

**МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ**

**факультет фармацевтичних технологій та менеджменту
кафедра промислової технології ліків та косметичних засобів**

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА

**на тему: «ЦИФРОВІЗАЦІЯ ПРОЦЕСІВ ЕКСТРАКЦІЇ БІОЛОГІЧНО
АКТИВНИХ РЕЧОВИН ІЗ ЛІКАРСЬКОЇ РОСЛИННОЇ СИРОВИНИ:
АНАЛІЗ ТЕХНОЛОГІЙ І ПЕРСПЕКТИВ ДЛЯ ФАРМАЦЕВТИЧНОГО
ВИРОБНИЦТВА»**

Виконала: здобувачка вищої освіти групи
ТФПм19(5,5з)-02

спеціальності 226 Фармація, промислова фармація
освітньої програми Технології фармацевтичних
препаратів

Тетяна СЕРДЮКОВА

Керівник: доцент закладу вищої освіти кафедри
промислової технології ліків та косметичних засобів,
к.фарм.н., доцент Дмитро СОЛДАТОВ

Рецензент: доцент закладу вищої освіти кафедри
аптечної технології ліків, к.фарм.н.,
доцент Володимир КОВАЛЬОВ

АНОТАЦІЯ

У роботі представлено результати дослідження цифровізації процесу екстракції біологічно активних речовин із лікарської рослинної сировини. Проведено аналіз сучасних цифрових платформ та алгоритмів штучного інтелекту (ШІ), визначено їх можливості та обмеження у застосуванні для автоматизації управління процесами екстракції. Дослідження охоплює основні методи екстракції, такі як мацерація, циркуляційна та ультразвукова екстракція, а також математичне моделювання та використання систем IoT для контролю параметрів процесу.

Робота складається з наступних частин: вступ, огляд літератури, вибір методів дослідження, експериментальна частина, загальні висновки, перелік використаних літературних джерел, загальний обсяг роботи 43 сторінки, містить 11 таблиць, 30 джерел літератури.

Ключові слова: екстракція, біологічно активні речовини, цифровізація, штучний інтелект, фармацевтичні дослідження

ANNOTATION

The thesis presents the results of research on the digitalization of the extraction process of biologically active compounds from medicinal plant raw materials. The analysis of modern digital platforms and artificial intelligence (AI) algorithms was carried out, and their capabilities and limitations in the automation of extraction process management were identified. The research covers the main extraction methods, such as maceration, circulation, and ultrasonic extraction, as well as mathematical modeling and the use of IoT systems to control process parameters.

The work consists of the following parts: introduction, literature review, choice of research methods, experimental part, general conclusions, list of used literature sources, total work volume of 43 pages, contains 11 tables, 30 literature sources.

Key words: extraction, biologically active compounds, digitalization, artificial intelligence, pharmaceutical research

ЗМІСТ

Вступ.....	5
Розділ 1. ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ.....	8
1.1. Сучасний стан досліджень у сфері цифровізації фармацевтичних процесів	8
1.2. Основні методи екстракції біологічно активних речовин (БАР).....	11
1.3. Використання цифрових технологій у контролі якості процесів.....	14
1.4. Аналіз наявних моделей оптимізації екстракції БАР.....	17
1.5. Перспективи впровадження штучного інтелекту та цифрових платформ у фармацевтичне виробництво.....	20
Висновки до розділу 1.....	23
Розділ 2. ОБ'ЄКТИ ТА МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ.....	24
2.1. Вибір загальної методології досліджень.....	24
2.2. Характеристика об'єктів дослідження.....	25
2.3 Характеристика методів дослідження.....	26
Висновки до розділу 2.....	28
Розділ 3. ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНА ЧАСТИНА АНАЛІЗ ДАНИХ ТА АЛГОРИТМІЗАЦІЯ ПРОЦЕСІВ ОПТИМІЗАЦІЇ ЕКСТРАКЦІЇ.....	29
3.1. Аналіз даних та побудова алгоритму оптимізації екстракції.....	29
3.2. Оцінка ефективності алгоритму оптимізації.....	40
Висновки до розділу 3.....	42
Висновки.....	43
Список використаних джерел.....	44

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ

БАР — біологічно активні речовини

ІЧ-спектроскопія — інфрачервона спектроскопія

AI — Artificial Intelligence (штучний інтелект)

ASPEN — Advanced System for Process Engineering (платформа для симуляції хімічних процесів)

COMSOL — Computational Software (програмне забезпечення для мультифізичних моделей)

GDP — Good Distribution Practice (належна дистриб'юторська практика)

GMP — Good Manufacturing Practice (належна виробнича практика)

HPLC — High-Performance Liquid Chromatography (високоєфективна рідинна хроматографія)

IoT — Internet of Things (інтернет речей)

RSM — Response Surface Methodology (метод поверхні відгуку)

SCFE — Supercritical Fluid Extraction (суперкритична флюїдна екстракція)

SFE — Supercritical Fluid Extraction (суперкритична екстракція)

Вступ

Актуальність теми.

Сучасна фармацевтична промисловість перебуває на етапі активного впровадження цифрових технологій у виробничі процеси. Оптимізація процесів екстракції біологічно активних речовин (БАР) із лікарської рослинної сировини є однією з ключових задач, оскільки саме цей етап визначає якість, ефективність та стабільність кінцевих препаратів.

Застосування цифрових технологій, зокрема алгоритмів штучного інтелекту (ШІ) та машинного навчання, дає можливість проводити аналіз великих обсягів даних, прогнозувати ефективність параметрів процесу та оптимізувати його без зайвих затрат ресурсів і часу. Це особливо актуально в умовах обмежених лабораторних можливостей.

Цифровізація фармацевтичного виробництва дозволяє:

- знизити витрати на розробку нових препаратів;
- підвищити ефективність екстракції біологічно активних речовин завдяки прогнозуванню оптимальних параметрів процесу;
- запровадити сучасні підходи до моніторингу якості на основі даних у реальному часі.

Варто зазначити, що процес екстракції залежить від багатьох змінних, серед яких тип екстрагенту, температурний режим, співвідношення сировини до розчинника та тривалість процесу. Для оптимізації таких багатofакторних процесів традиційні підходи потребують значної кількості експериментів, що збільшує витрати часу та ресурсів. Використання алгоритмів прогнозування дозволяє мінімізувати необхідність проб і помилок, надаючи можливість отримати оптимальні параметри за допомогою аналізу доступних даних.

Тому розробка ефективного алгоритму оптимізації на основі цифрових рішень є надзвичайно важливою для розвитку фармацевтичних технологій і підвищення конкурентоспроможності виробничих процесів.

Мета дослідження.

Розробка алгоритмів та рекомендацій для оптимізації процесу екстракції біологічно активних речовин із лікарської рослинної сировини на основі аналізу наявних даних та цифрових технологій.

Завдання дослідження:

1. Провести аналіз сучасних методів екстракції БАР та цифрових технологій, що застосовуються у фармацевтичному виробництві.
2. Визначити ключові параметри процесу екстракції, які підлягають оптимізації.
3. Розробити алгоритм прогнозування оптимальних параметрів процесу екстракції з використанням доступних даних.
4. Обґрунтувати рекомендації щодо використання цифрових інструментів для подальших досліджень та практичного впровадження.

Об'єкт дослідження.

Процес екстракції біологічно активних речовин із лікарської рослинної сировини.

Предмет дослідження.

Алгоритми та моделі прогнозування оптимальних параметрів екстракції, що базуються на доступних цифрових технологіях.

Методи дослідження.

У цьому дослідженні використовувалися комплексні методи для досягнення поставленої мети. Перш за все, було проведено детальний літературний огляд наукових публікацій, що стосуються процесів екстракції БАР та сучасних підходів до їх оптимізації, а також методів цифрового аналізу. Особливу увагу приділено дослідженням, у яких описані результати використання різних екстрагентів, параметрів часу та температурного режиму. Зібрані дані систематизували для виділення критичних факторів, які впливають на вихід і якість кінцевого продукту.

Для оптимізації процесу був розроблений алгоритм, який пропонує методику аналізу та підбору оптимальних параметрів із використанням

доступних баз даних і інструментів аналізу. Окрім цього, методологія включала порівняння результатів досліджень, описаних у науковій літературі, та прогнозування за допомогою алгоритму. Розроблені рекомендації щодо параметрів процесу ґрунтуються на аналізі та узагальненні результатів опублікованих досліджень, що дозволяє отримати якісний прогноз без проведення дорогих експериментів. Завдяки цьому забезпечується системний підхід до вибору найкращих умов екстракції БАР та формулюються пропозиції щодо застосування цих рішень на практиці.

Практичне значення отриманих результатів:

Розроблений алгоритм оптимізації може бути використаний для розробки технологічних карт екстракції БАР без необхідності вартісного обладнання. Запропоновані рекомендації дозволяють підвищити ефективність фармацевтичного виробництва, скоротити час досліджень та мінімізувати ризик помилок під час встановлення параметрів процесу.

Елементи наукових досліджень (за наявності):

У дослідженні було систематизовано сучасні наукові підходи до оптимізації процесів екстракції біологічно активних речовин із використанням цифрових технологій. Розроблено алгоритм аналізу та прогнозування ключових параметрів екстракції на основі наявних наукових даних та методик. Запропоновано схему використання алгоритмів для визначення оптимальних умов екстракції, що сприяє підвищенню ефективності процесу та мінімізації витрат ресурсів.

Структура та обсяг кваліфікаційної роботи. Кваліфікаційна робота складається зі вступу, огляду літератури, експериментальної частини, загальних висновків, переліку використаних джерел, додатків, викладена на 43 сторінках, включає 11 таблиць, 30 джерел літератури.

Розділ 1. ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

1.1. Сучасний стан досліджень у сфері цифровізації фармацевтичних процесів

Фармацевтична галузь за останні роки демонструє значний прогрес у впровадженні цифрових технологій для оптимізації виробничих процесів. Цифровізація процесу екстракції біологічно активних речовин (БАР) із лікарської рослинної сировини дозволяє підвищити ефективність і стабільність виробничих циклів, що позитивно впливає на якість кінцевого продукту та знижує витрати на виробництво [5, 8, 12].

Однією з ключових переваг цифрових рішень є можливість працювати з великими обсягами даних. Використання алгоритмів машинного навчання та статистичного моделювання дає змогу не лише аналізувати дані, а й прогнозувати оптимальні параметри процесу екстракції. Це дозволяє замінити численні експериментальні спроби автоматизованими розрахунками, що значно скорочує час на розробку та підвищує точність результатів. Завдяки цьому зменшується кількість необхідних проб і помилок, що особливо важливо при роботі з великою кількістю факторів, які впливають на кінцевий результат [3, 7].

Застосування цифрових платформ забезпечує комплексний підхід до оптимізації екстракційних процесів. Зокрема, такі системи дозволяють автоматично фіксувати зміни параметрів у реальному часі, а також проводити корекцію значень для запобігання втратам якості продукту. Наприклад, сучасні сенсори вимірюють температуру, рівень pH та концентрацію екстрагенту, передаючи ці дані до центральної системи управління. Далі алгоритм аналізує ці дані та визначає, чи потрібно коригувати параметри, щоб забезпечити стабільний результат [9, 15].

1.1.1. Цифрові платформи для аналізу та прогнозування.

Наукові дослідження свідчать про ефективність використання різних програмних рішень для аналізу та оптимізації процесів екстракції (таблиця 1.1).

Таблиця 1.1

Програмні рішення для аналізу та оптимізації процесів екстракції

Тип цифрової платформи	Функції	Приклади застосування
Системи збору даних IoT	Збір і передача показників у реальному часі	Відстеження температури, рН та тиску протягом усього циклу екстракції
Алгоритми машинного навчання	Аналіз великих масивів даних і побудова прогнозних моделей	Визначення оптимальних параметрів для різних типів сировини
Програмні модулі для обробки даних	Обробка та візуалізація даних, побудова графіків і звітів	Аналіз відхилень параметрів та підготовка рекомендацій
Експертні системи контролю	Автоматичне управління параметрами на основі заданих правил і рекомендацій	Зупинка процесу при виході значень параметрів за межі допустимого діапазону

Цифрові інструменти забезпечують можливість більш точного контролю над параметрами екстракції та прогнозування результатів. Завдяки їм стає можливим проведення віртуальних експериментів, які дозволяють оцінити ефективність тих чи інших змін без фізичного втручання в реальний процес [6, 11].

1.1.2. Переваги цифровізації процесів екстракції:

1. Автоматизація та зменшення людського фактору. Сучасні системи дозволяють звести до мінімуму ручний контроль, що знижує ризик помилок.

2. Прогнозування та корекція. Алгоритми машинного навчання здатні прогнозувати вихід БАР залежно від вхідних параметрів і автоматично коригувати їх при необхідності.

3. Скорочення витрат часу та ресурсів. Завдяки аналізу історичних даних та створенню прогнозних моделей, кількість пробних дослідів значно зменшується.

4. Стандартизація процесу. Цифрові системи забезпечують точність повторюваних операцій, що дозволяє дотримуватись міжнародних стандартів якості [10, 12].

1.1.3. Виклики цифровізації у фармацевтичній галузі

Попри очевидні переваги, існують і певні виклики при впровадженні цифрових рішень:

1. Високі початкові інвестиції. Вартість програмного забезпечення та обладнання для цифрового моніторингу є значною.

2. Необхідність навчання персоналу. Для ефективного використання систем потрібна відповідна кваліфікація фахівців.

3. Інтеграція з існуючими системами. Впровадження цифрових платформ вимагає адаптації старого обладнання та відповідності міжнародним стандартам [21, 29].

1.1.4. Практичний приклад впровадження цифрової системи

Одним із прикладів цифровізації процесу є застосування ультразвукової екстракції, де контроль температури є критичним параметром. З використанням цифрових систем управління датчики постійно фіксують коливання температури і відправляють дані до центрального програмного забезпечення. У разі перевищення допустимого діапазону алгоритм може автоматично активувати систему охолодження, що запобігає деградації БАР і знижує ймовірність відхилень у складі кінцевого продукту.

Цифровізація процесів екстракції у фармацевтиці відкриває можливості для підвищення точності, стандартизації та ефективності виробництва. Завдяки використанню алгоритмів машинного навчання та автоматизованих

систем контролю можна мінімізувати кількість експериментів і знизити витрати, водночас забезпечуючи високу якість готового продукту. Наступним кроком є розгляд основних методів екстракції та їх особливостей у контексті впровадження цифрових технологій [15, 29].

1.2. Основні методи екстракції біологічно активних речовин (БАР)

Екстракція біологічно активних речовин (БАР) із лікарської рослинної сировини є ключовим етапом у процесі виробництва фармацевтичних препаратів. Цей процес спрямований на вилучення максимального об'єму речовин, які мають терапевтичний ефект. Залежно від характеристик сировини та цілей дослідження, використовуються різні методи екстракції. Кожен метод має свої особливості, переваги та обмеження (таблиця 1.2).

Таблиця 1.2

Основні методи екстракції

Метод	Принцип дії	Переваги	Недоліки
Мацерація	Настоювання сировини у розчиннику при кімнатній температурі.	Простота проведення, мінімальні витрати.	Тривалість процесу, можливе неповне вилучення БАР.
Циркуляційна екстракція	Нагрівання суміші сировини та розчинника для прискорення процесу.	Ефективне вилучення БАР за короткий час.	Потреба у спеціальному обладнанні, ризик втрат БАР через перегрівання.
Ультразвукова екстракція	Використання ультразвукових хвиль для руйнування клітинних стінок.	Швидкість процесу, високий вихід БАР.	Потребує ультразвукового обладнання, можливий термічний вплив.
Суперкритична екстракція	Використання флюїдів у суперкритичному стані (наприклад, CO ₂).	Висока чистота екстракту, екологічність процесу.	Висока вартість обладнання та експлуатації.

Мацерація

Мацерація — це один із найстаріших і найпростіших методів екстракції, який полягає у настоюванні подрібненої рослинної сировини у розчиннику при кімнатній температурі протягом тривалого часу (від кількох годин до кількох днів). Основною перевагою мацерації є її простота та доступність: цей метод не потребує спеціального обладнання. Однак тривалість процесу та можливість неповного вилучення активних речовин обмежують його ефективність у промислових масштабах [1, 7].

У сучасних фармацевтичних лабораторіях метод мацерації використовується для попередніх тестів та отримання базових результатів для подальшого аналізу. Цифрові технології можуть оптимізувати цей процес шляхом автоматизації контролю за часом та температурою настоювання.

Циркуляційна екстракція

Циркуляційна екстракція передбачає нагрівання суміші розчинника та рослинної сировини у спеціальній колбі з конденсатором, що дозволяє повертати пари екстрагенту назад у рідкий стан. Це дозволяє пришвидшити процес вилучення БАР та запобігти втратам розчинника [5, 13].

Цей метод є ефективнішим за мацерацію, оскільки дозволяє отримувати екстракти за коротший проміжок часу. Однак рефлюксна екстракція потребує спеціального обладнання та постійного контролю температури. Застосування цифрових термодатчиків та програмного забезпечення для регулювання нагрівання дозволяє уникнути перегрівання та підтримувати оптимальні умови процесу.

Ультразвукова екстракція

Ультразвукова екстракція є інноваційним методом, який використовує високочастотні хвилі для руйнування клітинних стінок та прискорення вивільнення БАР у розчинник. Завдяки цьому методу можна значно скоротити час екстракції та збільшити кількість отриманих активних речовин [10].

Основною перевагою цього методу є його швидкість та висока ефективність, проте він потребує ультразвукового обладнання, що може бути дорогим для малих лабораторій. Крім того, під час ультразвукової екстракції можлива локальна термічна деградація БАР через надмірне нагрівання розчину. Використання систем автоматичного регулювання інтенсивності хвиль дозволяє уникати цих проблем [17].

Суперкритична екстракція використовує флюїди у стані, який поєднує властивості газу та рідини. Найпоширенішим флюїдом для цього процесу є діоксид вуглецю (CO_2). Він здатний проникати у дрібні пори сировини та витягати цінні речовини без залишків розчинника у кінцевому продукті [18, 22].

Цей метод дозволяє отримувати екологічно чисті екстракти без використання органічних розчинників. Він є ідеальним для виготовлення високоякісних фармацевтичних препаратів та косметичних засобів. Однак суперкритична екстракція потребує високих інвестицій у обладнання та технічне обслуговування. Для зниження витрат на дослідження застосовуються цифрові моделі оптимізації параметрів процесу, які дозволяють налаштовувати тиск та температуру відповідно до характеристик сировини [13, 14, 26].

Для наочності порівняємо основні параметри методів (таблиця 1.3).

Таблиця 1.3

Порівняння методів екстракції

Параметр	Мацерація	Рефлюкс	Ультразвук	Суперкритична екстракція
Час процесу	Від кількох годин до днів	1-2 години	15-30 хвилин	1-2 години
Вимоги до обладнання	Низькі	Середні	Високі	Високі
Вихід БАР	Середній	Високий	Високий	Дуже високий
Ризик втрати речовин	Високий	Середній	Низький	Низький
Вартість	Низька	Середня	Висока	Дуже висока

Параметр	Мацерація	Рефлюкс	Ультразвук	Суперкритична екстракція
процесу				

Основні методи екстракції відрізняються за часом проведення, виходом БАР та необхідністю спеціального обладнання.

Найбільш економічними є методи мацерації та циркуляції, тоді як ультразвукова та суперкритична екстракції забезпечують вищу ефективність, але потребують дорогого обладнання.

Цифровізація процесів дозволяє автоматизувати контроль параметрів, знижуючи ризик втрат активних речовин та підвищуючи стандартизацію результатів [25, 30].

1.3. Використання цифрових технологій у контролі якості процесів

Контроль якості є ключовим етапом у процесі екстракції біологічно активних речовин (БАР), адже саме на цьому етапі визначається стабільність та відповідність отриманого продукту необхідним стандартам. Завдяки впровадженню цифрових технологій стало можливим автоматизувати контроль основних параметрів, що впливають на результативність процесу, та забезпечити миттєве коригування параметрів у разі відхилень від норм.

На сьогодні у фармацевтичній галузі використовуються сучасні програмні комплекси та системи інтернету речей (IoT), які дозволяють забезпечити збір, аналіз та збереження даних у режимі реального часу [5].

До ключових компонентів таких систем належать:

- Сенсори та датчики — вимірюють фізико-хімічні параметри, такі як температура, тиск, рН розчину та концентрація екстрагенту.
- Програмні модулі обробки даних — аналізують отримані показники та формують звіти про відповідність параметрів встановленим нормам.
- Автоматизовані системи корекції — на основі отриманих даних можуть автоматично регулювати температуру або час екстракції для запобігання погіршенню якості продукту [18, 30].

Для кращого розуміння функціонування цифрових систем контролю наведемо таблицю основних параметрів, що контролюються у процесі екстракції (таблиця 1.4).

Таблиця 1.4

Параметри контролю екстракції

Параметр	Методи контролю	Роль у процесі	Наслідки відхилень
Температура	Термодатчики, системи регулювання	Контроль температури для уникнення деградації БАР	Руйнування активних компонентів
Час екстракції	Автоматичні таймери	Забезпечує достатній час для вилучення БАР	Неповне вилучення або зайва тривалість процесу
рН середовища	Цифрові рН-метри	Визначає стабільність компонентів у розчині	Зниження виходу активних речовин
Концентрація екстрагенту	Спектрофотометрія, мас-спектрометрія	Визначає ефективність процесу та чистоту отриманого екстракту	Залишок домішок або недостатній вихід БАР

Сучасні програмні комплекси здатні прогнозувати можливі відхилення параметрів на основі аналізу даних попередніх циклів екстракції. Це дозволяє виявляти потенційні ризики ще до того, як вони можуть вплинути на

кінцевий результат. Завдяки алгоритмам машинного навчання система може “навчатися” на основі зібраних даних та вдосконалювати свої прогнози [20].

У процесі циркуляційної екстракції датчики фіксують підвищення температури вище допустимого рівня. Алгоритм, використовуючи раніше зібрані дані, визначає, що подальше нагрівання може призвести до деградації активних компонентів. Відповідно, програма автоматично вмикає систему охолодження та регулює потік рідини, забезпечуючи стабільність процесу.

Інтеграція IoT у контроль якості

Технології інтернету речей дозволяють створити єдину систему моніторингу, яка охоплює всі етапи виробничого циклу. Наприклад, інформація з усіх сенсорів надходить до центрального програмного модуля, що формує звіти та передає їх відповідальним працівникам через додаток або робочу станцію [21, 29].

Переваги інтеграції IoT:

- Безперервний моніторинг — всі показники фіксуються та зберігаються для подальшого аналізу.
- Зменшення помилок через людський фактор — автоматичні системи мінімізують вплив помилкових дій оператора.
- Оперативність коригувань — у разі відхилень система автоматично регулює параметри для стабілізації процесу.

Окрім контролю процесу, цифрові технології дозволяють оцінювати якість отриманих екстрактів шляхом автоматичного аналізу фізико-хімічних характеристик. Використання спектрофотометрів із програмним забезпеченням дозволяє швидко отримувати результати щодо концентрації активних речовин та чистоти екстракту. Ці дані можуть використовуватися для порівняння ефективності різних параметрів процесу та побудови прогнозних моделей [19, 24].

Цифрові технології забезпечують безперервний контроль параметрів процесу екстракції та дозволяють уникати відхилень, які можуть вплинути на якість продукту.

Використання IoT-пристроїв і алгоритмів прогнозування значно підвищує точність моніторингу та оптимізує виробничі цикли.

Завдяки цифровим платформам можливо не лише контролювати якість процесу, а й проводити прогнозні розрахунки для підвищення ефективності екстракції та зменшення витрат.

1.4. Аналіз наявних моделей оптимізації екстракції БАР

Оптимізація процесу екстракції біологічно активних речовин (БАР) є важливим етапом, що дозволяє забезпечити максимальний вихід цінних речовин із мінімальними витратами ресурсів. У науковій літературі представлено декілька підходів до оптимізації цього процесу, серед яких статистичні моделі планування експериментів, алгоритми машинного навчання та математичне моделювання.

Статистичні моделі оптимізації

Одним із поширених методів оптимізації є використання статистичних моделей, таких як метод центрального композиційного планування (ЦКП) та метод поверхні відгуку (Response Surface Methodology, RSM). Ці методи дозволяють визначити вплив кількох факторів на результат процесу та встановити оптимальні значення параметрів [23, 28].

Основні етапи застосування статистичної моделі:

- Визначення ключових параметрів процесу (наприклад, температура, концентрація екстрагенту, час екстракції).
- Формування експериментального плану, який охоплює всі можливі комбінації значень параметрів.
- Проведення серії експериментів відповідно до плану.
- Побудова графічної моделі залежності виходу БАР від змін параметрів.
- Визначення оптимальних умов на основі отриманих даних.

Статистичні моделі є ефективними у випадках, коли можна проводити експерименти у лабораторних умовах. Проте вони вимагають значних затрат часу та ресурсів, особливо при роботі з великою кількістю змінних.

Алгоритми машинного навчання для прогнозування параметрів

У сучасних дослідженнях все частіше використовуються алгоритми машинного навчання для оптимізації процесів екстракції. Такі алгоритми дозволяють будувати прогнозні моделі на основі історичних даних і навіть симулювати результати експериментів без фізичного проведення досліджень.

Приклади алгоритмів:

- Лінійна регресія — використовується для побудови простих моделей залежності виходу БАР від одного чи кількох факторів.
- Алгоритми кластеризації — дозволяють групувати набори даних для визначення закономірностей у результатах екстракції.
- Нейронні мережі — можуть моделювати багатofакторні залежності та прогнозувати оптимальні параметри навіть у складних процесах [18, 26].

Перевага алгоритмів машинного навчання полягає у їх здатності працювати з великими масивами даних і виявляти приховані закономірності. Вони також дозволяють будувати динамічні моделі, які можуть автоматично оновлюватися на основі нових даних. Однак для ефективної роботи алгоритмів потрібна велика кількість вихідних даних і значні обчислювальні ресурси [14, 22].

Математичне моделювання

Математичні моделі, такі як рівняння масопереносу та теплопровідності, дозволяють описати процес екстракції з позиції фізичних і хімічних взаємодій між компонентами сировини та розчинника. Цей підхід дає змогу оцінити динаміку процесу та передбачити його результат залежно від зміни зовнішніх умов.

Типова модель включає такі параметри, як коефіцієнт дифузії, температура середовища та швидкість потоку розчинника. Однак побудова математичної моделі потребує глибокого розуміння фізико-хімічних

властивостей речовин і проведення значної кількості попередніх експериментів для визначення вхідних значень [19, 23, 28].

Порівняння методів оптимізації

Для наочності порівнюємо три основні підходи до оптимізації процесу екстракції (таблиця 1.5).

Таблиця 1.5

Порівняння підходів до оптимізації процесу екстракції

Метод оптимізації	Переваги	Недоліки	Сфера застосування
Статистичні моделі	Швидке визначення оптимальних параметрів при невеликій кількості факторів	Високі витрати на експерименти	Лабораторні дослідження з доступом до обладнання
Машинне навчання	Висока точність прогнозування, здатність працювати з великими обсягами даних	Потреба у великій кількості даних та ресурсів	Оптимізація без фізичних експериментів
Математичне моделювання	Можливість опису фізичних процесів та прогнозування поведінки системи	Складність побудови та необхідність додаткових експериментів	Наукові дослідження та інженерні проєкти

Статистичні моделі дозволяють ефективно визначати оптимальні параметри, але потребують серії експериментів для побудови моделі.

Алгоритми машинного навчання є перспективним інструментом для побудови прогностичних моделей без проведення фізичних досліджень, що економить ресурси.

Математичні моделі описують процеси на основі фізичних та хімічних залежностей, але потребують значних обчислень та попередніх даних.

1.5. Перспективи впровадження штучного інтелекту та цифрових платформ у фармацевтичне виробництво

Розвиток технологій штучного інтелекту (ШІ) та цифрових платформ відкриває нові можливості для фармацевтичного виробництва, зокрема для оптимізації процесу екстракції біологічно активних речовин (БАР). Завдяки впровадженню таких технологій стає можливим підвищити ефективність процесу, стандартизувати його параметри та знизити втрати сировини за рахунок використання прогностичних моделей і автоматизованих систем управління [17, 18].

Штучний інтелект здатний аналізувати великі обсяги даних, виявляти приховані закономірності та формувати рекомендації щодо оптимізації технологічних параметрів у реальному часі.

Сучасні алгоритми ШІ можуть виконувати такі завдання:

- Прогнозування виходу БАР на основі даних про тип сировини, концентрацію екстрагенту та температуру процесу.
- Автоматизація управління процесом — регулювання параметрів у режимі реального часу для запобігання відхиленням від оптимальних умов.
- Діагностика процесу — виявлення та усунення помилок у роботі обладнання ще до того, як вони можуть вплинути на якість продукції [29].

Уявімо, що в системі екстракції використовується алгоритм, який на основі попередніх даних навчається прогнозувати час, необхідний для завершення процесу. Наприклад, для рослин із високим вмістом ефірних олій алгоритм може адаптувати час нагрівання та концентрацію спирту, щоб уникнути втрати летких речовин. Якщо система виявляє, що температура

надто швидко підвищується, вона автоматично коригує швидкість нагрівання, забезпечуючи стабільність процесу.

Цифрові платформи — це інтегровані програмні рішення, що забезпечують комплексне управління процесом екстракції. Вони поєднують у собі функції збору даних, їх аналізу та формування рекомендацій для оптимізації [19].

До ключових функцій таких платформ належать:

- Моніторинг параметрів у реальному часі — збір даних від сенсорів і візуалізація результатів на робочій станції.
- Формування аналітичних звітів — автоматичне створення звітів щодо відповідності процесу нормативним показникам.
- Прогнозування та попередження ризиків — система може попереджати про можливі відхилення від норми та пропонувати варіанти коригування [13, 21].

Поєднання штучного інтелекту з інтернетом речей (IoT) дозволяє створити адаптивні системи управління, які можуть реагувати на зміни параметрів процесу у реальному часі. Наприклад, під час ультразвукової екстракції система може контролювати рівень кавітації, що є критичним параметром для отримання високого виходу БАР. Якщо рівень кавітації виходить за межі допустимих значень, система коригує інтенсивність ультразвукових хвиль і температуру для стабілізації процесу [17, 24].

Інтеграція ШІ та IoT у фармацевтичне виробництво має такі переваги:

- Гнучкість — система здатна адаптуватися до змін умов сировини та зовнішніх параметрів.
- Стабільність — завдяки безперервному контролю параметрів забезпечується стабільність виходу БАР.
- Швидкість прийняття рішень — автоматичні рішення приймаються значно швидше, ніж оператор міг би відреагувати вручну.

Інноваційні дослідження свідчать про те, що у майбутньому використання ШІ та цифрових платформ може стати стандартом для

фармацевтичного виробництва. Розробляються алгоритми, які можуть проводити багатofакторний аналіз у режимі реального часу та навіть прогнозувати вплив окремих змін параметрів на якість кінцевого продукту до початку експерименту [16, 28].

Додатково впровадження цифрових рішень дозволяє зменшити залежність виробничого процесу від кваліфікації персоналу, оскільки більшість операцій відбувається автоматично, а система лише надсилає повідомлення про необхідність втручання у разі серйозних відхилень. Це сприяє зниженню кількості помилок та підвищенню безпеки виробництва [12].

Попри численні переваги, впровадження штучного інтелекту у виробництво супроводжується такими викликами:

- Високі початкові витрати на обладнання та програмне забезпечення.
- Складність інтеграції із наявним виробничим середовищем.
- Необхідність забезпечення кібербезпеки для захисту конфіденційних даних і систем управління [10, 22, 27].

Використання штучного інтелекту та цифрових платформ дозволяє автоматизувати процес екстракції, підвищуючи його точність і стабільність.

Поєднання ШІ з технологіями IoT створює адаптивні системи, які можуть коригувати параметри в реальному часі для забезпечення оптимальних умов процесу.

Незважаючи на перспективи впровадження, важливими викликами залишаються високі витрати та потреба у навчанні персоналу.

Висновки до розділу 1

1. Процес екстракції біологічно активних речовин із лікарської рослинної сировини є одним із ключових етапів у фармацевтичному виробництві, ефективність якого залежить від правильно обраного методу та контролю параметрів.
2. Аналіз літературних джерел показав, що сучасні методи екстракції мають свої переваги та недоліки: мацерація є простим, але тривалим методом, рефлюкс дозволяє швидше отримати екстракт, ультразвукова екстракція забезпечує високий вихід БАР, а суперкритична екстракція є найбільш ефективною, проте дорогою.
3. Цифрові технології, зокрема системи інтернету речей (IoT), алгоритми машинного навчання та програмні модулі для аналізу даних, значно підвищують точність моніторингу та ефективність контролю процесу екстракції, забезпечуючи швидку реакцію на відхилення параметрів у реальному часі.
4. Алгоритми штучного інтелекту дозволяють будувати прогнозні моделі та автоматизувати процес прийняття рішень щодо оптимізації умов екстракції, що сприяє скороченню витрат на проведення експериментів та підвищенню стабільності виходу БАР.
5. Незважаючи на численні переваги, впровадження цифрових рішень супроводжується певними викликами, такими як необхідність значних початкових інвестицій, адаптація обладнання до роботи з новими системами та підготовка кваліфікованого персоналу.
6. Перспективи розвитку цифровізації фармацевтичного виробництва демонструють, що інтеграція штучного інтелекту, цифрових платформ та IoT поступово стає стандартом, забезпечуючи конкурентні переваги для виробників і підвищуючи якість лікарських засобів.

Розділ 2. ОБ'ЄКТИ ТА МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

2.1. Вибір загальної методології досліджень

Методологія дослідження відіграє важливу роль у досягненні поставлених завдань та формулюванні обґрунтованих висновків. У цьому дослідженні використовувався міждисциплінарний підхід, що поєднує систематизацію літературних джерел, аналіз наукових даних та побудову алгоритмів оптимізації параметрів процесу екстракції біологічно активних речовин (БАР).

Основою методології стала робота з вторинними даними, отриманими з наукових статей, патентів та публічних баз даних. Це дозволяє виконувати аналіз і формулювати пропозиції без проведення лабораторних експериментів, використовуючи відкриті джерела даних. Крім того, методологія дослідження включала проєктну складову — розробку алгоритму оптимізації параметрів на основі існуючих методів цифрового прогнозування.

Основні етапи методології:

1. Аналіз літературних джерел:

Проведено огляд досліджень щодо методів екстракції та підходів до оптимізації процесу з використанням сучасних цифрових рішень. Метою цього етапу було виявлення ключових параметрів, які впливають на результативність процесу.

2. Систематизація даних:

Зібрані дані було структуровано за параметрами: тип екстрагенту, температура процесу, співвідношення сировини та розчинника, тривалість екстракції тощо. На основі цієї систематизації сформовано базу для побудови алгоритму.

3. Розробка алгоритму оптимізації:

Створено схему покрокового аналізу параметрів екстракції для визначення оптимальних умов проведення процесу. Алгоритм включає прогнозування результатів залежно від змінних параметрів.

Вибір методів дослідження ґрунтувався на необхідності оптимізації параметрів екстракції без проведення лабораторних дослідів. Основна увага приділялася методам статистичного аналізу та побудові математичних моделей, що базуються на даних літератури. Використання алгоритмів машинного навчання також дозволяє зменшити кількість проб і помилок при оцінюванні параметрів.

Методологія дозволяє отримати обґрунтовані висновки та практичні рекомендації для впровадження цифрових рішень у процес екстракції БАР у промислових умовах.

2.2. Характеристика об'єктів дослідження

Об'єктом дослідження є процеси екстракції біологічно активних речовин (БАР) із лікарської рослинної сировини, а саме їх цифровізація та оптимізація параметрів для використання у фармацевтичному виробництві. Це включає систематизацію наукових підходів до вибору методів екстракції та параметрів процесу, а також аналіз доступних цифрових рішень для прогнозування і контролю ключових характеристик технологічного циклу.

Процес екстракції БАР відіграє центральну роль у виробництві фармацевтичних препаратів на основі рослинної сировини. Ефективність цього процесу залежить від правильно обраних технологічних параметрів, таких як тип екстрагенту, температура, час обробки та співвідношення сировини і розчинника. Залежно від умов проведення екстракції можливе вилучення максимальної кількості активних речовин або їх втрата через деградацію під час неправильного налаштування параметрів.

Цифровізація процесу дозволяє оптимізувати ці параметри за допомогою аналітичних алгоритмів та систем управління даними, що забезпечує більш точний контроль і прогнозування. Це особливо важливо у

промислових умовах, де навіть незначні зміни у виробничому циклі можуть впливати на якість і стабільність кінцевого продукту.

Елементи процесу екстракції як об'єкт дослідження.

Фізико-хімічні параметри процесу екстракції:

- Температура процесу впливає на швидкість вилучення та стабільність активних речовин. При оптимальному температурному режимі відбувається максимальне вилучення БАР без втрат через термічну деградацію.

- Час екстракції залежить від обраного методу — для тривалих процесів (мацерації) час може сягати кількох годин, тоді як ультразвукова екстракція дозволяє скоротити цей час до 15–30 хвилин.

- Тип екстрагенту визначає, які типи речовин будуть вилучені ефективніше. Водно-спиртові розчини (40–70% етанолу) забезпечують вилучення флавоноїдів і поліфенолів, тоді як вода краще підходить для гідрофільних сполук.

- Співвідношення сировини та розчинника впливає на контакт між компонентами і кількість вилучених БАР.

2.3 Характеристика методів дослідження

У цьому дослідженні застосовано міждисциплінарний підхід, який поєднує аналіз наукової літератури, систематизацію даних та розробку алгоритмів оптимізації на основі існуючих методів прогнозування і цифрових рішень. Основна увага приділяється математичному аналізу та проектуванню систем контролю параметрів екстракції без проведення лабораторних експериментів.

На першому етапі дослідження було проведено збір та систематизацію даних із наукових джерел для визначення ключових параметрів процесу екстракції.

Аналіз наукових джерел — огляд літературних даних із публікацій та патентів для отримання актуальної інформації про методи екстракції та використання цифрових технологій у фармацевтичному виробництві.

Систематизація параметрів — класифікація отриманих даних за типами екстрагентів, температурними режимами, тривалістю процесу тощо. Цей підхід дозволяє створити базу для побудови моделей прогнозування.

Основними методами дослідження є систематизація літературних джерел, математичне моделювання та побудова алгоритмів прогнозування.

Використання багатofакторного аналізу дозволяє визначати оптимальні параметри екстракції та уникати зайвих експериментів.

Застосування цифрових алгоритмів допомагає швидко оцінити ефективність обраних параметрів і сприяє стандартизації виробничих процесів.

Висновки до розділу 2

1. Об'єктом дослідження є процеси екстракції біологічно активних речовин із лікарської рослинної сировини та їх цифровізація для оптимізації технологічних параметрів.
2. Для досягнення мети було використано методи систематизації даних із наукових джерел, математичне моделювання, а також побудова алгоритмів прогнозування оптимальних параметрів процесу екстракції.
3. Основними фізико-хімічними параметрами, що впливають на ефективність екстракції, є температура, тривалість процесу, концентрація екстрагенту та співвідношення сировини до розчинника. Їх вплив було проаналізовано та враховано при розробці алгоритму оптимізації.
4. Застосування цифрових алгоритмів та програмних рішень дозволяє стандартизувати процес екстракції та уникати зайвих експериментів, що скорочує витрати часу та ресурсів на дослідження.
5. Вибір методології дослідження дозволяє побудувати оптимізаційні моделі навіть без доступу до лабораторного обладнання, що свідчить про перспективність такого підходу для подальшого впровадження в промислову практику.

Розділ 3. ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНА ЧАСТИНА

АНАЛІЗ ДАНИХ ТА АЛГОРИТМІЗАЦІЯ ПРОЦЕСІВ ОПТИМІЗАЦІЇ ЕКСТРАКЦІЇ

3.1. Аналіз даних та побудова алгоритму оптимізації екстракції

У цьому підрозділі розглянуто сучасні методи екстракції біологічно активних речовин (БАР), проаналізовано вплив ключових параметрів процесу на ефективність вилучення речовин та описано використання програмного забезпечення для моделювання процесів. Окрему увагу приділено побудові алгоритму оптимізації процесу на основі наукових даних та цифрових інструментів.

3.1.1 Огляд сучасних методів екстракції БАР

Методи екстракції біологічно активних речовин (БАР) поділяються на традиційні та сучасні інноваційні підходи. Кожен метод має свої особливості, переваги та недоліки, які враховуються під час розробки алгоритму оптимізації процесу екстракції.

Традиційні методи екстракції.

1. Мацерація.

Це найдавніший метод екстракції, який полягає у тривалому настоюванні сировини у розчиннику при кімнатній температурі. Мацерація залишається популярною завдяки простоті виконання та мінімальним витратам на обладнання. Однак основним недоліком методу є тривалий час процесу — від кількох годин до кількох діб — і неповне вилучення БАР, особливо у випадках використання складних полімерних структур клітинної стінки рослинної сировини.

При мацерації рослин, багатих на ефірні олії, може бути недоцільним використовувати лише воду, оскільки гідрофобні компоненти залишаються у сировині. Водно-спиртові суміші дозволяють частково компенсувати цей недолік.

2. Перколяція

Цей метод полягає у поступовому пропусканні розчинника через шар рослинної сировини у спеціальних апаратах-перколяторах. Перколяція дозволяє скоротити час екстракції завдяки безперервному контакту екстрагенту зі свіжими порціями сировини. Основна перевага методу — можливість вилучення великої кількості БАР при стабільному потоці розчинника. Недоліком є потреба у постійному контролі швидкості потоку та концентрації розчину, оскільки надмірно швидкий потік може призвести до неповного вилучення речовин.

3. Метод Soxhlet (циркуляційна екстракція)

Екстракція при нагріванні за допомогою зворотного охолоджувача, що повертає конденсат розчинника у колбу, робить процес більш ефективним для вилучення термостійких речовин. Метод Soxhlet широко застосовується для екстрагування жиророзчинних компонентів. Однак при використанні високих температур можуть деградувати термолабільні поліфеноли та флавоноїди, що обмежує його застосування у фармацевтичній практиці.

Для вилучення жирних кислот із рослинної сировини метод Soxhlet показує значно вищий вихід порівняно з мацерацією, але потребує великих енергетичних витрат.

Сучасні методи екстракції.

1. Ультразвукова екстракція (УЗЕ)

Цей метод використовує ультразвукові хвилі, які створюють мікропухирці в рідині та спричиняють їх руйнування (кавітацію), що підвищує ефективність вилучення речовин. Ультразвук сприяє руйнуванню клітинних стінок рослинної сировини, забезпечуючи швидкий доступ екстрагенту до внутрішньоклітинного вмісту. Основні переваги методу — значне скорочення часу процесу та високий вихід БАР. Недоліком може бути нерівномірне нагрівання розчину в окремих точках, що може призводити до локальної деградації термолабільних речовин.

При екстракції флавоноїдів із рослин ультразвукова обробка дозволяє зменшити час вилучення з кількох годин до 30 хвилин із підвищенням ефективності виходу на 20–30%.

2. Мікрохвильова екстракція

Метод базується на нагріванні розчину завдяки електромагнітним хвилям, що стимулює рух молекул розчинника та сировини, прискорюючи процес екстракції. Основна перевага цього методу — висока швидкість процесу та рівномірне нагрівання. Проте мікрохвильова екстракція потребує ретельного контролю параметрів, оскільки надмірно висока температура може призвести до перегрівання розчину та втрати біологічної активності речовин.

3. Суперкритична флюїдна екстракція (SCFE)

Застосування суперкритичного діоксиду вуглецю (CO_2) дозволяє отримувати високочисті екстракти без домішок. Суперкритична фаза CO_2 має властивості як рідини (розчинність), так і газу (висока проникність), що дозволяє ефективно вилучати як полярні, так і неполярні компоненти. Основна перевага — можливість отримання екстрактів без залишку розчинника. Проте цей метод є одним із найдорожчих через вартість обладнання та високий тиск процесу.

У фармацевтиці суперкритична екстракція застосовується для вилучення каротиноїдів та жиророзчинних вітамінів.

Традиційні методи екстракції є простими у виконанні та підходять для роботи в умовах, де не потрібні високі стандарти чистоти. Однак сучасні методи, такі як ультразвукова та суперкритична екстракція, демонструють значно кращу ефективність, особливо для вилучення речовин із комплексних структур. Застосування сучасних методів у поєднанні з цифровими технологіями дає змогу прогнозувати результативність процесу без значних затрат ресурсів, що особливо актуально для промислових умов.

Для наочного представлення переваг та недоліків кожного методу екстракції наведено порівняльну таблицю 3.1.

Таблиця 3.1

Порівняння методів екстракції

Метод екстракції	Принцип дії	Переваги	Недоліки	Приклади застосування
Мацерація	Настоювання сировини у розчиннику при кімнатній температурі	Простота виконання, мінімальні витрати ресурсів	Тривалість процесу (до 24 годин і більше), неповне вилучення БАР	Вилучення водорозчинних поліфенолів і органічних кислот
Перколяція	Пропускання розчинника через шар сировини	Безперервний контакт розчинника із сировиною, високий вихід БАР	Потреба у постійному контролі швидкості потоку та концентрації екстрагенту	Екстракція біологічно активних речовин із рослинних порошків
Рефлюксна екстракція	Нагрівання розчину з поверненням конденсату розчинника в систему	Швидкий процес, висока ефективність вилучення	Потребує нагрівання, ризик термічної деградації речовин	Отримання жиророзчинних компонентів та ефірних олій
Ультразвукова екстракція	Застосування ультразвукових хвиль для руйнування клітинних стінок сировини	Значне скорочення часу екстракції, високий вихід БАР	Потребує спеціального обладнання, ризик локального перегрівання	Екстракція флавоноїдів і антиоксидантів
Мікрохвильова екстракція	Нагрівання розчину за допомогою мікрохвиль, що прискорює рух молекул у системі	Швидке та рівномірне нагрівання, скорочення часу екстракції	Потребує ретельного контролю температури, можливість перегрівання	Вилучення термостійких компонентів (каротиноїди, деякі вітаміни)
Суперкритична екстракція	Застосування діоксиду вуглецю у суперкритичному стані для вилучення компонентів	Висока чистота продукту, відсутність залишків розчинника	Висока вартість обладнання, потреба у високому тиску	Отримання жиророзчинних вітамінів і каротиноїдів

3.1.2. Вибір оптимальних умов екстракції

У цьому підрозділі аналізується вплив основних фізико-хімічних параметрів на ефективність вилучення біологічно активних речовин (БАР). Вибір оптимальних умов екстракції є ключовим етапом, оскільки неправильний підбір параметрів може призвести до втрати біологічної активності речовин або неповного вилучення БАР.

Вибір оптимальних умов екстракції біологічно активних речовин (БАР) базується на аналізі впливу основних фізико-хімічних параметрів: температури, часу процесу, концентрації екстрагенту та співвідношення сировини до розчинника. Щоб забезпечити максимальний вихід БАР без втрати їхньої активності, ці параметри необхідно ретельно контролювати та оптимізувати.

Таблиця 3.2

Параметри оптимальної екстракції

Параметр	Діапазон значень	Рекомендації для оптимізації	Обговорення
Температура	50–65°C	Підтримувати в межах 50–65°C для поліфенолів і флавоноїдів.	Збільшення температури до 60°C підвищує вихід БАР, проте при >70°C можлива деградація термолабільних речовин.
Тривалість процесу	30 хвилин – 1 година	Зменшити час для ультразвукової екстракції та збільшити для циркуляційної екстракції.	Для ультразвукової екстракції оптимальний час становить 15–30 хвилин, тоді як для мацерації та циркуляційної екстракції — до 1–2 годин.
Концентрація етанолу	40–60%	Використовувати водно-спиртові суміші концентрацією 40–60% для вилучення поліфенолів.	Концентрація 50% забезпечує оптимальний баланс між розчиненням гідрофільних і ліпофільних компонентів.
Співвідношення сировини до розчинника	1:10 – 1:15	Використовувати співвідношення 1:10 для інтенсивних методів і 1:15 для циркуляційної екстракції.	Збільшення обсягу розчинника (до 1:20) може підвищити вихід БАР, але потребує більших витрат і збільшує час випаровування розчинника.

Аналіз показує, що температура є критичним параметром для збереження активності поліфенолів і флавоноїдів. Підвищення температури до 60°C дозволяє збільшити швидкість екстракції на 20%, але при 70°C та вище спостерігається зниження виходу через термічну деградацію.

Час екстракції також суттєво впливає на результат. Ультразвукова екстракція дозволяє скоротити процес до 15–30 хвилин, що є значною перевагою порівняно з мацерацією чи циркуляційною екстракцією, які тривають до кількох годин. При цьому надмірно тривала екстракція може призвести до окислення активних речовин у розчині.

Концентрація екстрагенту впливає на ефективність вилучення БАР: розчини етанолу концентрацією 50% забезпечують баланс між розчиненням водорозчинних і жиророзчинних компонентів. Однак для роботи з більш полярними речовинами концентрацію спирту слід зменшити до 40%.

Співвідношення сировини до екстрагенту визначає інтенсивність контакту між фазами. Застосування співвідношення 1:10 дозволяє забезпечити оптимальний контакт для ультразвукової обробки, тоді як циркуляційна екстракція вимагає більшого об'єму розчинника, що дозволяє збільшити площу контакту, але підвищує витрати на етапі випаровування залишків розчинника.

Загальні рекомендації параметрів екстракції зазначаються такі.

Оптимальні умови екстракції для поліфенолів і флавоноїдів: температура — 60°C, концентрація спирту — 50%, час — 30 хвилин для ультразвукової екстракції.

Циркуляційна екстракція ефективна для довготривалих процесів і забезпечує високу якість екстракту при використанні співвідношення сировини до розчинника 1:15.

Використання таблиці параметрів дозволяє наочно обрати оптимальні значення залежно від специфіки методу та типу біологічно активних речовин.

3.1.3 Використання програмного забезпечення для моделювання процесів екстракції

Програмне забезпечення для моделювання процесів екстракції дозволяє оптимізувати параметри процесу без проведення численних лабораторних дослідів. Вибір програми залежить від цілей моделювання, складності проєкту та доступних ресурсів. Нижче наведено порівняльну таблицю основних програм, які можуть бути використані для симуляції та прогнозування екстракції біологічно активних речовин (БАР).

Таблиця 3.3

Програмне забезпечення для моделювання процесів екстракції

Назва програми	Функціонал	Переваги	Недоліки	Приклад застосування
Aspen Plus	Моделювання хімічних процесів, масопереносу та теплопередачі	Точне моделювання фазових рівноваг, побудова детальних діаграм процесів	Складність у роботі для новачків, потребує значного обсягу початкових даних	Оцінка ефективності екстракції при зміні фазових параметрів
SuperPro Designer	Проектування та симуляція виробничих процесів у фармацевтиці	Можливість моделювання всього технологічного циклу, економічний аналіз процесу	Висока вартість програмного забезпечення, потребує спеціальних навичок	Аналіз економічної ефективності процесу екстракції
COMSOL Multiphysics	Моделювання багатофізичних процесів (дифузія, теплопередача)	Моделювання із врахуванням температури, тиску, швидкості потоку та інших параметрів	Високі вимоги до потужності комп'ютера для складних моделей	Симуляція впливу температури та часу на вилучення поліфенолів
SciLab (аналог MATLAB)	Математичне моделювання процесів, побудова графіків результатів	Безкоштовна альтернатива MATLAB, багатий набір бібліотек для обробки числових даних	Вимагає знань програмування та навичок у математичному аналізі	Побудова багатофакторних моделей для оцінки виходу БАР

Аналіз функціоналу програмного забезпечення дозволяє зробити висновок, що вибір конкретного інструмента залежить від мети дослідження та рівня доступних ресурсів.

Aspen Plus і SuperPro Designer є професійними інструментами для моделювання складних виробничих процесів із високою точністю. Вони дають можливість оцінювати ефективність різних варіантів екстракції та виконувати економічні розрахунки. Проте їх використання вимагає значних фінансових вкладень і специфічних навичок.

COMSOL Multiphysics дозволяє детально змоделювати фізико-хімічні процеси екстракції, враховуючи температурні та масопереносні параметри. Це ідеальний варіант для досліджень впливу теплових режимів і динаміки потоку екстрагенту, але для цього потрібні потужні комп'ютери та багато часу на розрахунки.

SciLab є безкоштовним інструментом, який дозволяє проводити математичний аналіз параметрів процесу та будувати прогнозні моделі, проте його використання вимагає глибоких знань програмування та математичних методів.

Для простих симуляцій та багатofакторного аналізу параметрів SciLab є оптимальним варіантом, якщо користувач має відповідні навички. Якщо ж необхідно моделювати весь технологічний процес, доцільно використовувати SuperPro Designer або Aspen Plus. COMSOL Multiphysics варто обрати у випадках, коли потрібно дослідити складні багатofізичні процеси, такі як дифузія та теплопередача.

Використання програмного забезпечення дозволяє зменшити кількість фізичних експериментів та прогнозувати результати на основі багатofакторного моделювання.

Для аналізу складних фізико-хімічних процесів ефективними є COMSOL Multiphysics та SuperPro Designer, але вони потребують значних обчислювальних ресурсів та фінансів.

Безкоштовні інструменти, такі як SciLab, забезпечують базовий функціонал для математичного моделювання, але їх застосування потребує додаткових знань у галузі програмування та математичного аналізу.

3.1.4 Розробка алгоритму оптимізації процесу екстракції

Алгоритм оптимізації процесу екстракції біологічно активних речовин (БАР) базується на систематичному аналізі ключових параметрів: температури, часу, концентрації екстрагенту та співвідношення сировини до розчинника. Основна мета алгоритму — визначити оптимальні умови для максимального виходу БАР із мінімальною деградацією активних компонентів.

Таблиця 3.4

Структура алгоритму оптимізації

Крок	Опис дії	Результат
1. Введення вхідних параметрів	Введення значень початкових параметрів: температура, час, концентрація екстрагенту, співвідношення фаз.	Створення базової моделі з вихідними даними.
2. Багатофакторний аналіз	Аналіз впливу кожного параметра на прогнозований вихід БАР.	Визначення найбільш впливових параметрів.
3. Прогнозування результату	Алгоритм обчислює вихід БАР на основі обраних значень параметрів.	Результат у вигляді відсотка виходу БАР залежно від умов процесу.
4. Візуалізація результатів	Побудова графіків залежності виходу БАР від ключових параметрів.	Наглядне представлення залежностей для оцінки та подальшого коригування параметрів.
5. Формування рекомендацій	Генерація рекомендацій для оптимізації умов процесу.	Перелік оптимальних значень параметрів для максимального виходу БАР

Детальний опис роботи алгоритму

Крок 1: Введення вхідних параметрів

На першому етапі користувач вводить початкові значення параметрів процесу екстракції:

- Температура (°C)
- Концентрація екстрагенту (%)
- Час екстракції (хвилини)
- Співвідношення сировини до розчинника

Приклад введення даних:

- Температура: 60°C
- Концентрація етанолу: 50%
- Час: 30 хвилин
- Співвідношення сировини до розчинника: 1:10

Крок 2: Багатофакторний аналіз

На цьому етапі алгоритм оцінює вплив кожного параметра на результат. Наприклад, температура значно впливає на швидкість процесу, але занадто висока температура може призвести до деградації БАР. Для оцінки алгоритм проводить багатофакторний аналіз та визначає, який параметр є найбільш критичним для кінцевого результату.

Таблиця 3.5

Приклад багатофакторного аналізу

Параметр	Значення	Відхилення (%)	Прогнозований вихід БАР (%)
Температура 50°C	50	-10%	75
Температура 60°C	60	0%	83
Температура 70°C	70	+10%	68

Крок 3: Прогнозування результату

Алгоритм будує модель залежності виходу БАР від параметрів процесу та прогнозує результат. Наприклад, при заданих значеннях параметрів прогнозується вихід поліфенолів на рівні 83%.

Крок 4: Візуалізація результатів

Для кращого розуміння алгоритм будує графіки залежностей:

- Залежність виходу БАР від температури при фіксованих значеннях часу та концентрації.
- Залежність виходу БАР від часу при фіксованій температурі та концентрації.

Крок 5: Формування рекомендацій

На основі проведеного аналізу алгоритм формує рекомендації для оптимізації умов процесу.

Наприклад: для уникнення деградації поліфенолів рекомендується підтримувати температуру не вище 65°C та час екстракції — 25 хвилин.

Якщо вихід БАР при концентрації 50% етанолу недостатній, алгоритм може рекомендувати підвищити концентрацію до 60%.

Приклад результату роботи алгоритму:

Вхідні параметри:

- Температура: 60°C
- Концентрація: 50%
- Час: 30 хвилин

Результат:

- Прогнозований вихід поліфенолів: 83%.
- Рекомендація: зменшити час до 25 хвилин, щоб уникнути окислення термолабільних компонентів.

Алгоритм дозволяє швидко оцінювати ефективність умов екстракції та робити прогноз результату. Однак його точність залежить від якості вихідних

даних та обраних формул для прогнозування. Для покращення алгоритму можна інтегрувати додаткові параметри, такі як рН середовища чи швидкість перемішування.

Алгоритм оптимізації дозволяє визначати оптимальні умови процесу екстракції без проведення фізичних експериментів.

Візуалізація результатів у вигляді графіків полегшує аналіз і прийняття рішень щодо коригування параметрів.

Обмеженням алгоритму є необхідність уточнення параметрів для конкретної сировини та методу екстракції.

3.2. Оцінка ефективності алгоритму оптимізації

Оцінка ефективності алгоритму оптимізації екстракції БАР дозволяє визначити, наскільки коректно алгоритм прогнозує результати та формує рекомендації для вибору параметрів процесу. Оскільки власних експериментальних даних немає, перевірка алгоритму базується на використанні даних із літературних джерел та імітаційних наборів.

Таблиця 3.6

Етапи оцінки ефективності алгоритму

Етап	Опис	Результат
1. Перевірка на основі літературних даних	Порівняння прогнозованих результатів алгоритму з даними наукових досліджень.	Оцінка точності алгоритму за відхиленнями від результатів у статтях.
2. Перевірка на штучно створених даних	Створення умовних наборів даних із середніми значеннями параметрів.	Тестування роботи алгоритму та його реакції на зміну параметрів.
3. Візуалізація результатів	Побудова графіків залежності виходу БАР від ключових параметрів процесу.	Оцінка тенденцій та відповідності результатів алгоритму очікуваним залежностям.
4. Аналіз стабільності алгоритму	Перевірка алгоритму на стійкість до змін вхідних даних та мінімальних похибок у значеннях параметрів.	Визначення, чи впливають малі зміни на різкі коливання результатів.

Аналіз літературних даних: дозволяє проводити оцінку без експериментів, але залежить від якості доступних джерел.

Генерація штучних даних: дозволяє гнучко моделювати різні сценарії, але не враховує всі фізико-хімічні нюанси.

Моделювання за емпіричними формулами: забезпечує високу точність, але потребує знання коефіцієнтів регресії для конкретних сполук.

Візуалізація: дає наочне уявлення про залежності, проте інтерпретація графіків потребує досвіду.

Для оцінки ефективності алгоритму оптимізації доцільно використовувати комбінацію кількох підходів: аналіз літературних даних, моделювання та візуалізацію результатів.

Найбільш інформативним є підхід із використанням емпіричних формул, оскільки він дозволяє кількісно оцінити залежності параметрів.

Генерація імітаційних даних допомагає тестувати роботу алгоритму та його поведінку при зміні параметрів.

Візуалізація результатів сприяє кращому розумінню ефективності процесу та пошуку критичних точок для коригування параметрів.

Висновки до розділу 3

1. Розроблений алгоритм оптимізації процесу екстракції дозволяє оцінювати вплив основних параметрів, таких як температура, концентрація екстрагенту, час процесу та співвідношення сировини до розчинника, на вихід біологічно активних речовин.
2. Алгоритм побудований на багатofакторному аналізі та емпіричних залежностях, що забезпечує можливість прогнозування результатів навіть за відсутності експериментальних даних. Це дозволяє застосовувати імітаційні набори даних та результати з літературних джерел для оцінки ефективності процесу.
3. Візуалізація результатів у вигляді графіків дозволяє легко інтерпретувати отримані залежності та визначати критичні точки процесу, такі як оптимальна температура та час екстракції для уникнення деградації термолабільних речовин.
4. Найефективнішими методами оцінки ефективності алгоритму є моделювання за емпіричними формулами та аналіз трендів за літературними даними.
5. Незважаючи на відсутність доступу до лабораторного обладнання, алгоритм дозволяє виконувати попередній аналіз і моделювання процесу екстракції, що відкриває можливості для його подальшого вдосконалення та застосування у практичних дослідженнях фармацевтичного виробництва.

Висновки

1. В ході роботи було проаналізовано сучасні підходи до цифровізації процесів екстракції біологічно активних речовин та визначено, що використання алгоритмів оптимізації дозволяє значно підвищити ефективність процесу за рахунок прогнозування результатів без проведення великої кількості фізичних експериментів.
2. Розроблений алгоритм оптимізації процесу екстракції враховує основні фізико-хімічні параметри (температура, концентрація екстрагенту, час, співвідношення сировини до розчинника) та дозволяє отримати прогноз виходу біологічно активних речовин.
3. Проведений аналіз підходів до оцінки ефективності алгоритму показав, що найбільш результативними є методи моделювання за емпіричними формулами та порівняння результатів із літературними даними. Також було визначено, що штучні набори даних дозволяють проводити гнучке тестування алгоритму.
4. Відсутність власних експериментальних даних частково компенсується використанням літературних джерел та імітаційних даних, проте для подальшого вдосконалення алгоритму необхідно використовувати реальні показники дослідів для підтвердження його результатів у різних умовах.

Список використаних джерел

1. Аламї С., Хохлова Л. Н. Методи екстрагування рослинної сировини при одержанні активних фармацевтичних інгредієнтів. URL: <https://dspace.nuph.edu.ua/bitstream/123456789/25651/1/60-61.pdf> (дата звернення: 01.09.2024).
2. Бєруашвілі І. В., Руда Н. В. Вибір умов екстракції для отримання субстанції з лікарської рослинної сировини. *Сучасні матеріали і технології виробництва виробів широкого вжитку та спеціального призначення*. Київ : КНУТД, 2019. Т. 1 С. 552–553. URL: https://er.knutd.edu.ua/bitstream/123456789/13535/1/NRMSE2019_V1_P55-2-553.pdf (дата звернення: 05.09.2024).
3. Гарна С. В., Вєтров П. П. Удосконалення технології екстрагування рослинної сировини зрідженим газом. *Вісник фармації*. 2011. № 1. С. 55–57.
4. Зубченко Т. М. Дослідження впливу умов екстракції на вивільнення біологічно-активних речовин кореня кульбаби. URL: <https://dspace.nuph.edu.ua/bitstream/123456789/28045/1/110-115.pdf> (дата звернення: 15.09.2024).
5. Жєплїнська М. М., Немирович П. М., Зоткіна Л. В. Дослідження процесу екстрагування біологічно активних речовин з рослинної лікарської сировини. *Вісник НПУ імені М. П. Драгоманова. Серія 3: Фізика і математика у вищій та середній школі*. 2015. Вип. 11. С. 91–95. URL: <https://enpuir.npu.edu.ua/bitstream/handle/123456789/9114/Doslidjennia%20procesu%20ekstraguvannia.pdf> (дата звернення: 20.09.2024).
6. Макаренко А. А., Авдєєва Л. Ю. Огляд новітніх методів екстрагування рослинної сировини. URL: <http://conf.biotech.kpi.ua/article/view/258851/255622> (дата звернення: 25.09.2024).

7. Павлюк І. В. Екстрагування шроту рослинної сировини з метою одержання біологічно активних речовин : дис. ... канд. техн. наук: 05.17.08 / Нац. ун-т "Львівська політехніка". Львів, 2015. 165 с.
8. Федоришин О. М. Механізм та кінетика екстрагування біологічно активних речовин з рослинної сировини : автореф. дис. ... канд. техн. наук: 05.17.08 / Нац. ун-т "Львівська політехніка". Львів, 2021. 20 с.
9. Сметаніна К. І. Удосконалення методики отримання олійних екстрактів з рослинної лікарської сировини. URL: <https://evnuir.vnu.edu.ua/bitstream/123456789/22158/1/184-185.pdf> (дата звернення: 10.10.2024).
10. A comprehensive review on the techniques for extraction of bioactive compounds from medicinal cannabis / H. M. Al Ubeed et al. *Molecules*. 2022. Vol. 27(3). P. 604.
11. Aum K. A Computational Study of Saponin Extraction from Quinoa Seeds and Grapes. URL: <https://www.proquest.com/openview/7164a31537d89510c6685049fc5bd924/1?pq-origsite=gscholar&cbl=18750&diss=y> (Date of access: 20.10.2024).
12. From nature to technology: exploring the potential of plant-based materials and modified plants in biomimetics, bionics, and green innovations / M. E. Barbinta-Patrascu et al. *Biomimetics*. 2024. Vol. 9(7). P. 390.
13. Chlev C., Petkov S. Kinetics of Green Solid-Liquid Extraction of Useful Compounds from Medicinal Plants. *Green Processing and Synthesis*. 2016. Vol. 5(6). P. 567–573.
14. Das A. P., Agarwal S. M. Recent advances in the area of plant-based anti-cancer drug discovery using computational approaches. *Molecular Diversity*. 2024. Vol. 28(2). P. 901–925.
15. Fundamental understanding of heat and mass transfer processes for physics-informed machine learning-based drying modelling / M. I. Khan et al. *Energies*. 2022. Vol. 15(24). P. 9347.

- 16.Extraction processes with several solvents on total bioactive compounds in different organs of three medicinal plants / N. E. Lezoul et al. *Molecules*. 2020. Vol. 25(20). P. 4672.
- 17.Versatile properties of *Opuntia ficus-indica* (L.) Mill. flowers: In vitro exploration of antioxidant, antimicrobial, and anticancer activities, network pharmacology analysis, and In-silico molecular docking simulation / M. A. Mwaheb et al. *PloS One*. 2024. Vol. 19(11). P. 1-30.
- 18.Modern approaches in the discovery and development of plant-based natural products and their analogues as potential therapeutic agents / A. Najmi et al. *Molecules*. 2022. Vol. 27(2). P. 349.
- 19.The potential of high voltage discharges for green solvent extraction of bioactive compounds and aromas from rosemary (*Rosmarinus officinalis* L.) —Computational simulation and experimental methods / M. Nutrizio et al. *Molecules*. 2020. Vol. 25(16). P. 3711.
- 20.Black-box modelling, bi-objective optimization and ASPEN batch simulation of phenolic compound extraction from *Nauclea latifolia* root / E. O. Oke et al. *Heliyon*. 2021. Vol. 7(1). P. 5856.
- 21.Pai S., Hebbar A., Selvaraj S. A critical look at challenges and future scopes of bioactive compounds and their incorporations in the food, energy, and pharmaceutical sector. *Environmental Science and Pollution Research*. 2022. Vol. 29(24). P. 35518–35541.
- 22.Priyanka Khanam S. Selection of suitable model for different matrices of raw materials used in supercritical fluid extraction process. *Separation Science and Technology*. 2018. Vol. 53(1). P. 71–96.
- 23.Rusu M., Pop N. Application of Polynomial Mathematical Models for the Extraction of Bioactive Compounds from Plant Sources. *Scientific Bulletin. Series F. Biotechnologies*. 2021. Vol. 25. P. 110–117.
- 24.Investigation of antioxidant and antibacterial effects of citrus fruits peels extracts using different extracting agents: Phytochemical analysis with in silico studies / M. Saleem et al. *Heliyon*. 2023. Vol. 9(4). P. 15433.

25. Techniques and modeling of polyphenol extraction from food: A review / A. Sridhar et al. *Environmental Chemistry Letters*. 2021. Vol. 19. P. 3409–3443.
26. Suryawansi B., Mohanty B. Simulation of a Mathematical Model of SFE Process Through COMSOL Multiphysics®. URL: file:///C:/Users/%D0%9A%D0%BE%D1%80%D0%B8%D1%81%D1%82%D1%83%D0%B2%D0%B0%D1%87/Downloads/suryawansi_abstract.pdf (Date of access: 23.11.2024).
27. Suryawansi B., Mohanty B. Solution of A Mass Transfer Based Mathematical Model of SCFE Process using COMSOL Multiphysics 5.2. URL: https://www.comsol.jp/paper/download/368141/suryawansi_paper.pdf (Date of access: 22.11.2024).
28. Taralkar S. V., Garkal D. J. Solid-Liquid Extraction Process of Active Ingredients from Medicinal Plants—Mathematical Models. *International Journal of Chemical and Physical Sciences*. 2015. Vol. 4(2). P. 105–110.
29. Digital twin for extraction process design and operation / L. Uhlenbrock et al. *Processes*. 2020. Vol. 8(7). P. 866.
30. Determination of biologically active substances extraction parameters from cranberry leaves / I. K. Vlasova et al. *Current issues in pharmacy and medicine: science and practice*. 2022. Vol. 15(2). P. 145–152.