

عنوان المشروع

منصة مبتكرة تعتمد الذكاء الاصطناعي لاكتشاف الأدوية وإعادة
استخدامها من خلال التنبؤ بالخصائص الجزيئية

مشروع لنيل شهادة مؤسسة ناشئة في إطار القرار الوزاري 1275

صورة العلامة التجارية



الاسم التجاري

Algeria SmartPharma

بطاقة معلومات:

حول فريق الاشراف وفريق العمل 1-فريق الاشراف:

فريق الإشراف	
:المشرف الرئيسي (01)	:التخصص إعلام آلي
:المشرف المساعد (01)	:التخصص إعلام آلي
:المشرف المساعد (02)	:التخصص إعلام آلي

2-فريق العمل:

فريق المشروع	التخصص	الكلية
الطالبة: جناد أسماء	ذكاء اصطناعي	كلية العلوم الدقيقة
الطالبة: خريش رقية	ذكاء اصطناعي	كلية العلوم الدقيقة

فهرس المحتويات

المحور الأول: تقديم المشروع

المحور الثاني: الجوانب الابتكارية

المحور الثالث: التحليل الاستراتيجي للسوق

المحور الرابع: خطة الإنتاج والتنظيم

المحور الخامس: الخطة المالية

المحور السادس : النموذج الأولي التجريبي

المحور الأول: تقديم المشروع

1. فكرة المشروع (الحل المقترح):

- يلعب مجال اكتشاف وتطوير الأدوية دورًا هامًا في قطاع الرعاية الصحية، ويشمل ذلك تصميم وتطوير واختبار أدوية جديدة مرشحة، قادرة على علاج أمراض مختلفة بنجاح. يمر مسار اكتشاف الأدوية بعدة مراحل، ففي المرحلة المبكرة، يتم تحديد الهدف (مثل إنزيم، أو مستقبل، أو قناة أيونية، ...) والتحقق من صحته، حيث إن تنشيطه أو تثبيطه يمكن أن يؤدي إلى تأثيرات علاجية للمرض. تتبع هذه الخطوة بداية تحديد الجزيئات المرشحة كأدوية (hits)، انطلاقًا من دراسات واختبارات. بمجرد تحديد هذه الأخيرة، يجب تقييم فعاليتها أولاً من خلال سلسلة من التجارب لتحسين خصائصها. ليصبح اسمها (leads)، حيث تدخل في الدراسات قبل السريرية والتجارب السريرية. في حال نجاحها، يمكن تسويق الدواء الجديد كمنتج طبي لعلاج المرض.
- يُعتبر اكتشاف الأدوية عمليةً معقدةً ومكلفةً وتستغرق وقتًا طويلاً. حيث تُشير التحليلات في المجالات الصيدلانية إلى أن طرق التطوير التقليدية لدواء جديد قد تستغرق أكثر من 12 عامًا وتكلف حوالي 2.6 مليار دولار. ومع ذلك، غالبًا ما تكون الأدوية المُنتجة غير فعّالة، مع العديد من حالات الفشل. تشمل هذه الأساليب التجريب المخبري المكثف (أنابيب الاختبار/الحيوانات) والاختبارات الكيميائية والبيولوجية التي تتطلب سنوات من العمل ومراحل متعددة من التجريب السريري قبل الوصول إلى نتائج ملموسة. كما أن التنبؤ بخصائص الجزيئات، كان يعتمد على طرق تحليل يدوية أو شبه آلية قد تكون عرضة للأخطاء البشرية، مما يزيد من احتمالية فشل المركبات في المراحل المتقدمة من التطوير. وقد أدى هذا إلى ارتفاع معدلات فشل الأدوية في التجارب السريرية، وزيادة التكاليف بشكل كبير، وتأخر وصول العلاجات إلى المرضى.
- دون أن ننسى أنه خلال جائحة كوفيد-19، واجه العالم تحديًا غير مسبوق في إيجاد علاجات فعّالة، مما جعل التطوير السريع لأدوات مُحسّنة لاكتشاف الأدوية أكثر أهمية من أي وقت مضى. ومع الزيادة السريعة في كمية البيانات الطبية الحيوية اليوم، هناك حاجة مُلحة لتوظيف استراتيجيات أكثر تطورًا للاستفادة من هذه الكميات المتزايدة، ومع الأخذ في الاعتبار هذه الأرقام، هناك تحديات كبيرة لتحسين وتسريع عملية اكتشاف الأدوية بأكملها. في الآونة الأخيرة، يُمكن للذكاء الاصطناعي أن يُساعد في التخفيف من هذه

- التحديات استنادًا إلى قدرته على معالجة كميات هائلة من البيانات، مما يُمكن أن يُعزز عملية اكتشاف الأدوية بشكل عام، ويوفر الوقت والجهد والمال.
- يهدف هذا المشروع إلى إحداث ثورة في اكتشاف الأدوية وإعادة توظيفها. حيث يقوم على تطوير منصة رقمية تحت اسم **Algeria SmartPharma** تعتمد على الذكاء الاصطناعي في التنبؤ بالخصائص الجزيئية للجزيئات، خاصة خصائص ADMET (الامتصاص، التوزيع، الأيض، الإخراج، والسمية) وذلك من خلال إدخال اسم الجزيء أو صيغته الجزيئية، تقدم المنصة تنبؤات حول سلوك الدواء داخل الجسم، مما يجعلها أداة أساسية لمطوري الأدوية. ولا تقتصر منصتنا على التنبؤ بالخصائص الجزيئية فحسب، بل تقدم أيضا خدمات تثقيفية. نوفر قسما علميا ثريا يقدم لمحة عامة حول عملية اكتشاف الأدوية التقليدية، بالإضافة إلى عملية اكتشاف الأدوية باستخدام الذكاء الاصطناعي، ومقدمة عن مختلف التمثيلات الجزيئية. كما توفر تجربة فريدة و مثرية للمستخدمين تمكنهم من عرض أي جزيء من خلال أنواع مختلفة من التمثيلات (البنية ثنائية الأبعاد، والنموذج ثلاثي الأبعاد، والرسوم البيانية الجزيئية، وغيرها). يساعد هذا العرض متعدد التمثيلات المستخدمين على فهم البنية الجزيئية بشكل أفضل من وجهات نظر علمية مختلفة. يوجد قسم في المنصة يعرض مختلف المقالات العلمية التي عملت في هذا مجال اكتشاف الأدوية باستخدام الذكاء الاصطناعي. وأخيرا فقد طبقنا نموذج الذكاء الاصطناعي المطور على واحد من بين أخطر الأمراض وهو فيروس ماربورغ.
 - من خلال هذا المشروع نهدف إلى توفير تنبؤات سريعة ودقيقة حول خصائص الأدوية، مما قد يُسرّع عملية تطوير الأدوية وإعادة استخدامها.

● اسم المنصة و الشعار:

- اسم المنصة: أطلقنا على منصتنا اسم "Algeria SmartPharma" ليعكس نهجًا ذكيًا في اكتشاف الأدوية، مُصمم خصيصًا للسياق الدوائي الجزائري. تُبرز كلمة "Smart" دمجنا للذكاء الاصطناعي والتقنيات المتقدمة، لا سيما في مجال التنبؤ بالخصائص الجزيئية لتسريع وتحسين دقة تحديد الأدوية المرشحة الواعدة. يرتبط مصطلح "Pharma"، المشتق من كلمة "Pharmaceutical"، ارتباطًا مباشرًا بمهمتنا في مجال الأدوية، في الوقت نفسه، يُرسخ اسم "Algeria" هويتنا كمبادرة وطنية

تهدف إلى تعزيز القدرات البحثية المحلية والمساهمة في الابتكار العالمي في مجال الرعاية الصحية. يُمثل هذا الاسم معًا مستقبلًا ذكيًا متجذرًا في الابتكار الجزائري.

- **الشعار:** يتميز شعارنا بمزيج من الألوان الأزرق والبرتقالي:

يُوحى **اللون الأزرق** بالثقة والأمان، وهي صفات أساسية في الطب. كما يرتبط بالنظافة والدقة والبيئات السريرية. وبالإضافة فإن للأزرق تأثير مُهدئ، يرمز إلى الشفاء والرعاية، وهو أمر مهم في الصناعات التي تُركز على المريض.

اخترنا أيضًا اعتماد **اللون البرتقالي** في تصميم شعار منصتنا ليعكس دلالة علمية مستوحاة من "الكتاب البرتقالي" الصادر عن إدارة الغذاء والدواء الأمريكية (FDA)، والذي يعد مرجعًا رئيسيًا في مجال الأدوية المعتمدة والتكافؤ العلاجي. وهذا ينسجم مع أهداف منصتنا في توفير أدوات ذكية تسهم في تقييم فعالية المركبات الدوائية وتسهيل البحث في مجال اكتشاف الأدوية.

2. القيم المقترحة: تعتمد منصتنا على الذكاء الاصطناعي للتنبؤ بالخصائص الجزيئية لاكتشاف الأدوية مما تساهم في:

- **القيمة المبتكرة أو الجديدة:** تعتمد المنصة على الذكاء الاصطناعي، وهو توجه حديث غير مطبق محليًا، فهي أول أداة جزائرية في مجال اكتشاف الأدوية باستخدام الذكاء الاصطناعي تساهم في تسريع اكتشاف الأدوية وإعادة استخدامها، وبالتالي التقليل من تكاليف البحث والتطوير.
- **القيمة بالأداء العالي:** توفر دقة وسرعة في التنبؤ بخصائص ADMET مقارنة بالطرق التقليدية، ما يساهم في تقليل وقت وجهد التجارب المخبرية.
- **القيمة بالحد من المخاطر:** تساعد على تقليل احتمال فشل المركبات في المراحل المتقدمة من تطوير الدواء عبر التنبؤ المبكر بخصائصها السمية أو الامتصاص... إلخ، بالإضافة إلى تقليل الاعتماد على التجارب الحيوانية.
- **القيمة بسهولة الاستخدام:** عبر منصة متكاملة و سهلة الاستخدام بواجهة تفاعلية يمكن للباحثين استخدامها بسهولة دون الحاجة لتقنيات برمجية معقدة.

- القيمة بالخدمة الشاملة: تقديم الدعم الفني، والتحديثات، وإمكانية التكامل مع أنظمة المستشفيات أو المختبرات... الخ.

3. فريق العمل:

فريق العمل	التخصص	المهام
الطالبة جناد أسماء	ذكاء اصطناعي	تطوير نماذج الذكاء الاصطناعي للتنبؤ والتحليل الجزيئي.
الطالبة خريش رقية	ذكاء اصطناعي	تصميم وتطوير منصة الويب التفاعلية ودمج نموذج الذكاء الاصطناعي في المنصة.
الأساتذة المشرفين	إعلام آلي	الإشراف و التواصل واللقاءات مع المخابر الجامعية الكيميائية، الشركة الجزائرية SADIAL لصناعة الأدوية.

4. أهداف المشروع:

- توفير حل مبتكر متمثل في منصة رقمية تساعد على التنبؤ بالخصائص الجزيئية للأدوية بشكل سريع وفعال.
- تطوير واجهة مستخدم سهلة وبسيطة، تتيح للمستخدمين سهولة الفهم والوصول إلى المعلومات.

- توفير منصة شاملة لأكبر عدد من المستخدمين من الباحثين إلى الطلاب وجميع المهتمين بهذا المجال.
- توفير محتوى ثقافي وعلمي في مجال اكتشاف الأدوية بجميع مراحله وكيفية تأثير الذكاء الاصطناعي عليه، مع قسم للمقالات العلمية الخاصة بتطبيق الذكاء الاصطناعي في مجال اكتشاف الأدوية.
- التعاون والشراكة مع مختلف الجهات من باحثين وشركات تصنيع الأدوية وحتى الجامعات والهيئات الصحية.
- تحسين حياة المرضى والمجتمعات من خلال المساهمة في تسريع عملية اكتشاف الأدوية.

5. جدول زمني لتحقيق المشروع :

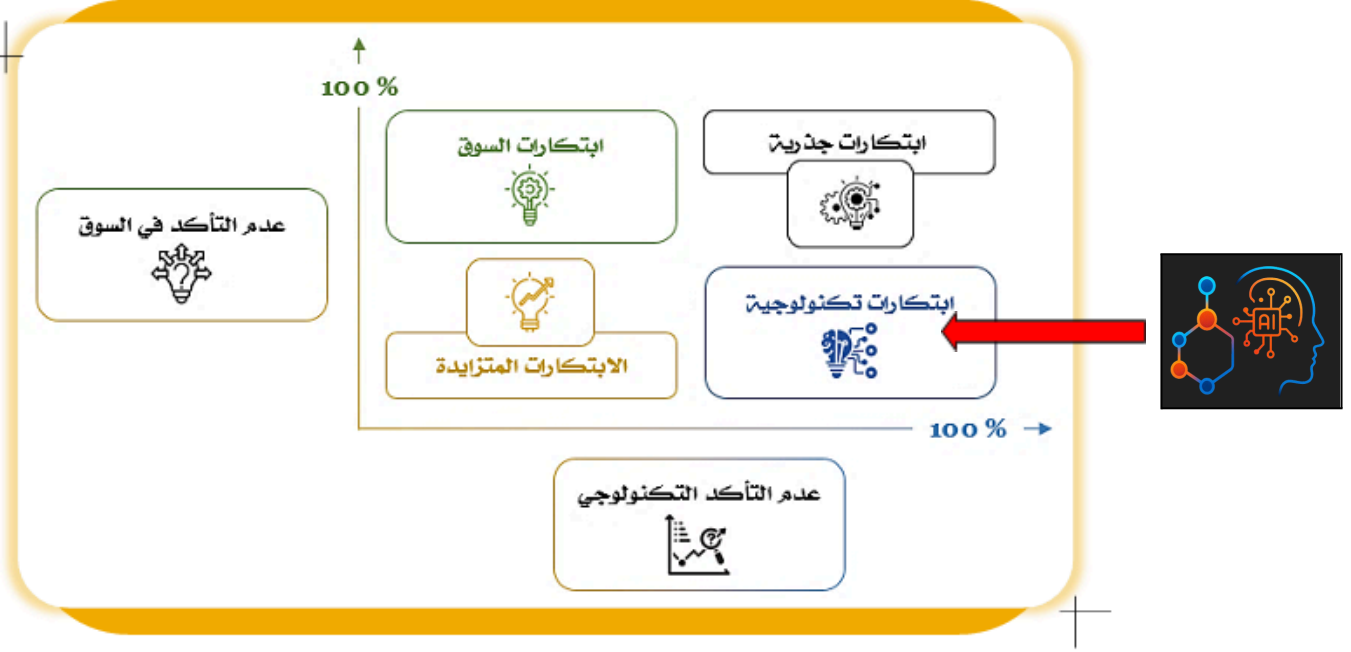
الأعمال		الأشهر										
		11	10	9	8	7	6	5	4	3	2	1
1	الدراسات الأولية										(√)	(√)
2	البحث والتعاون مع خبراء في المجال الكيمياء وصناعة الأدوية للحصول على الخبرة										(√)	
3	تجهيز مقر الشركة									(√)		
4	اقتناء المعدات والأجهزة								(√)			
5	تركيب الأجهزة							(√)				
6	تحميل البرمجيات اللازمة على الأجهزة					(√)						
7	تحليل البيانات وتطوير نماذج الذكاء الاصطناعي				(√)	(√)						

	(√)										8	تحليل النتائج مع خبراء في مجال صناعة الأدوية
	(√)										9	دمج نتائج والأجهزة
(√)											10	بداية إنتاج أول منتج

المحور الثاني: الجوانب الابتكارية

1. طبيعة الابتكارات:

يمكن تصنيف مشروعاتنا من ناحية طبيعة الابتكارات كما توضحه الصورة:



الصورة 01: تصنيف المشروع من حيث طبيعة الابتكار من إعداد الطالبتين.

- يُصنّف مشروعاتنا ضمن **الابتكارات التكنولوجية** نظرًا لاعتماده على تقنيات الذكاء الاصطناعي الحديثة التي أثبتت فعاليتها عالميًا، لكنه يُوظف لأول مرة بشكل منهجي ومتكيف مع احتياجات السوق الجزائرية في مجال لا يزال غير مستغل محليًا. في حين تعتمد معظم الجهات الفاعلة في الجزائر على حلول أجنبية جاهزة، غالبًا ما تكون غير متاحة أو غير مكيفة مع خصوصيات البيئة المحلية، يقدم مشروعاتنا حلاً مطوراً بالكامل داخل الجزائر، ما يمنحه قيمة مضافة حقيقية وميزة تنافسية واضحة. لا تقتصر أهمية المشروع على جانبه التقني، بل تمتد إلى قدرته على إحداث تأثير نوعي في القطاعين الصيدلاني والبحثي، من خلال تسريع عمليات اكتشاف الأدوية أو إعادة توظيفها، بالاعتماد على أساليب علمية دقيقة وسريعة تلبي احتياجات السوق الوطنية.

2. مجالات الابتكارات:

تسعى منصتنا إلى إحداث نقلة نوعية في مجال اكتشاف الأدوية من خلال تقديم قيم ابتكارية تجمع بين الذكاء الاصطناعي وسهولة الاستخدام:

- **الابتكار التقني (دمج الذكاء الاصطناعي):** أول منصة جزائرية تستخدم تقنيات الذكاء الاصطناعي، وخاصة التعلم العميق، لتسريع عملية اكتشاف الأدوية والتنبؤ بالخصائص الجزيئية (ADMET) الامتصاص، التوزيع، الأيض، الإخراج، والسمية بطريقة علمية دقيقة ومبسطة للمستخدمين.
- **التكامل مع تقنيات حديثة:** تدعم المنصة التكامل مع قواعد بيانات كبرى (مثل PubChem، ChEMBL)، ومع أدوات ذكاء اصطناعي أخرى، لتعزيز دقة التنبؤات وتحسين التحليل الدوائي.
- **تصميم موجه للمستخدم (سهولة الاستخدام):** تم تصميم المنصة لتكون سلسلة وسهلة الاستخدام، مع إمكانية عرض الجزيئات بأكثر من شكل (2D، 3D، SELFIES)، ما يُسهل على الباحثين تحليل الجزيئات بشكل شامل.
- **الأتمتة والتكامل:** أتمتة التنبؤ بخصائص المركبات كبديل عن الطرق التجريبية المكلفة و منصة موحدة تربط بين التمثيل الجزيئي، التنبؤ بالخصائص، والوصول السهل إلى الأبحاث العلمية.
- **الابتكارات الوظيفية:** توفر المنصة ميزات إضافية مثل: تقديم شروحات علمية مبسطة حول تقنيات اكتشاف الأدوية، مع إمكانية الاطلاع على آخر الأبحاث العلمية المرتبطة بالمجال مباشرة من المنصة.
- **ثورة في مجال الأدوية:** المنصة تُمثل نقلة نوعية في مجال اكتشاف الأدوية عبر تقديم أدوات ذكية وميسرة مما يساهم في تسريع الابتكار، وتقليل التكاليف، وتحسين جودة الرعاية الصحية.

المحور الثالث: التحليل الاستراتيجي للسوق

1. عرض القطاع السوقى:

● **الفئة المحتملة:** تمثل قاعدة أوسع من العملاء الذين قد يستفيدون من المنصة بشكل

غير مباشر أو في المستقبل مع التوسع. وتشمل:

○ **صيدليات المستشفيات:** تستفيد الصيدليات التابعة للمستشفيات من أداة

الذكاء الاصطناعي لتقييم الخصائص الجزيئية للمركبات المستخدمة في التركيبات الخاصة أو المكملات. يمكن للأداة مساعدتهم في التأكد من سلامة وفعالية المواد قبل استخدامها، خاصة في حالات التركيبات المخصصة للمرضى مثل الصيدلية المركزية لمستشفى مصطفى باشا الجامعي.

○ **الهيئات التنظيمية:** مثل الوكالة الوطنية للمنتجات الصيدلانية (ANPP)،

التي يمكن أن تعتمد على تحليل ADMET لاتخاذ قرارات بشأن ترخيص الأدوية.

● **الفئة المستهدفة:** تشمل الفئات التي تمثل أولوية قصوى للمشروع من حيث الحاجة

الفعالية، والقدرة على الدفع، والانخراط المباشر في عمليات البحث وتطوير الأدوية. وتشمل:

○ **شركات الأدوية:** تعتبر الفئة الأساسية المستهدفة، مثل شركة

Biopharm و SAIDAL، حيث تسعى إلى تقليل التكاليف والوقت اللازم لتطوير الأدوية. تساعدهم أداة الذكاء الاصطناعي في تصفية آلاف المركبات الكيميائية واختيار الأنسب منها بناءً على خصائص ADMET، مما يقلل من معدل الفشل في المراحل السريرية ويزيد من كفاءة عملية التطوير الدوائي.

○ **مراكز البحث في البيوتكنولوجيا:** يمكن للمركز الوطني للبحث في

البيوتكنولوجيا بالجزائر CRBT الاستفادة من منصتنا في تسريع وتسهيل عملية اكتشاف الأدوية عبر أدوات تحليلية مدعومة بالذكاء الاصطناعي

مما يوفر الوقت والتكلفة في المراحل الأولية للبحث. كما تدعم المنصة تمثيلات جزيئية متقدمة تساعد الباحثين في تحليل المركبات وفهم بنيتها بشكل أعمق. هذا يجعلها أداة فعالة لدعم الأبحاث في البيوتكنولوجيا.

o **الجامعات والمؤسسات الأكاديمية:** تشمل الجامعات، المدارس العليا، التي تعتمد على أحدث التقنيات والمصادر لدعم مشاريع البحث، التجارب العلمية، وتطوير المهارات لدى الطلبة والأساتذة الباحثين. كما تضم مختبرات متخصصة، مثل مختبر المدرسة الوطنية المتعددة التقنيات ENSP، مختبر قسم الهندسة الصيدلانية بجامعة قسنطينة 3.

● أسباب اختيار هذه الفئة المستهدفة:

- o كلا الفئتين شركات الأدوية ومراكز البحث في البيوتكنولوجيا تسعى لتقليل الوقت والتكلفة المرتبطين بتطوير الأدوية، خاصة في المراحل المبكرة التي تتطلب تحليل كميات ضخمة من المركبات.
- o تضم باحثين مؤهلين ومختبرات متقدمة تجعلها قادرة على استيعاب وتطبيق أدوات الذكاء الاصطناعي بسهولة وفعالية.
- o الحاجة لأدوات دقيقة وسريعة تقلل من معدل فشل الأدوية في المراحل المتقدمة من التطوير.
- o تمتلك الجامعات مختبرات نشطة ومشاريع بحثية مستمرة، مما يجعلها بحاجة دائمة إلى أدوات، خدمات تدعم الابتكار.

● تحديد إمكانية إبرام عقود شراء مع بعض الزبائن المهمين:

- o نعم، هناك إمكانية للتعاون مع شركات الأدوية مخابر البحث العلمي و المركز البيوتكنولوجي، حيث تم التواصل هاتفيا و ارسال طلب للتعاون مع شركة SAIDAL و في انتظار الرد، و هو الأمر كذلك مع المدرسة الوطنية المتعددة التقنيات ENSP تم التواصل مع استاذة قسم التكنولوجيا الحيوية.

2. قياس شدة المنافسة:

● تحليل القوى التنافسية (PORTER):

- **حدة المنافسة:** منخفضة، لا توجد أدوات أو منصات محلية تستخدم الذكاء الاصطناعي في اكتشاف الأدوية أو التنبؤ بخصائص ADMET. غالباً ما تعتمد المؤسسات الجزائرية على برامج أجنبية أو تحاليل تقليدية. هذا يمنح المشروع فرصة للريادة والتميز محلياً في هذا المجال الناشئ.
- **قوة العملاء:** منخفضة، بسبب ندرة الخيارات في السوق الجزائري، لا يوجد منتج محلي منافس يتمتع بنفس الخصائص. العملاء مثل الباحثين، مراكز البحث، الجامعات، وشركات الأدوية بحاجة إلى أدوات موثوقة. إذا تم توفير الأداة باللغات (العربية، الفرنسية، أو الإنجليزية) مع دعم فني محلي، فإن ولاء العملاء سيكون مرتفعاً وحساسيتهم للسعر منخفضة نسبياً.
- **قوة الموردين:** متوسطة، المعدات والأجهزة التقنية قد تعتمد على الاستيراد، ما قد يؤدي إلى ارتفاع في التكاليف أو تأخير في التسليم. أما البرمجيات والبيانات، فهي متوفرة كمصادر مفتوحة عالمية. يجب تنويع الموردين وتقليل الاعتماد على مصدر واحد لتجنب أي انقطاع في سلاسل التموين.
- **تهديد المنتجات البديلة:** منخفض محلياً، لا توجد بدائل محلية تعتمد على الذكاء الاصطناعي في اكتشاف الأدوية. بعض المؤسسات قد تستخدم أدوات أجنبية أو طرق تقليدية. استمرار المشروع في التطوير وتحديث المنصة وتقديم خدمات متميزة يعزز مكانته كمنقلة نوعية في السوق المحلي.
- **تهديد دخول منافسين جدد:** متوسط إلى مرتفع، يتطلب دخول السوق معرفة تقنية متقدمة وتمويلاً جيداً، مما يشكل حاجزاً أمام المنافسين. لكن مع تطور التعليم في مجالات الذكاء الاصطناعي والتقنيات الصحية، من الممكن أن تظهر مشاريع مشابهة في المستقبل. من المهم بناء اسم قوي

بسرعة، وعقد شراكات مع جامعات ومؤسسات صحية لتثبيت مكانة المشروع.

3. الاستراتيجيات التسويقية:

• تحليل (SWOT):

نقاط القوة (Strengths)	نقاط الضعف (Weakness)
<ul style="list-style-type: none"> - استخدام تقنيات الذكاء الاصطناعي المتقدمة والتعلم العميق في التنبؤ بالخصائص الجزيئية ADMET. - القدرة على توفير نتائج دقيقة وسريعة مقارنة بالطرق التقليدية. - تطوير منصة رقمية سهلة الاستخدام تشرح عملية اكتشاف الأدوية التقليدية والحديثة باستخدام الذكاء الاصطناعي، وتوفر مقالات علمية متخصصة في مجال اكتشاف الأدوية بالذكاء الاصطناعي. - دعم من شركاء أكاديميين ومراكز بحثية متخصصة. - تخصيص المنصة لاحتياجات فئات مختلفة (شركات أدوية، باحثين، جامعات). - تقليل تكاليف اكتشاف الأدوية بالطرق التقليدية. 	<ul style="list-style-type: none"> - الحاجة المستمرة لتحديث المنصة تكنولوجياً لمواكبة التطورات العلمية. - قد يواجه المشروع كونه مؤسسة ناشئة بعض القيود في التسويق و التوسع. - قلة الوعي و تبني التكنولوجيا من قبل بعض المستخدمين ما يحتاج إلى وقت لتوعية الفئات المستهدفة. - اعتماد كبير على جودة وكمية البيانات المتاحة لتدريب النموذج. - تكلفة تطوير وصيانة الأداة عالية نسبياً.

الفرص (Opportunities)	التهديدات (Threats)
<ul style="list-style-type: none"> - توسع التعاون مع شركات أدوية ومراكز بحثية لتعزيز التطبيق العملي للمنصة. - تزايد الطلب على أدوات الذكاء الاصطناعي في مجال اكتشاف الأدوية وتحليل ADMET. - زيادة الوعي بأهمية التنبؤ المبكر بخواص الأدوية للحد من الفشل في المراحل المتقدمة. - الاستفادة من تطورات الذكاء الاصطناعي و التعلم العميق لتحسين المنتج. 	<ul style="list-style-type: none"> - التغيرات السريعة في تقنيات الذكاء الاصطناعي قد تجعل الأداة قديمة بسرعة. - إمكانية رفض السوق أو بطء تبني التقنيات الجديدة في مجال صناعة الأدوية. - المنافسة الشديدة من المنافسين الجدد وتقنياتها المتقدمة و الموارد الكبرى. - مخاوف الخصوصية والأمان المتعلقة بالبيانات الجزيئية المستخدمة.

● المزيج التسويقي:

1. المنتج Product:

<p>Algeria - الاسم التجاري:</p> <p>SmartPharma</p> <p>- الشعار التجاري:</p> <p>Where Molecules Meet Intelligence</p>	<p>العلامة التجارية للمنتج</p>
<p>تصميم المنتج على شكل منصة في الهاتف أو الحاسوب مع إمكانية تغيير التصميم على حسب احتياجات المستخدمين. تتميز بسهولة الاستخدام.</p>	<p>التصميم</p>

<p>منتجنا هو منصة التنبؤ بالخصائص الجزيئية ADMET المدعومة بالذكاء الاصطناعي و تتميز ب:</p> <ul style="list-style-type: none"> - التنبؤ الجزيئي الذكي: التنبؤ بخصائص الإمتصاص، التوزيع، الأيض و السمية باستخدام نموذج التعلم العميق. - التحويلات الجزيئية: القدرة على تحويل الجزيء إلى عدة تمثيلات جزيئية مختلفة (ثنائية وثلاثية الأبعاد، رسوم بيانية) بإدخال اسم الجزيء أو صيغته الجزيئية. - القسم العلمي: يشرح عملية اكتشاف الأدوية التقليدية والحديثة باستخدام الذكاء الاصطناعي، وتوفر مقالات علمية متخصصة في مجال اكتشاف الأدوية بالذكاء الاصطناعي. - دراسة حالة: توفير التنبؤ بخصائص مرشحي الأدوية لفيروس ماربورغ (Marburg) و الحصول على رؤى حول إمكانيات كونهم كمرشحين أدوية. - حفظ البيانات: الناتجة عن التنبؤ و التحويلات الجزيئية المختلفة. - مرونة التخصيص: على حسب المستخدم (باحث أكاديمي، الصيدلة، شركة أدوية). - واجهة سهلة الاستخدام: تصميم واجهة سهلة الاستخدام و التفاعل. 	<p>خصائص المنتج والمواصفات</p>
<p>تكون المنصة مصحوبة ب :</p> <ul style="list-style-type: none"> - تاريخ الاصدار. - الاسم التجاري. - العلامة التجارية. - الشعار التجاري. - البريد الإلكتروني لفريق العمل. 	<p>المعلومات المصاحبة للمنصة</p>

<p>- الدعم الفني و الصيانة: توفير دعم فني متواصل على مدار الساعة لمساعدة المستخدمين في حل أي مشكلة تقنية أو الاستفسارات المتعلقة بالمنصة.</p> <p>- التحديثات الدورية للمنصة: إطلاق تحديثات مستمرة تشمل تحسينات في أداء المنصة، وإضافة ميزات جديدة مثل توليد الجزيئات حسب خصائص ADMET المرغوب بها، أو تحديث النماذج المطورة مسبقاً.</p> <p>- التدريب والتوجيه: تقديم دورات تدريبية وورش عمل افتراضية للمستخدمين الجدد لتسهيل استخدام المنصة والاستفادة القصوى منها.</p>	<p>خدمات ما بعد البيع</p>
---	----------------------------------

2. السعر Price:

- **الاشتراك الشهري أو السنوي:** خطط اشتراك مرنة (شهرية و سنوية) بأسعار تتناسب مع مختلف الفئات المستهدفة.
- **النسخة الأكاديمية:** تسعيرة منخفضة أو مجانية موجهة للباحثين والطلبة، تسمح باستخدام المنصة لأغراض علمية وتعليمية، مع ميزات محدودة.
- **فترة تجريبية مجانية:** لإعطاء المستخدمين فرصة لاختبار المنصة وتجربتها قبل الاشتراك المدفوع.
- **الدفع حسب الاستخدام:** نموذج مرن مناسب للمستخدمين غير الدائمين، كالمخابر الصغيرة أو مشاريع بحثية مؤقتة.

3. الترويج Promotion:

- **الحملات الرقمية:** إطلاق حملات إعلانية على منصات مثل LinkedIn، ResearchGate وغيرها من المواقع التي يرتادها الباحثون وشركات الأدوية.

- **التعاون مع الجامعات ومراكز البحث:** تقديم ورش عمل، دورات تعريفية، واتفاقيات شراكة مع أقسام علوم الأدوية والذكاء الاصطناعي.
- **البحث العلمي:** نشر أبحاث ودراسات حالة تبين نجاح المنصة في التنبؤ بالخصائص الجزيئية.
- **المؤتمرات والمعارض العلمية:** المشاركة في المؤتمرات والمعارض العلمية للتعريف بالمنصة و فوائدها وبناء شبكة علاقات مهنية.
- **الترويج التجريبي:** تقديم فترات تجريبية مجانية للمستخدمين الجدد، بهدف تشجيعهم على الاشتراك الكامل بعد تجربة القيمة الفعلية للمنصة.

4. التوزيع Place:

- منصة رقمية متاحة عبر الإنترنت للوصول السهل من أي مكان.
- تطوير تطبيقات للهواتف الذكية لتسهيل الوصول والاستخدام.
- التوزيع عبر شراكات مع مراكز الأبحاث والجامعات.
- التعاون مع المستشفيات والمراكز الطبية لاستخدام الأداة في البحث وتقييم فعاليات الأدوية.

5. الدليل المادي Physical Evidence:

- واجهة استخدام واضحة وسهلة على الموقع والتطبيق.
- تصميم هوية بصرية إحترافية (شعار، ألوان، تصميم).
- دعم فني مباشر عبر البريد الإلكتروني.
- استخدام أجهزة وخوادم حديثة لضمان أداء عالي.
- شهادات أو تقييمات من خبراء أو مؤسسات معتمدة.
- مكاتب منظمة ومجهزة لفريق العمل (لضمان جودة التطوير والدعم).

6. العمليات Processes:

- تسجيل المستخدمين بسهولة عبر المنصة أو التطبيق.

- إدخال البيانات (مثل اسم الجزيء) من قبل المستخدم أو تحميلها مباشرة.
- معالجة البيانات باستخدام نموذج الذكاء الاصطناعي تلقائيًا.
- عرض النتائج (مثل خصائص ADMET المتوقعة) بشكل واضح ومنظم.
- إمكانية تحميل التقارير أو حفظ النتائج.
- توفير دعم فني عند الحاجة خلال جميع مراحل الاستخدام.
- تحديثات دورية للنظام لضمان دقة النتائج وتحسين الأداء.
- آلية آمنة لحفظ بيانات المستخدمين وسريتهم.

7. الأفراد (الجمهور): People:

- **فريق البحث والتطوير:** يشمل خبراء و مهندسين في الذكاء الاصطناعي لتطوير وتحسين النماذج و المنصة.
- **فريق الأمن السيبراني:** لحماية المعلومات و ضمان سريتها وسلامتها من التهديدات السيبرانية.
- **فريق الدعم الفني:** يساعد المستخدمين في حال وجود مشاكل تقنية أو الاستفسارات.
- **شركاء المشروع:** مثل الجامعات، المراكز البحثية وشركات الأدوية.
- **المستخدمون النهائيون:** مثل الباحثين، الصيادلة، المستشفيات وشركات الأدوية.

● استراتيجيات المؤسسة:

- **استراتيجية القطاعات السوقية:** نظرًا لتنوع واختلاف الفئات المستهدفة، مثل شركات الأدوية، الباحثين، الصيادلة، الجامعات، والمستشفيات. يهدف هذا التوجه إلى تقسيم السوق إلى شرائح من حيث الاحتياجات والاهتمامات، مع تخصيص عروض وخدمات تلائم كل فئة على حدة. فشركات الأدوية مثلاً تحتاج إلى أدوات تساعد في تقليل الوقت والجهد والمال في عملياتها، بينما يهتم الباحثون بالدقة العلمية والتحليل المتقدم، وتبحث الجامعات عن أدوات تعليمية مناسبة لطلابها وأساتذتها. إن اعتماد هذه الاستراتيجية يمكّن المشروع من تحقيق فعالية أكبر في

الوصول إلى المستخدمين وتلبية توقعاتهم بشكل دقيق، مع الحفاظ على مرونة عالية لمواكبة تطورات السوق وتغيرات الطلب.

- **استراتيجية التميز:** من خلال تقديم أول أداة في الجزائر مبتكرة قائمة على الذكاء الاصطناعي تهدف إلى التنبؤ بخصائص ADMET، وهي عملية معقدة وأساسية في اكتشاف وتطوير الأدوية. تميّز الأداة نفسها من خلال دقتها العالية، وسرعة التحليل، وواجهة الاستخدام المبسطة، ما يجعلها تقدم قيمة مضافة يصعب تقليدها في السوق. هذا التميز العلمي والتقني يمنح المشروع قدرة تنافسية قوية، ويجعله جذابًا للباحثين وشركات الأدوية على حد سواء.

المحور الرابع: خطة الإنتاج والتنظيم

1. عملية الإنتاج: تمر عملية الإنتاج بعدة مراحل متمثلة في:



• لوازم الإنتاج:

- **المواد الأولية:** متمثلة في البيانات (قواعد بيانات ADMET مفتوحة TDC، البيانات الجزيئية) و البرمجيات اللازمة للتطوير (لغات البرمجة Python، مكتبات Rdkit).
- **الموارد المادية:** خوادم ومعالجات عالية الأداء (أجهزة GPU للتدريب)، الآلات والمعدات، الأثاث.
- **الموارد البشرية:** فريق البحث والتطوير (خبراء و مهندسين الذكاء الاصطناعي و البرمجيات)، فريق الأمن السيبراني (حماية المعلومات وضمان سريتها وسلامتها)، فريق الدعم الفني (حل مشاكل تقنية أو الرد على استفسارات).

• مراحل الإنتاج:

○ مرحلة الدراسات:

- دراسة السوق واحتياجات المستخدمين (باحثين، شركات أدوية).
- تحليل الأدوات المنافسة الموجودة في مجال ADMET.
- تحديد الخصائص الجزيئية المطلوب التنبؤ بها.
- جمع المعلومات التقنية والعلمية حول الذكاء الاصطناعي المستخدم في التنبؤ الجزيئي.

○ مرحلة التحضير:

- جمع قواعد بيانات ADMET من مصادر علمية موثوقة.
- معالجة البيانات وتنظيفها من الأخطاء والتكرارات.

- تحويل التمثيلات الجزيئية إلى تنسيقات قابلة للمعالجة (مثل SELFIES أو SMILES).

- تقسيم البيانات إلى مجموعات تدريب واختبار.

○ مرحلة بناء النموذج:

- اختيار نماذج الذكاء الاصطناعي المناسبة (مثل RoBERTa أو BERT).

- تصميم النموذج المختار (هندسة النموذج).

- تدريب النموذج على بيانات الخصائص الجزيئية (تصنيف أو انحدار حسب الخاصية).

- تقييم أداء النموذج المدرب باستخدام مقاييس مثل ROC AUC، RMSE، R^2

○ مرحلة تطوير المنصة:

- تصميم واجهة استخدام بسيطة وسهلة.

- ربط النموذج الذكي بالواجهة.

- تأمين المنصة وتوفير قاعدة بيانات لحفظ نتائج التنبؤات.

- دعم تحميل النتائج على شكل ملفات.

- التأكد من أمان البيانات وسهولة الاستخدام.

○ مرحلة الاختبار

- تجربة المنصة باستخدام بيانات حقيقية وغير مدربة سابقاً.

- جمع ملاحظات من المستخدمين (باحثين، طلاب...).

- تحسين النموذج بناءً على نتائج الاختبار.

- تصحيح الأخطاء وتحسين الأداء والواجهة.

○ مرحلة الإطلاق:

- نشر النسخة النهائية من المنصة عبر موقع إلكتروني أو تطبيق.

- تخصيص فريق لمراقبة الأخطاء وتقديم التحديثات.

- الترويج للمشروع عبر الشراكات العلمية والمؤتمرات.

- مراقبة الأداء وتحديث النظام حسب الحاجة.

2. التموين:

● سياسة الشراء:

- **المواد الأولية:** شراء بيانات جزيئية عالية الجودة (أو تحميلها من مصادر مفتوحة)، شراء تراخيص الأدوات البرمجية إذا لزم الأمر.
- **الآلات والمعدات:** 2 حواسيب شخصية، 2 حواسيب مكتبية عالية الأداء لتدريب النماذج، طابعة، مودام، مكيف، 4 مكاتب، 4 كراسي للمكاتب، طاولة، 8 كراسي و خزانة الملفات.

● أهم الموردين: قواعد البيانات العلمية: PubChem، ChEMBL، TDC

لمصادر بيانات ADMET، مع اختيار موردين موثوقين للمعدات الإلكترونية والبرمجية، التركيز على الجودة العالية والتكلفة المعقولة.

- **سياسة الدفع و الاستلام:** الدفع الإلكتروني عند استخدام تراخيص برمجية و الاستلام يتم بشكل فوري (البيانات أو الأدوات تكون رقمية)، و في حال شراء أجهزة يتم الدفع المسبق أو عند التسليم، حسب الاتفاق مع المورد.

3. اليد العاملة:

- **مهندس ذكاء اصطناعي:** لتصميم وتدريب النماذج.
- **مطور برمجيات:** لبناء المنصة وواجهة الاستخدام.
- **مهندس الأمن السيبراني:** لحماية المعلومات و ضمان سريتها وسلامتها من التهديدات السيبرانية.
- **تقني مراقبة الجودة:** لحل مشاكل تقنية أو الرد على الاستفسارات.
- **مختصون في الكيمياء:** لضمان دقة المحتوى العلمي والنماذج.

4. الشراكات الرئيسية:

- **شركات الأدوية:** للحصول على البيانات واختبار الأدوات في بيئة طبية حقيقية.
- **الجامعات والمؤسسات الأكاديمية:** لتوفير المعرفة العلمية.

المحور الخامس: الخطة المالية

1. التكاليف والأعباء : تتمثل التكاليف الإجمالية للمشروع في التكاليف الاستثمارية

والتكاليف التشغيلية:

● التكاليف الاستثمارية:

الأصول	التكلفة
الآلات والمعدات	<ul style="list-style-type: none">- 2 حواسيب شخصية: 280,000 دينار جزائري (140,000 دينار لكل جهاز).- 2 حواسيب مكتبية: 363,000 دينار جزائري (181,500 دينار لكل جهاز).- طابعة: 119,000 دينار جزائري.- مودام: 4900 دينار جزائري.- مكيف: 295,000 دينار جزائري.
الأثاث	<ul style="list-style-type: none">- 4 مكاتب: 40,000 دينار جزائري (10,000 دينار لكل مكتب).- 4 كراسي للمكاتب: 48,000 دينار جزائري (12,000 دينار لكل كرسي).- طاولة: 14,500 دينار جزائري,- 8 كراسي: 28,000 دينار جزائري (3500 دينار لكل كرسي).- خزانة ملفات: 19,000 دينار جزائري.
المجموع	1,211,400 دينار جزائري.

● التكاليف التشغيلية:

الأصول	التكلفة
المباني	20,000 دينار جزائري شهريا.
الأجور	<ul style="list-style-type: none"> - مطور برمجيات: 60,000 دينار جزائري. - مهندس أمن سيبراني: 60,000 دينار جزائري. - تقني مراقبة الجودة: 50,000 دينار جزائري. - مهندس ذكاء اصطناعي: 60,000 دينار جزائري.
اشتراك خدمات الاستضافة	4500 دينار جزائري سنويا.
اشتراك الهاتف والإنترنت	3850 دينار جزائري للشهر (3600 دينار للإنترنت و 250 دينار للهاتف).
الكهرباء والماء	25,000 دينار جزائري شهريا.
المجموع	283,350 دينار جزائري.

● طرق ومصادر الحصول على التمويل: يتم تمويل المشروع بعدة طرق، تتضمن

التمويل الذاتي بالاعتماد على الأموال الخاصة لصاحب المشروع، أو الاستعانة بالمؤسسات المالية عبر تمويل ثنائي أو ثلاثي. بالنسبة لمشروعنا أداة ذكاء اصطناعي لاكتشاف الأدوية وإعادة استخدامها، سيتم تمويله بشكل رئيسي من خلال التمويل الثنائي كما هو موضح في الجدول التالي:

$$\text{التكلفة الإجمالية} = \text{التكلفة الاستثمارية} + \text{التكلفة التشغيلية}$$

التكلفة الإجمالية = 1,211,400 + 283,350 = 1,494,750 دينار جزائري.

البيان	النسبة	القيمة
أموال خاصة	10%	149,475 دينار جزائري
صندوق التمويل الجزائري للشركات الناشئة	90%	1,345,275 دينار جزائري

- **كيفية استرداد الأموال:** سيتم استرداد رأس المال الأولي المُستثمر في المشروع، والمقدر بـ 1,494,750 دج، من خلال الإيرادات المحققة من تقديم الخدمة الأساسية للمشروع. وفقًا للتوقعات المالية الموضوعة، يُتوقع أن تبدأ عملية استرداد هذا الاستثمار تدريجيًا خلال السنوات الأولى، حيث يتم تغطية التكاليف أولاً، ثم استرجاع رأس المال، لتتحول الأرباح بعد ذلك إلى ربح صافي عائد لصالح المؤسسة. تفاصيل التدفقات المالية مبينة في الجداول التالية ضمن قسم رقم الأعمال والنتائج المتوقعة.

2. **رقم الأعمال:** السعر المدرج في الجداول أدناه يوضح قيمة الاشتراك السنوي.

- **النظرة التفاؤلية:** نفترض نموًا سريعًا في عدد العملاء ورفع تدريجي للأسعار بفضل نجاح الاستراتيجية التسويقية وجودة الخدمة.

	RÉALISATION			PRÉVISION		
Service A destiné Client	N	N+1	N+2	N +3	N+4	N+5
Quantité service A	-	200	250	400	650	800
Prix HT service A	-	12,000 DA	12,000 DA	18,000 DA	24,000 DA	36,000 DA

Ventes service A	-	2,400,000 DA	3,000,000 DA	7,200,000 DA	15,600,000 DA	28,800,000 DA
CHIFFRE D'AFFAIRES GLOBAL	-	2,400,000 DA	3,000,000 DA	7,200,000 DA	15,600,000 DA	28,800,000 DA

- **النظرة التشاؤمية:** نفترض وتيرة نمو أبطأ للعملاء وثباتاً نسبياً في الأسعار بسبب صعوبات في التوسع أو ضعف الإقبال في المراحل الأولى.

	RÉALISATION			PRÉVISION		
Service A destiné Client	N	N+1	N+2	N +3	N+4	N+5
Quantité service A	-	100	120	150	200	300
Prix HT service A	-	12,000 DA	12,000 DA	12,000 DA	18,000 DA	18,000 DA
Ventes service A	-	1,200,000 DA	1,440,000 DA	1,800,000 DA	3,600,000 DA	5,400,000 DA
CHIFFRE D'AFFAIRES GLOBAL	-	1,200,000 DA	1,440,000 DA	1,800,000 DA	3,600,000 DA	5,400,000 DA

3. جدول حسابات النتائج المتوقع (بناء على النظرة التفاؤلية):

Tot	Dé c	No v	Oc t	Se p	Ao ût	Ju il	Jui n	M ai	A vr	M ar s	Fè v	Janv	مصاريف التشغيل
240,000	//	//	//	//	//	//	//	//	//	//	//	20,000	الكرء
2,760,000	//	//	//	//	//	//	//	//	//	//	//	230,000	أجر العمال الإجمالي
4500	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	4500	اشترك خدمات الاستضافة (اشترك سنوي)
46,200	//	//	//	//	//	//	//	//	//	//	//	3850	اشترك الأنترنت والهاتف
300,000	//	//	//	//	//	//	//	//	//	//	//	25,000	الكهرباء والماء
3,350,700	//	//	//	//	//	//	//	//	//	//	278,850	283,350	المجموع

رقم الأرباح للسنة الأولى	2,400,000 دينار
حسابات النتائج المتوقعة	3,350,700 دينار
النتائج	-950,700 (خسارة)

نُدرِك تمامًا أن تحقيق خسارة في السنة الأولى بمقدار 950,700 دينار قد يثير التساؤلات، لكن من المهم التأكيد أن هذه الخسارة متوقعة ومنطقية في سياق مشاريع الابتكار، وخاصة في المؤسسات الناشئة التي تعتمد على تطوير منتج تكنولوجي جديد ودخول سوق غير مستغل محليًا. هذه الخسارة ناتجة بشكل رئيسي عن الأعباء التشغيلية المرتفعة خلال مرحلة الإطلاق، خصوصًا التكاليف المتعلقة بأجور فريق العمل، الكراء، الكهرباء، والاشتراكات الرقمية. بالرغم من هذه الخسارة الأولية، فإننا نتوقع تحوّلًا إيجابيًا بدءًا من السنوات الأولى المقبلة، اعتمادًا على:

- اكتمال تطوير المنصة وجاهزيتها التجارية.
 - انخفاض ملحوظ في المصاريف الثابتة بعد تجاوز مرحلة التأسيس.
 - خطط التوسّع التدريجي داخل السوق المحلي، مع إمكانيات التصدير الرقمي لاحقًا.
 - زيادة ثقة السوق في الأداة مما يساهم في ارتفاع حجم المبيعات والتعاقدات.
- بالتالي، نؤمن أن مشروعنا قادر على تجاوز نقطة التعادل في السنوات الأولى وتحقيق أرباح تدريجية، مدعومًا بقيمة مضافة حقيقية نُقدّمها للسوق الجزائري في مجال الرعاية الصحية الرقمية.

Molecular Representation

Molecular representation refers to the ways that transforms complex molecular structures into formats that are easier to interpret, store, and analyze, enabling applications in drug discovery, drug discovery, and materials science. We give a common representation of an interactive molecular visualization from user-defined molecular input in multiple representations.

[Explore this part](#)

Enter the SMILES string in the name of your molecule

Molecule Name: 5-amino-1-phenylimidazole-4-carbonitrile

Molecular Structure

Molecular 3D Structure

Molecular Graph

Case of input is : SMILES string

Enter the SMILES string in the name of your molecule

Molecule Name: 1,3,7-trimethylpurine-2,6-dione

Molecular Structure

Molecular 3D Structure

Molecular Graph

Case of input is : molecule name

● صفحة خاصة بالتنبؤ بالخصائص الجزيئية:

Molecular Property Prediction

Enter the SMILES to predict the value of your molecule

Molecule Descriptors

Descriptor	Value
Molecular Weight	228.7
LogP	3.88
TPSA	37.3
ClogP	2
Molecular Weight	228.7

Molecule Properties

Property	Value
Absorption	0.0001
Distribution	0.0001
Elimination	0.0001
Toxicity	0.0001

● صفحة خاصة بواجهة المستخدم:

Where Molecules Meet Intelligence

SmartPharma is an Algerian innovative platform designed to advance pharmaceutical research and development. It encompasses four core sections: Drug Discovery, Molecular Representations, Molecular Property Prediction (MPP), and a Scientific Research. Our platform bridges cutting-edge technology and scientific knowledge, empowering researchers to explore and innovate in drug development with precision and efficiency.

Update Account Info

First Name: smart
Last Name: pharma
Email: smartpharma@gmail.com
Confirm Password: Enter current password
Update Info

Change Password

Old Password: Old password
New Password: New password
Confirm New Password: Confirm new password
Reset/Change successfully
Change Password


Your Molecular Representations

Molecule Name	SMILES	Structure	REFLEX	Molecular Graph	Date
1,3,4,5-tetrahydrobenzo[c][1,2,4]oxadiazole	C1=NC2=C(N1)N=CN=C2				2024-05-10 10:17:47 (h)
5-amino-1,4-dihydro-2,3-dioxole	N#CC1=CC=CC=C1O				2024-05-10 10:17:47 (h)

Your ADMET Predictions

SMILES	Structure	Descriptors	ADMET Results	Date
C=CC(=O)N1C=CC=CC=C1		<ul style="list-style-type: none"> LogP: 1.004 TPSA: 37.3 Drover: 1 Acceptors: 2 Rotatable Bonds: 1 Molecular Weight: 228.7 	<ul style="list-style-type: none"> Absorption: <ul style="list-style-type: none"> LogP: 1.004 LogP: 1.004 LogP: 1.004 LogP: 1.004 LogP: 1.004 Distribution: <ul style="list-style-type: none"> LogP: 1.004 LogP: 1.004 LogP: 1.004 LogP: 1.004 LogP: 1.004 Elimination: <ul style="list-style-type: none"> LogP: 1.004 LogP: 1.004 LogP: 1.004 LogP: 1.004 LogP: 1.004 Toxicity: <ul style="list-style-type: none"> LogP: 1.004 LogP: 1.004 LogP: 1.004 LogP: 1.004 LogP: 1.004 	2024-05-10 10:17:47 (h)


● **صفحة خاصة بدراسة الحالة لفيروس ماربورغ:**



[AlphaGraphics](#)

[Login](#)
[Sign Up](#)

Marburg Virus Drug Candidates


Explore our dedicated section on the Marburg virus, a highly infectious pathogen with serious health implications. Learn about ongoing research, promising drug candidates, and their properties.

[explore this part](#) 



MARBURG VIRUS DRUG CANDIDATES

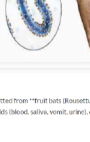
ANTIVIRAL VACCINE ANTIBODY


Alpha SmartPharma

[Login](#)
[Sign Up](#)

What is Marburg Virus?

The Marburg virus is a highly infectious pathogen from the *Filoviridae* family – the same family as the Ebola virus. It causes “Marburg Virus Disease (MVD)” a severe hemorrhagic fever with an average mortality rate of 50–88%. The disease affects both humans and nonhuman primates.



Causes

Marburg virus is transmitted from “fruit bats (*Myotis myotis*)” to humans and spreads between people through “direct contact” with bodily fluids (blood, saliva, vomit, urine), contaminated surfaces, or infected animals.

Symptoms

- High fever and chills
- Severe headache and muscle aches
- Diarrhea and vomiting may become bloody
- Bleeding from gums, eyes, or under skin
- Organ failure in severe cases
- Rash, fatigue, and confusion

Source: World Health Organization (WHO), CDC


Select a Drug Candidate

Quinoxaline properties alter cellular pH, potentially disrupting viral replication before it's proven.

Predict ADMET Properties

Predicting ADMET properties for Quinoxaline

Molecule Depiction



Molecule Properties

Property	Model Name	Predicted Value	Unit
Acceptance	Amber_100mg	1.716	None
Acceptance	Amber_100mg	2.885	None
Acceptance	Amber_100mg	4.136	None
Acceptance	Amber_100mg	Yes	Categorical (Yes/No)
Acceptance	Amber_100mg	Yes	Categorical (Yes/No)
Acceptance	Amber_100mg	Yes	Categorical (Yes/No)
Acceptance	Amber_100mg	Yes	Categorical (Yes/No)
Acceptance	Amber_100mg	1.863	None
Acceptance	Amber_100mg	Yes	Categorical (Yes/No)
Acceptance	Amber_100mg	1.249	None
Acceptance	Amber_100mg	2.359	None
Acceptance	Amber_100mg	2.228	None
Acceptance	Amber_100mg	2.545	None

Molecule Descriptors

Descriptor	Value
Molecular Weight	239.166
LogP	5.9724
TPSA	37.38
Donors	1
Acceptors	4
Rotatable Bonds	9

Marburg ADMET Analysis

Score: 21

Moderate drug candidate — may require ADMET optimization.


- ✓ Optimal lipophilicity (LogP 1-3) for passive membrane permeability and oral absorption.
- ✗ Poor solubility (LogS ≤ -4) likely limits systemic exposure.
- ✓ High protein binding (>90%) may limit unbound drug efficacy.
- ✓ Normal distribution volume (0.5-3 L/kg), ideal for systemic exposure.
- ✓ Short half-life (<3h) may necessitate frequent administration.
- ✓ Low hepatic clearance (<10 mL/min/100g cells), supports systemic exposure.
- ✓ High metabolic stability (low microsomal clearance).
- ✓ High acute toxicity (LD50 > 200 mg/kg).
- ✓ High intestinal absorption ensures good oral uptake.
- ✓ Sufficient oral bioavailability detected.
- ✓ Can cross the blood-brain barrier — may be useful for CNS involvement.
- ✓ P-glycoprotein substrate — possible efflux from gut or brain.
- ✓ Acceptable molecular weight (< 500 Da).
- ✗ High LogP — may lead to poor solubility or toxicity.
- ✓ TPSA in optimal range (< 140 Å²) for absorption.
- ✓ Acceptable number of H-bond donors (< 5).
- ✓ Acceptable number of H-bond acceptors (< 10).
- ✓ Acceptable number of rotatable bonds (< 10).

Contact Us

postcard@alpha-smartpharma.com

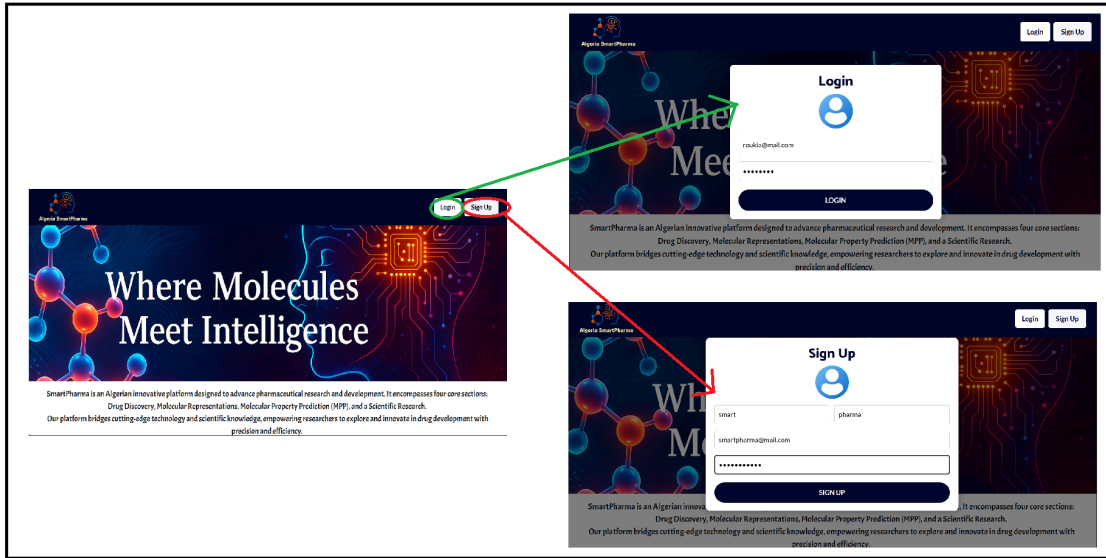
About Us

We use AI to accelerate drug discovery by predicting molecular properties, transforming how treatments are developed and delivered.

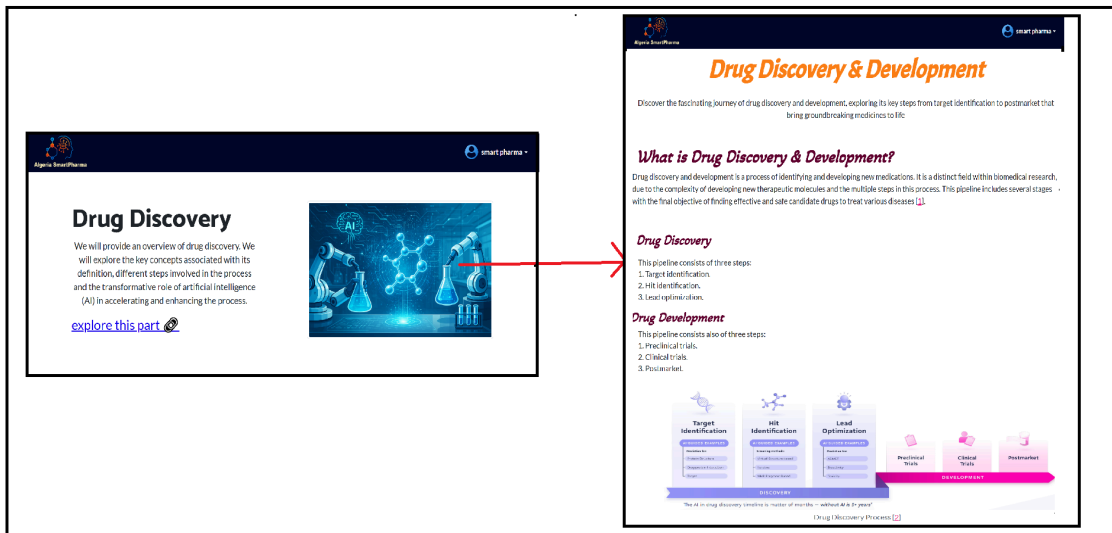

Alpha SmartPharma

© Copyright 2025 SmartPharma — Made in Algeria

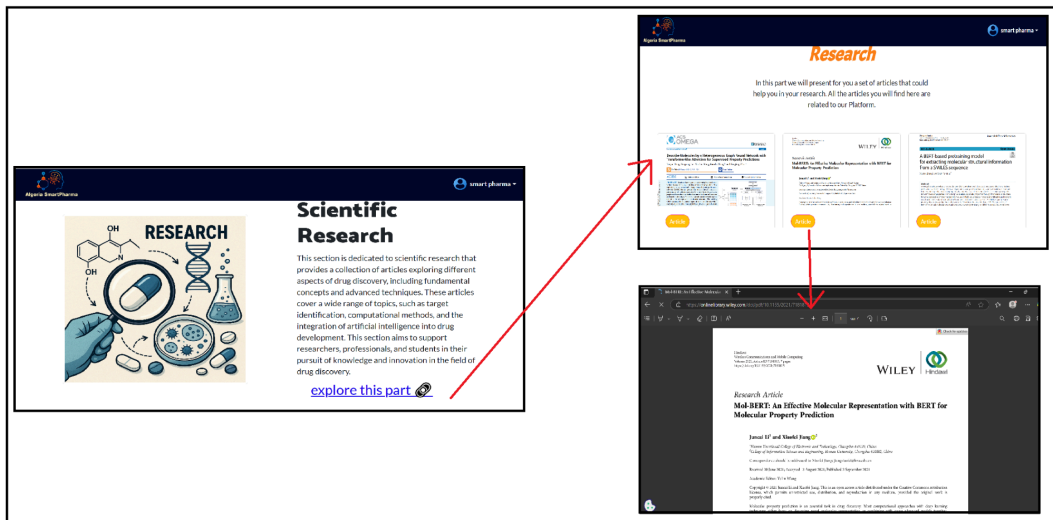
● إنشاء حساب و تسجيل الدخول:



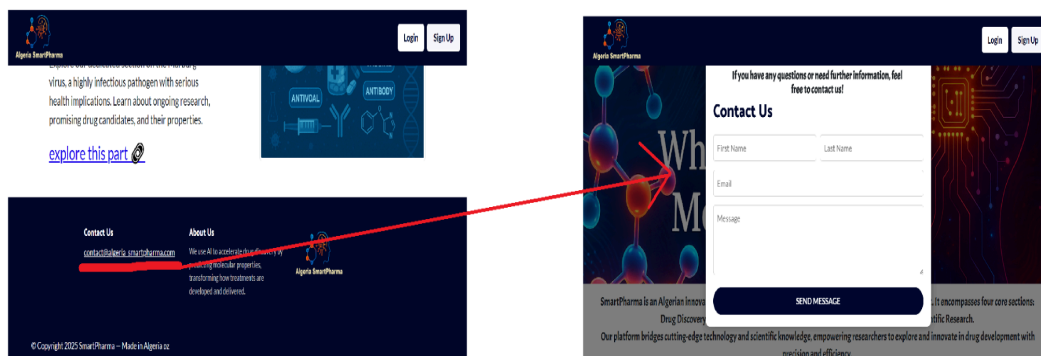
● صفحة تقدم نظرة عامة حول اكتشاف الأدوية:



- صفحة تقدم مختلف المقالات التي تخص التنبؤ بالخصائص الجزيئية باستعمال الذكاء الاصطناعي:



- صفحة اتصل بنا:



الملحق رقم 04: نموذج العمل التجاري

شرائح العملاء	العلاقات مع العملاء	القيم المقترحة	الأنشطة الرئيسية	الشراكات الرئيسية
<p>-شركات الأدوية</p> <p>(SAIDAL</p> <p>صيدال</p> <p>Biopharm</p> <p>(بيوفارم</p> <p>-مراكز البحث في</p> <p>البيوتكنولوجيا(المر</p> <p>كز الوطني للبحث</p> <p>في البيوتكنولوجيا</p> <p>(CRBT</p> <p>-الجامعات</p> <p>والمؤسسات</p> <p>الأكاديمية (مختبر</p> <p>المدرسة الوطنية</p> <p>المتعددة التقنيات</p> <p>ENSP، مختبر</p> <p>قسم الهندسة</p> <p>الصيدلانية بجامعة</p> <p>قسنطينة 3)</p>	<p>- منصة برمجية سهلة الاستخدام (ذاتية الخدمة)</p> <p>- دعم العملاء عبر الإنترنت</p> <p>- ندوات تدريبية و ورش عمل</p>	<p>-القيمة المبتكرة: أول أداة جزائرية تستخدم الذكاء الاصطناعي لاكتشاف الأدوية، مما يسرّع التطوير ويقلل التكاليف</p> <p>-القيمة بالأداء العالي: توفر دقة وسرعة في التنبؤ بخصائص ADMET، مما يقلل وقت وجهد التجارب المخبرية</p> <p>-القيمة بالحد من المخاطر: تقلل من فشل الأدوية بالتنبؤ المبكر بخصائصها السمية والدوائية، وتحد من الاعتماد على التجارب الحيوانية</p> <p>-القيمة بسهولة الاستخدام: منصة تفاعلية سهلة الاستخدام لا تتطلب مهارات برمجية</p> <p>- القيمة بالخدمة الشاملة: توفير دعم فني، تحديثات مستمرة،</p>	<p>- البحث وتطوير نماذج الذكاء الاصطناعي</p> <p>- جمع ومعالجة بيانات SMILES و ADMET</p> <p>- تدريب النماذج واختبارها</p> <p>- تطوير المنصة وربط النموذج بها</p>	<p>شركات الأدوية:</p> <p>للحصول على البيانات واختبار الأدوات في بيئة طبية حقيقية</p> <p>-الجامعات</p> <p>والمؤسسات</p> <p>الأكاديمية: لتوفير المعرفة العلمية</p>
	<p>القنوات</p> <p>- مبيعات مباشرة</p> <p>- منصات البحث العلمي (مثل ResearchGate)</p> <p>- شراكات مع شركات الأدوية و الجامعات والمؤسسات الأكاديمية</p> <p>- المؤتمرات و المعارض العلمية</p> <p>- الإنترنت والمنصات الرقمية</p>	<p>- البرمجيات التي تدعم استعمال وتطوير نماذج الذكاء الاصطناعي (خوادم GPU)</p> <p>- بيانات SMILES و ADMET</p> <p>- البرمجيات التي تدعم معالجة البيانات</p> <p>- فريق بحث وتطوير (ذكاء اصطناعي، كيمياء، برمجة)</p> <p>- أدوات تطوير البرمجيات</p>	<p>الموارد الرئيسية</p>	

		وتكامل مع أنظمة المستشفيات والمختبرات ...الخ	-صيدليات المستشفيات (الصيدلية المركزية لمستشفى مصطفى باشا الجامعي) -الهيئات التنظيمية (الوكالة الوطنية للمنتجات الصيدلانية (ANPP
هيكل التكاليف		مصادر الإيرادات	
- تكاليف البحث و التطوير - البنية التحتية (خوادم، أنظمة، أدوات) - دعم العملاء والصيانة - رواتب فرق العمل - نفقات التسويق والمشاركة في المؤتمرات - تطوير وتحسين المنصة بشكل مستمر		-الخدمات الاستشارية -الاشتراكات المدفوعة - تراخيص استخدام نماذج الذكاء الاصطناعي -الإعلانات والتسويق الرقمي - خدمات التدريب	