

“快” AI与 “慢” 药筛

——AI+药筛专题报告

行业评级：看好

2023年4月28日

分析师	孙建
邮箱	sunjian@stocke.com.cn
电话	13641894103
证书编号	S1230520080006

1、AI+药物设计再掀热潮，目前仍处于积累训练期

- **为何ChatGPT再掀热潮？** 生成式人工智能是未来重要的AI技术趋势，ChatGPT让人们再次燃起对AI领域的重视。与AlphaFold针对已知蛋白质序列预测蛋白质结构不同，生成式AI模型可以生成全新的蛋白序列或结构。相比于效率提升，AI+医药真正的魅力体现在使不可能发现的靶点及成药机制成为可能，拓展用于药物研发的初始蛋白结构库，创造新的药物方向及增量市场。
- **生物医药已经成为AI最重要的应用场景。** 传统的制药模式中，药物结构设计高度依赖专家经验、新药筛选失败率高、药企的投资回报率不断下降。在人工智能的所有应用中，医疗行业位列首位。据中商产业研究院统计，2020年AI+医疗已占人工智能市场的18.9%。根据艾瑞咨询的数据，2020年中国医疗AI市场规模已达到59亿元，市场规模在2025年有望达385亿元，2020-2025年CAGR达46%。
- **数据、算法推动快速发展，AI成融资寒冬中的火热赛道。** 1966年赛勒斯·利文索尔将计算机模拟与分子图像相结合实现蛋白质和核酸结构可视化，正式标志着计算机辅助药物设计的开始。2022年医药行业的投融资热度下降，但AI制药赛道反而更加火热。根据公开数据统计，2022年全年AI制药赛道相关的融资总事件达144起，YOY 97%，总金额为62.02亿美元（约人民币426.66亿元），YOY 47.67%。且美国AI初创公司吸纳了市场上的绝大部分资金，占总融资额的77%。
- **看AI管线：** 在我们统计的80条国内外AI辅助药物设计管线中：①推进进度，有42条推进到I期，29条推进到II期，我们认为AI药物设计兑现期有望在3-5年后来临。②从靶点选择上，其中52条已公布靶点，25条未公布靶点，而运用人工智能发现新靶点的管线仅3条，这也表明用AI进行药物研发仍起到相对辅助的作用。③从适应症选择上，和传统方法一样，癌症是AI制药企业首选的适应症，其次为遗传性疾病和罕见病。由于2020-2022年疫情对药物的巨大需求，针对COVID-19的药物研发占据了6%。我们认为当前AI+药物设计仍然处于积累训练期。

2、板块主要参与者

当前国内AI制药市场的主要参与者有三类：互联网公司、药企、CRO。在商业模式上主要分为：AI SaaS、AI CRO和AI biotech，即售卖软件、服务和研发药物。

(1) 互联网公司：借助对外投资、打造自有相关平台、提供算力及计算框架服务。我们认为互联网公司做AI+的优势在于①大厂资金优势；②算法和算力优势。但缺点在于对制药专业领域的知识及经验较为匮乏，因此主要集中在新药研发对数据及算力要求较高的环节，到了CMC之后的阶段，算法能够提供的帮助就非常有限了。

(2) CRO：国内外CRO公司纷纷通过自建及合作、投资等方式丰富了自身的AI+服务平台。

AI+“降本”中的本指的是CRO的业绩吗？ ①AI现在只能实现“快”，有效性仍待验证。②CRO是医药板块转型AI+的最优选。

高质量数据是制约AI发展的关键瓶颈。而CRO最大的优势来自于丰富的实验数据，这些数据既包括成功的也包括失败的经验，都将赋能完善数据库。搭建高通量数据生成能力的智能实验室，将成为核心竞争力。但要注意的是CRO的数据或需要相关药企授权。

因此，我们认为AI短期无法替代传统人力为主的CRO，且凭借丰富的数据优势，CRO可能成为AI+领域最大赢家。

(3) 药企：市场上参与AI制药的大型药企仍以资金实力较为雄厚的MNC为主，一般通过自建平台、外部投资并购以及合作的形式展开。截止2022年末全球前十大药企均有AI布局，其中阿斯利康、默克、辉瑞开展的AI项目数位居榜首。国内起步相对较晚，但在2021年进入爆发期。我们认为药企进入AI研发的优势在于①在优势领域具有敏锐研发眼光；②可以建立独有的、不断迭代的数据库；③主动性及系统性强。而缺点在于对算法的理解有限，更倾向于通过自己的经验去优化分子，有路径依赖。

3、A股相关标的及投资建议

我们认为基于对行业发展趋势的敏感性及数据库的丰富度，建议关注向AI布局的CRO企业

- (1) 龙头CXO公司，具有较强的资金优势及数据优势；
- (2) 多技术平台布局的公司具有多角度结合AI搭建模型的优势；
- (3) 已经较早布局AI的公司或具有先发优势。

推荐：药明康德、美迪西、药石科技等；**关注：**成都先导、皓元医药、泓博医药等。

风险提示

- 1、人工智能发展进展不及预期
- 2、商业化拓展不及预期
- 3、下游应用场景的用户认知不及预期
- 4、审评审批流程进展不及预期
- 5、国际形势不确定风险

目录

CONTENTS

01 AI+药物设计再掀热潮

02 板块主要参与者

03 A股相关标的

04 投资建议

05 风险提示

01

AI+药物设计 再掀热潮

为何ChatGPT再掀热潮？

生物医药是AI产业化的重要部分

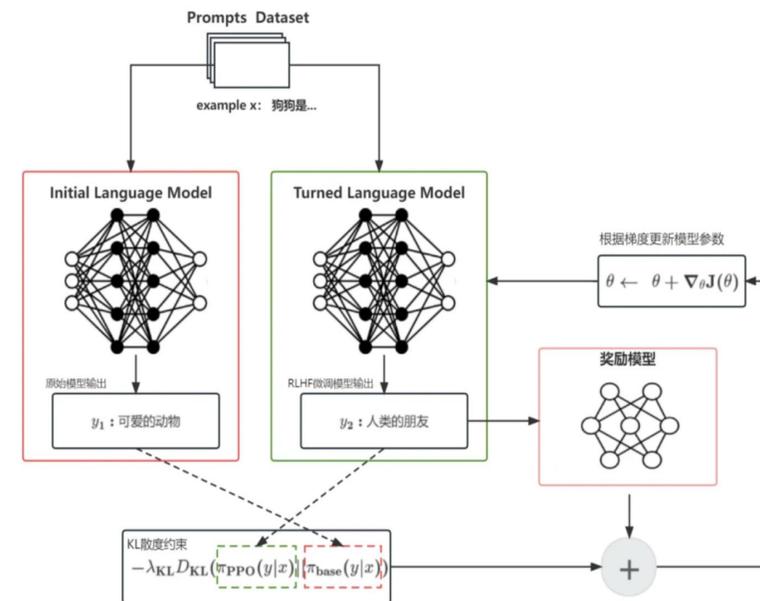
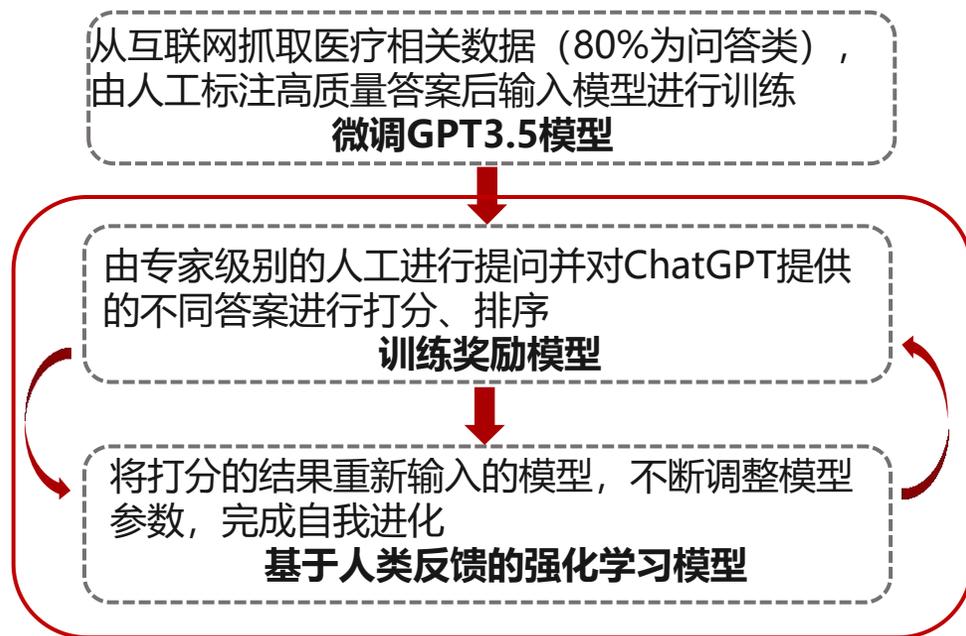
AI成融资寒冬中的火热赛道

**生成式AI：从分析到设计，打开
想象空间**

1.1 为何ChatGPT再掀热潮?

生成式人工智能是未来重要的AI技术趋势。2022年11月，OpenAI发布的ChatGPT让人们再次燃起对AI领域的重视，其也被视为有史以来最好的生成式大规模预训练语言模型。2022年末以来，国内科技巨头们纷纷参与其中。百度、360、阿里巴巴以及华为分别公布了“文心一言”、“360智脑”、“通义千问”、及“盘古大模型”的最新进展。与传统判别式AI相比，生成式AI正在生成新的东西，而不仅仅是分析已经存在的东西。人工智能发展正在从局部探索走向千行百业。据华为中国政企数据中心解决方案总裁常成根据行业测算预测，2026年人工智能的行业渗透率将达到20%，为数字经济注入新动能。

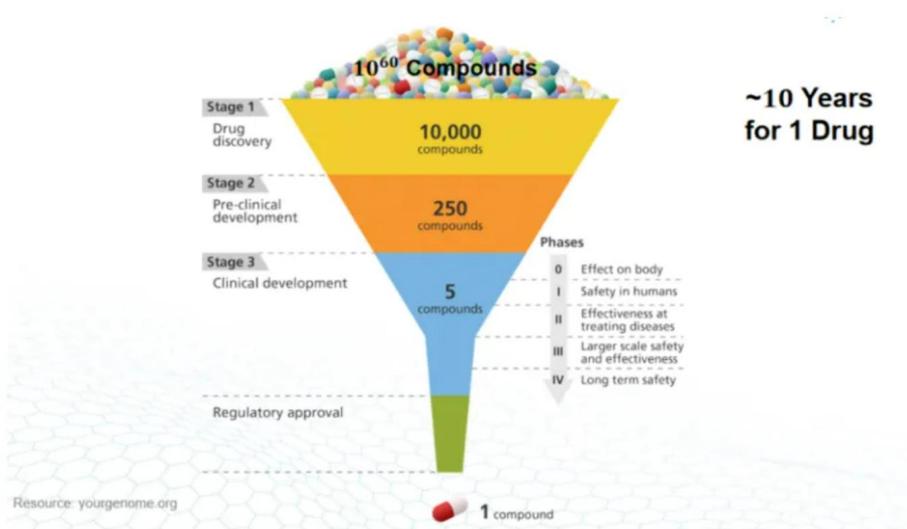
ChatGPT
自然语言处理技术 (NLP)



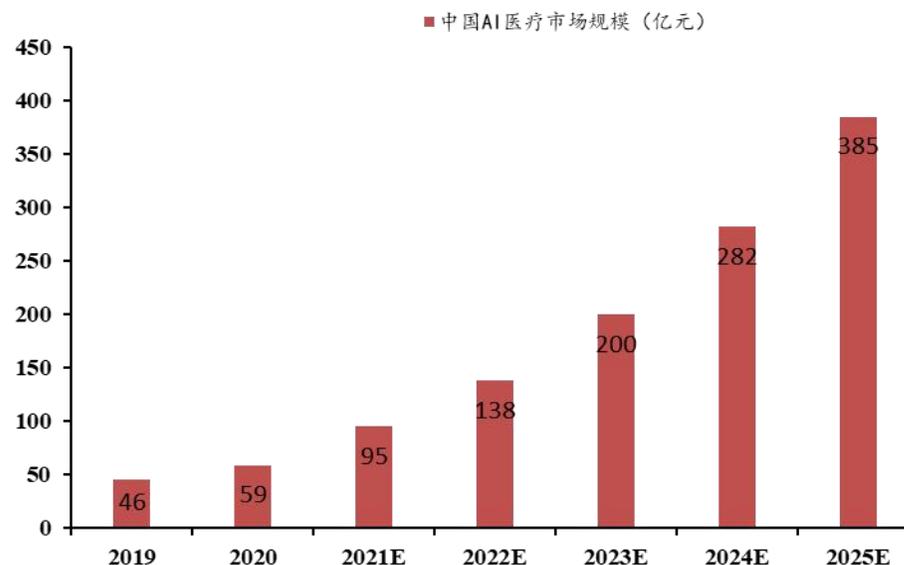
生物医药是AI产业化最重要的部分之一。从需求角度来讲，新药研发通常投入超10亿美元、周期超10年。传统的制药模式中，药物结构设计依赖于专家经验且新药筛选失败率高、药企的投资回报率不断下降。如何通过大数据、人工智能等科学技术加速新药研发进程、平衡研发投入与成果产出之间的关系，成为了医药公司在数字化改革道路上的重点之一。

在人工智能的所有应用中，医疗行业位列首位。据中商产业研究院统计，2020年 AI+医疗已占人工智能市场的18.9%。根据艾瑞咨询的数据，2020年中国医疗AI市场规模已达到59亿元，市场规模在2025年有望达385亿元，2020-2025年CAGR达46%。

药物研发过程中逐渐筛选化合物



2019-2025E中国AI医疗市场规模 (亿元)



制药环节	AI技术类型	应用情况
靶点确认	机器学习、深度学习、大数据	通过机器学习，在蛋白质的原始信息中提取关键特性，从而精准构建模型；通过深度学习，从大量的患者样本及生物医学资料中整理筛选相关的基因组学、蛋白质组学代谢组学等多组学数据，分析疾病与非疾病间差异、或寻找可对疾病产生影响的蛋白质
基于表型的药物发现	机器学习	通过机器学习，直接使用生物系统进行药物筛选，在表型筛选中关联细胞表型和化合物作用方式，从而获得靶点、信号通路或遗传疾病相关聚类
分子生成	机器学习、深度学习、自然语言处理	通过机器学习深度学习中的变分自编码器(VAE)和生成式对抗网络(GAN)及基于自然语言处理的循环神经网络(RNN)，长短期记忆人工神经网络(LSTM)，门控循环单元(GRU)和头Transformer等技术，对海量的化合物及药物分子进行学习，获取成药性及分子结构相关的规律从而生成新的小分子作为候选药物分子，形成高质量、规模性的药物分子化合物库
化学反应设计	机器学习、深度学习	将药物分子结构映射为可通过机器学习算法处理的形式，形成多条合成路线，并推荐最佳合成路线或在给定反应物的前提下通过深度学习预测化学反应结果
化合物筛选	机器学习	通过机器学习中的决策树、支持向量机、深度神经网络、随机森林等算法，及分子对接、自由能微扰等技术，构建化合物化学结构与生物活性之间的关系模型，实现对药物化合物作用机制的快速预测
ADMET性质预测	机器学习、深度学习	通过深度学习，对筛选后的化合物进行药代动力学测试识别，根据得到的相关特征，评估多个ADMET参数间的隐藏的关系和趋势，预测化合物的药性，如代谢性、细胞渗透性和溶解性、毒性等性质

自1956年达茂斯会议提出制造智能机器的科学和工程后，AI逐渐引入到药物研发领域。1966年赛勒斯·利文索尔将计算机模拟与分子图像相结合实现蛋白质和核酸结构可视化，正式标志着计算机辅助药物设计的开始。自此，随着数据和算法的快速推动，AI+药物设计得到快速发展，也引起了资本的重视。2022年医药行业的投融资热度下降，但“投资收缩”的资本总额反而凸显了对AI制药赛道的青睐。根据智药局不完全统计，2022年全年AI制药赛道相关的融资总事件达144起，YOY 97%，总金额为62.02亿美元（约人民币426.66亿元），YOY 47.67%。且美国AI初创公司吸纳了市场上的绝大部分资金，占总融资额的77%。

AI+药筛发展史

1979 Tripos公司成立，它是第一家计算机辅助药物设计的公司，旨在借助对分子相互作用日益深入的认识，通过计算机设计出更好的分子结构。

1990 薛定谔成立。随着计算机和医药行业的发展，更多的软件被开发出来，用于评估分子多样性、构建化合物库、开展基于分子相似性的筛选，以及将大型化合物库与生物靶标自动对接等。

2010 大数据概念兴起，随着生物大数据进入爆发时代，人工智能越来越广泛应用于药物研发。

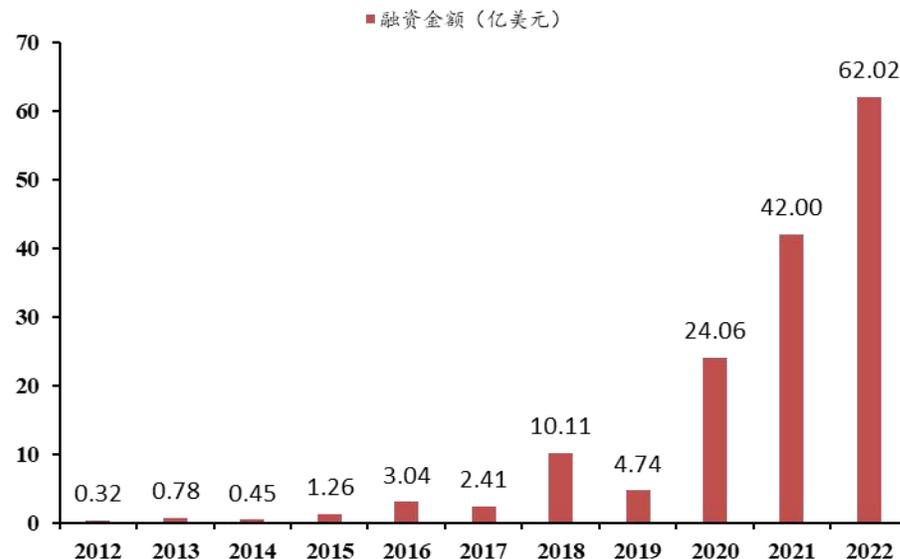
1966赛勒斯·利文索尔报道了将计算机模拟与分子图像相结合的方法，从而实现了蛋白质和核酸结构可视化的研究工作，这也标志着计算机辅助药物设计的开端。

1984计算机性能和分子建模能力已经发展到可以对蛋白质进行模拟，BioDesign公司启动了第一个基于蛋白质模拟的商业项目。

2006 深度学习首次应用于药物研发。

2020 Google旗下DeepMind的AlphaFold发布取得重大突破，解决了困扰科学家50年的生物学难题-蛋白折叠。

2012-2022 AI 制药投融资总额



资料来源：亿欧智库，《2021中国医疗人工智能产业研究报告》，智药局，浙商证券研究所

1.5

截至2022年全球获批的AI药物管线 (1)

公司名称	药物名称	适应症	研发方式	临床阶段
国内公司				
英矽智能	ISM001-005	特发性肺纤维化	自研	I期
未知君	XBI-LBP01	糖尿病	与瑞士Aurealis合作	II期 (欧洲)
	XBI-LBP02	溃疡性结肠炎	自研	I期 (美国)
	XBI-302	急性移植物抗宿主病	自研	I期
冰州石生物	AC0682	乳腺癌 (晚期)	自研	I期
	AC0176	前列腺癌	自研	I期
费米子	FZ002	CNS	自研	国内获批IND
中以海德	HDM-8421034	乙肝	老药新用	I期
德睿智药	MDR-001	肥胖症和二型糖尿病	自研	在美获批IND
新合生物	NeoCura Ag-IND	肿瘤	自研	I期
红云生物	H002-101CN	晚期非小细胞肺癌	自研	I期
药物牧场	DF-006	乙肝/肝病	自研	I期
锐格医药	RGT-075	二型糖尿病和肥胖症	自研	II期
剂泰医药	MTS004	神经退行性疾病	自研	I期
劲风生物	-	癌症	自研	在美获批IND
埃格林医药	EG-301	干性黄斑病变	自研	II期
	EG-501	红斑狼疮认知障碍	自研	II期
	EG-009(A)	COVID-19	自研	II期
	EG-001	罕见病	自研	I期
	EG-007	子宫内膜癌	自研	III期

公司名称	药物名称	适应症	研发方式	临床阶段
宇耀生物	YY001	实体瘤	自研	国内获批IND
海外公司				
AI Therapeutics	LAM-001	肺动脉高压和肺结节病	自研	I期
	AIT-101	ALS	自研	II期
BenevolentAI	BEN-2293	特应性皮炎	自研	I期
C4Xdiscovery	INVD-2000	阿片类药物成瘾	自研, 已授权	I期
	REC-2282	突变脑膜瘤	收购	II期
Recursion Pharmaceuticals	REC-4881	腺瘤	收购	II期
	REC-994	脑海绵状血管畸形	自研	II期
Exscientia	EXS-21546	胰腺癌、肺癌	与Evotec合资开发	I期
Schrodinger	SGR-1505	B细胞淋巴瘤	自研	I期
Erasca	ERAS-007	实体瘤、肠道肿瘤、肺癌、急性髓系白血病	自研	I期
	ERAS-601	晚期实体瘤、肺癌	收购	I期
	Naporafenib	黑色素瘤	收购	II期
Lantern Pharma	ERAS-3490	肿瘤	自研	IND
	LP-100	前列腺癌	自研	II期
Landos Biopharma	LP-300	治疗非小细胞肺癌	买入	II期
	BT-11	溃疡性结肠炎、克罗恩病	自研	III期
	LBP-104	类风湿性关节炎、狼疮	自研	I期
Healx	NX-13	结肠炎	自研	II期
	HLX-0201	罕见病、遗传病	老药新用	II期
Deep genomics	DG12P1	威尔逊病	自研	II期
BioAge	BGE-117	贫血、衰老疾病	自研	II期
	BGE-105	老年肌肉萎缩	合作	I期

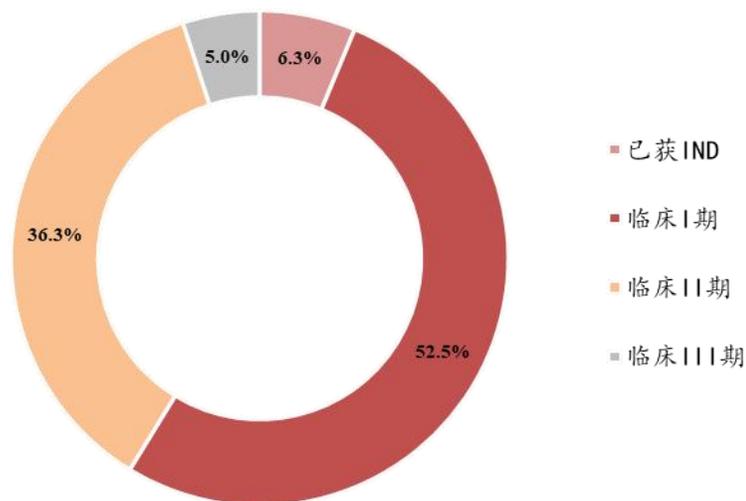
公司名称	药物名称	适应症	研发方式	临床阶段
Relay Therapeutics	RLY-1971	实体瘤	合作	I期
	RLY-4008	胆管癌	自研	I期
	RLY-2608	实体瘤	自研	I期
Pharnext	PXT3003	罕见病	自研	III期
	PXT864	遗传性神经病、ALS	自研	II期
Notable Labs	ND-1000	恶性肿瘤	合作	II期
	NBI-001	AML、肿瘤	收购	II期
Oncocross	OC-201	胰腺癌、肺癌	自研	I期
	OC-514	癌症肌肉减少症	自研	I期
Berg	BPM31510	胰腺癌	自研	II期
		实体瘤、罕见病	自研	I期
	BPM31543	胰腺癌	自研	I期
BioXcel Therapeutics	BXCL501	神经系统疾病	自研	III期
		重度抑郁症	自研	I期
	BXCL701	肿瘤	自研	I期
Evaxion Biotech	EVX-01	黑色素瘤	合作	II期
	EVX-02	肿瘤	自研	I期
	EVX-03	非小细胞肺癌	自研	I期
Gristone Oncology	GRANITE-001	肿瘤、癌症	合作	II期
	CORAL	COVID-19	自研	II期
SOM Biotech	SOM0226	罕见病	外部授权	II期
	SOM3355	罕见病	自研	II期
	SOM1311	罕见病	自研	I期
	SOM0061	COVID-19	合作	I期
	SOM3366	罕见病	自研	I期
Black Diamond	BDTX-1535	非小细胞肺癌	自研	I期

公司名称	药物名称	适应症	研发方式	临床阶段
Pharos iBT	PHI-101-AML	急性髓系白血病	自研	I期
	PHI-101-TNBC	乳腺癌	自研	I期
	PHI-101-OC	卵巢癌	自研	I期
Hepion	CRV431	NASH、COVID-19	合作	II期
Lcosavax	IVX-121	免疫性疾病	合作	I期
	IVX-A12	免疫性疾病	自研	I期
	IVX-411	COVID-19	合作	II期
Verge Genomics	VRG50635	肌萎缩侧索硬化症	自研	I期
Nimbus Therapeutics	NDI-034858	银屑病	已被武田收购	II期
	NDI-101150	实体瘤	自研	II期
Aulos Bioscience	AU-007	实体瘤	自研	II期

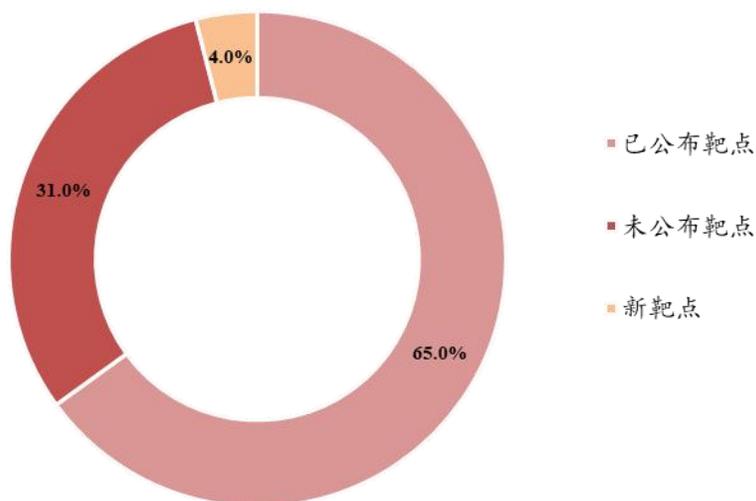
资料来源：CDE及Clinical Trials，浙商证券研究所

我们统计了全球80条获批临床的AI药物管线。从推进进度看，有42条推进到I期，29条推进到II期，4条推进至III期，我们认为AI药物设计兑现期有望在3-5年后来临。从靶点选择上，其中52条已公布靶点，25条未公布靶点，而运用人工智能发现新靶点的管线仅3条，这也表明用AI进行药物研发仍起到相对辅助的作用。从适应症选择上，和传统方法一样，癌症是AI制药企业首选的适应症，其次为遗传性疾病和罕见病。由于2020-2022年疫情对药物的巨大需求，针对COVID-19的药物研发占据了6%。我们认为当前AI+药物设计仍然处于积累训练期。

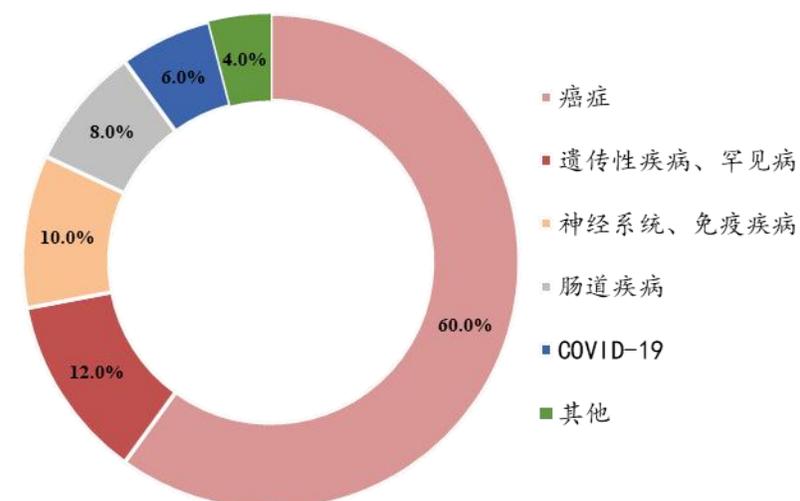
全球AI药物管线临床进展



全球AI药物管线靶点情况



全球AI药物管线适应症



2023年美国癌症研究协会(AACR)大会于4月14日召开。作为最熟关注的癌症研究大会，此次AACR年会吸引了多家AI制药公司的身影，包括Exscientia、Lantern Pharma、Deepcell、Owkin、PathAI、Tempus、Visiopharm、水木生物、英矽智能、百图生科等企业，让我们看到了AI在癌症领域最新的突破。

- **英矽智能**：公司携四款新型抗癌化合物（ISM3091，可口服的USP1选择性小分子抑制剂；ISM3412，选择性MAT2A抑制剂；ISM4312A，新型DGKA抑制剂；ISM6466A，新型共价 CDK12 抑制剂）亮相本届AACR，分别针对不同靶点，具有良好的抗肿瘤活性和安全性。
- **百图生科**：公司提出了一种原子级精确度的抗体结构预测方法—— xTrimABFold++，较 AlphaFold2 提高 30%。此外，公司AI 驱动的用于免疫疗法抗体开发使用的自动化高通量蛋白质生产和表征平台也在此次亮相。
- **Exscientia**：展示了药物及通路的研究成果，进一步验证了Exscientia的平台转化能力。
- **Lantern Pharma**：LP-184 在实体瘤以及成人和儿童中枢神经系统癌症的大量体外和体内临床前模型中的效力。
- **Tempus**：发布了多款数据模型、试验程序的研究成果，包括利用Tempus分子数据跟踪（集成的NGS和EMR数据）和TIME试验程序（将患者快速匹配到Just in TIME 临床试验地点）进行患者识别和预筛选；用机器学习平台整合DNA改变和RNA表达数据测量致癌信号通路的激活状态，并表征可能导致通路失调的新基因改变；使用Visum CytAssist比较空间转录组学数据中的批间相似性和细胞反卷积及使用计算机视觉解决患者衍生模型大规模屏幕治疗反应中的增殖动力学。

- **PathAI**: 提出一种数字替代方案用于非小细胞肺癌 (AIM-PD-L1 NSCLC) 中的 PD-L1的定量测量; 通过机器学习 (ML) 模型量化TME的组织学并输出预测临床相关生物标志物的潜力; 为癌症中的WSI mIF数据开发一个端到端的工作流程分析原始图像到细胞级特征。

2021年7月，DeepMind公司与欧洲生物信息研究所（EMBL-EBI）合作开发的AI系统AlphaFold，荣登Science杂志公布2021年度科学突破榜单榜首。其能够预测出超过100万个物种的2.14亿个蛋白质结构，几乎涵盖了地球上所有已知蛋白质，在制药界引起很大轰动。与AlphaFold针对已知蛋白质序列预测蛋白质结构不同，生成式AI模型可以生成全新的蛋白序列或结构。相比于效率提升，AI+医药真正的魅力体现在使不可能发现的靶点及成药机制成为可能，拓展用于药物研发的初始蛋白结构库，创造新的药物方向及增量市场。

生成式AI+药物筛选应用

ProGen

2023年1月，Salesforce Research、Tierra Biosciences 和加州大学的研究团队开发出ProGen蛋白质工程深度学习语言模型。模型接受了来自公开的已测序天然蛋白质数据库中的2.8亿个原始蛋白质序列的训练，从头开始生成人工蛋白质序列，并且该模型生成的具备特定属性的蛋白序列多样性强，生成的酶能够展现出与天然酶相似的活性。

NVIDIA-BioNeMo

2023年3月，NVIDIA推出一整套用于自定义AI基础模型的生成式AI云服务，将加速新蛋白质和治疗方法的创建以及基因组学、化学、生物学和分子动力学等领域的研究。全新的BioNeMo™ 云服务产品可提供预训练模型，并使用专有数据自定义服务于药物研发流程各阶段的模型。这能够帮助研究人员识别正确的靶向目标、设计分子和蛋白质并预测它们在人体内的相互作用，从而研发出最佳的候选药物。

百图生科-AIGP

2023年3月，百图生科对外发布由生命科学大模型驱动的AI生成蛋白平台AIGP，根据不同模块的输入和要求，AIGP平台可在较短时间内设计和生成具有特定性质的蛋白质，大幅简化蛋白质生产流程，可实现几十分钟、几小时设计蛋白质，几天内完成蛋白质制备。

02

板块主要 参与者

互联网巨头\CXO\药企
参与者们各自的进展
及优劣势

当前国内AI制药市场的主要参与者有三类：药企、CRO、互联网公司。在商业模式上主要分为：AI SaaS、AI CRO和AI biotech，即售卖软件、服务和研发药物。根据Deep Pharma Intelligence数据，截止2022年Q1，全球参与AI药物研发的大型药企超过56家，其中包括逾36家传统药企和20家CRO企业；相关互联网头部企业超31家，AI制药初创企业超495家。

当前AI制药市场主要参与者



互联网公司借助对外投资、打造自有相关平台、提供算力及计算框架服务。由于较大的市场空间及研发需求，各大头部互联网公司在搭建数据模型后纷纷落地医药产业。我们认为互联网公司做AI+的优势在于①大厂资金优势；②算法和算力优势。但缺点在于对制药专业领域的知识及经验较为匮乏，因此主要集中在新药研发对数据及算力要求较高的环节，到了CMC之后的阶段，算法能够提供的帮助就非常有限了。通过对AI制药初创企业进行投资、自主研发建立AI制药平台及于外部合作研发AI制药项目的方式进场。我们预计未来随着大模型及数据的逐渐完善，互联网界巨头在AI制药领域的活跃度及渗透率或进一步提升。

国内互联网大厂建立的医药AI数据平台

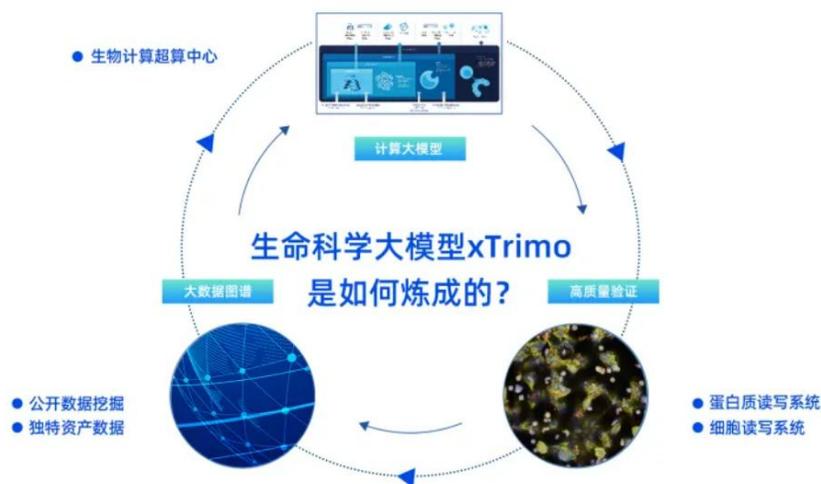
企业	AI平台	建立时间	介绍
阿里巴巴	阿里云	2018	阿里云的医疗AI可以根据少量实验数据以及化合物结构，建立高效的机器学习模型，快速过滤无活性概率较大的分子，从而富集潜在有效分子，提升研究效率。此外，还可以用于生成全新化合物，形成虚拟化合物库。此前，阿里云的医疗AI已在基因测序、甲状腺结节识别、肺结节识别、数字化模拟临床实验等领域发挥作用。
腾讯	云深智药	2020	云深智药是一个人工智能驱动的临床前新药研发开放平台，基于腾讯AI Lab自主研发的深度学习算法，同时提供数据库和云计算支持，该平台的AI模型覆盖了临床前新药研发的全流程，包括五大模块——蛋白质结构筛选、虚拟筛选、分子设计/优化、ADMET性质预测（即将开源）及合成路线规划。
字节跳动	AILab	2020	AILab主要是在AI算法支持下研究药物的发现和制造，并在基于结构或配体的药物设计、分子动力学模拟、晶体结构预测等领域具备丰富的经验。AI Lab的定位是字节跳动内部研发所和技术服务商。
百度	百图生科	2020	百图生科通过AI技术+前沿生物技术的融合创新，打造了多组学联合挖掘平台、AI药物设计平台、高通量体外模拟及药物验证平台，以加速新靶点转化和药物研发等。
华为	华为云EIHealth	2021	EIHealth主要覆盖基因组、临床研究和药物研发三个方向。其中，华为云盘古药物分子大模型首次采用「图-序列不对称条件变分自编码器」架构，可以对市面上真实存在的17亿个药物分子的化学结构进行预训练，在化学无监督学习模式下，实现结构重构率、合法性、唯一性等指标全面优于现有方法。

在制药领域，由于生成式AI对靶点、分子思路的彻底打开，吸引国内互联网大厂纷纷入局，试图破局制药困境。但目前生成式AI仍对制药的赋能仍面临许多困境。①本身数据的可靠性、互通性还不完善；②目前ChatGPT仅适用于数据及信息的归纳整理，离更精准的产出仍有距离。③相关法规、IP的归属仍有争议。

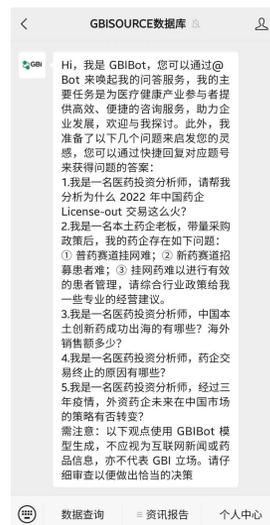
从长远来看，生成式AI或具备颠覆现有AI的潜力，而要获得更加通用、好用的模型，还需要更多领域相关专家的写作、数据积累和算法创新。

国内互联网大厂建立的医药生成式AI数据平台

百图生科大模型



GBISOURCE数据库



华为-盘古大模型



CRO作为新药研发的服务商，对市场的趋势变化往往更敏感。无论是出于加快交付成果的角度，还是减少人工支出的角度，AI应用于药物研发对CRO而言都有巨大的吸引力。国内外CRO公司纷纷通过自建及合作、投资等方式丰富了自身的AI+服务平台。

CRO龙头公司在AI+领域的搭建

CRO公司	时间	形式
IQVIA		搭建IQVIA CORE™将其数据与机器学习相结合，来进行准确的患者匹配。
	2020.01	IQVIA公司Linguamatics的自然语言处理平台获得了Questex 2019创新奖。该平台将灵活性、规模和数据转换独特地结合在一起，可以分析PB字节级别的非结构化数据，在医疗保健和生命科学领域都有广泛的应用，如靶标识别、基因定位、患者预后预测等。
	2020.02	IQVIA推出了Avacare Clinical Research Network™，该网络可以让中心更快、更有效地匹配患者进行试验。网络平台由AI算法提供支持，可以在19个疾病领域开展工作。
PAREXEL	2020.09	Parexel收购了医疗保健软件公司Roam Analytics，这将增强Parexel的真实世界数据分析能力和药物警戒业务能力。Roam Analytics开发的技术平台可以处理任何医疗保健语言数据，包括临床记录、远程医疗互动、社交媒体和其他来源的数据。
	2020.09	Parexel与Innoplexus（基于AI的药物发现和开发平台）共同启动了COVID-19 Clearinghouse计划，该计划旨在提供有关Covid-19的累积数据的访问权限，数据包括出版物、临床试验链接、新闻以及其他各种数据集。
PPD	2019.02	2019年2月，PPD与中国公司开心生活科技（HLT）签署合作协议。该合作将HLT的数据和AI技术与PPD的临床试验和真实世界证据生成能力结合在了一起。HLT先进的分析能力可以帮助PPD实施其先前启动的将患者与临床试验匹配的计划。
Charles River Labs	2019.01	2019年1月，Charles River Labs与领先的AI技术公司Atomwise建立了合作伙伴关系。根据协议，Charles River Labs将获得Atomwise开发的AtomNet™平台的访问权，并有权向客户提供该访问权。
	2022.01	Charles River和Valo Health宣布建立战略合作伙伴关系。Valo Health是一家利用人类数据和由人工智能驱动的计算来改变药物发现和开发流程的技术公司。未来Valo的Opal计算平台与Charles River的药物发现和开发能力将结合起来，提供一个新的变革性的、由人工智能驱动的药物发现和开发平台。

AI+ “降本” 中的本指的是CRO的业绩吗？

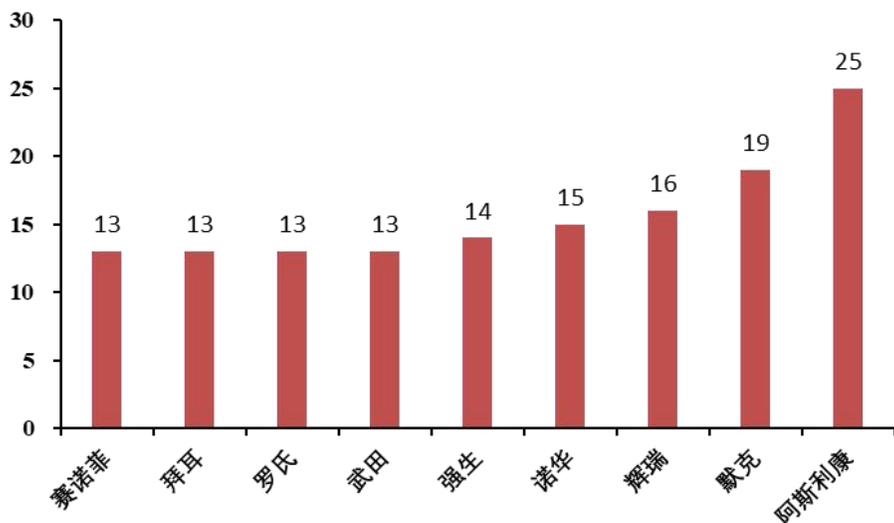
①AI现在只能实现“快”，有效性仍待验证。根据我们前面的管线分析可知，目前AI制药主要集中在临床I期，Exscientia首个进入临床的AI设计的分子也由于临床一期的研究并未达到预期标准而停止。尚无药品上市的AI制药仍需要时间证明自己的有效性。

②CRO是医药板块转型AI+的最优选。高质量数据是制约AI发展的关键瓶颈，目前AI+医药面临最大的问题来自于有限的数据、不规范的数据及数据分散在各药企中成为数据孤岛。而CRO最大的优势来自于丰富的实验数据。AI辅助药物研发对数据有着极大依赖性，面临着不同领域实验数据的采集差别大、质量参差不齐，甚至是一些失败结果的数据难获得等问题，限制了行业发展。而传统CRO公司最大的优势在于借助服务药物研发过程积攒了大量数据，这些数据既包括成功的也包括失败的经验，都将赋能完善数据库。搭建高通量数据生成能力的智能实验室，将成为核心竞争力，也是AI参与者们的重要竞争壁垒。但要注意的是CRO的数据或需要相关药企授权。

因此，我们认为AI短期无法替代传统人力为主的CRO，且凭借丰富的数据优势，CRO可能成为AI+领域最大赢家。

当前市场上参与AI制药的大型药企仍以资金实力较为雄厚的MNC为主，一般通过自建平台、外部投资并购以及合作的形式展开。截止2022年末全球前十大药企均有AI布局，其中阿斯利康、默克、辉瑞开展的AI项目数位居榜首。合作方式上，辉瑞采取自有平台搭建及多方合作的形式成为全球AI制药领头羊；GSK及诺华在自己企业内部建立了专门的AI部门；默沙东采取了通过健康创新基金和加速器项目进行投资。国内起步相对较晚，但在2021年进入爆发期，其中复星医药与英矽智能达成的合作共同推进多个靶点的AI药物研发，首付款高达1300万美元。我们认为药企进入AI研发的优势在于①在优势领域具有敏锐研发眼光；②可以建立独有的、不断迭代的数据库；③主动性及系统性强。而缺点在于对算法的理解有限，更倾向于通过自己的经验去优化分子，有路径依赖。

2021-2022Q1MNC开展的AI制药项目数



辉瑞进行的AI+药物研发合作

日期	合作对象	合作内容
2016.12	IBM	使用Waston分析大量异构数据，共同开发癌症药物。
2017.01	AbCelera	进行靶向蛋白的抗体药物研发。
2018.01	Adapsyn	确定和测试微生物菌株系列中以前未发现的自然产品。
2018.05	晶泰科技	融合量子物理与人工智能，驱动小分子药物创新。
2018.09	Atomwise	运用人工智能进行药物研发。
2019.01	CytoReason	运用疾病模型开展癌症免疫治疗。
2021.01	Insilico	为多种疾病找到潜在靶点。
2021.03	Iktos	利用人工智能从头设计小分子药物。
2022.01	PostEra	建立人工智能实验室，共同推进多个药物发现计划。
2022.02	Tempus	推进肿瘤疗法的开发
2022.03	CytoReason	扩大在免疫方面的合作。

时间	药企名称	AI合作方	适应症	合作内容
2021.03	再鼎医药	阿尔脉生物	肿瘤	新药研发
2021.07	天境生物	星亢原生物	多领域	10+个大分子研发项目
2021.08	瀚森制药	望石智慧	肿瘤、中枢神经系统、抗感染	新药研发
2021.08	丽珠集团、健康元	智化科技	多领域	小分子创新药
2021.09	华东医药	英矽智能	肿瘤	设计和筛选潜在的First-in-class分子
2021.09	开拓药业	晶泰科技	肿瘤	单克隆抗体药物
2021.09	京新药业	晶泰科技	精神、神经领域	小分子创新药
2021.09	海思科	晶泰科技	肿瘤、代谢、免疫	加速新药研发
2021.10	信达生物	新合生物	肿瘤	小分子药物发现、先导化合物优化
2021.10	海正药业	望石智慧	肿瘤	First-in-class靶点
2021.11	昆药集团	望石智慧	肿瘤	单克隆抗体药物
2022.01	正大天晴	晶泰科技	肿瘤	高难度小分子新药开发
2022.01	复星医药	英矽智能	肿瘤	针对四个制定靶点进行药物研发
2022.02	瀚森制药	深势科技	肿瘤、中枢神经系统、抗感染	小分子药物
2022.04	联邦制药	晶泰科技	肿瘤、代谢、免疫	加速新药研发
2022.04	恩华药业	晶泰科技	免疫性疾病	小分子创新药
2022.07	云南白药	华为	多领域	包括但不限于大小分子设计、相关病症、数据库开发等
2022.11	信立泰	阿尔法分子	肥胖症	靶点发现，加速新药研发

03

相关标的

3.1 药明康德：前瞻投资AI制药赛道

药明康德在2018年以来就多次参与AI制药领域龙头企业的融资，其中包括：Engine Biosciences（2018年1月）、Insilico Medicine（2018年6月）、Verge genomics（2018年7月）、Schrödinger（2019年1月）、Insitro（2020年5月）等。

前瞻性的布局也有望奠定药明康德在药物筛选、药物发现等领域的龙头地位，也有望在AI制药快速推进过程中享受市场红利和保持龙头低位。

药物筛选、计算机辅助药物设计等均有应用AI

虚拟筛选

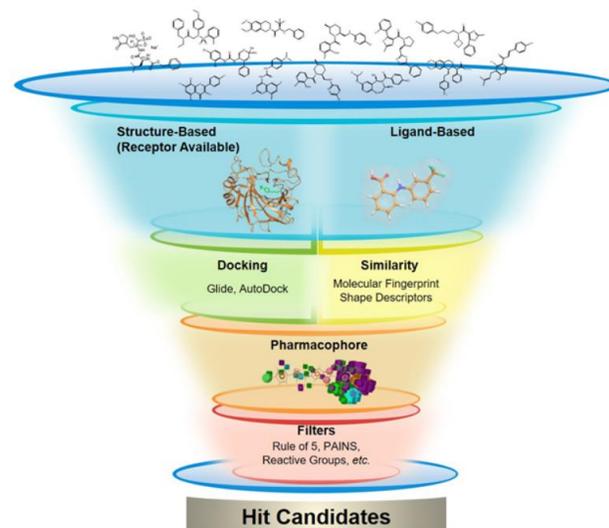
利用计算软件筛选实体或虚拟化合物库，模拟目标靶点与候选药物之间的相互作用，计算两者之间的亲和力大小，以降低实际筛选化合物数目，同时提高苗头化合物发现效率。

虚筛方法：

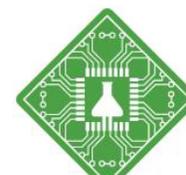
- 基于分子对接
- 基于药效团
- 基于三维构象
- 基于分子指纹

化合物库：

- WuXi HTS set (300k)
- Mcule Purchasable (8.8M)
- WuXi GalaXi virtual library (2.3 billion)
- Enamine REAL virtual library (3.4 billion)



药明康德参与投资的AI企业



Insilico
Medicine

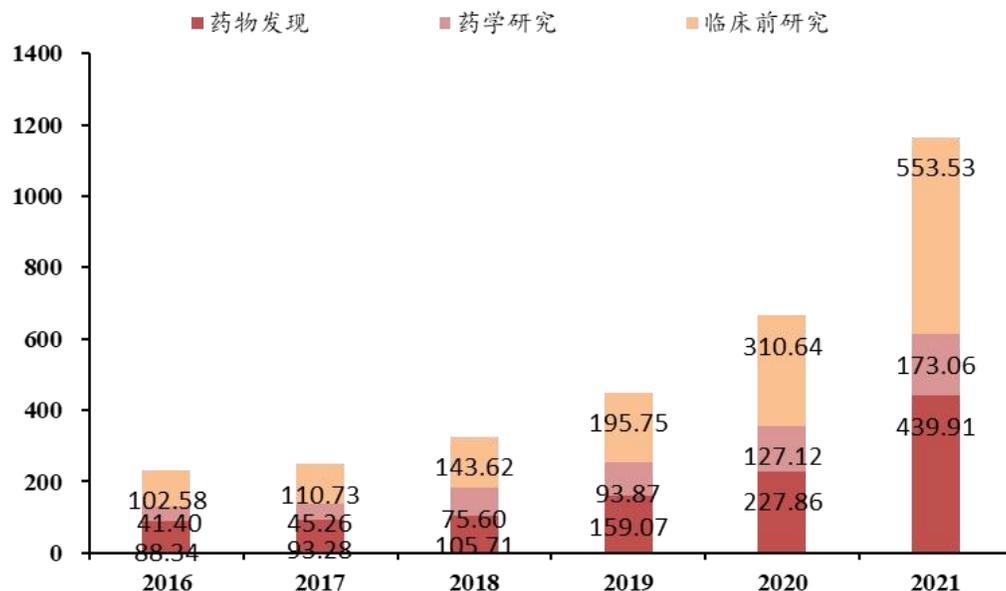


Schrödinger

3.2 美迪西：快速合作布局的AI+CRO公司

美迪西是国内临床前一体化CXO龙头公司，服务涵盖医药临床前新药研究的全过程。公司积累了丰富的创新药物分子设计经验及技术储备，如通过计算机辅助药物设计（CADD）及借助人工智能（AI）技术评估设计化合物和靶标蛋白的结合，优化化合物的设计，从而提高化合物的生物活性的成功率、大幅缩短分子结构优化的时间、加速新药研发的进程。2021年启动了基于AI的药物开发平台建设。

公司收入构成（百万元）



公司在AI+领域的布局



朗睿生物

2022.06.19 签署了创新药战略合作协议，依托KINET人工智能新药研发平台加码AI技术，赋能小分子创新药研发。



Insilico Medicine

2021.06.18 与英矽智能达成了战略合作



美迪西生物医药



英飞智药

2022.11.20, 与英飞智药达成战略合作，结合PharmaMind和TopTargets平台，为研发的关键环节降本增效



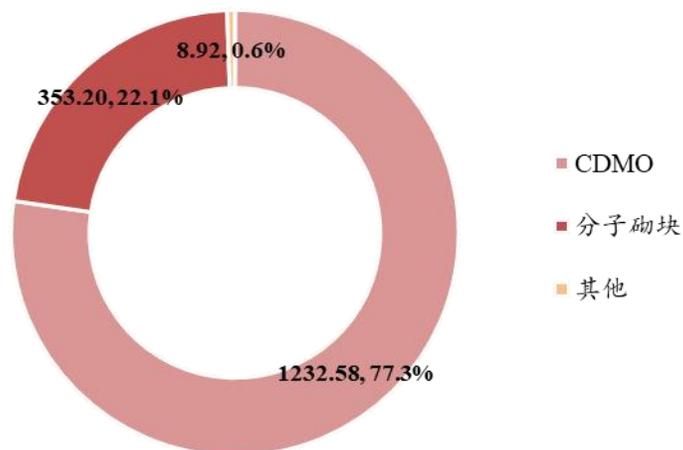
德睿智药

MindRank

2021.10.21, 与杭州德睿智药在美迪西川沙园区签订战略合作协议，达成战略合作关系。

药石科技是以分子砌块为核心基础拓展的一体化CXO公司。公司基于内部独特的分子砌块，建设了多样化的、主流的药物发现技术平台，通过与人工智能药物发现技术平台（AIDD）结合，探索AI与公司其他新药发现技术如虚拟筛选、DEL-T、FBDD的有效结合，利用开源蛋白质结构预测AlphaFold2 算法模型，具备了针对绝大部分创新靶点的人工智能筛选能力。并且公司基于结构生物学、计算机辅助药物设计（CADD）、药物化学等方面的能力，对苗头化合物进行多维度优化以得到先导化合物和临床候选分子。

2022年公司收入构成（百万元）



公司在AI+领域的布局

药物发现

新药研发服务



PharmaBlock

AI赋能新药筛选技术 促进新药研发业务

- 重点开发基于超大成药化学空间的人工智能药物发现技术平台
- 开发多种算法模型，具备人工智能筛选能力
- 超大虚拟动态化合物库容量突破万亿级，成药性优越
- 中等分子量库容量>1500，基于此搭建特色共价化合物库
- 结构生物学服务（X-Ray晶体衍射、蛋白核磁）能力取得突破



3.4 成都先导：基于DEL不断延伸的药物筛选公司

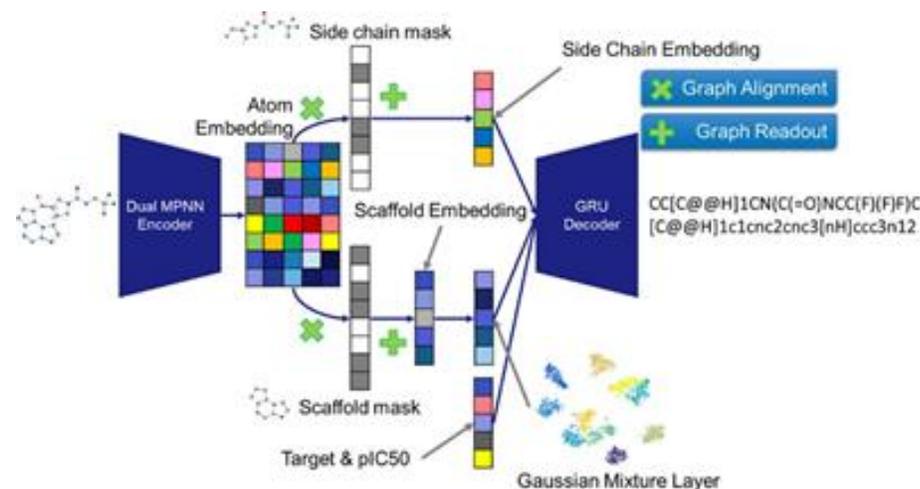
成都先导是一家以DNA 编码化合物库（DEL）为核心技术的药物筛选公司，拥有全球最大的DEL库之一，公司的主营业务为 DEL 技术相关的药物早期发现及以DEL平台为主的新药研发转让。公司的CADD/AIDD平台整体发展思路和策略主要体现在以下几个方面：（1）**DEL领域**：目前，已经实现完成特定靶点库的设计、合成和筛选，加速部分药化项目的优化过程，并成功为一些具体项目提供高效的小分子化合物筛选方案，且能够为DEL筛选的靶点在市售化合物库中找到新的化合物系列。（2）**FBDD/SBDD 领域**：与收购的英国公司Vernalis共同推进。（3）**小核酸药领域**：计算科学团队着重在小核酸序列设计方面布局，希望通过高质量的核酸序列设计加速小核酸药物的早期研发进程。（4）**在靶向蛋白降解领域**：计算科学团队着重在利用CADD技术加速三元复合物优化过程方面布局，提升团队在蛋白降解早期研发阶段的竞争力。

成都先导与腾讯AI Lab合作

成都先导与腾讯AI Lab合作，共同设计开发了一款分子骨架跃迁算法（GraphGMVAE）。该算法可以在保持分子侧链不变的情况下，生成具有相似活性不同骨架的分子。同时提出了一套对分子进行优先级排序的流程，可以缩小验证范围，该结果已经发布在ACS Omega上。

骨架跃迁是药化设计中的重要工具，但传统跃迁算法大都受限于骨架数据库的大小、较长的计算时间或昂贵的许可证。成都先导和腾讯AI Lab合作开发的GraphGMVAE算法运用深度图学习与高斯混合分布隐空间相结合，能够针对目标靶点的参考分子进行骨架跃迁，有望加快药物研发领域中的小分子设计环节，从而大大减少人力以及时间成本。

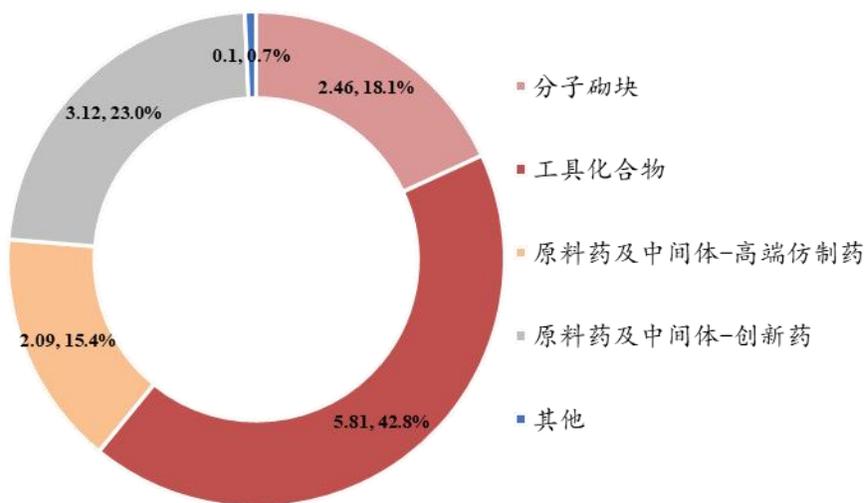
成都先导GraphGMVAE模型主要组成



3.5 皓元医药

皓元医药是一家专注小分子及新分子类型药物研发的一体化CXO公司，形成了前端分子砌块和工具化合物的产品销售，和后端原料药及中间体的产品销售及CDMO两大业务板块。公司在2021年开始与AI制药公司开展合作：①2022年1月与AI制药公司**睿智药**就**AI辅助药化合成**方面深化战略合作（2021年开始合作），具体包括正向化学反应预测以及逆向合成路线预测与改进等；②2022年8月与AI制药公司**英矽智能**开展战略合作，双方在**创新药小分子化合物定制服务业务、FTE业务、CMC业务、CDMO业务、合成样品库业务**等开展深度合作；2023年2月公司成功助力英矽智能靶向主蛋白酶（3CLpro）药物ISM3312进入临床阶段，成为英矽智能第二款进入临床阶段药物。

2022年公司收入构成（亿元）



皓元医药CRDMO模式布局



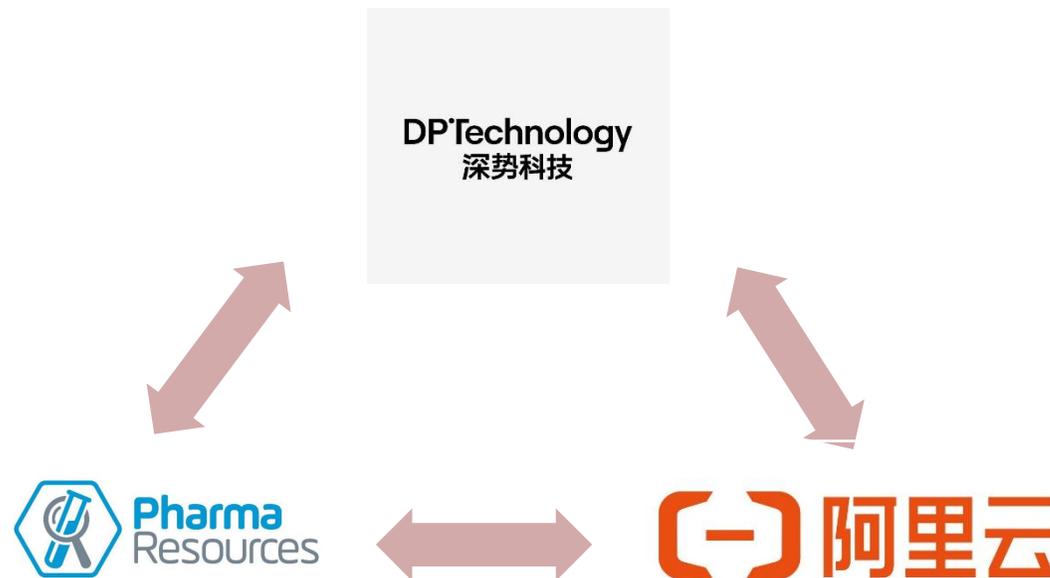
3.6 泓博医药：以药物设计为抓手拓展一体化的CRO公司

泓博医药是一家新药研发服务及原料药生产企业，致力于为全球医药客户提供一站式的小分子药物研发和生产解决方案，公司业务涵盖了药物发现、工艺和药学研究以及原料药生产等领域。公司以小分子药物设计见长，并与海外优质 biotech 公司建立深度的合作，协助客户开发多款 FIC 药物，并享有较高的议价权。公司CADD/AIDD技术平台成立于2019年，截止2021年底已累计为30多个创新药项目提供技术支持，目前尚处于临床前或早期临床阶段。

泓博医药与阿里云、深势科技合作

泓博医药于2022年12月携手深势科技，阿里云共同加速药物研发进程。

泓博医药执行副总裁蔡振伟表示：“深势科技的 Hermite® 平台加上阿里云高性能计算 E-HPC 集群，大幅提升了泓博医药分子模拟效率，降低了泓博医药的合成成本，也减少了定制合成的等待时间，大大缩短管线推进到临床候选化合物的时间。”



03

投资建议

我们认为基于对行业发展趋势的敏感性及数据库的丰富度，建议关注向AI布局的CRO企业

1. 龙头CXO公司，具有较强的资金优势及数据优势；
2. 多技术平台布局的公司具有多角度结合AI搭建模型的优势；
3. 已经较早布局AI的公司或具有先发优势。

➤ **推荐：药明康德、美迪西、药石科技等；关注：成都先导、皓元医药、泓博医药等。**

表：AI相关的CRO相关标的

代码	重点公司	现价	EPS		PE			评级
		2023/4/28	2022E	2023E	TTM	2022E	2023E	
603259.SH	药明康德	67.5	2.97	3.24	21	23	21	买入
300725.SZ	药石科技	55.9	1.57	2.08	37	36	27	买入
688202.SH	美迪西	150.0	3.89	6.14	36	39	24	增持
688222.SH	成都先导	18.3	0.06	0.16	282	305	114	-
688131.SH	皓元医药	115.8	1.82	2.94	70	64	39	-
301230.SZ	泓博医药	58.8	0.87	1.48	63	68	40	-

资料来源：wind，浙商证券研究所

其中，药明康德、药石科技、美迪西为浙商盈利预测，成都先导、皓元医药、泓博医药为wind一致性预测

05

风险提示

1、人工智能发展进展不及预期：

- 人工智能多次因基础硬件软件、数据库的完善度、投入产出比较低等原因发展受限，尤其在生物医药领域对内容专业性及精确度要求极高；

2、商业化拓展不及预期

- 目前AI筛选的新药仍与传统方法新药重叠度较高，同质性可能导致商业化拓展不及预期；

3、下游应用场景的用户认知不及预期

- ChatGPT及其相关技术仍处于发展初期，面临着较多的不确定性，下游用户对技术了解度和信任度不够限制了ChatGPT在各环节的深度应用。

4、审评审批流程进展不及预期

- ChatGPT等AI替代易导致伦理道德、数据安全、隐私泄露方面的问题，相关监管制度和标准严格，审核进度慢。

5、国际形势不确定风险

- 高端芯片供货不足等危机可能导致发展受限。

行业及公司评级与免责声明

行业的投资评级

以报告日后的6个月内，行业指数相对于沪深300指数的涨跌幅为标准，定义如下：

- 1、看好：行业指数相对于沪深300指数表现 + 10%以上；
- 2、中性：行业指数相对于沪深300指数表现 - 10% ~ + 10%以上；
- 3、看淡：行业指数相对于沪深300指数表现 - 10%以下。

股票投资评级说明

以报告日后的6个月内，证券相对于沪深300指数的涨跌幅为标准，定义如下：

- 1.买入：相对于沪深300指数表现 + 20%以上；
- 2.增持：相对于沪深300指数表现 + 10% ~ + 20%；
- 3.中性：相对于沪深300指数表现 - 10% ~ + 10%之间波动；
- 4.减持：相对于沪深300指数表现 - 10%以下。

我们在此提醒您，不同证券研究机构采用不同的评级术语及评级标准。我们采用的是相对评级体系，表示投资的相对比重。

建议：投资者买入或者卖出证券的决定取决于个人的实际情况，比如当前的持仓结构以及其他需要考虑的因素。投资者不应仅仅依靠投资评级来推断结论

法律声明及风险提示

本报告由浙商证券股份有限公司（已具备中国证监会批复的证券投资咨询业务资格，经营许可证编号为：Z39833000）制作。本报告中的信息均来源于我们认为可靠的已公开资料，但浙商证券股份有限公司及其关联机构（以下统称“本公司”）对这些信息的真实性、准确性及完整性不作任何保证，也不保证所包含的信息和建议不发生任何变更。本公司没有将变更的信息和建议向报告所有接收者进行更新的义务。

本报告仅供本公司的客户作参考之用。本公司不会因接收人收到本报告而视其为本公司的当然客户。

本报告仅反映报告作者的出具日的观点和判断，在任何情况下，本报告中的信息或所表述的意见均不构成对任何人的投资建议，投资者应当对本报告中的信息和意见进行独立评估，并应同时考量各自的投资目的、财务状况和特定需求。对依据或者使用本报告所造成的一切后果，本公司及/或其关联人员均不承担任何法律责任。

本公司的交易人员以及其他专业人士可能会依据不同假设和标准、采用不同的分析方法而口头或书面发表与本报告意见及建议不一致的市场评论和/或交易观点。本公司没有将此意见及建议向报告所有接收者进行更新的义务。本公司的资产管理公司、自营部门以及其他投资业务部门可能独立做出与本报告中的意见或建议不一致的投资决策。

本报告版权均归本公司所有，未经本公司事先书面授权，任何机构或个人不得以任何形式复制、发布、传播本报告的全部或部分内容。经授权刊载、转发本报告或者摘要的，应当注明本报告发布人和发布日期，并提示使用本报告的风险。未经授权或未按要求刊载、转发本报告的，应当承担相应的法律责任。本公司将保留向其追究法律责任的权利。

浙商证券研究所

上海总部地址：杨高南路729号陆家嘴世纪金融广场1号楼25层

北京地址：北京市东城区朝阳门北大街8号富华大厦E座4层

深圳地址：广东省深圳市福田区广电金融中心33层

邮政编码：200127

电话：(8621)80108518

传真：(8621)80106010

浙商证券研究所：<http://research.stocke.com.cn>