

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

وزارة التعليم العالي و البحث العلمي

جامعة محمد خيضر بسكرة

## عنوان المشروع

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

مشروع لنيل شهادة مؤسسة ناشئة في إطار القرار الوزاري 1275

صورة العلامة التجارية



الاسم التجاري

Algeria SmartPharma

السنة الجامعية

2024 \_ 2025

## بطاقة معلومات:

### حول فريق الاشراف وفريق العمل

#### 1-فريق الاشراف:

فريق الإشراف	
:التخصص إعلام آلي	01:(المشرف الرئيسي) يوكانة إيمان
:التخصص إعلام آلي	01:(المشرف المساعد) كحول العيد
:التخصص إعلام آلي	02:(المشرف المساعد) صولي رشيدة

#### 2-فريق العمل:

الكلية	التخصص	فريق المشروع
كلية العلوم الدقيقة	ذكاء اصطناعي	الطالبة: جناد اسماء
كلية العلوم الدقيقة	ذكاء اصطناعي	الطالبة: خربيش رقية

## 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 المقترن):

- يلعب مجال اكتشاف وتطوير الأدوية دوراً هاماً 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)، انطلاقاً 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.
- يعتبر اكتشاف الأدوية عمليةً معقدةً ومكلفةً وتستغرق وقتاً طويلاً. حيث تشير التحليلات في المجالات الصيدلانية إلى أن طرق التطوير التقليدية لدواء جديد قد تستغرق أكثر من 12 عاماً وتتكلف حوالي 2.6 مليار دولار. ومع ذلك، غالباً ما تكون الأدوية المنتجة غير فعالة، 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 تحدياً غير مسبوق في إيجاد علاجات فعالة، مما جعل التطوير السريع لأدواء محسنة لاكتشاف الأدوية أكثر أهمية من أي وقت مضى. ومع الزيادة السريعة في كمية البيانات الطبية الحيوية اليوم، هناك حاجة ملحة لتوظيف استراتيجيات أكثر تطوراً للاستفادة من هذه الكميات المتزايدة ، ومع الأخذ في الاعتبار هذه الأرقام، هناك تحديات كبيرة لتحسين وتسريع عملية اكتشاف الأدوية بأكملها. في الآونة الأخيرة، يمكن للذكاء الاصطناعي أن يساعد في التخفيف من هذه

التحديات استناداً إلى قدرته على معالجة كميات هائلة من البيانات، مما يمكن أن يعزز 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 أيضاً خدمات تطبيقية. نوفر قسماً علمياً ثرياً يقدم لمحة عامة حول عملية اكتشاف الأدوية التقليدية، بالإضافة إلى عملية اكتشاف الأدوية باستخدام الذكاء الاصطناعي، ومقادمة عن مختلف التمثيلات الجزيئية. كما توفر تجربة فريدة ومتقدمة 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. وأخيراً 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 نهجاً ذكياً في اكتشاف الأدوية، مصمم خصيصاً للسوق الدوائي الجزائري. تُبرز كلمة "Smart" دمنا للذكاء الاصطناعي والتقنيات المتقدمة، لا سيما في مجال التنبؤ بالخصائص الجزيئية لتسريع وتحسين دقة تحديد الأدوية المرشحة الواعدة. يرتبط مصطلح "Pharma"، المشتق من الكلمة "Pharmaceutical"، ارتباطاً مباشراً بمهمنا 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 مستقبلاً ذكيًا متجرًا في الابتكار الجزائري.

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

يُوحِي اللون الأزرق بالثقة والأمان، وهي صفات أساسية في الطب. كما يرتبط بالنظافة والدقة والبيئات السريرية. وبالإضافة فإن للأزرق تأثير مُهدي، 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 مرجعاً رئيسياً 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 محلياً، 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، مما يسهم في تقليل وقت وجهد التجارب المخبرية.
- **القيمة بالحد من المخاطر:** تساعد على تقليل احتمال فشل المركبات في المراحل المقدمة من تطوير الدواء عبر التنبؤ المبكر بخصائصها السمية أو الامتصاص... إلخ، بالإضافة إلى تقليل الاعتماد على التجارب الحيوانية.
- **القيمة بسهولة الاستخدام:** عبر منصة متكاملة وسهلة 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:

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

### 4. أهداف المشروع:

- توفير حل مبتكر متمثل في منصة رقمية تساعده 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 :

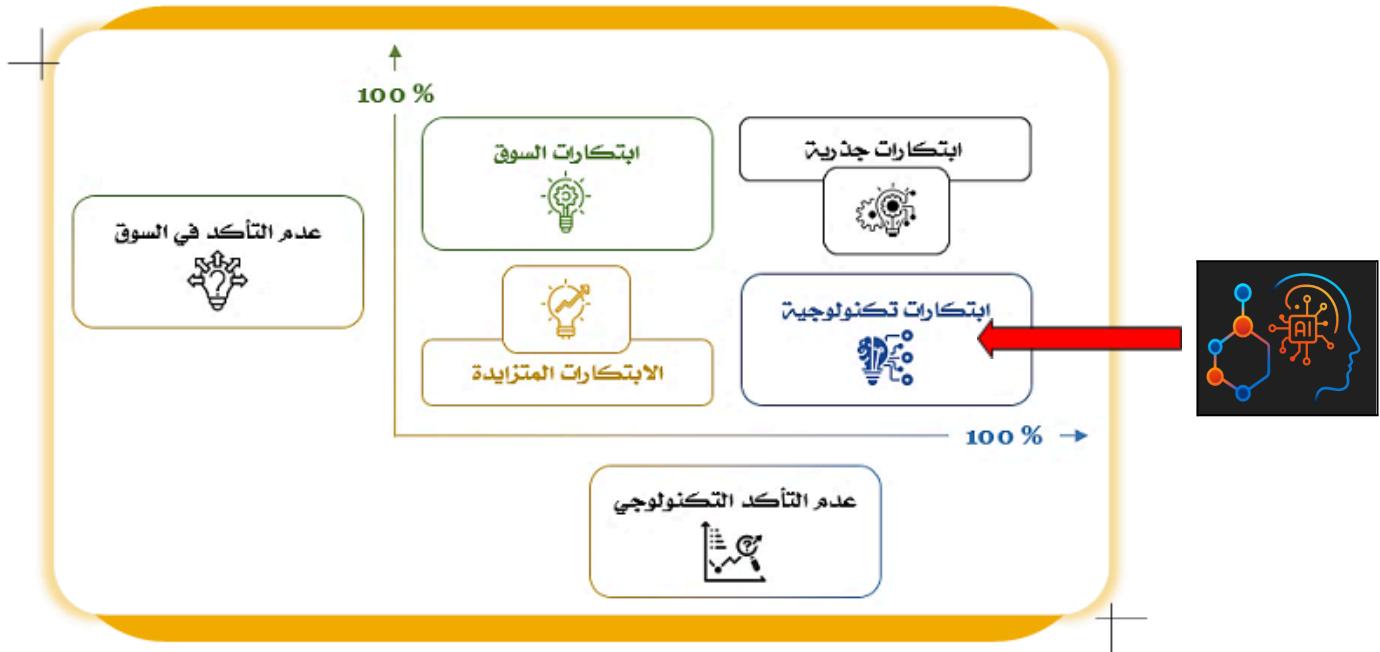
الأشهر												الأعمال	
11	10	9	8	7	6	5	4	3	2	1			
								(✓)	(✓)		الدراسات الأولية	1	
								(✓)			البحث والتعاون مع خبراء في المجال الكيمياء وصناعة الأدوية للحصول على الخبرة	2	
							(✓)				تجهيز مقر الشركة	3	
						(✓)					اقتناء المعدات والأجهزة	4	
					(✓)						تركيب الأجهزة	5	
				(✓)			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

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

## المحور الثاني: الجوانب الابتكارية

## ١. طبيعة الابتكارات:

يمكن تصنيف مشروعنا من ناحية طبيعة الابتكارات كما توضحه الصورة:



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

- يُصنّف مشروعنا 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، غالباً ما تكون غير متوافقة أو غير ملائمة مع خصوصيات البيئة المحلية، يقدم مشروعنا حلًا مطورًا بالكامل داخل الجزائر، ما يمنحه قيمة مضافة حقيقة وميزة تنافسية واضحة. لا تقتصر أهمية المشروع على جانبه التقني، بل تمتد إلى قدرته على إحداث تأثير نوعي في القطاعين الصيدلاني والبحري، من خلال تسريع عمليات اكتشاف الأدوية أو إعادة توظيفها، بالإضافة على أساليب علمية دقيقة وسريعة تلبى 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 سلسة وسهلة الاستخدام، مع إمكانية عرض الجزيئات بأكثر من شكل (2D، 3D، SELFIES)، ما يسهل على الباحثين تحليل الجزيئات بشكل شامل.
- **الأتمتة والتكامل:** أتمتة التنبؤ بخصائص المركبات كديل 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 بال المجال مباشرةً من المنصة.
- **ثورة في مجال الأدوية:** المنصة تمثل نقلة نوعية في مجال اكتشاف الأدوية عبر تقديم أدوات ذكية ومبكرة مما يساهم في تسريع الابتكار، وتقليل التكاليف، وتحسين جودة الرعاية الصحية.

## المotor 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 التوسيع. وتشمل:

◦ **صيدليات المستشفيات:** تستفيد الصيدليات التابعة للمستشفيات من أداة الذكاء الاصطناعي لتقدير 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 الفعلية، والقدرة على الدفع، والانخراط المباشر في عمليات البحث وتطوير الأدوية. وتشمل:

◦ **شركات الأدوية:** تعتبر الفئة الأساسية المستهدفة، مثل شركة SAIDAL و Biopharm، حيث تسعى إلى تقليل التكاليف والوقت اللازم لتطوير الأدوية. تساعدهم أداة الذكاء الاصطناعي في تصفية آلاف المركبات الكيميائية و اختيار 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.

٥ 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 ٣.

#### • أسباب اختيار هذه الفئة المستهدفة:

٥ كلا الفتئين شركات الأدوية ومراكز البحث في البيوتكنولوجيا تسعين لتقليل الوقت والتكلفة المرتبطين بتطوير الأدوية، خاصة في المراحل المبكرة التي تتطلب تحليل كميات ضخمة من المركبات.

٥ تضم بباحثين مؤهلين ومخبرات متقدمة تجعلها قادرة على استيعاب وتطبيق أدوات الذكاء الاصطناعي بسهولة وفعالية.

٥ الحاجة لأدوات دقيقة وسريعة نقل من معدل فشل الأدوية في المراحل المتقدمة من التطوير.

٥ 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:

٥ نعم، هناك إمكانية للتعاون مع شركات الأدوية مخبر البحث العلمي والمركز البيوتكنولوجي، حيث تم التوأصل هاتفيًا وارسال طلب للتعاون مع شركة SAIDAL و في انتظار الرد، و هو الأمر كذلك مع المدرسة الوطنية المتعددة التقنيات ENSP تم التوأصل 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 يمنحك 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 كنقطة نوعية في السوق المحلي.

**تهديد دخول منافسين جدد:** متوسط إلى مرتفع، يتطلب دخول السوق معرفة تقنية متقدمة وتمويلًا 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

بسريعة، وعقد شراكات مع جامعات ومؤسسات صحية لثبيت مكانة المشروع.

### 3. الاستراتيجيات التسويقية:

#### • تحليل (SWOT)

نقاط القوة (Strengths)	نقاط الضعف (Weakness)
- استخدام تقنيات الذكاء الاصطناعي المتقدمة والتعلم العميق في التنبؤ بالخصائص الجزيئية ADMET.	- الحاجة المستمرة لتحديث المنصة تكنولوجياً لمواكبة التطورات العلمية.
- القدرة على توفير نتائج دقيقة وسريعة مقارنة بالطرق التقليدية.	- قد يواجه المشروع كونه مؤسسة ناشئة بعض القيود في التسويق و التوسيع.
- تطوير منصة رفيعة سهولة الاستخدام تشرح عملية اكتشاف الأدوية التقليدية والحديثة باستخدام الذكاء الاصطناعي، وتتوفر مقالات علمية متخصصة في مجال اكتشاف الأدوية بالذكاء الاصطناعي.	- قلة الوعي و تبني التكنولوجيا من قبل بعض المستخدمين ما يحتاج إلى وقت لتوسيعية الفئات المستهدفة.
- دعم من شركاء أكاديميين ومراكز بحثية متخصصة.	- اعتماد كبير على جودة وكمية البيانات المتوفرة لتدريب النموذج.
- تخصيص المنصة لاحتياجات فئات مختلفة (شركات أدوية، باحثين، جامعات).	- تكلفة تطوير وصيانة الأداة عالية نسبياً.
- تقليل تكاليف اكتشاف الأدوية بالطرق التقليدية.	

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

• **المزيج التسويقي:**

**1. المنتج :Product**

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

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

## خدمات ما بعد البيع

- **الدعم الفني و الصيانة:** توفير دعم فني متواصل على مدار الساعة لمساعدة المستخدمين في حل أي مشكلة تقنية أو الاستفسارات المتعلقة بالمنصة.
- **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.
- **التدريب والتوجيه:** تقديم دورات تدريبية وورش عمل افتراضية للمستخدمين الجدد لتسهيل استخدام المنصة والاستفادة القصوى منها.

## 2. السعر :Price

- **الاشتراك الشهري أو السنوي:** خطط اشتراك مرنة (شهريه وسنوية) 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، كالمخابرات 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 الإنترن特 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 وتقديم 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 تلقائياً.

- عرض النتائج (مثل خصائص ADMET المتوقعة) بشكل واضح ومنظّم.

- 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 وسريرتهم.

## 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:** نظراً 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 مثلًا تحتاج إلى أدوات تساعدها في تقليل الوقت والجهد والمال في عملياتها، بينما يهتم الباحثون بالدقة العلمية والتحليل المتقدم، وتحث الجامعات عن أدوات تعليمية مناسبة لطلابها وأساتذتها. إن اعتماد هذه الاستراتيجية يمكن 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. تميز الأداة نفسها من خلال دقتها العالية، وسرعة التحليل، وواجهة الاستخدام المبسطة، ما يجعلها تقدم قيمة مضافة يصعب تقليلها في السوق. هذا التميز العلمي والتكنولوجي يمنح المشروع قدرة تنافسية قوية، ويجعله جذاباً للباحثين وشركات الأدوية على حد سواء.

## المotor الرابع: خطة الإنتاج والتنظيم

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



### • لوازم الإنتاج:

- **المواد الأولية:** ممثلة في البيانات (قواعد بيانات ADMET مفتوحة TDC، البيانات الجزيئية) و البرمجيات اللازمة للتطوير (لغات البرمجة (Rdkit، Python
- **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 .(SMILES أو SELFIES

- 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 ،

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 الإختبار

- 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، ADMET، لمصادر بيانات، مع اختيار موردين موثوقين للمعدات الإلكترونية والبرمجية، التركيز على الجودة العالية والتكلفة المعقولة.
- **سياسة الدفع والاستلام:** الدفع الإلكتروني عند استخدام تراخيص برمجية والاستلام يتم بشكل فوري (البيانات أو الأدوات تكون رقمية)، وفي 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 وضمان 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 حقيقة.
- **الجامعات والمؤسسات الأكademية:** لتوفير المعرفة العلمية.

## المحور الخامس: الخطة المالية

1. التكاليف والأعباء : تمثل التكاليف الإجمالية للمشروع في التكاليف الاستثمارية والتكاليف التشغيلية:
- التكاليف الاستثمارية:

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

• التكاليف التشغيلية:

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

• 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 ثالثي 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 = 1,494,750 + 283,350 + 1,211,400 دينار جزائري.

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

• **كيفية استرداد الأموال:** سيتم استرداد رأس المال الأولي المستثمر في المشروع، والمقدر بـ 1,494,750 دج، من خلال الإيرادات المحققة من تقديم الخدمة الأساسية للمشروع. وفقاً للتوقعات المالية الموضوعة، يُتوقع أن تبدأ عملية استرداد هذا الاستثمار تدريجياً خلال السنوات الأولى، حيث يتم تغطية التكاليف أولاً، ثم استرجاع رأس المال، لتحول 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 نمواً سريعاً 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	-	2,400,0 00 DA	3,000,0 00 DA	7,200,0 00DA	15,600, 000 DA	28,800 ,000 DA
CHIFFRE D'AFFAIR ES GLOBAL	-	2,400,0 00 DA	3,000,0 00 DA	7,200,0 00 DA	15,600, 000 DA	28,800 ,000 DA

- **النّظرة التّشاؤمّية:** نفترض وتيرة نمو أبطأ للعملاء وثباتًا نسبيًا في الأسعار بسبب صعوبات في التوسيع أو ضعف الإقبال في المراحل الأولى.

	RÉALISATION			PRÉVISION		
	Service A destiné Client	N	N+1	N+2	N +3	N+4
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	-	1,200,0 00 DA	1,440,0 00 DA	1,800,0 00DA	3,600,0 00 DA	5,400, 000 DA
CHIFFRE D'AFFAIR ES GLOBAL	-	1,200,0 00 DA	1,440,0 00 DA	1,800,0 00 DA	3,600,0 00 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 ars	Fè v	Janv	مصاريف التشغيل
240,00 0	//	//	//	//	//	//	//	//	//	//	//	20,00 0	الكراء
2,760, 000	//	//	//	//	//	//	//	//	//	//	//	230,0 00	أجر العمال الإجمالي
4500	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	4500	اشتراك خدمات الاستضافة (اشتراك سنوياً)
46,200	//	//	//	//	//	//	//	//	//	//	//	3850	اشتراك الأنترنت والهاتف
300,00 0	//	//	//	//	//	//	//	//	//	//	//	25,00 0	الكهرباء والماء
3,350, 700	//	//	//	//	//	//	//	//	//	//	27 8,8 50	283,3 50	المجموع

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

ندرك تماماً 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 محلياً.

هذه الخسارة ناتجة بشكل رئيسي عن الأعباء التشغيلية المرتفعة خلال مرحلة الإطلاق، خصوصاً التكاليف المتعلقة بأجور فريق العمل، الكراء، الكهرباء، والاشتراكات الرقمية.

بالرغم من هذه الخسارة الأولية، فإننا نتوقع تحولاً إيجابياً بدءاً من السنوات الأولى المقبلة، اعتماداً على:

- اكتمال تطوير المنصة وجاهزيتها التجارية.
- انخفاض ملحوظ في المصاريف الثابتة بعد تجاوز مرحلة التأسيس.
- خطط التوسيع التدريجي داخل السوق المحلي، مع إمكانيات التصدير الرقمي لاحقاً.
- زيادة ثقة السوق في الأداة مما يساعده في ارتفاع حجم المبيعات والتعاقدات.

بالتالي، نؤمن أن مشروعنا قادر على تجاوز نقطة التعادل في السنوات الأولى وتحقيق أرباح تدريجية، مدعوماً بقيمة مضافة حقيقة نقدمها للسوق الجزائري في مجال الرعاية الصحية الرقمية.

## المحور السادس: النموذج الأولي التجريبي

### • الصفحة الرئيسية:



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.

### • صفحة خاصة بالتحويلات الجزيئية:

**Molecular Representation**

Molecular representation refers to the ways that transform complex molecular structures into formats that are easier to interpret, store, and process. It is a fundamental concept in chemistry, drug discovery, and related fields. We give a common representation of an interactive molecule, allowing for direct and efficient input in multiple representations.

[explore this part](#)

**Case of input is : SMILES string**

**Case of input is : molecule name**

## • صفحة خاصة بالتنبؤ بالخصائص الجزيئية:

## • صفحة خاصة بواجهة المستخدم:

## • صفحة خاصة بدراسة الحالة لفيروس ماربورغ:



**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 non-human primates.



**Causes**

Marburg virus is transmitted from "fruit bats (Ebavestus aegyptiaca)" to humans and spreads between people through "direct contact" with bodily fluids (blood, saliva, urine, semen, breast milk), 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**

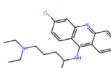
Quinacrine

Quinacrine properties after cellular pH. Lysosomal properties after cellular pH. Lysosomotropic properties after cellular pH.

**Predict ADMET Properties**

Predicting ADMET properties for Quinacrine

**Molecule Depiction**



**Molecule Properties**

Property	Model Name	Predicted Value	Unit
Absorption	DeepQ-2D	-1.714	Numeric
Absorption	lipophilicity_aevarineca	2.189	Numeric
Absorption	lipophilicity_aevarineca	4.108	Numeric
Absorption	logP_hh	Yes	Categorical (Yes/No)
Absorption	logP_brockhoff	Yes	Categorical (Yes/No)
Absorption	bioavailability_ma	Yes	Categorical (Yes/No)
Distribution	bioavailability_ma	0.000	Numeric
Distribution	volu_kamberski	3.862	Numeric
Distribution	volu_kamberski	3.862	Numeric
Excretion	bioavailability_ma	Yes	Categorical (Yes/No)
Excretion	clearance_baileyse_ar	1.249	Numeric
Excretion	clearance_baileyse_ar	2.359	Numeric
Excretion	clearance_micromerse_ar	2.228	Numeric
Excretion	info_ar	2.545	Numeric

**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 bound drug efficacy.

✓ Neutral dissociation constant (0.5-3  $\mu$ M) ideal for systemic exposure.

✓ Short half-life ( $\tau_{1/2}$ ) may require frequent administration.

✓ Low hepatic clearance (< 10  $\mu$ l/min/ $10^6$  cells), supports systemic exposure.

✓ High metabolic stability (low microsomal clearance).

✗ High acute toxicity (LD50 < 200 mg/kg).

✓ High water solubility (> 100 mg/ml) 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).

✓ Acceptable number of H-bond donors (< 5).

✓ Acceptable number of H-bond acceptors (< 10).

✓ Acceptable number of rotatable bonds (< 10).

**Contact Us**

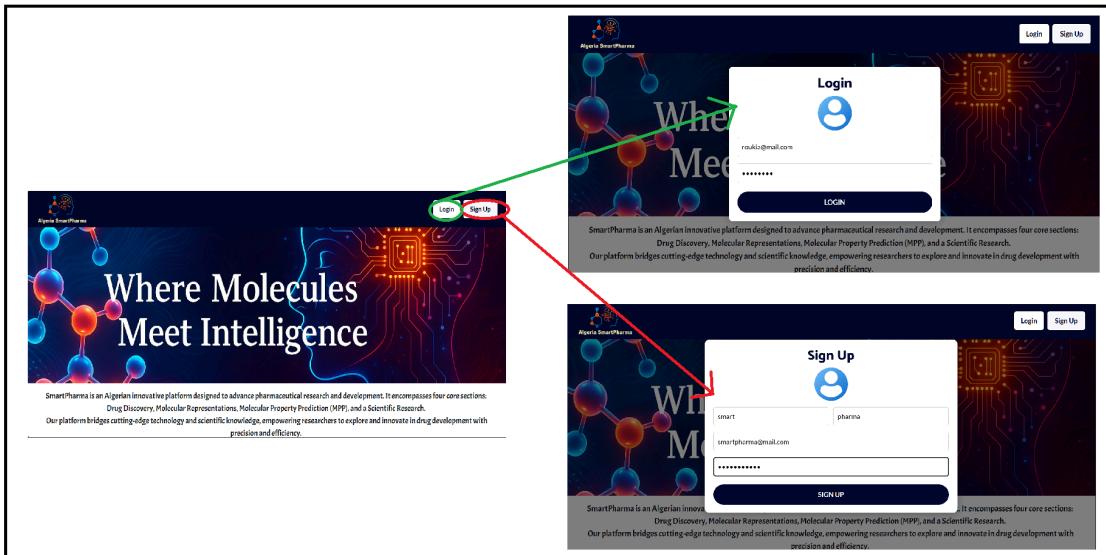
contact@algeriasmartpharma.com

**About Us**

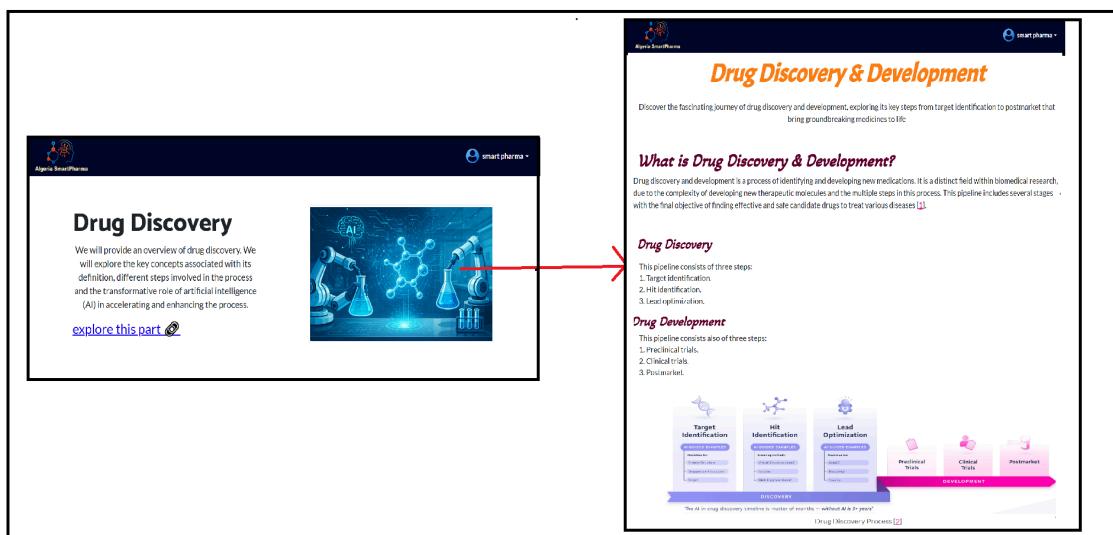
We use AI to accelerate drug discovery by predicting molecular properties, transforming how treatments are developed and delivered.

© Copyright 2025 SmartPharma – Made in Algeria dz

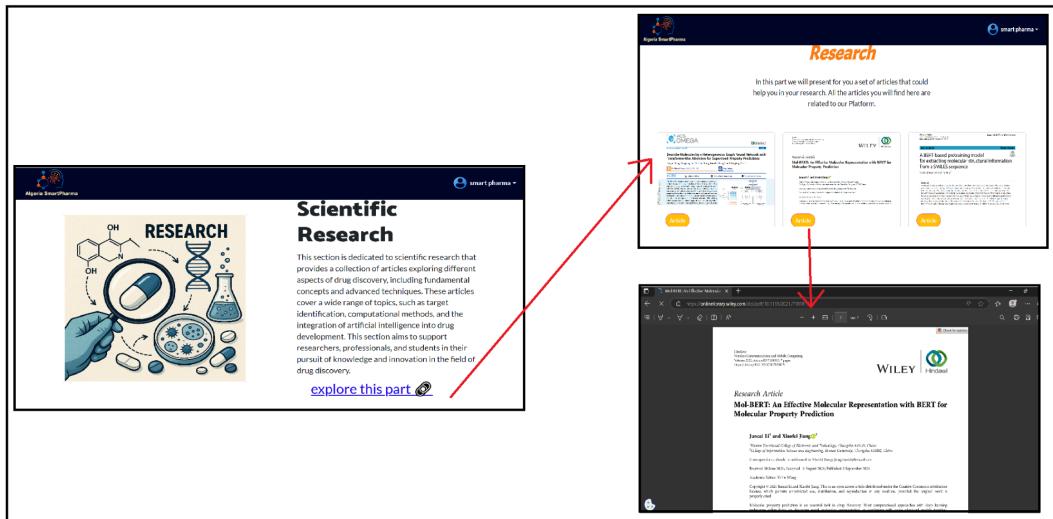
## • إنشاء حساب و تسجيل الدخول:



## • 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

الشراكات الرئيسية	الأنشطة الرئيسية	القيم المقترحة	العلاقات مع العملاء	شرح العملاء
<p><b>شركات الأدوية:</b> للحصول على البيانات واختبار الأدواء في بيئة طبية حقيقة الجامعات والمؤسسات الأكاديمية: لتوفير المعرفة العلمية</p>	<p><b>الأنشطة الرئيسية</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- البحث وتطوير نماذج الذكاء الاصطناعي</li> <li>- جمع ومعالجة بيانات SMILES و ADMET</li> <li>- تدريب النماذج واختبارها</li> <li>- تطوير المنصة وربط النموذج بها</li> </ul> <p><b>الموارد الرئيسية</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- البرمجيات التي تدعم استعمال وتطوير نماذج الذكاء الاصطناعي (خوادم GPU)</li> <li>- بيانات ADMET و SMILES</li> <li>- البرمجيات التي تدعم معالجة البيانات، فريق بحث وتطوير (ذكاء اصطناعي، كيمياء، برمجة)</li> <li>- أدوات تطوير البرمجيات</li> </ul>	<p><b>القيم المقترحة</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- <b>القيمة المبتكرة:</b> أول أداة جزائرية تستخدم الذكاء الاصطناعي لاكتشاف الأدوية، مما يسرّع التطوير ويقلل التكاليف</li> <li>- <b>القيمة بالأداء العالي:</b> توفر دقة وسرعة في التنبؤ بخصائص ADMET، مما يقلل وقت وجهد التجارب المخبرية</li> <li>- <b>القيمة بالحد من المخاطر:</b> تقلل من فشل الأدوية بالتبؤ المبكر بخصائصها السمية والدوائية، وتحد من الاعتماد على التجارب الحيوانية</li> <li>- <b>القيمة بسهولة الاستخدام:</b> منصة تفاعلية سهلة الاستخدام لا تتطلب مهارات برمجية</li> <li>- <b>القيمة بالخدمة الشاملة:</b> توفر دعم فني، تحديثات مستمرة،</li> </ul>	<p><b>العلاقات مع العملاء</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- منصة برمجية سهلة الاستخدام (ذاتية الخدمة)</li> <li>- دعم العملاء عبر الإنترن特</li> <li>- ندوات تدريبية وورش عمل</li> </ul> <p><b>القوفات</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- مبيعات مباشرة</li> <li>- منصات البحث العلمي (مثل ResearchGate)</li> <li>- شراكات مع شركات الأدوية و الجامعات والمؤسسات الأكاديمية</li> <li>- المؤتمرات و المعارض العلمية</li> <li>- الإنترن特 والمنصات الرقمية</li> </ul>	<p><b>شركات الأدوية (SAIDAL)</b> <b>صيدال، Biopharm (بيوفارم)</b> <b>مراكز البحث في البيوتكنولوجيا (المركز الوطني للبحث في البيوتكنولوجيا (CRBT</b> <b>الجامعات والمؤسسات الأكاديمية (مختبر المدرسة الوطنية المتعددة التقنيات، ENSP، مختبر قسم الهندسة الصيدلانية بجامعة قسنطينة (3)</b></p>

		<p>وتكمel مع أنظمة المستشفيات والمختبرات الخ...</p>		<p>صيدليات المستشفيات (الصيدلية المركزية لمستشفى مصطفى بasha الجامعي) -الهيئات التنظيمية ( الوكالة الوطنية للم المنتجات الصيدلانية (ANPP</p>
<p><b>هيكل التكاليف</b></p>		<p>- تكاليف البحث و التطوير - البنية التحتية (خوادم، أنظمة، أدوات) - دعم العمالء والصيانة - رواتب فرق العمل - نفقات التسويق والمشاركة في المؤتمرات - تطوير وتحسين المنصة بشكل مستمر</p>		<p><b>مصدر الايرادات</b></p> <p>-الخدمات الاستشارية -الاشتراكات المدفوعة - تراخيص استخدام نماذج الذكاء الاصطناعي - الإعلانات والتسويق الرقمي - خدمات التدريب</p>