ورقة بحثية مجلة مفتوحة الوصول

تطبيق الذكاء الاصطناعي AI في التنبؤ بالتفاعلات بين المواد الدوائية الفعالة والسواغات

الأستاذ المساعد الدكتورة كنده درويش*، لين محمد رائد ناصرالدين**

*(كلية الصيدلة، جامعة المنارة، البريد الإلكتروني: (kinda.darwish@manara.edu.sy)

**(كلية الصيدلة، جامعة المنارة، البريد الإلكتروني : (naceraldeenleen@gmail.com)

الملخص :

تُعد التفاعلات بين المواد الدوائية الفعالة (APIs) والسواغات (Excipients) من القضايا المحورية في تطوير وصناعة المستحضرات الصيدلانية، نظرًا لتأثيرها المباشر على الثباتية والفعالية الدوائية. أظهرت الدراسة أن الطرق التقليدية مثل DSC و FTIRو XRPD تُستخدم للكشف عن هذه التفاعلات، لكنها تعجز عن التنبؤ المسبق، مما يحد من فعاليتها ويزيد من تكاليف وزمن التطوير. في المقابل، أثبت الذكاء الاصطناعي قدرته على التنبؤ بدقة عالية تراوحت بين 91–97% باستخدام خوارزميات مثل SVM والشبكات العصبية العميقة، كما تم التحقق من صحة هذه التنبؤات تجريبيًا في حالات مثل الباراسيتامول مع الفانيلين والميثيل بارابين. خلص البحث إلى أن دمج الذكاء الاصطناعي مع الطرق التقليدية يوفر مقاربة مزدوجة تعزز من كفاءة تطوير الأدوية وتزيد من سلامتها، مع التأكيد على ضرورة تطوير قواعد بيانات متخصصة واعتماد الذكاء الاصطناعي التفسيري لتعزيز ثقة الباحثين.

الكلمات المفتاحية: التفاعلات الدوائية، السواغات، الذكاء الاصطناعي، الثباتية الدوائية

Abstract**:**

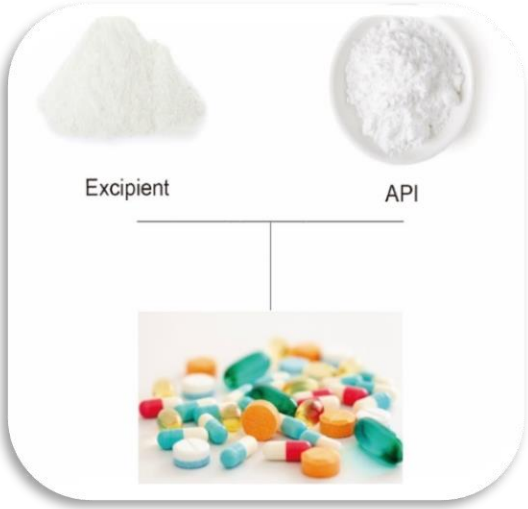
Interactions between Active Pharmaceutical Ingredients (APIs) and excipients represent a critical challenge in drug development and formulation, as they directly affect stability and therapeutic efficacy. Traditional methods such as DSC, FTIR, and XRPD are widely used to detect these interactions; however, they lack predictive power, resulting in higher costs and longer development timelines. In contrast, Artificial Intelligence (AI) has demonstrated high predictive accuracy, ranging from 91% to 97% with algorithms such as SVM and deep neural networks. These predictions were experimentally validated in cases such as paracetamol with vanillin and methylparaben. The study concludes that integrating AI with conventional methods provides a dual approach that enhances drug development efficiency and safety, while highlighting the need for specialized databases and explainable AI to strengthen trust in predictive models.

Keywords: Drug Interactions, Excipients, Artificial Intelligence, Drug Stability.

I. المقدمة

تُعد التفاعلات بين المواد الدوائية الفعالة والسواغات من الموضوعات الأساسية في تطوير المستحضرات الصيدلانية، إذ يمكن أن تؤثر بشكل مباشر على ثباتية المنتج الدوائي، فعاليته وسلامته [1]. إن تصميم صيغة دوائية متوازنة يتطلب فهمًا عميقًا لهذه التفاعلات، خصوصًا أن بعض السواغات قد تؤدي إلى تغيرات في الذوبانية أو معدل الانحلال أو حتى التوافر الحيوي للمادة الفعالة.[2]

لقد بينت الدراسات أن فشل المستحضرات الدوائية في المراحل السريرية غالبًا ما يعود إلى عدم التنبؤ المسبق بحدوث هذه التفاعلات، مما يبرز الحاجة الملحة لاعتماد أدوات تحليلية وتقنية حديثة قادرة على تقييم هذه المخاطر مبكرًا [3]. وفي هذا السياق، يبرز دور الذكاء الاصطناعي كمنهجية مبتكرة للتنبؤ بالتداخلات الدوائية – السواغية قبل انتقال المستحضر إلى المراحل السريرية، بما يختصر الزمن والكلفة ويزيد من فرص نجاح التطوير [4].



الشكل(1) المكوّنات الدوائية الفعالة (API) والسواغات (Excipients) كأساس في تشكيل المستحضرات الصيدلانية

A. تعريف المواد الدوائية الفعالة (APIs) والسواغات (Excipients)

المادة الدوائية الفعالة (API) هي المركب الكيميائي الذي يمتلك خصائص علاجية مسؤولة عن التأثير الدوائي في المستحضر الصيدلاني [5]. أما السواغات (Excipients) فهي مكونات غير فعالة دوائيًا لكنها ضرورية لتشكيل المنتج الدوائي، إذ تؤدي وظائف فيزيائية وكيميائية مثل تحسين الذوبانية، ضبط سرعة الانحلال، تعزيز الثباتية، وتسهيل التصنيع.[6]

B. أنواع السواغات ووظائفها في المستحضرات الصيدلانية

يمكن تصنيف السواغات تبعًا لوظيفتها إلى عدة مجموعات:

1) سواغات رابطة (Binders): تعزز تماسك المساحيق في الأقراص.
2) سواغات مفككة (Disintegrants): تساعد على تفكك القرص بعد تناوله لتسريع انحلال المادة الفعالة.
3) سواغات مزلقة (Lubricants): تقلل الاحتكاك أثناء عملية الكبس.

4) سواغات سطحية :(Surfactants) تحسن الذوبانية والتوزع الحيوي.
5) مواد حافظة :(Preservatives) تمنع نمو الجراثيم والفطور في المستحضرات السائلة.[7]

هذه الوظائف تجعل السواغات جزءًا أساسيًا في تصميم المستحضر، حيث قد تحدد سرعة الامتصاص ودرجة التوافر الحيوي للدواء

C. التفاعلات بين الـ API والسواغات

تنقسم التفاعلات بين المواد الدوائية الفعالة (APIs) والسواغات (Excipients) إلى نوعين رئيسيين :تفاعلات فيزيائية وتفاعلات كيميائية، وكلاهما يمكن أن يؤثر بشكل مباشر على فعالية المستحضر الدوائي وثباتيته.

1) التفاعلات الفيزيائية

تشمل التغيرات في الخواص الميكانيكية أو الشكلية للمستحضر دون حدوث تفاعل كيميائي جوهري. ومن الأمثلة على ذلك:

a) تغير سرعة انحلال الدواء نتيجة ارتباطه بالسواغات المفككة أو المزلقة.
b) انخفاض الذوبانية بسبب تشكل معقدات ضعيفة بين الـ API والسواغ، مما يقلل من التوافر الحيوي.[2]
c) تغير معدل التحرر الدوائي نتيجة تغير البنية البلورية أو التحول بين الأشكال الصلبة (Polymorphism) تحت تأثير بعض السواغات.[5]

2) التفاعلات الكيميائية

تنطوي على حدوث تغيرات في البنية الجزيئية للدواء بفعل السواغات، مما قد يؤدي إلى فقدان الفعالية أو تشكل نواتج ضارة. ومن أبرز الأمثلة:

a) التحلل المائي للـ API عند وجود سواغات رطبة أو ماصة للرطوبة.
b) تفاعلات الأكسدة التي قد يسببها وجود سواغات مؤكسدة أو معادن محفزة.
c) تكوين روابط تساهمية بين الدواء والسواغ(مثل تفاعل الأمينات مع السكريات المختزلة في تفاعلات Maillard) . [5]

إن هذه التفاعلات، سواء الفيزيائية أو الكيميائية، تؤكد على أهمية إجراء دراسات ما قبل الصياغة لتحديد توافقية الـ API مع السواغات المختارة وضمان ثباتية وأمان المنتج النهائي.

3) تأثير هذه التفاعلات على الثبات والفعالية الدوائية

تُعد التفاعلات بين المواد الدوائية الفعالة (APIs) والسواغات (Excipients) من العوامل الجوهرية التي تحدد ثباتية وفعالية المستحضرات الصيدلانية. إذ يمكن لهذه التفاعلات أن تؤدي إلى انخفاض العمر التخزيني للدواء نتيجة تحلل المادة الفعالة أو فقدان بنيتها البلورية المستقرة، مما ينعكس على جودة المنتج النهائي.[3]

من الناحية السريرية، قد ينتج عن هذه التفاعلات انخفاض التوافر الحيوي للدواء نتيجة ضعف الذوبانية أو بطء الانحلال، الأمر الذي يقلل من تركيز الدواء الفعّال في الدم ويؤدي إلى فشل العلاج [3]. على سبيل المثال، التغيرات الفيزيائية مثل التحول بين الأشكال الصلبة (Polymorphism) أو تكوين معقدات ضعيفة قد تقلل من الذوبان، في حين أن التفاعلات الكيميائية مثل الأكسدة أو التحلل المائي قد تسبب فقدانًا مباشرًا للفعالية الدوائية.[4]

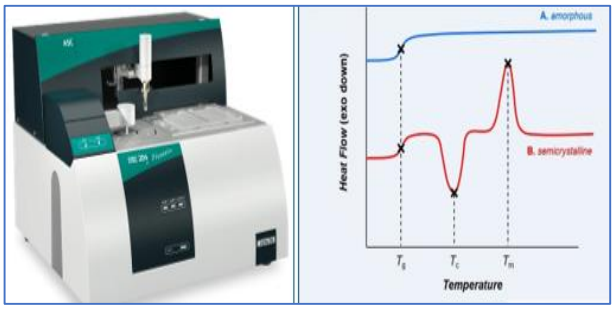
كما يمكن لهذه التفاعلات أن تؤدي إلى تشكل نواتج ثانوية سامة أو مهيجة، ما يؤثر على سلامة المريض ويزيد من احتمالية ظهور آثار جانبية غير مرغوبة [5]. لذلك، فإن فهم هذه التفاعلات والقدرة على التنبؤ بها يمثل خطوة أساسية في مرحلة ما قبل الصياغة لضمان تطوير مستحضرات دوائية آمنة وفعالة ومستقرة.

4) طرق الكشف التقليدية عن التفاعلات

اعتمدت الصناعة الدوائية لعقود طويلة على مجموعة من التقنيات التحليلية التقليدية للكشف عن التفاعلات الممكنة بين المواد الدوائية الفعالة (APIs)والسواغات .(Excipients) ورغم الطفرة الكبيرة في أدوات الذكاء الاصطناعي والنمذجة الحاسوبية، إلا أن هذه الطرق لا تزال تُعتبر المرجع الأولي والذهبي للتحقق من جودة التركيبات الصيدلانية. إذ توفر هذه الأدوات قدرة مباشرة على رصد التغيرات الفيزيائية والكيميائية الناتجة عن عدم التوافق، وتقدّم أدلة عملية على آليات التفاعل بين مكونات المستحضر .[5]

a) المسعر التفاضلي(DSC)

يُستخدم على نطاق واسع لدراسة استقرار المركبات الصيدلانية، حيث يقيس التغيرات الحرارية في العينات مع رفع درجة الحرارة تدريجيًا. إن ظهور قمم جديدة أو اختفاء قمم متوقعة يشير إلى تفاعل فيزيائي أو كيميائي بين الدواء والسواغ.



الشكل(2) .جهاز التحليل الحراري التفاضلي (Differential Scanning Calorimetry – DSC) ومنحنى التدفق الحراري

- مثال: أظهر الأسبرين عند مزجه مع النشاء قمة انصهار منخفضة مقارنة بالأسبرين النقي، مما عُزي إلى تحلل مائي جزئي ناجم عن رطوبة النشاء.
- تفسير: هذا الانخفاض في درجة الانصهار يُعد مؤشرًا مبكرًا على فقدان الثباتية. كما أظهرت دراسة أخرى أن الميتفورمين عند دمجه مع بعض البوليمرات قدّم تغيرات حرارية واضحة في منحنياتDSC ، وهو ما يشير إلى تفاعل محتمل.[5]

b) مطيافية الأشعة تحت الحمراء(FTIR)

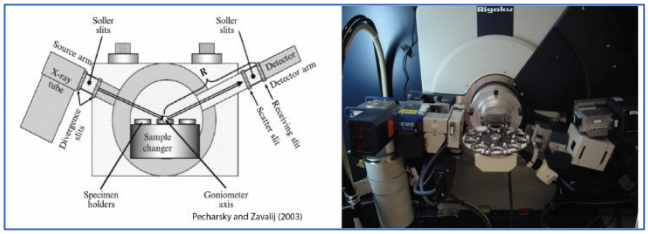
تُستخدم للكشف عن التغيرات في الروابط الكيميائية، مثل روابط C=Oأو O–H، حيث يشير أي تغير في نطاق الامتصاص إلى حدوث تفاعل مثل الأكسدة أو التحلل المائي. وتمتاز هذه التقنية بأنها سريعة ودقيقة في إعطاء "بصمة جزيئية" للمركبات، لكنها قد تواجه صعوبة عند تداخل الإشارات.

- مثال: أظهر الباراسيتامول عند دمجه مع HPMC تغيرًا في قمة مجموعة OH– عند $3300\ cm^{-1}$ ، ما يشير إلى تكوين روابط هيدروجينية جديدة.
- تفسير: هذه الروابط قد تؤثر على سرعة الانحلال والتوافر الحيوي للمستحضر .[6]

الشكل(3) جهاز مطيافية الأشعة تحت الحمراء

c) حيود الأشعة السينية (XRPD)

يستخدم لرصد التغيرات في البنية البلورية للمواد الصيدلانية. أي تحول من الشكل المتبلور إلى غير المتبلور أو العكس يعد مؤشرًا قويًا على حدوث تفاعل. هذه التغيرات قد تؤدي إلى تغيرات في الذوبانية والانحلال. وقد وثّقت أبحاث حديثة أن العديد من حالات فشل الأقراص في الانحلال ارتبطت بتغيرات بلورية تم رصدها عبر XRPD [6].



الشكل 4 جهاز حيود الأشعة السينية على المساحيق (X-Ray Powder Diffraction – XRPD) ومخطط عمله

d) طرق مساندة.

إلى جانب الطرق السابقة، توجد أدوات إضافية مساعدة:

- HPLC للكشف الكمي عن نواتج التحلل الكيميائي.
- TGA لتقدير تأثير الرطوبة عبر مراقبة التغيرات الوزنية.
- دراسات الثبات المسرّع :تحت ظروف حرارة ورطوبة مرتفعة لمحاكاة التخزين طويل الأمد. كما تُستخدم أدوات مثل UV spectroscopyلمراقبة الامتصاص الطيفي الناتج عن التحلل، والتحليل الحراري الوزني للكشف عن فقدان المذيب أو التحلل الحراري.[5]

II. القيود المرتبطة بالطرق التقليدية

على الرغم من دقتها، تواجه هذه التقنيات عدة قيود، من أبرزها: الحاجة إلى كميات كبيرة من العينات، ارتفاع التكلفة نتيجة الاعتماد على أجهزة متقدمة، وصعوبة ربط النتائج المخبرية بالواقع السريري. إضافة إلى ذلك، فإنها بطبيعتها تعتمد على الملاحظة بعد حدوث التفاعل، أي أنها تكشف عن المشكلة لكنها لا تتنبأ بها مسبقًا.[5]

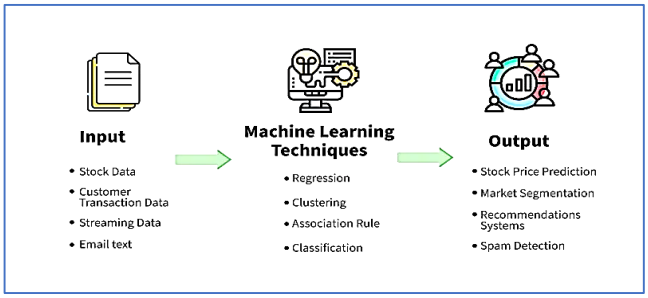
A. حدود الطرق التقليدية في التنبؤ

تعاني الطرق التقليدية من ثلاث مشكلات رئيسية:

1) الاعتماد على التجربة والخطأ :إذ يتطلب اختبار عدد كبير من التركيبات للوصول إلى صيغة مناسبة.
2) التكلفة العالية :نتيجة استخدام معدات متقدمة وكميات كبيرة من المواد الخام.
3) الفجوة مع التطبيق السريري :حيث لا تعكس النتائج المخبرية دائمًا واقع الجسم البشري .[5]

III. الذكاء الاصطناعي في الصناعات الدوائية

أحدث الذكاء الاصطناعي (AI) تحولًا كبيرًا في الصناعة الدوائية بفضل قدرته على تحليل البيانات الضخمة والتنبؤ بالتفاعلات المعقدة بين المواد الدوائية الفعالة والسواغات. وقد أصبح وسيلة استراتيجية لتسريع البحث والتطوير وتحسين اختيار التركيبات الصيدلانية [5].



الشكل(5) آلية عمل تقنيات تعلم الآلة من إدخال البيانات إلى استخراج المخرجات التنبؤية

يُعد تعلم الآلة (ML) أحد أهم فروع الذكاء الاصطناعي، حيث يُستخدم في تصنيف المركبات، التنبؤ بالذوبانية، ومحاكاة الاستقرار. على سبيل المثال، طُورت نماذج قادرة على توقع معدل انحلال المركبات باستخدام خوارزميات مثل Decision Trees و K–Nearest Neighbors [6].

A. من أبرز الخوارزميات الشائعة في النمذجة الصيدلانية:

1) Decision Trees و Random Forest لتحديد العوامل المؤثرة في التفاعلات.
2) SVM للتصنيف بين التركيبات المتوافقة وغير المتوافقة.
3) الشبكات العصبية (DNNs) لمحاكاة العلاقات غير الخطية.

إذ حققت خوارزمية SVM دقة تجاوزت 90% [5]، فيما أظهرت الشبكات العصبية تفوقًا في التنبؤ بالانحلال والاستقرار [6].
امتدت تطبيقات الذكاء الاصطناعي إلى مجالات أخرى مثل اكتشاف الأدوية الجديدة باستخدام النماذج التوليدية، التنبؤ بالسمية قبل التجارب المخبرية [4]، وتحسين التوافر الحيوي والانحلال. كما قدّم نموذج ExPreSo تنبؤًا بوجود تسعة سواغات شائعة بدقة عالية [3].

يمتاز الذكاء الاصطناعي بالسرعة، الدقة، قلة التكلفة، والقدرة التنبؤية، مقارنة بالطرق التقليدية. وقد ساعد على خفض معدلات فشل التركيبات في المراحل المبكرة بنسبة تصل إلى 25% [6].

I. جدول 1 مقارنة بين الطرق التقليدية وتقنيات الذكاء الاصطناعي في الكشف عن التفاعلات API–Excipient

البند	الطرق التقليدية	الذكاء الاصطناعي
الزمن اللازم	عدة أيام إلى أسابيع لتنفيذ تجارب متكررة.	يعالج آلاف التركيبات الافتراضية خلال دقائق أو ساعات.
الدقة	دقة عالية بعد حدوث التفاعل، لكنها محدودة في التنبؤ المسبق.	قدرة تنبؤية >90% عند توافر بيانات جيدة التدريب
التكلفة	أجهزة متقدمة (DSC، FTIR، XRPD) واستهلاك مواد خام.	أقل تكلفة على المدى البعيد لاعتماده على البيانات الرقمية
إمكانية التنبؤ	تكشف النتائج بعد حدوث التفاعل فقط.	تتنبأ استباقيًا بمدى التوافق واحتمالية التفاعل
حجم البيانات	محدود بعدد التجارب المخبرية الممكنة.	قادر على تحليل قواعد بيانات ضخمة مثل PubChem وDrugBank.
القابلية للتطبيق	قد تختلف النتائج المخبرية عن الواقع السريري بسبب اختلاف الظروف.	يمكن مواءمة النماذج مع البيانات السريرية لتعزيز دقة التنبؤ
المرونة	صعوبة التكيّف مع مئات التركيبات المختلفة.	مرن، قابل للتعلم المستمر وإعادة التدريب عند إدخال بيانات جديدة

IV. الإطار التطبيقي للنموذج التنبؤي

يمثل بناء نموذج تنبؤي للتفاعلات بين المواد الدوائية الفعالة (APIs) والسواغات (Excipients) أحد التطبيقات المتقدمة للذكاء الاصطناعي في الصناعات الدوائية. يعتمد هذا النموذج على دمج البيانات الكيميائية والفيزيائية مع خوارزميات تعلم الآلة لاستخلاص أنماط يصعب رصدها بالطرق التقليدية، بهدف التنبؤ بالتوافق والثباتية.[6]

A. مصادر البيانات

تعتمد النماذج التنبؤية على قواعد بيانات مفتوحة مثل PubChem وDrugBank، التي توفر البنية الجزيئية، والخصائص الفيزيائية والكيميائية، ومعلومات عن السواغات. استخدمت إحدى الدراسات هذه القواعد لبناء نموذج أولي للتنبؤ بالتفاعلات.[5]

B. معالجة البيانات

تشمل خطوات أساسية مثل التوحيد لجعل القيم ضمن مقياس واحد، واختيار الخصائص الأكثر ارتباطًا، وترميز البيانات النوعية. أظهرت دراسة أن اختيار 24 متغيرًا فقط من أصل 100 كان كافيًا لتحقيق دقة بلغت 97.[6] %

C. بناء النموذج

تُستخدم عدة خوارزميات منها الانحدار للتنبؤ بالثباتية، التصنيف لتحديد التوافق، التجميع لتصنيف السواغات، والشبكات العصبية العميقة لاكتشاف العلاقات المعقدة. على سبيل المثال، قدّم ExPreSo نموذجًا تصنيفيًا لتوقع وجود تسعة سواغات شائعة بدقة عالية.[3]

D. التدريب والتحقق

تقسم البيانات إلى مجموعة تدريب (70–80%) ومجموعة تحقق (20–30%). أثبتت دراسة أن خوارزمية SVM حققت دقة بلغت 91% عند التحقق المتقاطع.[5]

E. آلية التنبؤ والمخرجات

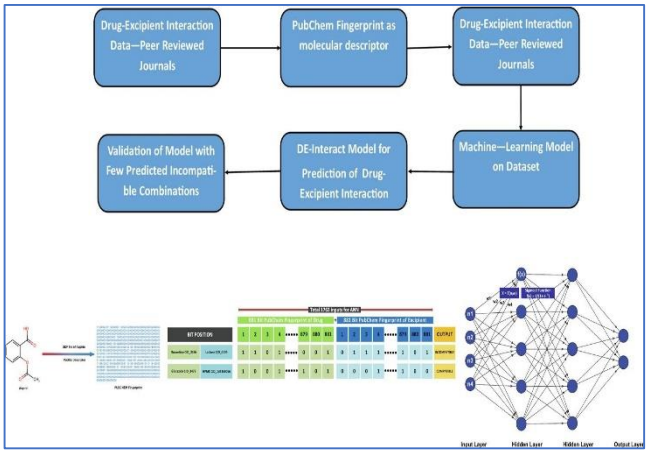
ينتج النموذج مؤشرات مثل :احتمالية حدوث التفاعل، نوع التفاعل (فيزيائي/كيميائي)، تأثيره على الثباتية أو الانحلال، إضافة إلى توصيات عملية. على سبيل المثال، تنبأ نموذج FormulationAIبعدم توافق الباراسيتامول مع ميثيل بارابين، وهو ما تم تأكيده مخبريًا.[4]

II. جدول 2 المراحل الأساسية لبناء النموذج التنبؤي للتفاعلات بين المواد الدوائية الفعالة والسواغات

المرحلة	الخطوة
جمع البيانات	استخراج خصائص API والسواغات من PubChemوDrugBank
معالجة البيانات	التطبيع – اختيار الخصائص – الترميز
بناء النموذج	استخدام الانحدار، التصنيف، التجميع، أو الشبكات العصبية
التدريب والتحقق	تقسيم البيانات – التحقق المتقاطع – حساب الدقة والحساسية والنوعية
المخرجات النهائية	احتمالية التفاعل – نوع التفاعل – التوصيات التطبيقية

V. تحليل النتائج ودراسة الحالات

يمثل تحليل نتائج النماذج التنبؤية خطوة محورية لتقييم دقتها وكفاءتها في التنبؤ بتفاعلات المواد الدوائية الفعالة مع السواغات. إذ لا تُعتبر النتائج ذات قيمة إلا بعد التحقق الإحصائي ومقارنتها بالبيانات المخبرية.[6]



الشكل(6) مخطط عمل نموذج DE-INTERACT للتنبؤ بتفاعلات الدواء–السواغ

A. عرض النتائج الإحصائية للنموذج

أظهرت النماذج التنبؤية دقة عالية:

1) نموذج **SVM** حقق دقة 91% باستخدام بيانات من PubChem و DrugBank [5].
2) نموذج **DNNs** بلغ دقته 97% في التنبؤ بالثباتية والانحلال
3) أداة **ExPreSo** توقعت وجود تسعة سواغات شائعة بدقة متفوقة على التوقعات العشوائية.[3]

كما بينت مقارنة أداء الخوارزميات أن دقة Random Forest وصلت إلى 93%، بينما حققت DNNs أفضل أداء بواقع 97 %

B. مقارنة النتائج مع البيانات الواقعية

أكدت المقارنات العملية موثوقية النماذج:

1) تنبأ FormulationAI بعدم توافق الباراسيتامول مع الميثيل بارابين، وتم التحقق من ذلك عبر FTIR .[4].
2) أظهر DE–INTERACTأن الباراسيتامول مع الفانيلين غير متوافق، وأكد DSC انخفاض قمة الانصهار.[2]

توضح هذه الأمثلة أن النماذج التنبؤية ليست بديلًا مطلقًا للتجارب، لكنها تقلل من عددها وتدعم كفاءتها

C. دراسة حالة: توافق الباراسيتامول مع سواغات شائعة

1) الخلفية والمنهجية

يُستخدم الباراسيتامول على نطاق واسع، لكن تفاعلاته مع بعض السواغات قد تؤثر على الثباتية. استخدمت الدراسة خصائص جزيئية للباراسيتامول وبيانات من PubChem وDrugBank، واعتمدت على نموذج تصنيفي ضمن FormulationAIلتوقع التفاعلات.[4]

2) النتائج والتحقق

- باراسيتامول + فانيلين :توقع النموذج احتمالية عالية لعدم التوافق (85%)، وأكد DSC انخفاض درجة الانصهار.[2]
- باراسيتامول + ميثيل بارابين :توقع احتمالية متوسطة لعدم التوافق (65%)، وأظهر FTIR تغيرًا في قمة OH– عند 3300 cm^{-1} [6].

3) المناقشة

أوضحت الحالة أن الذكاء الاصطناعي يقدم تنبؤات دقيقة قبل التجارب، مما يوفر الوقت والتكلفة. ورغم ذلك، تبقى الطرق التقليدية مثل DSC و FTIRأساسية للتحقق العملي، ما يبرز تكامل الأدوات التنبؤية مع التحليل التجريبي في تطوير التركيبات الصيدلانية الحديثة.

III. جدول 3 نتائج دراسة حالة توافق الباراسيتامول مع سواغات شائعة

الزوج الدوائي	مخرجات النموذج التنبؤي	النتيجة المخبرية
باراسيتامول + فانيلين	احتمالية عالية لعدم التوافق(85%)	DSC:انخفاض واضح في درجة الانصهار ← دليل على تفاعل فيزيائي
باراسيتامول + ميثيل بارابين	احتمالية متوسطة لعدم التوافق(65%)	FTIR:اختفاء/انزياح قمة OH– عند 3300 cm^{-1} ← دليل على تكوين روابط هيدروجينية

4) التحديات والآفاق المستقبلية

رغم التقدم الكبير في استخدام الذكاء الاصطناعي للتنبؤ بالتفاعلات بين المواد الفعالة والسواغات، ما تزال هناك تحديات تحد من تطبيقه الواسع. أبرزها:

a) نقص قواعد البيانات المتخصصة :غياب منصات شاملة يقلل من دقة النماذج، حيث أن 40% من حالات الفشل تعود لمحدودية البيانات.[6]

b) صعوبة تفسير النماذج :اعتماد الشبكات العصبية على آلية "الصندوق الأسود" يقلل الثقة، مما يبرز الحاجة إلى الذكاء الاصطناعي التفسيري.[3]

c) اختلاف الظروف المخبرية والسريرية :بعض التركيبات أثبتت ثباتيتها مخبريًا لكنها فقدت فعاليتها سريريًا.[4]

أما الآفاق المستقبلية فتشمل:

d) دمج الذكاء الاصطناعي مع النمذجة الجزيئية، مما يزيد من دقة التنبؤ بنسبة تصل إلى 15% . [5]

e) تعزيز الطب الدقيق، عبر تصميم تراكيب فردية تتناسب مع الخصائص الجينية والفيزيولوجية للمريض.[6]

f) بناء قواعد بيانات عالمية، مثل مشروع FormulationAI الذي يمثل خطوة مهمة.[4]

g) تطوير الذكاء الاصطناعي التفسيري، لتقديم مخرجات قابلة للتفسير وزيادة ثقة الصناعات

VI. النتائج

1. التفاعلات بين الـ APIs والسواغات تؤثر بشكل مباشر على الثباتية والفعالية.
2. الطرق التقليدية DSC، FTIR، XRPD أساسية لكنها محدودة بقدرتها التنبؤية.[6]
3. الذكاء الاصطناعي يحقق دقة عالية (91–97%) باستخدام خوارزميات مثل SVM و DNNs.[3]
4. التحقق التجريبي (باراسيتامول + فانيلين/ميثيل بارابين) أكد صحة التنبؤات [4].[2]
5. التحديات الرئيسية تشمل نقص قواعد البيانات وصعوبة تفسير النماذج، مما يعزز الحاجة إلى تطوير الذكاء الاصطناعي التفسيري [3].

VII. التوصيات

- بحثيًا :بناء قواعد بيانات واسعة، دمج AI مع النمذجة الجزيئية، وتطوير الذكاء الاصطناعي التفسيري.
- صناعيًا :إدخال النماذج التنبؤية في المراحل المبكرة لتقليل التكاليف، واستخدامها بجانب الطرق التقليدية، وإنشاء منصات لتبادل البيانات بين الشركات.
- تعليميًا وتدريبيًا :إدراج تقنيات الذكاء الاصطناعي في مناهج كليات الصيدلة وتدريب الكوادر على استخدامها وتفسير نتائجها.

المراجع

[1] DE-Interact 2.0 Team. (2025). Enhanced DE-Interact platform using stacked AI models for drug–excipient incompatibility prediction. Journal of Pharmaceutical Innovation.
[2] Dioguardi, F., et al. (2023). DE-INTERACT: A predictive tool for anticipating drug–excipient incompatibilities using machine learning and PubChem fingerprints. Pharmaceutical Research.
[3] ExPreSo Research Group. (2025). ExPreSo: Predicting excipient presence in formulations using advanced AI models. bioRxiv.
[4] FormulationAI Consortium. (2024). FormulationAI: An AI-powered web platform for drug–excipient design and optimization. Briefings in Bioinformatics, 25(1), bbad419.
[5] Nithyanantham, D., et al. (2024). Machine learning approaches for predicting drug–excipient compatibility. International Journal of Pharmaceutics.
[6] Obaidullah, A. J., & Mahdi, W. A. (2025). A predictive machine learning framework for solubility and activity coefficient estimation in pharmaceutical formulations. Scientific Reports, 15, 5512.
[7] Obaidullah, A. J., & Mahdi, W. A. (2025). Improved predictive accuracy of ML models for drug–excipient interactions via ensemble learning and feature selection. Scientific Reports. https://www.nature.com/articles/s41598-025-05535-7