].

Попередньо проведені дослідження включали тестування різних алгоритмів машинного навчання: ансамблевих моделей, гаусових процесів, градієнтного бустингу та графових нейронних мереж [4–7]. Порівняння результатів показало, що графові нейромережі продемонстрували найвищу точність прогнозування для обох цільових показників. Проте, для задачі оцінювання pK_a найкращі результати забезпечила модель на основі Graph Isomorphism Network (GIN) [18] із точністю $R^2 \approx 0,989$, а для $LogP$ найвищу ефективність мала Graph Convolutional Network (GCN) [19] з використанням AttentiveFP-дескрипторів ($R^2 \approx 0,955$).

Оптимізація гіперпараметрів здійснювалася із застосуванням hyperopt [20] у поєднанні з двохофолдною крос-валідацією, оскільки тестування моделей із 3–5 фолдами продемонструвало деградацію точності (R^2 знижувався від 0,809 до 0,772). Стратифікований поділ використовувався для збереження балансу класів і діапазонів експериментальних значень.

Для перевірки відповідності передбачень хімічній логіці застосовували методи пояснюваного штучного інтелекту. Зокрема, substructure mask explanation (SME) підтвердив, що значущість фторовмісних фрагментів у моделі корелює з експериментальними трендами зміни кислотності та ліпофільності. Таким чином, на основі отриманих результатів було сформовано програмну бібліотеку та відкрито набір даних, що створило передумови для розроблення відповідної інформаційної технології.

Архітектура інформаційної технології. Інформаційна технологія реалізована у вигляді веб-застосунку на базі фреймворку Streamlit. Архітектура системи побудована за модульним принципом і складається з чотирьох основних компонентів, які забезпечують повний цикл обробки молекулярних даних (рис. 1)

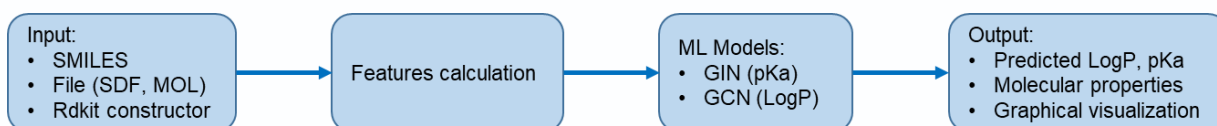


Рис. 1. Блок-схема роботи застосунку

1. Модуль введення даних підтримує три формати представлення хімічних структур: SMILES, молекулярні файли у форматах SDF та MOL, а також інтерактивний редактор молекулярних структур Rdk.

2. Модуль розрахунку дескрипторів виконує автоматичне обчислення молекулярних характеристик на основі отриманої молекули із попереднього модулю, які необхідні для нейронних моделей.

3. Блок моделей машинного навчання включає дві спеціалізовані нейронні мережі: Graph Isomorphism Network (GIN) для прогнозування значень pK_a та Graph Convolutional Network (GCN) для передбачення коефіцієнта розподілу $LogP$. Обидві моделі використовують графове представлення молекул, що дозволяє врахувати не лише атомний склад, але й топологію хімічних сполук.

4. Модуль виведення результатів представляє користувачу передбачені значення pK_a та $LogP$ разом із основними фізико-хімічними властивостями.

Практичне використання інформаційної технології. Інтерфейс розробленої ІТ дозволяє досліднику вводити хімічні структури у різний спосіб: шляхом безпосереднього введення SMILES, завантаження готового файлу зі структурою або побудови молекули вручну за допомогою інтерактивного редактора (рис. 2).

Після завантаження молекули система автоматично обчислює всі необхідні молекулярні дескриптори, що використовуються у процесі прогнозування.

Завдяки цьому застосунок виконує не лише функцію інструмента для передбачення значень $LogP$ та pK_a , але й може слугувати середовищем для попереднього аналізу фізико-хімічних характеристик сполук.

Прогнозування кислотно-основних властивостей та ліпофільності насичених фторвмісних похідних здійснюється з використанням графових нейронних мереж, які, згідно з попередніми дослідженнями [13], продемонстрували найвищу прогностичну ефективність для цього класу сполук.

Таким чином, реалізований програмний інтерфейс інтегрує саме ті алгоритми, які забезпечили максимальну точність під час моделювання значень pK_a та $LogP$.

Система також надає доступ до додаткових фізико-хімічних дескрипторів, що можуть бути релевантними для інтерпретації результатів прогнозування.

Серед них – молекулярна маса, загальна та позитивна площа полярної поверхні, дипольний момент, топологічні індекси та інші характеристики, які впливають на поведінку молекули в моделі та підвищують інформативність отриманих результатів (рис. 3).

Отже, такий підхід дозволяє не лише отримувати цільові значення прогнозу, але й аналізувати фактори, що визначають їх формування, що, у свою чергу, забезпечує кращу інтерпретованість і наукову придатність програмного інструмента.

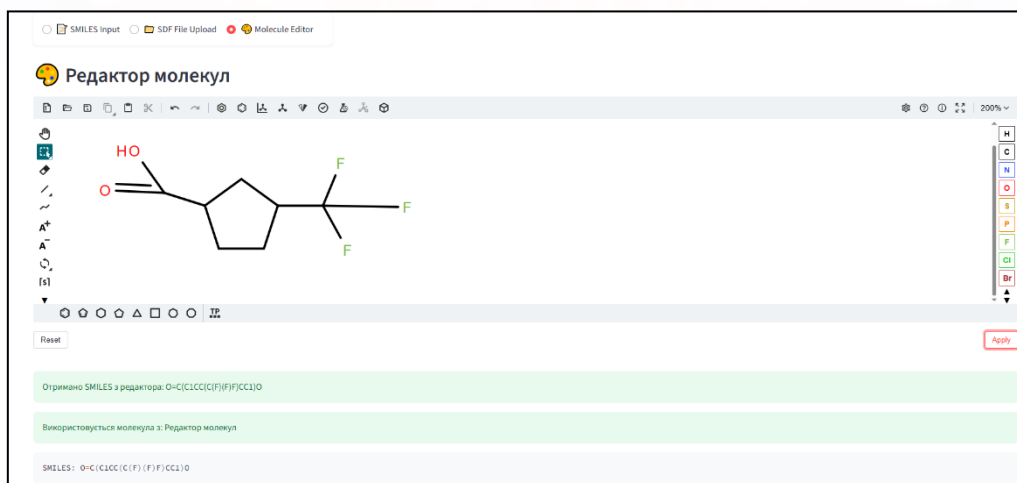


Рис. 2. Побудова молекули за допомогою інтерактивного редактора

3D Характеристики молекули		
Basic Properties:	Angles:	Distances and Conformation:
Identifier	Angle X1X2R2	F to FG
carboxilic_acid	148.3355	2
Dipole Moment	Angle X2X1R1	F Freedom
0.3579	111.0587	0
Molecular Volume	Angle R2X2R1	Distance Between Atoms in Cycle
145.288	156.6559	2.4171
Molecular Weight	Angle R1X1R2	Distance Between F-Group Centers
182.141	118.7575	4.7071
SASA	Dihedral Angle	Cis/Trans
211.132	131.5528	impossible to calculate
TPSA/F		
86.605		

Рис. 3. Розраховані ознаки та значення рКа для молекули
«O=C(C1CC(C(F)(F)F)CC1)O»

Ще однією важливою перевагою створеного інтерфейсу є його функціональна універсальність. Система підтримує як точковий аналіз окремих молекул за SMILES-нотацією, так і пакетну обробку бібліотек сполук у файловому форматі. Крім того, користувач має змогу самостійно конструювати нові структури та оперативно оцінювати їхні властивості. Така гнучкість робить інструмент придатним для віртуального скринінгу, перевірки експериментальних даних та освітнього застосування у сфері хімічної інформатики.

Розроблений вебзастосунок доступний онлайн за посиланням [21]. Його використання не потребує спеціальної підготовки у програмуванні чи локального встановлення програмного забезпечення, що спрощує доступ для широкої наукової аудиторії. Це, у свою чергу, забезпечує можливість інтеграції

отриманих результатів у практичні дослідження, їх валідації та порівняння з альтернативними підходами.

Висновки. У роботі створено інформаційну технологію для прогнозування pK_a та LogP насичених фторвмісних похідних на основі високоточних моделей машинного навчання. Система реалізована у вигляді вебзастосунку, що включає модулі введення хімічних структур, обчислення дескрипторів, застосування графових нейронних мереж (GIN і GCN) та візуалізацію результатів.

Запропоноване рішення враховує основні вимоги, що висуваються до сучасних інструментів хімічної інформатики, а саме: забезпечення можливості швидкого прогнозування значень LogP та pK_a для широкого кола фтормісних сполук; автоматизоване обчислення молекулярних дескрипторів; надання результатів у зручному графічному форматі; забезпечення універсальності в роботі з різними типами вхідних даних (SMILES, файлові структури, інтерактивна побудова молекул). Ключовою перевагою запропонованої інформаційної технології є поєднання високої прогностичної точності з доступним та інтуїтивно зрозумілим інтерфейсом. Такий підхід забезпечує можливість інтеграції інструмента у прикладні наукові дослідження без необхідності володіння спеціалізованими навичками програмування, що, своєю чергою, сприяє валідації гіпотез та підвищенню ефективності процесів молекулярного скринінгу.

Подальші наукові дослідження будуть спрямовані на розширення функціоналу застосунку за рахунок включення інших класів сполук.

Література:

1. Benaiges, D., Pedro-Botet, J., & Climent, E. (2021). Hydrophilic or lipophilic statins? *Frontiers in Cardiovascular Medicine*. <https://doi.org/10.3389/fcvm.2021.687585>
2. Kuentz, M. T., & Arnold, Y. (2009). Influence of molecular properties on oral bioavailability of lipophilic drugs – mapping of bulkiness and different measures of polarity. <https://doi.org/10.1080/10837450802626296>
3. Challener, C. (2017). Oral delivery of biologic APIs: The challenge continues. *Drug Development & Delivery*, 41(3).
4. Wang, D., Liu, X., Zhong, F., Wan, X., Li, X., Li, Z., Luo, X., Chen, K., Jiang, H., & Zheng, M. (2020). Pushing the boundaries of molecular representation for drug discovery with the graph attention mechanism. *Journal of Medicinal Chemistry*, 63(16). <https://doi.org/10.1021/acs.jmedchem.9b00959>
5. Baltruschat, M., & Czodrowski, P. (2020). Machine learning meets pK_a . *F1000Research*. <https://doi.org/10.12688/f1000research.22090.2>
6. Caine, B. (2019). On the development and application of AIBL- pK_a , a pK_a predictor based on equilibrium bond lengths of a single protonation state.
7. Yang, Q., Li, Y., Liu, Y., Zhang, L., Luo, S., & Cheng, J. (2020). Holistic prediction of the pK_a in diverse solvents based on a machine-learning approach. *Angewandte Chemie International Edition*, 43. <https://doi.org/10.1002/anie.202008528>

8. Xiong, J., Li, Z., Wang, G., Fu, Z., Zhong, F., Xu, T., Liu, X., Huang, Z., Liu, X., Chen, K., Jiang, H., & Zheng, M. (2022). Multi-instance learning of graph neural networks for aqueous pKa prediction. *Bioinformatics*, 38(3). <https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btab714>

9. Li, M., Zhou, J., Hu, J., Fan, W., Zhang, Y., Gu, Y., & Karypis, G. (2017). DGL-LifeSci: An open-source toolkit for deep learning on graphs in life science. *ACS Omega*, 6(41). <https://doi.org/10.1021/acsomega.1c04017>

10. Landrum, G. (2023, September). RDKit: Open-source cheminformatics [Online]. Retrieved from <https://www.rdkit.org>

11. Raddi, R. M., & Voelz, V. A. (2022). Stacking Gaussian processes to improve pKa predictions in the SAMPL7 challenge. *Journal of Computer-Aided Molecular Design*, 35. <https://doi.org/10.1007/s10822-021-00411-8>

12. Wang, Y., Xiong, J., Xiao, F., Zhang, W., Cheng, K., Rao, J., Niu, B., Tong, X., Qu, N., Zhang, R., Wang, Y., Li, K., Li, X., & Zheng, M. (2023). LogD7.4 prediction enhanced by transferring knowledge from chromatographic retention time, microscopic pKa and logP. *Journal of Cheminformatics*, 15(76). <https://doi.org/10.1186/s13321-023-00754-4>

13. Gurbych, O., Pavliuk, P., Krasnienkov, D., Liashuk, O., Melnykov, K., Grygorenko, O. (2025). Filling the gap in LogP and pKa evaluation for saturated fluorine-containing derivatives with machine learn.. *Journal of Computational Chemistry*, 46(2). <https://doi.org/10.1002/jcc.70002>

14. Inoue, M., Sumii, Y., & Shibata, N. (2020). Contribution of organofluorine compounds to pharmaceuticals. *ACS Omega*, 5(19). <https://doi.org/10.1021/acsomega.0c00830>

15. O'Hagan, D., & Young, R. J. (2023). Future challenges and opportunities with fluorine in drugs. *Medicinal Chemistry Research*, 32(7). <https://doi.org/10.1007/s00044-023-03094-y>

16. Tanimoto, T. T. (1958). An elementary mathematical theory of classification and prediction.

17. Moriwaki, H., Tian, Y.-S., Kawashita, N., & Takagi, T. (2018). Mordred: A molecular descriptor calculator. *Journal of Cheminformatics*, 10. <https://doi.org/10.1186/s13321-018-0258-y>

18. Wieder, M., Mayr, F., Wieder, O., & Langer, T. (2022). Improving small-molecule pKa prediction using transfer learning with graph neural networks. *Frontiers in Chemistry*, 10. <https://doi.org/10.3389/fchem.2022.866585>

19. Kipf, T. N., & Welling, M. (2017). Semi-supervised classification with graph convolutional networks [Online]. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1609.02907>

20. Bergstra, J., Yamins, D., & Cox, D. D. (2013). Making a science of model search: Hyperparameter optimization in hundreds of dimensions for vision architectures. *Proceedings of the 28th International Conference on Machine Learning*.

21. FluoricLogPpKa. (2025). [Online]. Retrieved from <http://fluoriclogppka.com>

References:

1. Benaiges, D., Pedro-Botet, J., & Climent, E. (2021). Hydrophilic or lipophilic statins? *Frontiers in Cardiovascular Medicine*. <https://doi.org/10.3389/fcvm.2021.687585>

2. Kuentz, M. T., & Arnold, Y. (2009). Influence of molecular properties on oral bioavailability of lipophilic drugs – mapping of bulkiness and different measures of polarity. <https://doi.org/10.1080/10837450802626296>

3. Challener, C. (2017). Oral delivery of biologic APIs: The challenge continues. *Drug Development & Delivery*, 41(3).

4. Wang, D., Liu, X., Zhong, F., Wan, X., Li, X., Li, Z., Luo, X., Chen, K., Jiang, H., & Zheng, M. (2020). Pushing the boundaries of molecular representation for drug discovery with the graph attention mechanism. *Journal of Medicinal Chemistry*, 63(16). <https://doi.org/10.1021/acs.jmedchem.9b00959>

5. Baltruschat, M., & Czodrowski, P. (2020). Machine learning meets pKa. *F1000Research*. <https://doi.org/10.12688/f1000research.22090.2>
6. Caine, B. (2019). On the development and application of AIBL-pKa, a pKa predictor based on equilibrium bond lengths of a single protonation state.
7. Yang, Q., Li, Y., Liu, Y., Zhang, L., Luo, S., & Cheng, J. (2020). Holistic prediction of the pKa in diverse solvents based on a machine-learning approach. *Angewandte Chemie International Edition*, 43. <https://doi.org/10.1002/anie.202008528>
8. Xiong, J., Li, Z., Wang, G., Fu, Z., Zhong, F., Xu, T., Liu, X., Huang, Z., Liu, X., Chen, K., Jiang, H., & Zheng, M. (2022). Multi-instance learning of graph neural networks for aqueous pKa prediction. *Bioinformatics*, 38(3). <https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btab714>
9. Li, M., Zhou, J., Hu, J., Fan, W., Zhang, Y., Gu, Y., & Karypis, G. (2017). DGL-LifeSci: An open-source toolkit for deep learning on graphs in life science. *ACS Omega*, 6(41). <https://doi.org/10.1021/acsomega.1c04017>
10. Landrum, G. (2023, September). RDKit: Open-source cheminformatics [Online]. Retrieved from <https://www.rdkit.org>
11. Raddi, R. M., & Voelz, V. A. (2022). Stacking Gaussian processes to improve pKa predictions in the SAMPL7 challenge. *Journal of Computer-Aided Molecular Design*, 35. <https://doi.org/10.1007/s10822-021-00411-8>
12. Wang, Y., Xiong, J., Xiao, F., Zhang, W., Cheng, K., Rao, J., Niu, B., Tong, X., Qu, N., Zhang, R., Wang, Y., Li, K., Li, X., & Zheng, M. (2023). LogD7.4 prediction enhanced by transferring knowledge from chromatographic retention time, microscopic pKa and logP. *Journal of Cheminformatics*, 15(76). <https://doi.org/10.1186/s13321-023-00754-4>
13. Gurbych, O., Pavliuk, P., Krasnienkov, D., Liashuk, O., Melnykov, K., Grygorenko, O. (2025). Filling the gap in LogP and pKa evaluation for saturated fluorine-containing derivatives with machine learning. *Journal of Computational Chemistry*, 46(2). <https://doi.org/10.1002/jcc.70002>
14. Inoue, M., Sumii, Y., & Shibata, N. (2020). Contribution of organofluorine compounds to pharmaceuticals. *ACS Omega*, 5(19). <https://doi.org/10.1021/acsomega.0c00830>
15. O'Hagan, D., & Young, R. J. (2023). Future challenges and opportunities with fluorine in drugs. *Medicinal Chemistry Research*, 32(7). <https://doi.org/10.1007/s00044-023-03094-y>
16. Tanimoto, T. T. (1958). An elementary mathematical theory of classification and prediction.
17. Moriwaki, H., Tian, Y.-S., Kawashita, N., & Takagi, T. (2018). Mordred: A molecular descriptor calculator. *Journal of Cheminformatics*, 10. <https://doi.org/10.1186/s13321-018-0258-y>
18. Wieder, M., Mayr, F., Wieder, O., & Langer, T. (2022). Improving small-molecule pKa prediction using transfer learning with graph neural networks. *Frontiers in Chemistry*, 10. <https://doi.org/10.3389/fchem.2022.866585>
19. Kipf, T. N., & Welling, M. (2017). Semi-supervised classification with graph convolutional networks [Online]. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1609.02907>
20. Bergstra, J., Yamins, D., & Cox, D. D. (2013). Making a science of model search: Hyperparameter optimization in hundreds of dimensions for vision architectures. *Proceedings of the 28th International Conference on Machine Learning*.
21. FluoricLogPpKa. (2025). [Online]. Retrieved from <http://fluoriclogppka.com>