

AI 新药研发 (AIDD) 行业系列报告—洞鉴行业发展, 把握投资先机: (一) AIDD 概览篇

AI 新药研发已走过0到1阶段, 1到10阶段将带来更多可能

反摩尔定律一直是制药行业的痛点, AI 技术可深入参与新药研发从靶点发现到新药上市的各个环节, 甚至促进生物学研究、发现新的生物靶点机制和开发新的疾病模型。AIDD 将深度协助传统药物研发手段, 大幅提高新药研发效率, 由 1 到 10 阶段, AIDD 或将带来制药行业巨大变革。

支撑评级的要点

- **AI+医疗空间广阔, AIDD “小荷才露尖尖角”。**近年来 AI 技术在下游应用端快速拓展, 尤其是 2016 年 3 月, AI 程序 AlphaGo 大胜韩国著名棋手李世石, 可谓是 AI 发展历史上的里程碑事件, 这一事件加快了 AI 在医疗领域的探索和应用。更多 AI+医疗产品延伸至院内院外更多场景, 并更加深入的整合进医疗流程。目前, 以 CT 影像、皮肤影像、眼底筛查、病理影像等为代表的 AI+辅助检查以及 CDSS 在技术及应用上较为成熟。同时, 随着药物研发产业的发展, 医疗互联网的出现, 可用的各类药物研发数据越来越多, 以至于在一定时间范围内无法使用常规方法和软件工具分析和处理所有数据。尤其是以深度学习为代表的 AI 技术凭借其超大规模处理、学习数据能力、发现关系并构建模型能力, 优势得以凸显, 目前 AIDD 已走过 0 到 1 阶段并走向由 1 到 10 阶段。
- **打破制药行业的反摩尔定律 (Eroom's Law), AIDD 逐渐 “升温”。**导致制药行业反摩尔定律主要有三种理解: 低垂果实假设 (好摘的果子被摘走了)、监管障碍假设 (新药申报的监管要求不断增高)、研发模式问题。前两种解释都已经是既定客观事实, 但对于研发模式问题 AI 或将大有作为。AIDD 的出现导致新药研发的实验科学不再是唯一选项, 以数据为中心的药品发现逐渐走上舞台。近些年, AI 制药概念验证研究持续不断、大量的资本涌入 AIDD 初创公司、制药公司与 AIDD 公司和 AI 技术供应商之间的合作越来越多。AI 不仅仅是先导化合物发现的工具, 而且是一个促进生物学研究、发现新的生物靶点和开发新的疾病模型的更通用的工具。AI 逐渐应用于药物发现的靶点发现, 虚拟筛选, 化合物设计与合成, ADME-T 预测, 药物临床试验设计、患者招募及管理等多个流程和环节, 并将在变构类药物、老药新用等领域产生深远影响。
- **资本助力, 传统 Big Pharma 公司、新兴 AIDD 公司以及互联网巨头在 AIDD 领域百花齐放。**2020 年, 美国老牌 AI 制药公司 Schrödinger、AI 制药新锐 Relay Therapeutics 相继登陆资本市场。据 CB Insights 数据统计, 自 2020 年 3 月以来, 全球共有 11 家 AI 制药公司获 1 亿美元以上的大额融资。2020 年 AIDD 开始迈入临床验证的新时期。英国 AI 制药公司 Exscientia 宣布全球首个完全由 AI 设计的药物分子进入临床, 随后又公布了 2 个药物分子进入临床。同时, 根据 GlobalData Healthcare 的数据, 目前有 27 家 big pharma 与 AI 药物研发公司达成合作关系。国际制药巨头如葛兰素史克、阿斯利康、吉利德、辉瑞、拜耳、诺华、赛诺菲、百时美施贵宝、武田制药、勃林格殷格翰等公司, 国内如正大天晴、中国生物制药等传统制药公司、药明康德、博腾股份等 CMO 公司都参与 AIDD 布局。目前 AIDD 主要聚焦肿瘤类药物、精神疾病类药物、罕见病等。

建议关注

- 国内一级市场: 晶泰科技、英码智能等; 二级市场: 药明康德

主要投资风险

- 技术人才流失风险; 一级市场投资降温风险; AI 技术应用不达预期风险; 新药研发等底层数据被头部药企封锁风险; 伦理相关风险以及政策审批风险; 报告引用数据更新不及时风险等。

相关研究报告

《海外采装紧张, 国内血液制品政策推动集中度提升: 2021 年血液制品行业跟踪报告》
20210303

《肿瘤治疗行业报告: 整体有较大增长潜力, 行业进入者需要突破一定的行业门槛》
20210122

《医药行业 2021 年度策略: 重视非医保领域的高端、差异化医疗需求》 20201130

《IVD 行业深度系列报告——后疫情时代叠加医改大环境非药支出占比提高, 病前诊断的全民大健康意识助力 IVD 行业迎来新机遇》
20210402

《mRNA 疫苗开启疫苗行业新时代》 20210707

中银国际证券股份有限公司
具备证券投资咨询业务资格

医药生物

证券分析师: 邓周宇

(86755)82560525

zhouyu.deng@bocichina.com

证券投资咨询业务证书编号: S1300517050001

目录

前言.....	7
1、AI+医疗多点开花，AIDD 引人关注.....	9
2、反摩尔定律的制药行业，AIDD 带来行业新变局.....	21
3、AIDD 市场活跃，正经历由 1 到 10.....	44
4、AIDD 概览篇小结.....	84
5、AIDD 行业投资风险.....	86

图表目录

图表 1. 国内 AI+医疗发展历程 9

图表 2. 中国及全球 AI+医疗发展历程详情 9

图表 3. 医院信息化契合 AI 落地生态, AI 反哺医疗行业发展 10

图表 4. 2020 年中国院内机器学习与自然语言应用场景 10

图表 5. 2012-2020 年医学文献中热门应用算法 10

图表 6. 2010-2020 中国 AI+医疗总融资金额与融资事件数 11

图表 7. 2019 年中国 AI+医疗项目融资轮次分布 11

图表 8. 2020 年中国 AI+医疗项目融资轮次分布 11

图表 9. AI+医疗相关政策 12

续 图表 9. AI+医疗相关政策 13

图表 10. 2017-2020 年中国 AI+医疗典型政策分析 13

图表 11. 2020 年中国 AI+医疗产业链 14

图表 12. AI 赋能的新基建全面助力医疗产业发展 15

图表 13. 2020 年中国 AI+医疗应用成熟度分析 15

图表 14. 2020 年中国 AI+眼底筛查商业模式分析 16

图表 15. 2020 年中国 CDSS 应用分析及相关电子病历评级要求 16

图表 16. 我国公共卫生总费用及占 GDP 比重 17

图表 17. 2015-2020 年中国城镇居民医疗保健支出 17

图表 18. 2015-2020 年中国农村居民医疗保健支出 17

图表 19. 2020 年中国 AI+医疗痛点分析 18

图表 20. 2020 年中国医学图谱现有技术与发展趋势 19

图表 21. 2020 年中国 AI+医疗技术趋势 19

图表 22. AI 在新药研发中的价值 20

图表 23. 人工智能和传统计算机辅助药物研发比较 20

图表 24. 创新药相关概念 21

图表 25. 化学小分子药和生物大分子药特征对比 22

图表 26. 2020-2030E 年中国各类药物市场规模 (亿元) 及增长率 (%) 22

图表 27. 2020-2024E 年全球以及中国的医药市场规模 (万亿元) 23

图表 28. 2020 年全球药品销售额 TOP100 药物类型汇总 23

图表 29. 国内创新药上市流程 24

图表 30. 国内 Pre-IND 沟通交流会议的申请和审批流程 25

图表 31. 临床试验申请一般审批流程 26

图表 32. 新药上市许可一般审批流程 28

图表 33. 中美新药审批对比.....	28
图表 34. 三种上市审批审评加速通道.....	29
图表 35. 我国新药加速上市注册制度.....	29
图表 36. 监管制度和政策的改革实施对创新药上市加速的影响.....	30
图表 37. 带量采购政策的实施历程.....	31
图表 38. 我国医改政策分析.....	32
图表 39. 2005-2020 年新靶点开发数量统计(单位: 个).....	32
图表 40. 全球药物研发管线体量(单位: 条).....	33
图表 41. 全球各开发阶段的临床晚期产品管线数量比较 (2016-2021) (单位: 条).....	33
图表 42. 2014-2020Q3 国产化学创新药 IND 受理情况(单位: 个).....	34
图表 43. 2013-2020Q3 国产生物制品 IND 受理数(单位: 个).....	34
图表 44. 我国近年来临床试验数目(单位: 次).....	35
图表 45. 2014-2021Q2 国产化学创新药 NDA 受理数量 (个).....	35
图表 46. 2013-2021Q2 国产生物制品 NDA 受理数量 (个).....	36
图表 47. 中国创新药获批数量统计 (2016 年-2021 年 3 月, 个).....	36
图表 48. 2020 年-2021 年 3 月我国部分企业 1 类新药申报上市情况.....	37
图表 49. 2020 年 FDA 批准新药统计.....	37
图表 50. 2020 年 NMDA 批准新药统计.....	37
图表 51. 中美生物创新药获批数量比较 (2016 年-2021 年 3 月).....	38
图表 52. 2020 年全球新药研发公司分布.....	38
图表 53. 2021 年全球新药研发公司分布.....	38
图表 54. 2021 年上半年 FDA 创新七大事件.....	39
图表 55. 2021 年上半年 FDA 批准新药重磅潜质.....	40
图表 56. 药物研发流程漫长.....	41
图表 57. 非 AI 药物研发路径痛点及 AI 引入.....	42
图表 58. 2010 至 2020 年全球医药研发费用及药物开发支出情况 (亿美元).....	42
图表 59. 2010-2019 年全球生物医药巨头投资回报率.....	43
图表 60. 新药研发从药物发现到上市流程.....	44
图表 61. AI 可参与的新药研发从药物发现到上市流程.....	45
图表 62. AI 和传统药物研发优势对比.....	45
图表 63. AI 全程赋能新药研发.....	46
图表 64. AI 应用于新药研发各个环节简单梳理.....	46
图表 65. AI 用于靶点发现 (基于多组学).....	47
图表 66. AI 用于靶点发现 (基于分子—靶标识别).....	47
图表 67. AI 用于化合物发现.....	48

图表 68. AI 用于化合物设计	48
图表 69. AI 用于蛋白质结构预测	49
图表 70. AI 用于 ADMET 预测	49
图表 71. AI 用于晶型预测	49
图表 72. AI 用于药物重定位 (老药新用)	50
图表 73. 几个主要国家 AI 制药政策环境对比	50
续 图表 73. 几个主要国家 AI 制药政策环境对比	51
图表 74. 中国促进人工智能新技术发展相关政策整理	52
续 图表 74. 中国促进人工智能新技术发展相关政策整理	53
图表 75. 中国生物医药相关的人工智能创新发展政策演变历程	53
图表 76. 全球 AI+制药企业不同融资轮次占比	54
图表 77. 全球 AI+制药企业 2014-2020 年融资金额和数量变化趋势	54
图表 78. 全球 2014-2020 年 AI+制药企业融资轮次分布变化趋势	55
图表 79. 中国 AI+制药 2015-2020 年融资事件和金额变化趋势	55
图表 80. 中国 2015-2020 年 AI+制药企业融资轮次变化趋势	55
图表 81. 2020 年中国 AI 制药领域融资情况	56
图表 82. AI+制药领域活跃投资机构 TOP5	56
图表 83. 不同年份 AI 制药初创公司梳理	57
图表 84. AIDD 初创公司简况	58
续 图表 84. AIDD 初创公司简况	59
续 图表 84. AIDD 初创公司简况	60
续 图表 84. AIDD 初创公司简况	61
续 图表 84. AIDD 初创公司简况	62
续 图表 84. AIDD 初创公司简况	63
图表 85. AI 制药公司的基本信息	64
续 图表 85. AI 制药公司的基本信息	65
图表 86. AI 制药公司在各阶段的业务情况	66
图表 87. 新药研发各阶段 AI 制药公司情况	66
图表 88. 参与与 TOP 药企商业合作的代表型 AI 制药公司	67
图表 89. 部分国内药企参与 AI 行动的细节	67
续 图表 89. 部分国内药企参与 AI 行动的细节	68
续 图表 89. 部分国内药企参与 AI 行动的细节	69
图表 90. 部分国外药企参与 AI 行动的细节	69
续 图表 90. 部分国外药企参与 AI 行动的细节	70
续 图表 90. 部分国外药企参与 AI 行动的细节	71

图表 91. 头部药企与 AI 初创公司、IT-云服务商合作次数.....	72
图表 92. 部分药企对 AI 初创公司的投资情况列举.....	73
图表 93. 国际大药企近年的净收入及发展 AI 后的盈收状况	73
图表 94. 药企参与 AI 制药的各个阶段具体分布	74
图表 95. 不同药物研发阶段 AI 布局数量	74
图表 96. 参与 AI 制药的各阶段的代表药企.....	75
图表 97. AI+制药研发管线适应症分布	75
图表 98. 药企在 AI 合作上聚焦的疾病方向.....	76
图表 99. 各大药企在 AI 合作上聚焦的疾病方向.....	76
图表 100. 药企在 AI 合作上聚焦疾病的细节（待更新）	77
续 图表 100. 药企在 AI 合作上聚焦疾病的细节（待更新）	78
图表 101. 新型 AI 制药企业药物研发合作及最新进展	79
续 图表 101. 新型 AI 制药企业药物研发合作及最新进展.....	80
续 图表 101. 新型 AI 制药企业药物研发合作及最新进展.....	81
续 图表 101. 新型 AI 制药企业药物研发合作及最新进展.....	82
续 图表 101. 新型 AI 制药企业药物研发合作及最新进展.....	83
图表 102. AI 创新药研发存在的问题.....	85

前言

创新是生物医药行业永恒的主题，近 20 年来，中国在创新药的发展道路上经历了 Me-too、Me-better，并逐步开始探索 First in class。近几年，我国创新药发展环境迎来政策利好，先后出台了优先审评审批、注册分类改革、上市许可持有人制度、一致性评价、集采等一系列政策，创新药的研发、审评、生产和支付等环节的政策环境随之优化。2021 年 7 月 2 日，国家药品监督管理局药品审评中心（CDE）发布了《以临床价值为导向的抗肿瘤药物临床研发指导原则》征求意见稿，再次加大了我国对创新药的研发及上市要求。接下来我国创新药行业又该如何发展呢？

一、从行业行政审批端来看我国创新药的发展历程：

近年来我国创新药研发主要还是研究国外已上市的药物，并对分子结构进行改造以有效规避专利限制，然后生产“me-too”药物。即便如此，相比 16 年前的“郑筱萸式”近乎停滞的医药创新，中国的创新药市场依然有所进步。

新中国成立到 2008 年新药上市数量少，原研药审批缓慢（同期，美国已立法授予食品药品监督管理局（FDA）监管资格，启动关键路径计划，通过层级筛选、临床试验、资本追投等程序，加速创新药上市。）具体来说，**2000 年**，我国成立药品监督管理局——**2004 年**，新成立国家药监局初期，仅 2004 年就受理了 10009 种“新药”申请（同期，美国药监局一年仅受理了 148 种新药的审批），在此期间临床试验数据的造假和药品审批的随意，**医药市场乱象丛生——2007 年，药品研发进展陷入资本与制药两难的僵局**：药品申请事件大量积压、大量的药企面临着多年的审批等待时间、资本入市的欲望也受到不利影响——直到 **2015 年**，毕井泉“空降”国家食药监管总局。由此，中国医药行业过去十年混乱的药品审批制度开始逐渐瓦解，**药品评审顶层监管日趋严格，我国创新药春天开始到来——2015 年 8 月**，国办 44 号文件《关于改革药品医疗器械审评审批制度的意见》走出了药品监管改革的第一步，重新定义了新药和仿制药，**审评门槛提高——2016 年 2 月**，国办发布《关于开展仿制药质量和疗效一致性评价》的文件，要求药企在规定期限内完成“企业标准自制、监管机构评估”的仿制药一致性评价，重整临床试验数据造假的仿制药市场。**缩减审批时间、扭转市场创新理念，加快新药审批上市速度，创新药发展的全新时代开始到来，2018 年-至今**，在研发人才、资本入局、行业转型和政策监管这四个方面的连锁反应下，**中国创新药领域继续焕发生机——**根据国家药监局所发布的《药品监督管理统计年度报告（2020 年）》最新创新药审评数据：2020 年共批准创新药临床品种 1096 个，批准创新药生产品种 20 个；2020 年共批准进口药品临床 604 件，上市 128 件——中商产业研究院研究显示，国内创新药行业市场规模逐年增长，**2021 年预计达到 1467 亿美元的规模**。根据中国外商投资企业协会药品研制和开发行业委员会（RDPAC）发布的《聚力创新药行业，助力健康中国建设》报告显示，**2016 年到 2020 年，中国共上市 200 个创新药产品**，这些产品涉及的疾病领域包括肿瘤、消化道及代谢、呼吸、心脑血管等慢病，都是中国疾病负担最大和增速最高的疾病领域。

二、我国创新药产业走向繁荣的背后靶点扎堆，药研发亟待技术变革

近年来，在创新药发展的一片繁荣背后，创新药的困境也在慢慢浮现。在有限的人体基因靶点下，潜在的药物靶点数量有限。在中国追求快速资本回报的医药市场中，“内卷”生成，同质化的靶点扎堆出现。从中国的创新药行业深刻改革贝达药业研发出我国第一个创新药埃克替尼，每年两位数的药物申报时期，到如今上百种 PD-1、ADC 和 Car-T 种子赛道，中国创新药市场还能否涌现出如贝达药业般的前行者，离开拥挤的靶点赛道，**AI 制药或将给出解决问题的出路**。

2019 年年底突发的新冠疫情出现并迅速席卷全球，全球卫生医疗系统经历了前所未有的挑战。从我国抗疫“火眼”实验室的迅速建成，到我国新冠灭活疫苗的快速问世，再到疫苗领域颠覆式变革的 mRNA 疫苗研发成功，各个国家对医疗系统的建设、对医疗、医药产业的创新发展都提出了更高的要求，政策方面对创新也给了更大的支持。同时，资本方面对高端医疗、基因治疗和细胞治疗等新疗法、AI 技术赋能的新药研发等新兴领域给予了更高的关注。

三、对于创新药研发，AI 制药的出现无疑是翻开了药物研发的新篇章

2020 年 1 月 20 日，美国国家生物信息中心（NCBI）网站首次公布了新冠病毒的基因序列。晶泰科技就迅速对新冠病毒 SARS-CoV-2 上的关键蛋白搭建了三维结构模型。2020 年 2 月 2 日，晶泰科技将这些高精度模型与大量的计算数据、研究结果发布在自媒体与公司网站上。这些科研成果被行业人士大量下载，为研究病毒分子机理、设计与筛选抗病毒药物提供了基础。此后，晶泰科技又对 3000 多款上市药和 10000 多个中药成分进行了老药新筛，与同行分享活性预测结果。从疫情开始到今年 6 月，晶泰科技持续发布了多篇与新冠病毒关键突变预测、亚单位疫苗设计等相关的论文和文章。由此，2020 年新冠疫情期间，晶泰科技作为一家 AI 制药领域的初创公司，获得了资本市场的颇多关注。2020 年 9 月，晶泰科技完成 3.188 亿美元 C 轮融资，创造了当时全球 AI 药物研发领域融资额的最高纪录。也因为新冠疫情的契机 2020 年是 AI 制药行业备受关注的一年，2021 年 AI 制药行业继续快速发展。例如，英矽智能在 2021 年 2 月宣布，其全球首次利用人工智能发现了一种全新机制的用于治疗特发性肺纤维化(IPF)的临床前候选化合物。6 月，该公司又宣布完成了 2.55 亿美元 C 轮融资；冰洲石生物也在 2021 年 4 月宣布完成数千万美元的新一轮融资，并建设超 10 个生物新药的产品管线，涵盖 first-in-class（全球首创）和 best-in-class（全球最优）药物靶点。2021 年 4 月，晶泰科技又宣布与希格生科合作的弥漫性胃癌项目取得重大进展，仅用半年多时间就找到了全新靶点的理想临床前候选化合物。这一成果助力希格生科获得 6000 万元的天使轮融资。

AI 制药可谓新药研发的颠覆性变革手段，将大幅降低新药研发的时间投入和成本投入，AI 制药一旦成功落地将给新药研发带来变革性发展。目前，无论是资本端、技术端，还是政策端都为 AIDD 产业的发展提供了极大支撑，AIDD 作为行业发展新生力量已走过由 0 到 1 阶段并走在由 1 到 10 阶段。也鉴于此，我们深入研究了 AIDD 行业，并撰写了“洞鉴 AIDD 行业发展，把握投资先机”深度行业系列研究报告，由于报告篇幅过长（~400Pages，后续或稍作调整），我们暂定将报告拆分为三篇外发，分别为：AIDD 行业概览篇、AIDD 行业技术篇、AIDD 行业公司篇（暂时分了三篇，后续或有调整）。本次先发 AIDD 行业概览篇。AIDD 行业技术篇、AIDD 行业公司篇后续将会陆续发出来，敬请关注！

AIDD 概览篇 我们将从 AI+ 医疗角度切入，进而过渡到 AIDD 方向。内容主要包括创新药行业现状、新药上市审批流程及政策、创新药市场的需求活力与痛点等，并主要阐述 AIDD 行业的发展现状，包括 AIDD 的一级市场融资情况、AIDD 的新兴企业、传统 Big Pharma 企业的 AIDD 参与者、AIDD 目前主要布局的适应症、AIDD 目前的发展阻碍以及发展趋势等。**AIDD 技术篇** 我们将根据学术文献阅读分析结果，从新药研发的底层机理入手，按新药研发技术环节较为深入的剖析以深度学习的卷积神经网络、图神经网络、生成式对抗神经网络等为代表的算法在新药研发领域的应用。**AIDD 公司篇** 我们将较为全面的梳理 AIDD 参与者，并深度剖析目前 AIDD 领域主要新兴公司及二级市场主要参与者（包括传统 Big Pharma 和 CRO 公司）。本篇将按新药研发的环节着重分析国内乃至全球走在前端的 AIDD 企业业务及布局情况，对于重点公司我们将做对比分析。

希望通过本系列 AIDD 行业深度报告抛砖引玉让广大投资者初步了解 AIDD 行业，进而关注国内外优质的新兴 AIDD 公司中的潜在标的。对于新兴的 AIDD 公司建议广大投资者从以下角度关注：相应企业在 AIDD 领域专利和论文情况、企业中技术专家团队（尤其是生物和 AI 复合背景专家）占比、与大药企及科研院所的合作情况、在研管线推进进展情况（若有）、高水平的 AIDD 技术推广情况（如主持筹办大型 AIDD 行业论坛、技术论坛等）等角度来初步评价相关公司。国内公司例如晶泰科技、Insilico Medicine（英矽智能）等公司（待上市）建议广大投资者重点关注。

另外，从国内二级市场角度来看，药明康德值得关注。药明康德作为国内 CRO 领域龙头，旨在通过高性价比、高效率的一体化研发服务帮助全球客户缩短药物研发周期、降低药物研发成本，打通了早期研发-临床试验-药品生产的整体服务流程，为客户提供一站式的 CRO 服务。从 2013 年到 2017 年底，药明康德分散地投资了大量研发创新药的初创企业，兼有人工智能、基因大数据和基因检测等。2018 年药明康德开始深度布局人工智能和基因大数据企业，尤其是 2019 年 1 月投资美国的人工智能新药研发企业 Schroödinger，表明药明康德对未来新药研发行业的人工智能和大数据的重点关注。药明康德通过探索包括人工智能、医疗大数据、自动化实验室等前沿科技，力求将其早日运用于新药研发流程当中，帮助客户提高研发效率，在最大程度上降低新药研发的门槛。同时，药明康德本身就有药物生产能力和计算机辅助药物设计开发团队来进一步提升自身赋能新药研发的能力。近年，药明康德在人工智能药物研发领域格外关注和活跃。

1、AI+医疗多点开花，AIDD 引人关注

1.1 AI+ 医疗市场概况

1.1.1 AI+ 医疗领域发展历程及现状

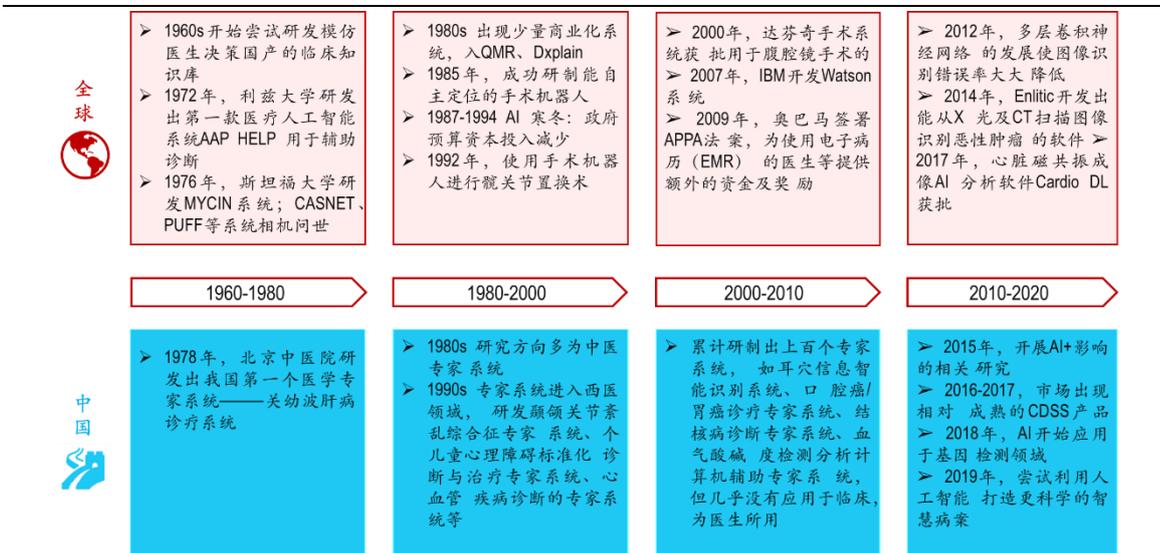
1956 年人工智能 (AI) 开始成为独立的研究领域, 经由神经网络和模糊逻辑到深度学习, 技术起伏发展。20 世纪前, 中外对 AI 在医疗领域的研究集中在临床知识库上, 但由于大多数临床知识库必须运行在 LISP 设备上, 当时 LISP 设备尚不能联网且价格昂贵等原因, 临床知识库并没有广泛地应用于临床中。国内 AI 在医疗最早的应用可以追溯到 1978 年的“关幼波肝病诊疗程序”, 1996 年我国专注人工智能研发的企业开始出现, 2000 年-2015 年期间, 国外的研究重点为 AI 在临床知识库外的应用, 如手术机器人应用落地、鼓励发展电子病历等。而中国仍以研究更多类疾病的临床知识库为主, 发展相对缓慢。2015 年-2017 年, 由于 AI 在图像识别方面的准确率有大幅度提升, AI+影像得以快速发展。同时, 得益于在临床知识库的长期研究, CDSS 产品走向成熟。2018 年后, 中国 AI+医疗进入稳定发展阶段, 智慧病案等新产品相继面世, 目前国产手术机器人尚在研究阶段。另外, 在 2015 年赛道内厂商数量达到峰值开始进行整合, 2018 年全国已有上千家三甲医院引入 AI 产品。

图表 1. 国内 AI+医疗发展历程



资料来源: Analysys 易观, IT 桔子, 中银证券

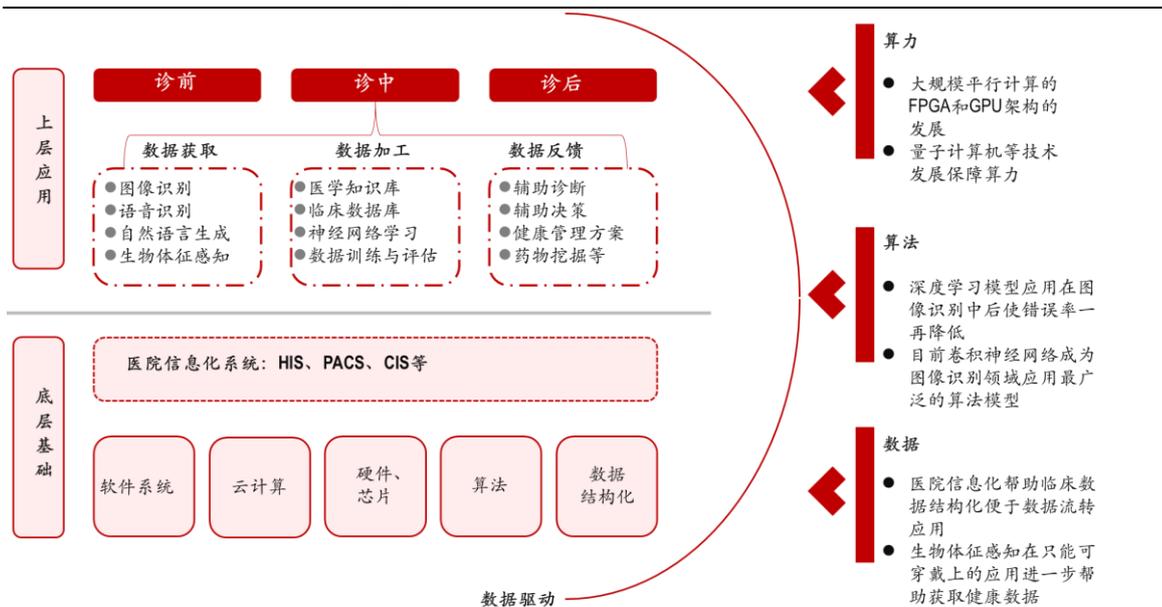
图表 2. 中国及全球 AI+医疗发展历程详情



资料来源: 艾瑞咨询研究院, 中银证券

总之，人工智能概念由来已久，但是曾经碍于算力、算法不成熟、数据资源的缺乏，未能得到广泛应用。时至今日，随着计算能力、模型算法、数据资源等条件的日渐成熟，人工智能开始逐步在各个行业应用并落地。AI+医疗行业泛指应用人工智能技术，包括但不限于智能传感器、神经网络芯片、开源开放平台等技术应用于医疗健康领域。医疗领域中，例如医院信息化为医疗 AI 的介入搭建了基础，人工智能从数据获取到数据加工最终给予反馈的工作逻辑可以应用于医疗行业诊前、诊中、诊后的各个模块。

图 3. 医院信息化契 AI 落地生态，AI 反哺医疗行业发展

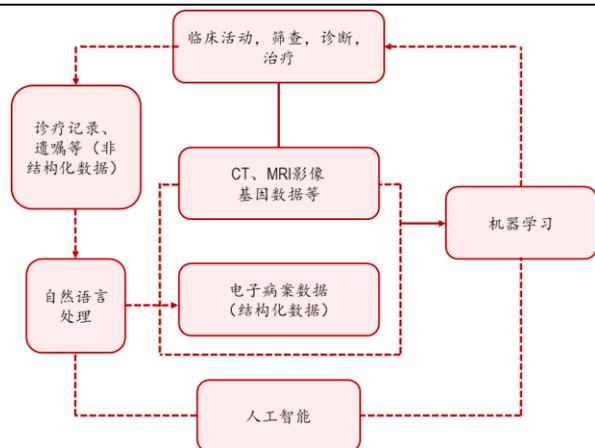


资料来源: Analysys 易观, 中银证券

1.1.2 AI+ 医疗领域主要算法应用

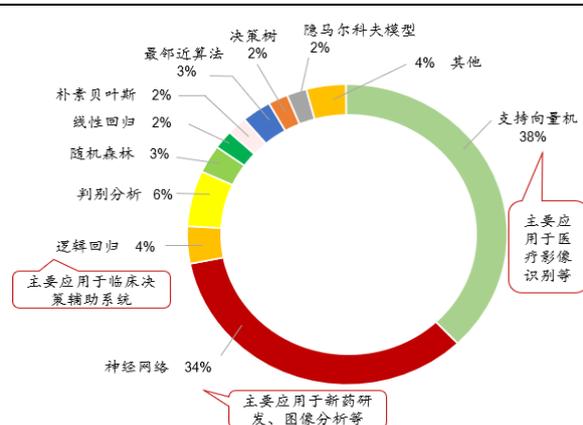
目前传统的机器学习和深度学习算法已被广泛的用来处理临床研究和医疗服务中的结构化数据，如医学影像数据、基因数据和生物标志物数据；而非结构化数据，如人工笔记、医学期刊与患者调查等则依靠专门的医学自然语言处理技术来分析。艾瑞咨询研究院通过 PubMed 公开数据整理，2012-2020 年在医学文献中使用到的热门机器学习算法和深度学习算法包括：1) 支持向量机 (38%)，主要应用于识别成像生物标志物和医疗影像分析；2) 神经网络 (34%)，主要应用于生化分析、图像分析和药物开发；3) 逻辑回归 (4%)，主要用于疾病风险评估和临床决策辅助系统。

图 4. 2020 年中国院内机器学习与自然语言应用场景



资料来源: 艾瑞咨询研究院, 中银证券

图 5. 2012-2020 年医学文献中热门应用算法

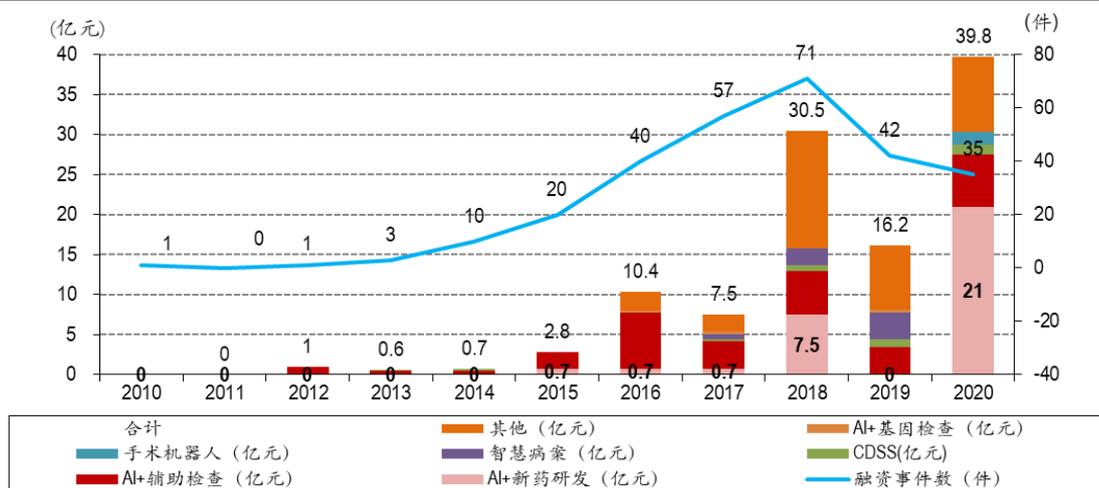


资料来源: 艾瑞咨询研究院, 中银证券

1.1.3 我国 AI+ 医疗投融资分析

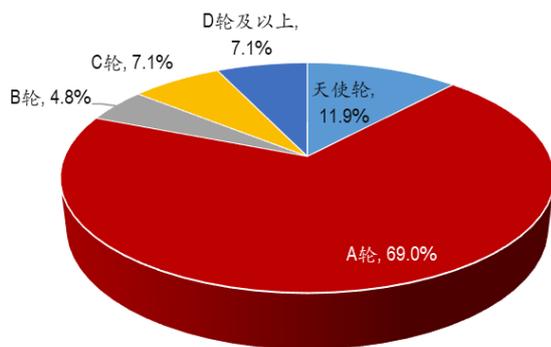
目前，随着国际和国内 AI 医疗的热度持续上升，资本投入了更多关注。2020 年我国医疗融资事件数递减，但融资总额却强劲走高，到达历史最高的接近 40 亿元，其中 AI 新药研发是最热门医疗 AI 融资领域。AI+影像占融资额的比例连续三年保持在 20%左右，成为另一热门融资领域。对比 2019 年与 2020 年的融资项目轮次，其中天使轮、A 轮与 B 轮占融资项目的比例由 85.7%降低到 70.6%，说明市场成熟度有所提高。同时笔均融资额从 0.39 亿元/笔上升至 1.14 亿元/笔，目前行业处于快速成长期。

图表 6. 2010-2020 中国 AI+ 医疗总融资金额与融资事件数



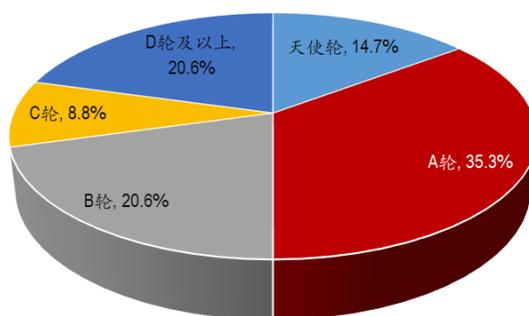
资料来源：艾瑞咨询研究院，中银证券

图表 7. 2019 年中国 AI+ 医疗项目融资轮次分布



资料来源：艾瑞咨询研究院，中银证券

图表 8. 2020 年中国 AI+ 医疗项目融资轮次分布



资料来源：艾瑞咨询研究院，中银证券

1.1.4 中国 AI+ 医疗政策导向

医药行业层面：无论是药品供给侧改革还是公立医院改革，在产品创新及信息流通方面提高了要求倒逼技术革新；技术创新层面：新兴技术助力医疗行业改革，加速医疗行业升级，AI、大数据、云计算等新兴产业发展为大健康行业提供了包括智能硬件、AI 药物挖掘、人体器官 3D 打印等新的赛道。总体来说，医疗行业政策改革顺应行业发展趋势，政策驱动也更加加速科技创新，进一步推动医疗 AI 的发展落地。

图表 9. AI+医疗相关政策

发布日期	主要政策	相关单位	发布内容
2014年1月	《关于加快实施信息惠民工程有关工作通知》	发改委	信息惠民工程实施的重点是解决社保、医疗、教育等九大领域的突出问题；各地方在实施信息惠民工程中，要注重资源整合，逐步实现公共服务事项和社会信息服务的全人群覆盖、全天候受理和“一站式”办理。
2015年5月	《关于全面推开县级公立医院综合改革的实施意见》； 《关于城市公立医院综合改革试点的指导意见》		医保支付方式改革，上下联动（分级诊疗），信息化
2015年8月	《关于改革药品医疗器械审评审批制度的意见》	国务院	加快审评审批列入国家科技重大专项和国家重点研发计划的药品，转移到境内生产的创新药和儿童用药。将仿制药由现行的“仿已有国家标准的药品”调整为“仿与原研药品质量和疗效一致的药品”。
2015年12月	《中西部地区村卫生室信息化建设项目管理方案的通知》	卫生部	为中西部地区 90% 的村卫生室配备电脑，70% 以上的农村居民配备健康卡，开发整合村卫生室信息化软件，加快区域（地级市和县级）卫生信息平台建设
2016年3月	《机器人产业发展规划（2016—2020年）》	工信部、发改委、财政部	促进服务机器人向更广领域发展，实现系列化，个人/家庭服务机器人实现商品化
2016年5月	《“互联网+”人工智能三年行动实施方案》	工信部、科技部、发改委、科技部、工业和信息化部、中央网信办	支持在制造、教育、环境、交通、商业、健康医疗、网络安全、社会治理等重要领域开展人工智能应用试点示范，推动人工智能的规模化应用
2016年6月	《关于积极推动医疗、医保、医药联动改革的指导意见》		加大医保管理创新机制创新，促进医药分开
2016年6月	《关于促进和规范健康医疗大数据应用发展的指导意见》	国务院	支持研发健康医疗相关的人工智能技术等。加快研发成果转化，提高数字医疗、物联网等设备生产制造水平，促进健康医疗智能装备产业升级
2016年9月	《智能硬件产业创新发展专项行动（2016-2018年）》	工信部、发改委	鼓励医疗机构加快信息化建设进程，推动智能医疗健康设备在诊断、治疗、护理、康复等环节的应用
2016年12月	《“十三五”国家信息化规划》	国务院	推动健康医疗相关的人工智能、生物三维打印、医用机器人、可穿戴设备以及相关微型传感器等技术和产品在疾病预防、卫生应急、健康保健、日常护理中的应用
2017年1月	《“十三五”全国人口健康信息化发展规划》	卫健委	充分发挥人工智能、虚拟现实、增强现实、生物三维打印、医用机器人、可穿戴设备等先进技术和装备产品在人口健康信息化和健康医疗大数据应用发展中的引领作用，促进由医疗救治向健康服务转变，实现以治疗为中心向以健康为中心的转变
2017年2月	《智慧健康养老产业发展行动计划（2017年-2020年）》		发展健康养老数据管理和智能分析系统
2017年6月	《“十三五”卫生与健康科技创新专项规划》	卫健委	数据分析和机器学习等技术研究，开发集中式智能和分布式智能等多种技术方案，重点支持机器智能辅助个性化诊断、精准治疗辅助决策支持系统、辅助康复和照看等研究，支撑智慧医疗发展
2017年7月	《新一代人工智能发展规划》	国务院	推广应用人工智能治疗新模式新手段，建立快速精准的智能医疗体系。探索智慧医院建设，开发人机协同的手术机器人等设备。基于人工智能开展研究和新药研发，推进医药监管智能化
2017年10月	《关于深化审评审批制度改革鼓励药品医疗器械创新的意见》		加强药品医疗器械全生命周期管理
2017年12月	《促进新一代人工智能产业发展三年行动计划（2018年-2020年）》		重点培育医疗影像辅助诊断系统
2017年12月	《促进新一代人工智能产业发展三年行动计划（2018-2020年）》	工信部	到 2020 年，在工业、医疗、金融、交通等领域汇集一定规模的行业应用数据，用于支持创新创业。推动医学影像数据采集标准化与规范化，加快医疗影像辅助诊断系统的产品化及临床辅助应用
2018年1月	《关于改革完善全科医生培养与使用激励机制的意见》		加快培养大批合格全科医生，加强基层医疗卫生服务体系建设
2018年4月	《关于促进“互联网+医疗健康”发展的意见》	国务院	完善“互联网+医疗健康”支撑体系

资料来源：政府官网，中银证券

续 图表 9. AI+医疗相关政策

发布日期	主要政策	相关单位	发布内容
2018年4月	《全国医院信息化建设标准与规范（试行）》	卫健委	利用人工智能技术对疾病风险进行预测，实现医学影像辅助诊断、临床辅助诊疗、智能健康管理、医院智能管理和虚拟助理
2018年7月	《关于深入开展“互联网+医疗健康”便民惠民活动的通知》	卫健委	加快推进智慧医院建设，改造优化诊疗流程。推进智能医学影像识别、病理分型和多学科会诊以及多种医疗健康场景下的智能语音技术应用，提高医疗服务效率
2019年3月	《关于促进人工智能和实体经济深度融合的指导意见》	卫健委	稳步推进教育、医疗、能源、公共安全等领域数据的内部整合、共享与对外开放，制定数据资源清单和开放计划，支持相关企事业单位联合人工智能企业围绕应用场景开展人工智能服务，鼓励优质机构人工智能服务能力和资源向地方开放
2019年8月	《国家新一代人工智能开放创新平台建设指引》	国务院	推广人工智能治疗新模式新手段，探索人机协同智能诊疗体系的建设，加强群体智能健康建设，突破大数据、物联网等关键技术，完善支持人工智能发展的重点政策，完善适应人工智能医疗、保险的政策体系
2020年8月	《国家新一代人工智能标准体系建设指南》	国家标准化管理委员会、网信办、发改委、工信部	在2023年率先在医疗等领域初步建立人工智能标准体系；智能医疗领域，围绕医疗数据、医疗诊断、医疗服务、医疗监管等，重点规范人工智能医疗应用在数据获取、数据隐私管理等方面内容，制定包括医疗数据特征表示、人工智能医疗质量评估等标准

资料来源：政府官网，中银证券

特别值得注意的是 2017 年我国国务院发布的《新一代人工智能发展规划》中提出要发展便捷高效的智能服务，推广应用人工智能治疗新模式、新手段，建立快速精准的智能医疗体系。从 2017 年开始，我国已把人工智能作为一个国策进行推动，近几年的两会上 AI 也被多次写入政府工作报告中。而 AI+医疗则作为 AI 中的先行者，得到了政府的大力倡导。2018 年政府提出人工智能向基层医疗进行渗透，2019 年将 AI+医疗的范围进一步扩大到康养范畴，2020 年进一步提出未来的建设指南，期望在 2023 年在以医疗为代表的人工智能领域中建立一套初步的标准体系规范。

图表 10. 2017-2020 年中国 AI+医疗典型政策分析

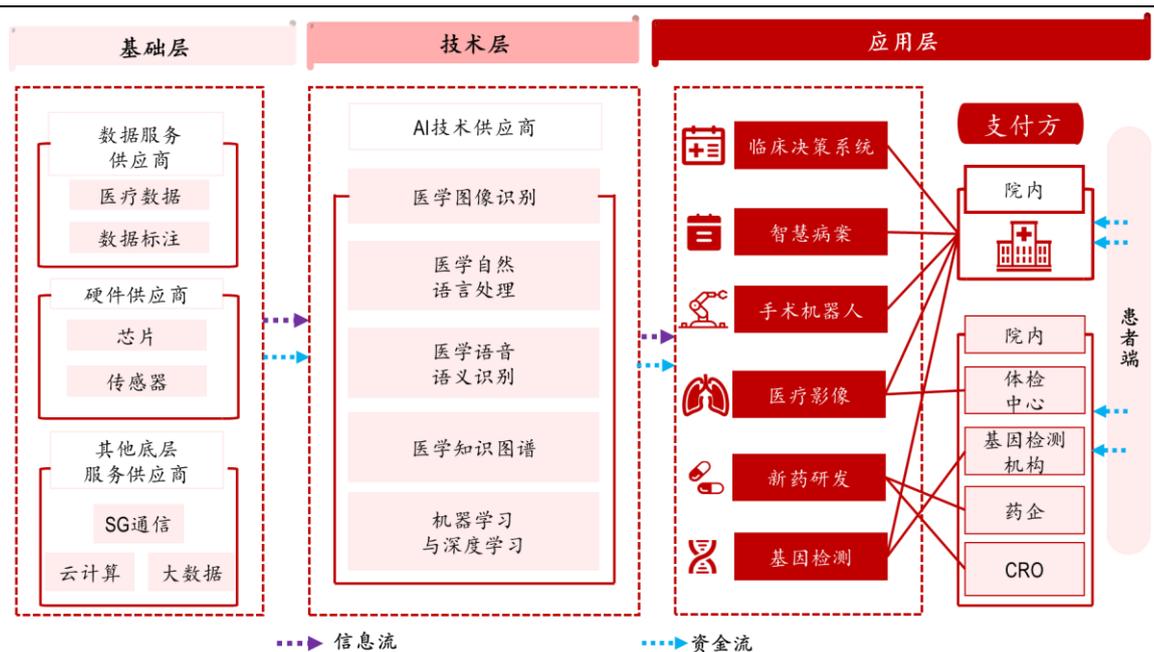


资料来源：艾瑞咨询研究院，中银证券

1.1.5 AI+ 医疗产业链分析

艾瑞咨询研究表明，AI+核心医疗产业链可以分为 AI 基础层，AI 医疗技术层与应用层：1) 基础层，除数据服务外，芯片与通信等基础核心领域已形成牢固的技术壁垒，市场呈寡头局面；2) 技术层，算法、框架以及通用技术则需要长期的投入与研发来攻克，目前各大科技企业与互联网巨头企业基本已完成布局，中小企业生存空间较少；3) 应用层，应用层可触达全医疗服务场景，如院内临床决策系统、手术机器人、智慧病案系统、医疗影像、药企新药研发与基因检测，已有大量的互联网医疗公司和传统医疗公司涌入，而且有大量依托 AI 算法的初创公司产生，本系列报告也将重点 AI 新药研发方向，AI 新药研发技术分析、公司分析等都将较为深入的展开。

图表 11. 2020 年中国 AI+ 医疗产业链

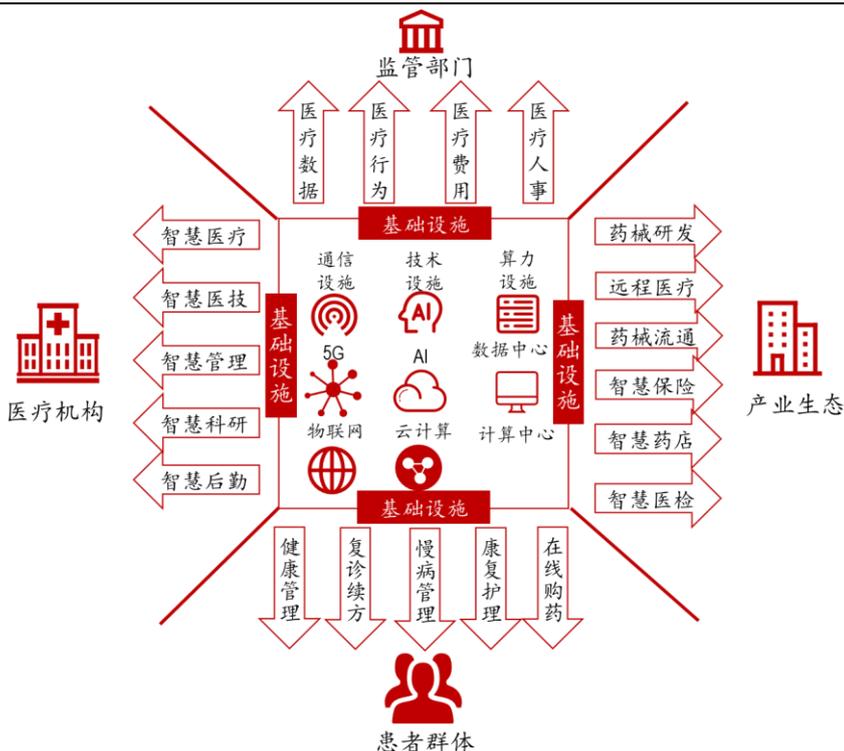


资料来源：艾瑞咨询研究院，中银证券

AI 赋能医疗的发展是向多主体提供智慧服务，面向医疗机构的智慧医院建设，涉及患者、医疗(包括门诊、住院)、护理、医技(含药事)、管理(含行政、业务)、后勤保障、教学科研、区域协调等领域的智慧化建设，是一个系统性的工程。面向监管机构的智慧监管建设，涉及医疗数据、医疗行为、医疗费用、医疗人事等方面的监管，AI 需要助力实现医疗数据的隐私保护和权限分配，医疗行为的科学性和合规性，医疗费用的合理性和真实性以及医疗人事组织的灵活性。

面向产业生态的智慧服务，为医药企业提供靶点发现与探索、化合物筛选与优化、临床前研究、临床研究、注册申报、真实世界研究服务，助力器械企业研发医疗 AI 设备，为互联网医疗企业提供智能问诊、智能续方、智能患者管理服务，为保险企业提供智能分销、智能定价、智能理赔服务，为药店提供智能采购、承接处方、患者管理服务，为第三方医检企业提供影像、病理辅助诊断服务等。面向患者的智慧管理建设，包括健康管理、在线复诊、慢病管理、康复护理、在线购药等服务。

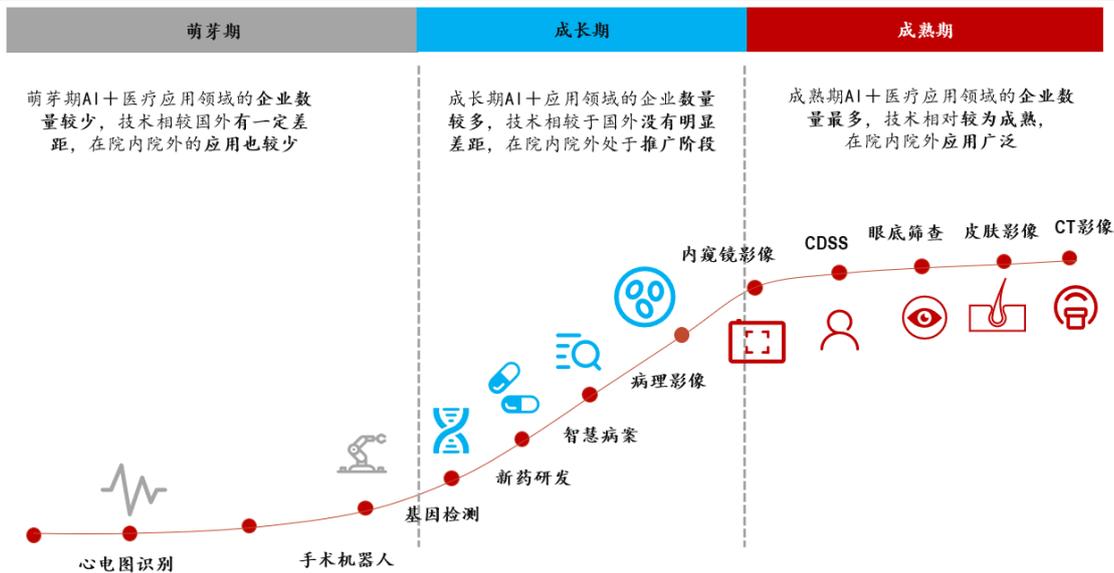
图表 12. AI 赋能的新基建全面助力医疗产业发展



资料来源：蛋壳研究院，中银证券

1.1.6 AI+ 医疗应用成熟度分析

图表 13. 2020 年中国 AI+ 医疗应用成熟度分析



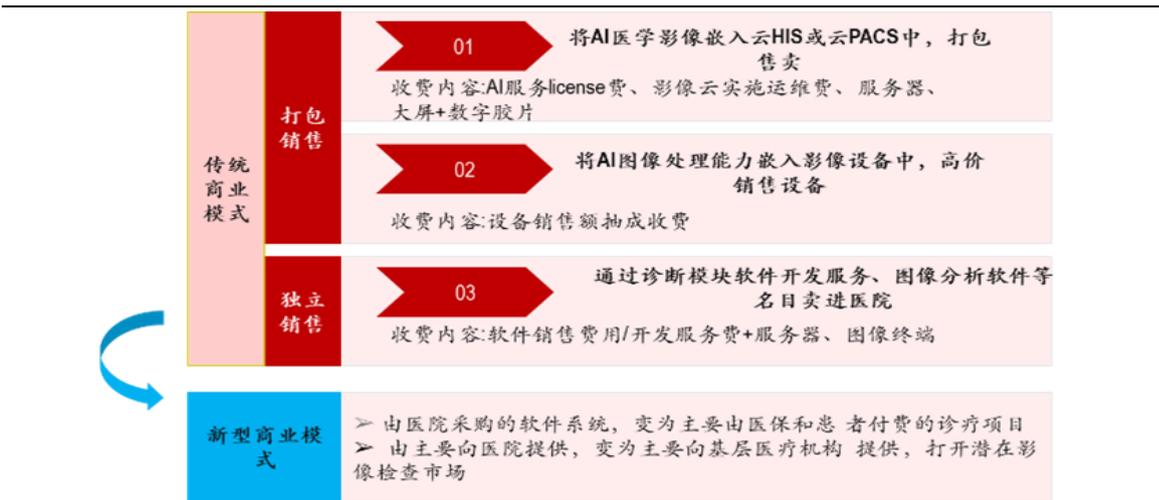
资料来源：艾瑞咨询研究院，中银证券

随着人工智能产品在医疗领域被越来越多使用，更多 AI+ 医疗产品延伸至院内院外更多场景，并更加深入的整合进医疗流程。根据艾瑞咨询报告显示，目前，以 CT 影像、皮肤影像、眼底筛查、病理影像等为代表的 AI+ 辅助检查以及 CDSS 在技术及应用上最为成熟。其中眼底筛查主要集中于糖尿病视网膜病变、视神经疾病的预测和诊断，CDSS 则结合以疾病为中心的知识图谱，智能辅助临床决策并助力医疗机构评审。2019 年以来兴起的智慧病案由于目前 DRGs、DIP 等支付政策推动，目前处于快速增长期。

■ 举例：AI+医疗成熟期应用分析-眼底筛查

眼底疾病是我国目前患者致盲的重要原因，DR（糖尿病视网膜病变）是最常见的病因，且随着糖尿病持续时间的增加，发病率也会逐渐增加。根据艾瑞推算，仅考虑DR的威胁，到2030年，我国每天约有38.4万人需要进行眼底筛查，因而眼底筛查需求十分广阔。艾瑞认为，随着眼底筛查三类证的签发，医保收费名录在AI领域的扩大以及基层医疗机构信息化水平的逐渐增强，未来AI+眼底筛查领域也得以逐渐开始从向医院打包销售和独立销售的传统商业模式进一步扩展至由医保支付购买以及由基层医疗机构购买的新型商业模式。

图表 14. 2020 年中国 AI+眼底筛查商业模式分析

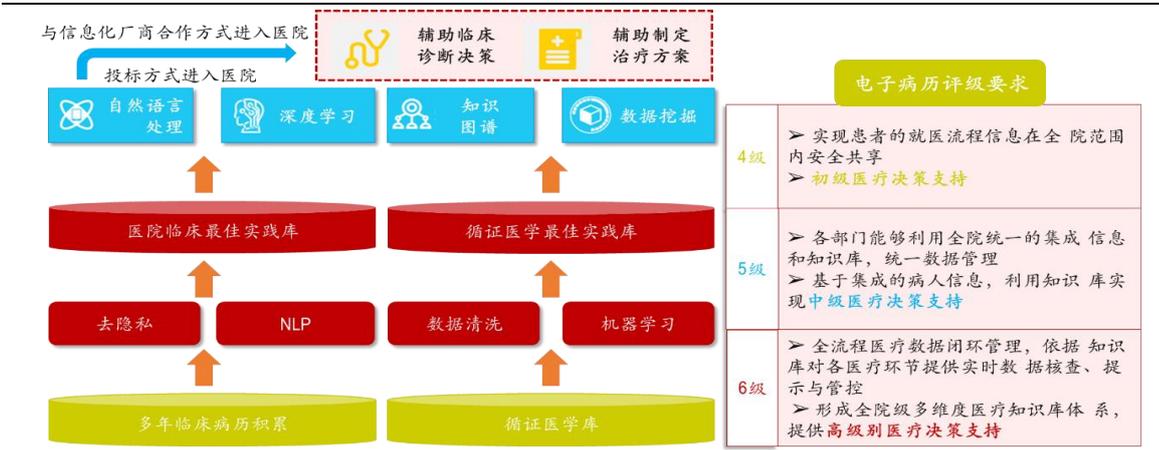


资料来源：艾瑞咨询研究院，中银证券

■ 举例：AI+医疗成熟期应用分析-CDSS

CDSS是AI与医疗在院内融合的体现，也是现代医疗体系中各医疗机构在近年来关注的重点内容。CDSS在临床工作中的应用，使得医师的诊疗水平得到提升，有效降低了临床上的误诊率和漏诊率。CDSS通过真实病历与循证医学库的积累，经过人工智能的优化处理得到最佳实践库，并以此为根据辅助支持医生的临床诊断与治疗决策。2018年12月国家卫健委出台政策，对医院电子病历评级做出了规定，并提出至2020年所有三级医院要达到评级4级以上的要求，而4级以上评级的重要标准之一即是要拥有不同程度的CDSS。这一政策的实施使得CDSS获得了极为广大的发展前景以及巨大的发展潜力。

图表 15. 2020 年中国 CDSS 应用分析及相关电子病历评级要求



资料来源：艾瑞咨询研究院，中银证券

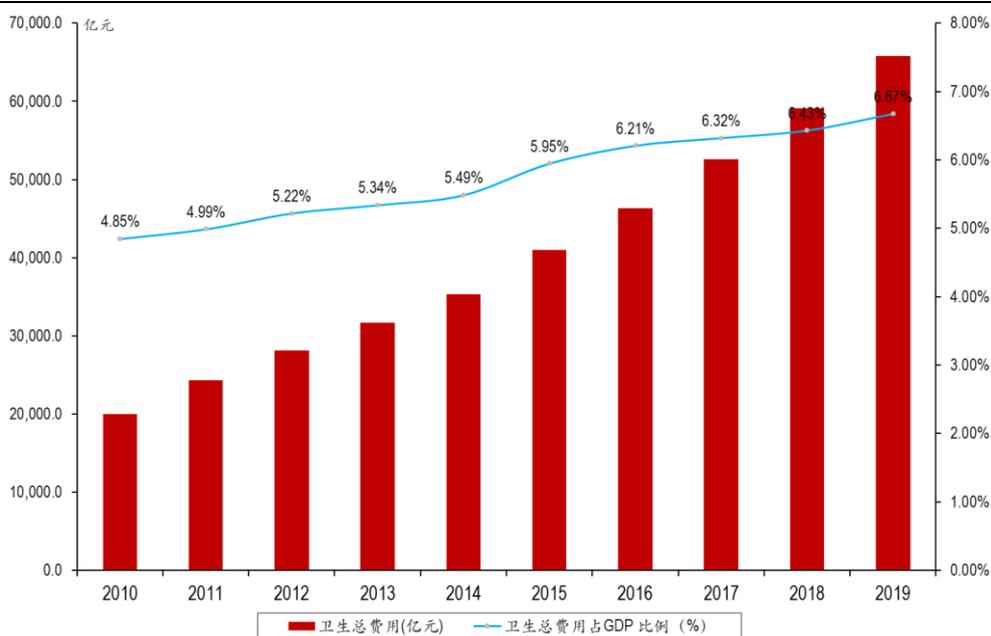
1.2 AI+ 医疗行业的现状分析

1.2.1 从需求端和供给端分析 AI+ 医疗驱动因素

■ AI+ 医疗驱动因素：需求端

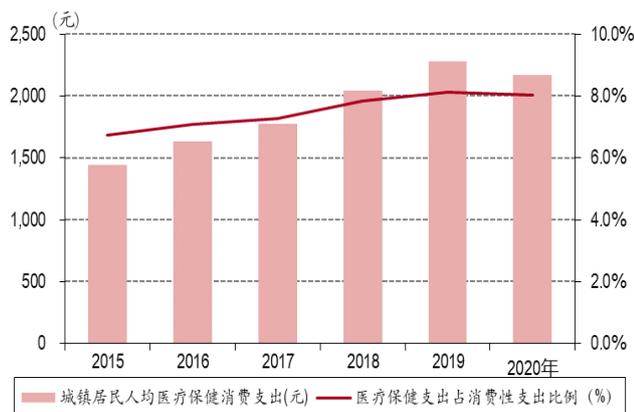
卫生总费用逐年上升，居民在医疗方面的付费意愿不断提升。2018 年中国卫生总费用达到近 6 万亿元，约为 2010 年的三倍，2019 年中国卫生总费用继续提升。同时，2010 年-2019 年期间，卫生费用占 GDP 的比例缓慢上升。从居民个人角度看，受农村整体经济条件及医疗水平等因素影响，2015-2019 年农村居民在医疗保健方面的支出低于城镇居民。城乡居民医疗保障支出占总消费性支出的比例均有所上升，居民在医疗保健方面的付费意愿不断增强。国家、社会各界及居民个人越来越重视卫生健康，未来 AI 不仅能帮助医院及药企的管理与研发，而且能帮助基层医疗机构提升医疗水平，从而满足居民不断增长的医疗保健需求。

图表 16. 我国公共卫生总费用及占 GDP 比重



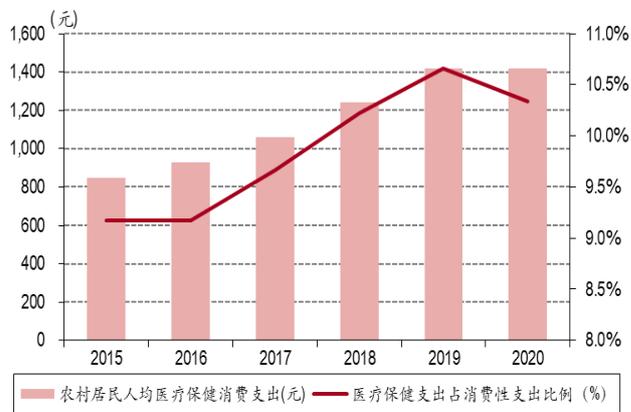
资料来源：国家卫生健康委员会，中国卫生健康统计年鉴，中银证券

图表 17. 2015-2020 年中国城镇居民医疗保健支出



资料来源：国家卫生健康委员会，中国卫生健康统计年鉴，中银证券

图表 18. 2015-2020 年中国农村居民医疗保健支出



资料来源：国家卫生健康委员会，中国卫生健康统计年鉴，中银证券

■ AI+医疗驱动因素：供给端

基层与医院、城市与乡村，医疗技术水平仍有较大差距。根据中国卫生健康统计年鉴数据显示，2018年全国医疗卫生机构数量接近10万家，其中近95%为基层卫生机构。基层卫生机构中，社区卫生技术人员工作年限多在10-30年，但高水平人员较少，取得正高/副高资格的医生占比仅有5.1%。提升基层医院尤其是社区医院医疗技术人员的综合能力能够减少居民对于去基层医疗机构就医的顾虑，促进分级诊疗制度的落实。分城市与乡村来看，城市每千人口卫生技术人员总数达10.91人，其中药师、检验技师、影像技师等卫生技术人员占比相对较低。城乡间每千人口卫生技术人员总数仍有较大差距，农村居民在医疗方面有较强付费意愿，但能够获得的医疗资源有限。未来AI+医疗通过向乡村医疗卫生机构提供标准化的产品，能在一定程度上弥补城乡间的医疗资源差距。

1.2.2 AI+医疗痛点分析

图表 19. 2020 年中国 AI+医疗痛点分析



资料来源：艾瑞咨询研究院，中银证券

AI+医疗存在技术难点与标准缺失，打通数据壁垒成为关键。随着我国医疗体制改革的深化、分级诊疗制度的落实，政府开始加大力度解决医疗资源分配问题以及医疗服务效率问题。其中，医疗人工智能的广泛应用在提高医疗质量和效率、减少误诊误治方面发挥了重要作用。然而，目前AI+医疗仍存在医学数据相关问题、复合人才短缺、行业标准缺失以及医疗科研转化为成熟产品的周期过长等问题。其中，数据的获取、使用与数据共享是阻碍AI+医疗发展的最大因素。

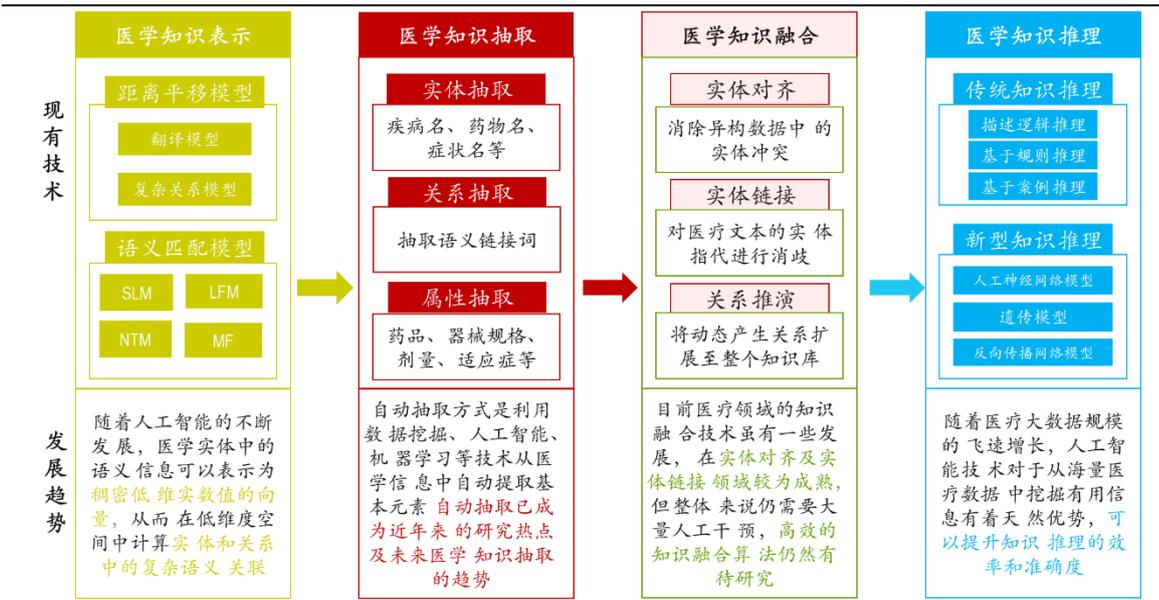
1.2.3 AI+医疗未来趋势

医疗AI方兴未艾，从AI算法知识图谱到应用拓展都将进一步完善并继续深入。

■ AI+医疗图谱趋势：AI助力医学知识图谱不断进步，赋能临床决策等多应用场景

医学知识图谱为医疗信息系统中海量、异构、动态的医疗大数据的表达、组织、分析、管理及利用提供了一种更为有效的方式，使系统的智能化水平更高，更加接近于人类的认知思维。医学知识图谱的构建流程大致分为四个步骤，即医学知识表示、医学知识抽取、医学知识融合、医学知识推理，受益于人工智能的不断进步，这四个步骤都取得了较大的进步。

图表 20. 2020 年中国医学图谱现有技术与发展趋势



资料来源：艾瑞咨询研究院，中银证券

AI+医疗算法趋势：突破 AI 技术障碍，与医疗领域产生更深度融合

医疗与人工智能深度融合已是大势所趋，人工智能理论奠基人特伦斯·谢诺夫斯基在 2019 年其新书《深度学习：智能时代的核心驱动力》中预测“基于大数据的深度学习将改变医疗行业，对疾病提供更快速准确的诊断与治疗，甚至未来癌症将变得不再可怕。”通过深度学习的诊断，医生可以将癌症诊断的准确度从 0.966 提高到 0.995。误判的情况将大大减少，更多生命将被挽救。具体而言，未来 AI+医疗在技术上的突破将包括算法拟合度进一步的优化、算法泛用性的增强、对隐私信息的保护、对 AI+医疗产生的结果可解释性的加强，以及通过增加可靠验证而不断降低 AI+医疗可能发生不良医疗事件的风险。

图表 21. 2020 年中国 AI+医疗技术趋势



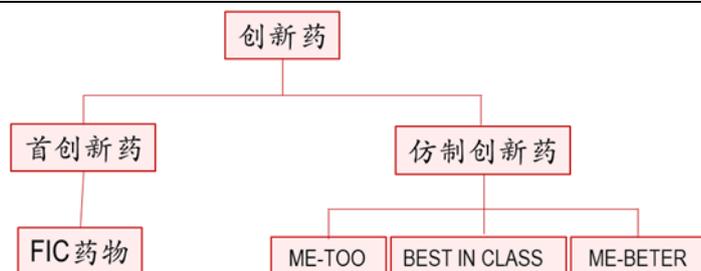
资料来源：艾瑞咨询研究院，中银证券

2、反摩尔定律的制药行业，AIDD 带来行业新变局

2.1 创新药行业概览

2.1.1 创新药相关概念

图表 24. 创新药相关概念



资料来源：药智网，中银证券

FIC(first in class)：首创新药一般情况下是全新的化合物，同时靶点也是新的，是新药理机制的第一代药物。具体来说，首创新药指的是医药公司基于最新疾病学研究的重要突破，找到一些候选靶点，从无到有逐步合成候选化合物，通过反复试验筛选，最终发现既满足治疗效果又满足人体安全性（耐受程度、药代动力）要求的药物。首创新药的研发投入大，失败率高，但是一旦成功会是药物治疗领域的重大突破，收益也十分巨大，研发投入几十亿美元的重磅新药一般都是此类型。

Me-too、me-better、best in class 类药物指的是医药公司根据公开的 fist in class 药物信息，充分研究其分子结构以及化学特性，在其原有结构上进行合理修改，得到一个分子结构和原 FIC 药物不同，但是药效近似的药物。由于是在已经研究出来的 FIC 药物基础上进行修改，研发风险大大降低，但是依然需要通过大量反复地临床试验，研发费用依旧较高，在国内一般会几亿至十亿元的量级。根据最终药物实际疗效的优劣程度，依次分为 Me-too、me-better、best in class 等多种类型。这些药物面临的市场竞争一般比 FIC 类药物要大得多。

2.1.2 创新药分类及研发概况

国际上药品通常可区分为化学小分子药和生物大分子药（生物技术药物），其中，小分子药物是化学合成的活性物质小分子，小分子成分可制成易于被机体吸收的片剂或胶囊。因体积较小，小分子几乎可到达体内的任一目标。此外，凭借其小巧的结构与化学组成，小分子一般可轻易穿透细胞膜。生物大分子药物是一类利用现代生物技术方法生产的源自生物体内并被用于疾病的诊断、治疗或预防的生物大分子，目前生物技术药物包括 DNA 重组技术生产的蛋白质、多肽、酶、激素、疫苗、单克隆抗体和细胞因子药物，也包括蛋白质工程技术生产的上述产品的各类修饰物，还包括用于基因治疗的基因、反义寡核苷酸和核酶及病毒和非病毒基因递送载体等。与化学合成药物相比，生物大分子药物具有相对分子量大，结构复杂、不易透过生物膜、给药剂量低和易在体内降解等特点。

在新药研发领域中，因新药发现阶段针对的是结构简单、性质已知的小分子化合物，小分子药物研发的进入门槛较低，但同时研发成功率也较低。小分子药物的研发周期长，从先导化合物的发现到临床研究是一个长期、艰难和昂贵的过程。但当化学小分子药物专利到期后，由于药物分子结构明确、简单，仿制药相对直接和简单，药物价格会有大幅降低。大分子药物的开发成功率稍高，但大分子药物研发初始资金投入巨大，开发门槛高，生物技术水平和质量控制水平要求高，对新药研发企业有极严格的要求。相应的，生物仿制药开发困难，生产工艺和质控复杂，需要大量的前期投入，对开发者和监管者都带来很高的挑战，所以生物仿制药并不能显著降低原研药价格。

图表 25. 化学小分子药和生物大分子药特征对比

对比特征	化学小分子药		生物大分子药		
	多肽和蛋白	核酸	单克隆抗体 (mAb)	抗体药物偶联物 (ADC)	
相对分子质量	200~700	1,500~7,000	6,000~18,000	150,000	150,000
给药途径	多为口服, 患者依从性高	静脉注射或皮下给药	静脉注射或皮下给药	静脉注射或皮下给药	静脉注射
吸收	生物利用度差异大				
分布	分布广泛	组织分布有限, 多分布在血液	肝脏、肾脏高度分布, 心脏、脾脏、胰腺、中枢神经系统几乎无分布	心脏、脾脏、胰腺、中枢神经系统分布最少	抗体药物偶联率 (DAR) 小于 4, 和 mAb 分布一致。DAR > 4, 肝分布增加, 清除加快
代谢	CYP450 酶系	蛋白酶	核酸酶	蛋白酶	蛋白酶和 CYP450
排泄	不同程度的胆、肾排泄	以氨基酸或小肽的方式重利用或经肾排泄	以核酸片段的方式经肾排泄	以氨基酸或小肽的方式重利用或经肾排泄	包含小分子和 mAb 两种排泄途径
药物-药物相互作用	广泛存在	无	无	无	存在
半衰期	短 (几小时)	短 (几分钟或小时)	未经修饰的核酸, 短 (几秒或分钟), 经修饰的核酸, 长 (几周或月)	长 (数天或月)	抗体部分半衰期长, 小分子化合物持续释放
理化性质	稳定				
研发成功率 (上市数量/进入临床前研究数量)	约 1/20		约 1/8~1/7		
生产难度	低		高		
仿制成本	低		高		
价格	大部分较低		较高		
仿制药价格	较原研药有显著降价		一般不会显著降低原研药价格		

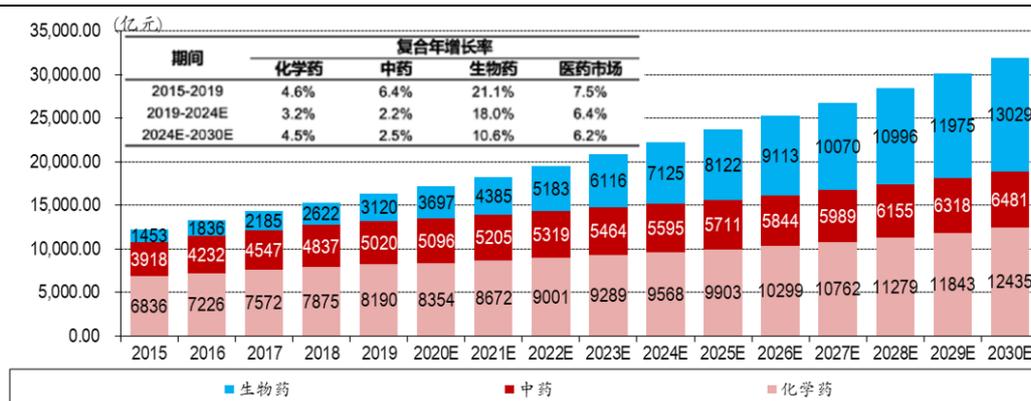
资料来源:《药学进展 2018》, 中银证券

2.2 国内外医药市场规模及上市销售情况

2.2.1 国内外医药市场规模

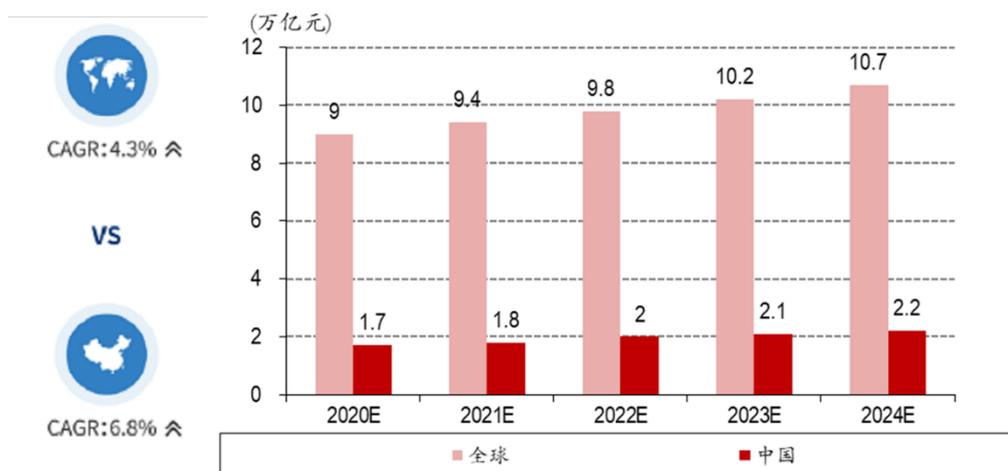
在 2019 年时, 中国医药市场规模达到 16,330 亿人民币, 其中化学药品市场是中国医药市场中最大的细分领域, 达到 8,190 亿人民币。从 2015 年至 2019 年的复合年增长率为 4.6%。到 2024 年, 这一细分市场预计将增长至 9,568 亿人民币, 从 2019 年到 2024 年的复合年增长率为 3.2%, 进一步地, 到 2030 年预计增长至 12,435 亿人民币。2019 年, 生物药是中国医药市场中规模最小的行业, 2019 年生物药市场规模为 3,120 亿人民币。但随着生物类似药在国内的起步, 以肿瘤免疫为代表的创新疗法等推广, 预计到 2024 年, 中国生物药市场规模预计将快速增长到 7,125 亿人民币, 从 2019 年到 2024 年的复合年增长率为 18.0%, 远高于同期全球生物药市场, 进一步地, 到 2030 年, 增长至 13,029 亿人民币。

图表 26. 2020-2030E 年中国各类药物市场规模 (亿元) 及增长率 (%)



资料来源: 弗若斯特沙利文分析, 中银证券

图表 27. 2020-2024E 年全球以及中国的医药市场规模 (万亿元)



资料来源: 弗若斯特沙利文分析, 中银证券

2.2.2 国内外新药上市销售情况

跟据医药魔方数据显示, 2020 年全球药品销售额最高的 100 个药品中, 小分子药物共 52 个, 销售额达到 1630.2 亿美元, 收入占比 46%。单抗、双抗、ADC (抗体偶联药物)、重组蛋白类生物大分子药物共 42 个, 销售额达到 1720.15 亿美元, 收入占比 49%。疫苗类有 6 个, 销售额为 194.5 亿美元, 收入占比 5%。

图表 28. 2020 年全球药品销售额 TOP100 药物类型汇总

统计项目	化学小分子药	单克隆抗体 (mAb)	生物大分子药			疫苗
			重组蛋白	双特异性抗体 (bsAb)	抗体药物偶联物 (ADC)	
数量	52	29	11	1	1	6
2020 年销售额 (亿美元)	1,630.2	1,271.1	407.1	23.35	18.6	194.5
收入占比 (%)	46	36	11	1	1	5

资料来源: 医药魔方, 中银证券

2.3 创新药上市审批流程

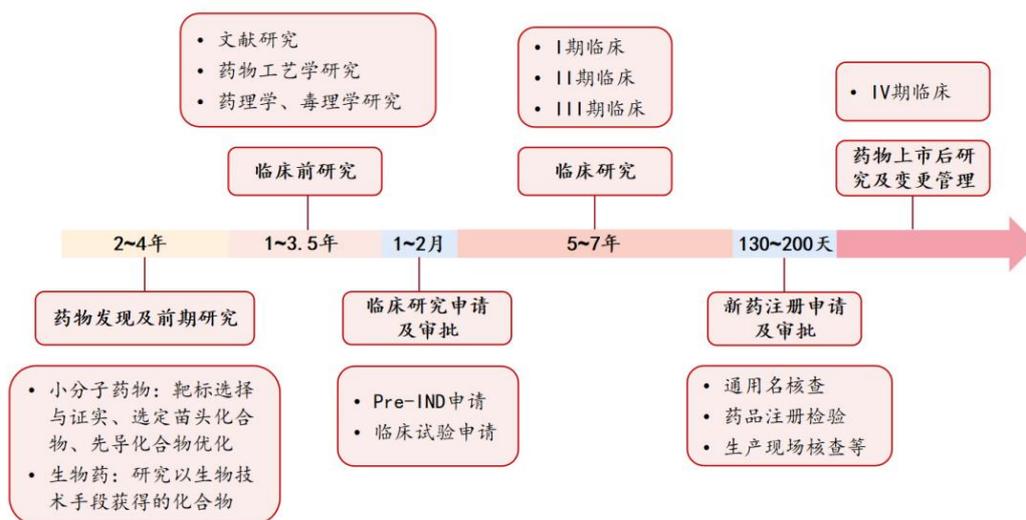
2.3.1 创新药上市常规流程

新药上市要经历化合物的发现和研究、临床前研究、临床研究和上市后研究几个研究阶段, 其中关键的审核流程包括临床研究申请和审核、新药注册申请和审核。制药企业在对药物展开临床研究之前要向国家药品监督管理局药品审评中心 (CDE) 提交 IND 申请, 审核通过后方可进行。临床研究结束后, 需将临床结果研究报告上交 CDE, 提交新药上市注册申请, 经国家药品监督管理局 (NMPA) 直属各药监部门审核通过后, 新药方可上市。

法律法规: 《中华人民共和国药品管理法》(2019 版) 和《药品注册管理法》(2020 版) 贯穿新药上市的全流程, 新药研发企业需遵循全部法律规定。

总管理机构: 国家药品监督管理局 (NMPA), 负责建立药品注册管理工作体系和制度, 制定药品注册管理规范, 依法组织药品注册审评审批以及相关的监督管理工作。NMPA 的各直属单位负责具体执行审批程序。

图表 29. 国内创新药上市流程



资料来源：web of science, 药智网, 《药品注册管理办法》(2020版), 中银证券

(一) 化合物研究阶段

对于化学小分子药物来讲，化合物研究阶段主要包括确定靶点和靶点结构、寻找苗头化合物 (Hits)、确定先导化合物 (Leads) 和先导化合物优化获得临床候选药物 (Clinical Candidate)。对生物制品来讲，化合物研究阶段针对的是通过生物技术手段制备的大分子化合物，包括大分子药物的发现与制备，表达体系的选择 (原核细胞蛋白表达或真核细胞蛋白表达) 等流程。

(二) 临床前研究阶段

化合物研究阶段结束后，新药都要经历临床前研究阶段，这一阶段进行的是体外试验和动物体内试验，通过评价药理学研究、药理毒理的试验结果，为后期开展临床研究提供安全方面的参考数据。临床前研究内容主要包括：

- 文献研究：药品名称和命名依据、证明性文件、立题目的与依据
- 药物工艺学研究：原料药工艺研究，制剂处方及工艺研究，确证化学结构或组份的试验，药品质量试验，药品标准起草及说明，样品检验，辅料，稳定性试验、包装材料和容器有关试验等。对于生物制品，要依次进行摇瓶工艺开发，小试工艺开发和中试工艺放大几个阶段，逐步放大生产工艺使其基本定型。
- 药理学 (药效学和药代动力学)、毒理学研究：在实验室条件下用实验系统 (体外和实验动物体内) 进行的试验。药理学主要研究药物对机体的作用及作用机制、安全药理学试验以及药物在机体的吸收、分布、代谢和排泄；毒理学则需要进行药物的单次给药毒性试验、重复给药毒性试验、生殖毒性试验、遗传毒性试验、致癌性试验、局部毒性试验、免疫原性试验、依赖性试验、毒代动力学试验以及与评价药物安全性有关的其他试验。

法律法规：《药物非临床研究质量管理规范》(GLP, 2017版)

监管机构：国家药品监督管理局 (NMPA)

（三）临床研究（IND）的申请和审批阶段

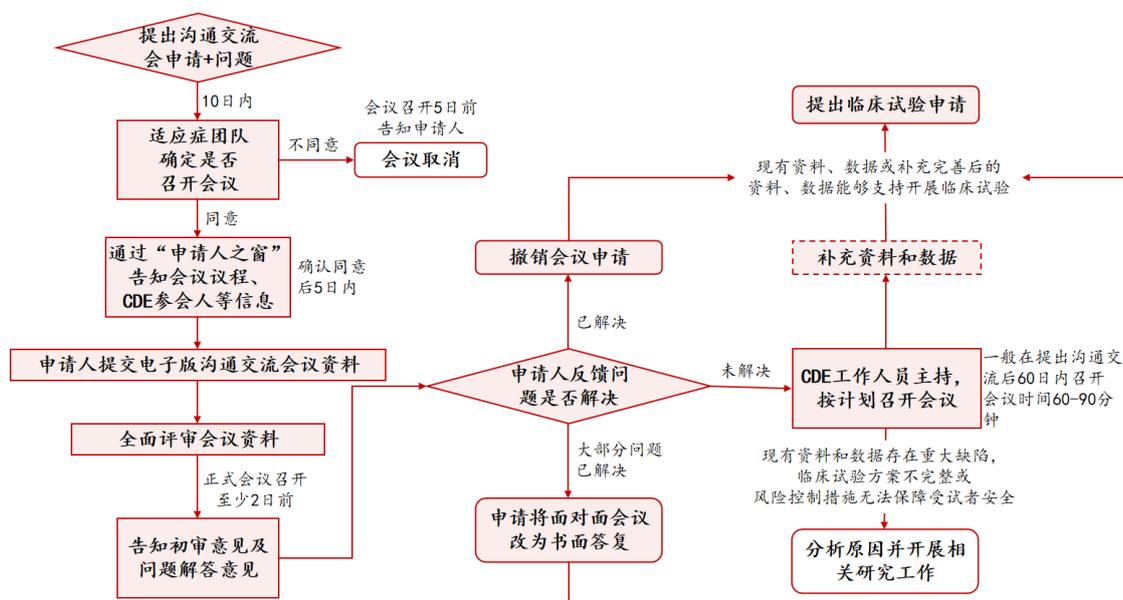
简介：申请 Pre-IND 沟通交流会议进行初审，初审通过后申请临床试验。

■ Pre-IND 沟通交流会议

申请人在提出新药首次药物临床试验申请之前，应向国家药品监督管理局药品审评中心（CDE）提出沟通交流会议申请，并在确保受试者安全的基础上，确定临床试验申请资料的完整性、实施临床试验的可行性。会议由 CDE 工作人员主持，双方围绕药物临床试验方案就申请人提出的关键技术问题，以及已有资料和数据是否支持实施临床试验开展和受试者安全风险是否可控进行讨论，并为后续研究提出要求和建议。

不需申请沟通交流会议的类型：（1）对于技术指南明确、药物临床试验有成熟研究经验，申请人能够保障申报资料质量的，或国际同步研发的国际多中心临床试验申请，在监管体系完善的国家和地区已经获准实施临床试验的，申请人可不经沟通交流直接提出临床试验申请。（2）在已获准开展的临床试验期间，申请增加新适应症的，可直接提出新的临床试验申请。

图表 30. 国内 Pre-IND 沟通交流会议的申请和审批流程



资料来源：国家药品监督管理局关于调整药物临床试验审评审批程序的公告（2018年第50号），《药物研发与技术审评沟通交流管理办法》，中银证券

（四）临床研究阶段

在临床试验研究申请审核通过后，新药可进入到临床研究阶段，临床研究分为 I、II、III 期三个阶段：

- I 期临床试验初步的临床药理学及人体安全性评价试验。观察人体对于新药的耐受程度和药代动力学，为制定给药方案提供依据。参与试验的人数为 20~30 例。
- II 期临床试验治疗作用初步评价阶段。其目的是初步评价药物对目标适应证患者的治疗作用和安全性，也包括为设计 III 期临床试验研究和确定给药剂量的方案提供依据。参试病例数要求不少于 100 例。
- III 期临床试验治疗作用确证阶段。其目的是进一步验证药物对目标适应证患者的治疗作用和安全性，评价其利益与风险关系，最终为药物注册申请的市在提供充分的依据。多为国际多中心临床试验，参试病例数不少于 300 例。

在临床试验过程中，申办者应当定期在药品审评中心网站提交研发期间安全性更新报告。研发期间安全性更新报告应当每年提交一次，于药物临床试验获准后每满一年后的两个月内提交。药品审评中心可以根据审查情况，要求申办者调整报告周期。对于药物临床试验期间出现的可疑且非预期严重不良反应和其他潜在的严重安全性风险信息，申办者应当按照相关要求及时向药品审评中心报告。

法律法规：《药物临床试验质量管理规范》（GCP，2020 版），《临床试验数据管理工作技术指南》（2016 版）

监管机构：国家药品监督管理局药品审评中心（CDE），伦理委员会

■ 临床试验申请

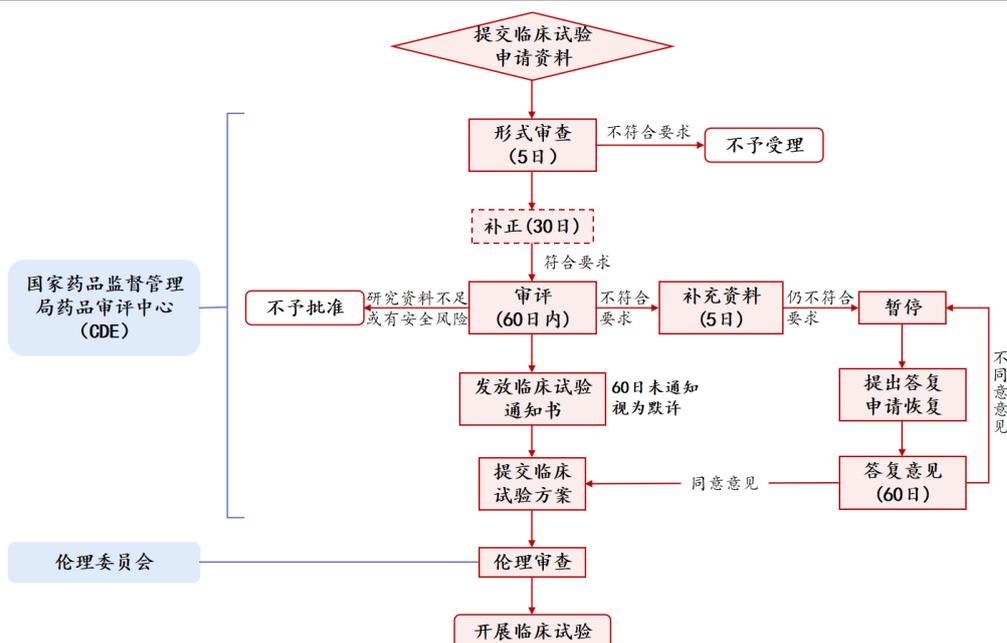
根据 2020 年新版《药品注册管理办法》，申请人完成支持药物临床试验的药学、药理毒理学等研究后，提出药物临床试验申请的，应当按照申报资料要求提交相关研究资料。经形式审查，申报资料符合要求的，予以受理。药品审评中心应当组织药学、医学和其他技术人员对已受理的药物临床试验申请进行审评。另外，开展药物临床试验，应当经伦理委员会审查同意。

对药物临床试验申请应当自受理之日起六十日内决定是否同意开展，并通过药品审评中心网站通知申请人审批结果；逾期未通知的，视为同意，申请人可以按照提交的方案开展药物临床试验。获准开展药物临床试验的，申办者在开展后续分期药物临床试验前，应当制定相应的药物临床试验方案，经伦理委员会审查同意后开展，并在药品审评中心网站提交相应的药物临床试验方案和支持性资料。

法律法规：《药物研发与技术审评沟通交流管理办法》（2020 版），《药品注册管理办法》（2020 版）

审批机构：国家药品监督管理局药品审评中心（CDE），主要负责执行各类审批流程，主要负责药物临床试验申请、药品上市许可申请、补充申请和境外生产药品再注册申请等的审评；伦理委员会，指由医学、药学及其他背景人员组成的委员会，其职责是通过独立地审查、同意、跟踪审查试验方案及相关文件、获得和记录受试者知情同意所用的方法和材料等，确保受试者的权益、安全受到保护。多为医院系统开设，一般不隶属于药监机构。

图表 31. 临床试验申请一般审批流程



资料来源：《药品注册管理办法》（2020 版），中银证券

（五）新药上市注册阶段

制药企业在完成支持药品上市注册的药学、药理毒理学和药物临床试验等研究，确定质量标准，完成商业规模生产工艺验证，并做好接受药品注册核查检验的准备后，提出药品上市许可申请，按照申报资料要求提交相关研究资料。经对申报资料进行形式审查，符合要求的，予以受理。

申报药品拟使用的药品通用名称，未列入国家药品标准或者药品注册标准的，申请人应当在提出药品上市许可申请时同时提出通用名称核准申请。药品上市许可申请受理后，通用名称核准相关资料转药典委，药典委核准后反馈药品审评中心。

此后，药品审评中心组织药学、医学和其他技术人员，按要求对已受理的药品上市许可申请进行审评。药品审评中心在受理后四十日内进行初步审查，需要药品注册生产现场核查的，通知国家药品监督管理局食品药品审核查验中心（简称药品核查中心）组织核查，药品核查中心原则上应当在审评时限届满四十日前完成核查工作，并将核查结果等相关材料反馈至药品审评中心。另外，新药注册需进行注册检验，申请人可以在药品注册申请受理前向中国食品药品检定研究院（简称中检院）提出药品注册检验。

最终审评通过，附条件批准药品上市的，发给药品注册证书，并载明附条件批准药品注册证书的有效期、上市后需要继续完成的研究工作及完成时限等相关事项。药品注册证书有效期由药审中心在审评中与申请人沟通交流后根据上市后研究工作的完成时限确定，并经由国家药品监督管理局信息中心进行文件信息归档。

法律法规：《药品注册管理办法》（2020版）

审批机构：国家药品监督管理局药品审评中心（CDE）；

国家药品监督管理局行政事项受理服务和投诉举报中心，在审核流程中负责对申报资料进行形式审查；

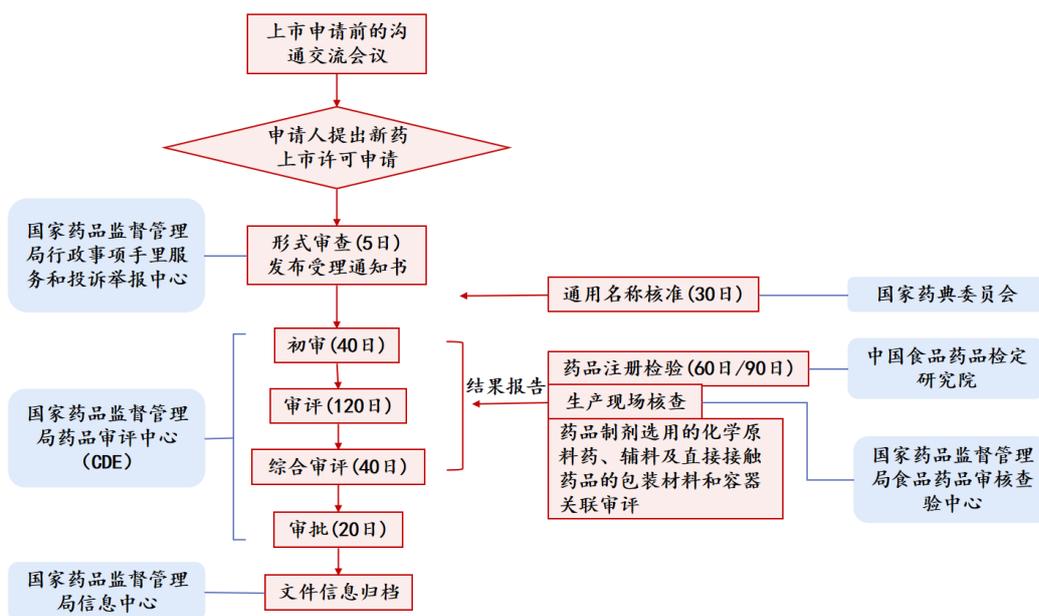
国家药典委员会，在审核流程中负责药品注册中的通用名核准、核查；

中国食品药品检定研究院，在审核流程中承担依法实施药品注册管理所需的药品注册检验；

国家药品监督管理局食品药品审核查验中心，在审核流程中承担药物临床试验、非临床研究机构资格认定（认证）和研制现场检查，承担药品注册现场检查；

国家药品监督管理局信息中心，在药品注册程序中负责中国食品药品监管数据中心的建设，承担监管信息数据的采集、整理、存储、分析、利用、监测、评价等管理工作。

图表 32. 新药上市许可一般审批流程



资料来源：《药品注册管理办法》（2020 版），《药品附条件批准上市申请审评审批工作程序（试行）》（2020 版），中银证券

（六）药物上市后研究阶段

附条件批准上市的药品，药品上市许可持有人应当在药品上市后采取相应的风险管理措施，并在规定期限内按照要求完成药物临床试验等相关研究，以补充申请方式申报。上市后进行临床 IV 期试验阶段，即新药上市后由申请人进行的应用研究阶段。

- IV 期临床试验：其目的是考察在广泛使用条件下的药物的疗效和不良反应、评价在普通或者特殊人群中使用的利益与风险关系以及改进给药剂量等。若已经批准上市的药物在这一阶段发现之前研究中未发现的严重不良反应，可能会被监管部门强制要求下架。参试病例数要求大于 2000 例。

2.3.2 中美新药注册审批制度对比

随着新版《药品注册管理法》的实行，国内新药研发的审批流程正朝着更加规范化、高效率的方向飞速发展。对标美国较为完善的监管环境和审批环节，新版法规及近两年一系列新规章制度的发布，进一步完善了国内新药上市过程中的监管制度，如特殊审批制度、临床试验申请默许规定等。

图表 33. 中美新药审批对比

项目	美国	中国
临床试验默许许可	提交 IND 申请 30 日 无回应视为默许	提交 IND 申请 60 日 无回应视为默许
加速审批程序	优先审评 加速审批 快速通道 突破性疗法	突破性治疗药物 附条件批准 优先审评审批 特别审批
伦理委员会监管	《机构审查委员会注册法规》，规范化的伦理审查模式	不隶属于药监机构，目前无针对性监管政策
知识产权保护	《Hatch-Waxman 法案》	2020 年发布《药品专利纠纷早期解决机制实施办法（试行）（征求意见稿）》

资料来源：火石创造，CDE，FDA，中银证券

2.3.3 新药加速上市注册制度

2020年7月8日，国家药监局发布了《突破性治疗药物审评工作程序（试行）》、《药品附条件批准上市审评审批工作程序（试行）》和《药品上市许可优先审评审批工作程序（试行）》三项配套细则文件，以配合2020版《药品注册管理办法》中加快新药上市注册程序的实施。

图表 34. 三种上市审批审评加速通道

附条件批准上市适用条件	突破性治疗药物审评适用条件	优先审评适用条件
<ul style="list-style-type: none"> 治疗严重危及生命且尚无有效治疗手段的疾病以及公共卫生方面急需的药品，药物临床试验已有数据显示疗效并能预测其临床价值的。 应对重大突发公共卫生事件急需的疫苗或者国家卫生健康委员会认定急需的其他疫苗，经评估获益大于风险的。 	<ul style="list-style-type: none"> 用于防治严重危及生命或者严重影响生存质量的疾病。 对于尚无有效防治手段的，该药物可以提供有效防治手段；或者与现有治疗手段相比，该药物具有明显临床优势，即单用或者与一种或者多种其他药物联用，在一个或者多个具有临床意义的终点上有显著改善。 	<ul style="list-style-type: none"> 临床急需、重大传染病和罕见病的创新药和改良新药 符合儿童生理特征的儿童用药品新品种、剂型和规格 疾病预防、控制急需的疫苗和创新疫苗 纳入突破性治疗药物程序的药品 符合附条件批准的药品

资料来源：国家食品药品监督管理局，中银证券

根据新版《药品注册管理办法》，国家药监局对标美国FDA的优先审批程序，建立了四条特殊审评通道：突破性治疗药物、附条件批准、优先审评审批、特别审批程序。定位于药品临床研发阶段的是突破性治疗药物程序；定位于药品上市注册阶段的是附条件批准和优先审评审批程序；特别审批程序针对突发公共卫生事件。四条路径相辅相成，相互交叉，共同加速创新药审评审批。

图表 35. 我国新药加速上市注册制度

特殊审评制度	适用阶段	适用对象	已纳入项目（截至 2021.4.19）
突破性治疗药物	药物临床试验期间	用于防治严重危及生命或者严重影响生存质量的疾病，且阳性的非小细胞肺癌）、耐克替尼片尚无有效防治手段或者与现有治疗手段相比有足够证据表明具有明显临床优势的创新药或者改良型新药等	HS-10296 片（针对 EGFR T790M 突变和/或不耐受的慢性期慢性髓性白血病）等共 48 种新药项目
附条件批准	药品上市注册阶段	（一）治疗严重危及生命且尚无有效治疗手段的疾病的药品，药物临床试验已有数据证实疗效并能预测其临床价值的； （二）公共卫生方面急需的药品，药物临床试验已有数据显示疗效并能预测其临床价值的； （三）应对重大突发公共卫生事件急需的疫苗或者国家卫生健康委员会认定急需的其他疫苗，经评估获益大于风险的。	根据 NMPA 公示信息，2020 年以来，共有新型冠状病毒灭活疫苗（Vero 细胞）、重组新型冠状病毒疫苗（5 型腺病毒载体）、普拉替尼胶囊、布罗索尤单抗注射液等 14 种新药项目通过附条件批准上市
优先审评审批	药品上市注册阶段	（一）临床急需的短缺药品、防治重大传染病和罕见病等疾病的创新药和改良型新药； （二）符合儿童生理特征的儿童用药品新品种、剂型和规格； （三）疾病预防、控制急需的疫苗和创新疫苗； （四）纳入突破性治疗药物程序的药品； （五）符合附条件批准的药品； （六）国家药品监督管理局规定其他优先审评审批的情形。	根据 CDE 公示目录，共 1254 种新品种已纳入优先审评审批程序
特别审批	药品上市注册阶段	在发生突发公共卫生事件的威胁时以及突发公共卫生事件发生后，国家药品监督管理局可以依法决定对突发公共卫生事件应急所需防治药品实行特别审批。	疫情期间，NMPA 特别审批通过： 清肺排毒颗粒—中国中医科学院中 医临床基础医学研究所 化湿败毒颗粒—广东一方制药 宣肺败毒颗粒—山东步长制药 法维拉韦片—海正药业等新药，多个新药为附条件批准上市

资料来源：医药网，《药品注册管理办法》（2020 版），国家药品监督管理局，中银证券

2.3.4 近年来我国创新药监管新举措

我国医药行业正处于“仿制药”向“创新药”战略转型期。自 2015 年以来,我国仿制药一致性评价、两票制、持续推进的药审改革、带量采购等重磅政策重构行业发展逻辑。政策在研发、生产和医保支付等多个环节不断调整,支持真正有临床治疗价值的药物进入医保,这大大促进了创新药的研发与发展,具体到创新药外包服务的细分市场,化学药和生物药外包服务都有不同的增长。

我国的创新药研发主要有三类。其一、“仿制”转型为“创新”,即从研制“Me-too”做起;其二、“Me-better”,围绕原 NCE 结构基础上进行二次创新;其三、“Best-in-class”(BIC),是“Me-better”里更强的一个。对于“First-in-class”(FIC)药物,目前,我国创新药的层次与海外存在一定的差异。海外市场创新药 First-in-class 类居多,FIC 高成本高风险下享受高收益,通常在专利到期之前销售一路上行。

为促进中国医药企业的创新,满足国内患者的用药需求,中国政府开始药品审评审批制度改革。2015 年国务院发布《关于改革药品医疗器械审评审批制度的意见》,提出优化创新药的审评审批程序、鼓励以临床价值为导向的药物创新。2019 年 8 月,《药品管理法》二次修订版颁布,其中第 3 条例提出“全面提升药品质量,保障药品的安全、有效、可及”。在一系列与医药产业相关的监管制度和政策的改革实施下,中国的创新药上市周期缩短。2015 年之前,中国的创新药的批准时间明显落后于海外医疗先进国家,试验推进困难是一大影响因素。但是受临床试验阶段的审批制度的影响却是另一大主要影响因素。中美欧新药上市加快审评审批,每年批准上市新药数量增加,药企研发的积极性得到有效激励。

图表 36. 监管制度和政策的改革实施对创新药上市加速的影响

举措	对创新药上市加速的影响
加入人用药品注册技术要求国际协调会议(ICH)	自 2017 年起,原国家食品药品监督管理局加入 ICH 并在 2018 年成功当选管委会成员并在 2021 年成功 ICH 管理委员会成员。加入 ICH 后推动了中国制度流程标准跟国际接轨,缩短国内与国外的制度流程差异,提高国际竞争力,吸引更多国际创新药企业选择中国作为首批上市国家之一
缩短临床试验申请许可审评流程	国家药监局在 2018 年公布了《关于调整药物临床试验审评审批程序的公告(2018 年第 50 号)》,通过创新药的临床试验申请流程以鼓励创新药的研发,大幅缩短创新药的临床试验需花费的时间
创新药(化学药)Ⅲ期临床试验药学研究信息指南	国家药监局在 2018 年 3 月颁布了该项指导原则,Ⅲ期临床的研究周期较长、受试者较多、临床样品需求量较大,同时伴随研究进展所获得的药学信息也逐渐丰富,本指导原则进一步规范了创新化学药的Ⅲ期临床研究
《药品注册管理办法》的修订	在 2020 年最新版的《药品注册法》中,明确定义了四个审评加速通道,分别是突破性治疗、优先审评、附条件上市、优先审评以及特别审批,为之后的创新药的上市进一步细化了上市申请通道,针对产品类型做不同的审评方案,通过分类来加速创新生物药的上市
增加临床试验机构中心的数量,推行备案制管理	临床试验条件和能力评价被纳入医疗机构等级评审的项目之中,目的在于鼓励更多的医疗机构设立临床试验部门,有利于推动更多临床试验的进行,同时推动临床试验机构资格认定备案管理制度,激励医疗机构参与临床试验的能力和热情,成功将临床试验中心数量从 2015 年的 375 家扩增到 2019 年的 1072 家
修订《专利法》,保障专利以及延续专利保护期	最新版的《专利法》在 2020 年 10 月 17 日通过并将于 2021 年 6 月 1 日起实施。首次在立法层面提出新药专利权期限补偿制度,对创新药给予药品专利期补偿,藉此提高中国成为世界创新药首批上市国家的地位,并同时刺激本土创新药企业在研发中投入更多,推动本土创新
审评能力加强,推动科学监管	国家药审中心持续推动审评人数的增加,从 2015 年的 150 人到 2018 年的 700 人,以及建立了由 626 名外聘专家组成的评审专家团,推动以“科学监管”、“公平公正”以及“公开透明”为原则的评审制度的出台和形成,加强对创新药的支持
《创新药(化学药)临床试验期间药学变更技术指导原则(试行)》	2021 年 3 月 3 日,国家药审中心组织制定该项指导原则,本指导原则适用于化学创新药和改良型新药(放射药除外)临床试验期间的药学变更,主要阐述了创新药药学变更评估和研究的一般原则,仅对部分常见的重大变更和一般变更进行了举例,并简述了该类变更下的研究思路和研究内容
化学药品创新药 I 期临床试验申请药学共性问题相关技术要求	2021 年 4 月 15 日,国家药审中心组织颁布该项指导原则,在过往审评中发现部分创新药 I 期临床试验申请仍然存在一些安全性内容相关的药学问题。为了更好地实施《关于调整药物临床试验审评审批程序的公告》,促进创新药的研究和开发,本技术要求对创新药 I 期临床试验申请药学共性问题进行总结,以供申请人参考。

资料来源:国家食品药品监督管理局,《药品注册管理办法》,中银证券

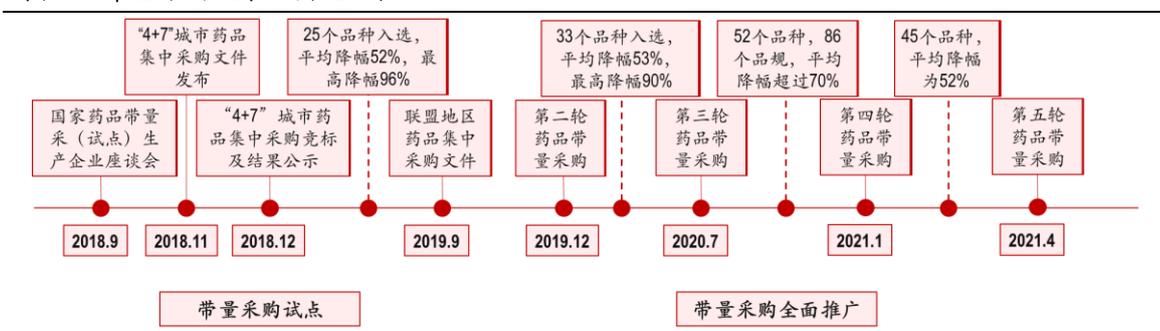
2.3.5 政策举例分析——带量采购的实施为我国创新药产业营造良好政策环境

所谓的带量采购，指的是招标方在招标公告会公示所需的采购量，而投标方在投标过程中除了要考虑价格，还要考虑自身产能能否承担起相应的采购供应量，促使投标方在竞标过程中采用以价换量的方式降低药品价格。传统的省级招标是由省级卫生部门主导，负责药品定价而不带量，后续药品是否能被医疗机构采购上量，仍需要医药代表等另行公关，外资原研企业还因享有单独定价政策而价格高企，内资企业则开始价格厮杀，导致专利过期后迟迟未出现专利悬崖。

由于省级招标中的省级卫生部门只负责定价、医保部门只负责药品买单，且由于上量需公关而出现带金销售行为，导致无法对降低药价形成良好的闭环控制机制。而带量采购则打破了旧有利益格局，由支付方医保局统一牵头组织，拿出一定市场份额，保证销量，让原研以及通过一致性评价的厂家在一起同台竞价，价低者得，药价降低幅度平均高达 50% 以上，大大节省了医保资金，也因此抵制了带金销售。

总体而言，带量采购政策的全面实施，极大压缩了以往国内医药企业靠仿制药赚取的利润空间，倒逼药企积极布局创新药研发管线，促进国内创新药市场的长期发展。

图表 37. 带量采购政策的实施历程



资料来源：国家卫健委等政府官网，医保专家张自然教授报告，中银证券

国家政府对医药创新领域高度持续高度关注

2021年7月2日我国药品审评中心组织撰写了《以临床价值为导向的抗肿瘤药物临床研发指导原则》，形成征求意见稿。长期来看，该项政策整治以往肿瘤临床试验中一些无意义，低端重复的乱象，对于肿瘤创新药物研发意义深远。药物研发应以患者需求为核心，以临床价值为导向已经成为普遍共识。目前我国抗肿瘤药物研发处于快速发展阶段；肿瘤患者对于药物的安全性、治疗体验和生存质量都有了更高的期望。抗肿瘤药物研发，从确定研发方向，到开展临床试验，都应贯彻以临床需求为核心的理念，开展以临床价值为导向的抗肿瘤药物研发。

总体而言，近年来国家药品监督管理局审评中心进行了一系列对创新药的医疗审批审评制度改革，覆盖范围广泛，从临床、审评，到上市价格和费用皆有涉及。随着改革措施逐渐落地，对于创新药的影响将越来越大，同时中国药检机构的积极作为也是推动中国生物医药创新改革的一大助力。

图表 38. 我国医改政策分析



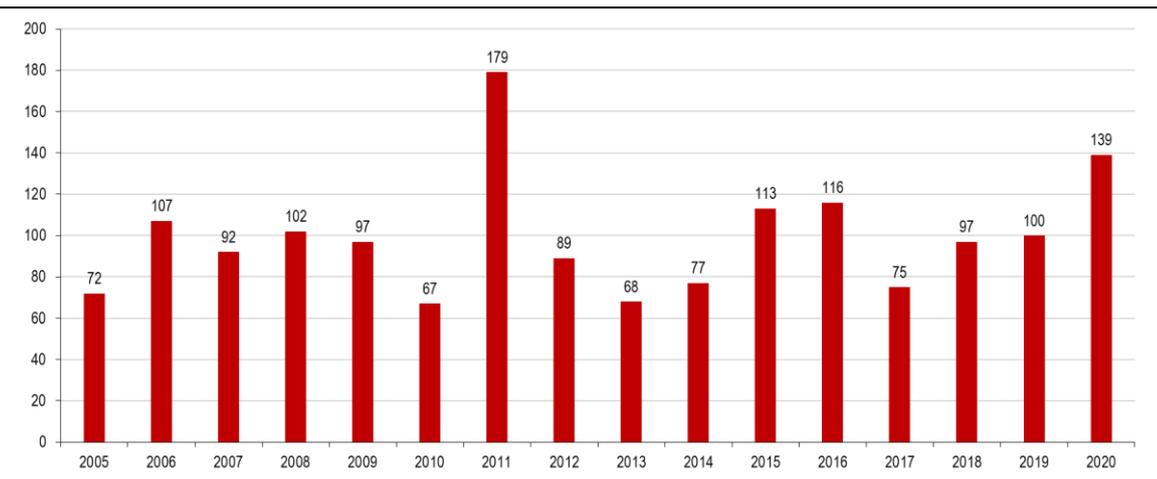
资料来源：国家卫健委，药渡，中银证券

2.4 新药研发市场景气度持续

2.4.1 新药研发靶点情况

目前生物医药企业的创新研发重心向创新靶点和新一代疗法的开发转移。从创新靶点角度来看，创新生物药靶点的新发现持续进行中，新靶点的发现和开发一直都是生物创新药开发的核心，一旦能够开发出新的有效靶点并成功上市，便能给药企带来庞大的利润和发展前景。据 Pharma Projects 统计 2020 年全球一共新增了 139 个新靶点，是近 10 年来仅次于 2011 年的新增数量（2011 年的新增数量暴增主要是因为自 2011 年起计入了细菌靶点的数量），从行业的角度来说是个非常好的结果。同时，创新靶点数量的持续增长也将带来更丰富的创新生物药产品管线。

图表 39. 2005-2020 年新靶点开发数量统计(单位：个)



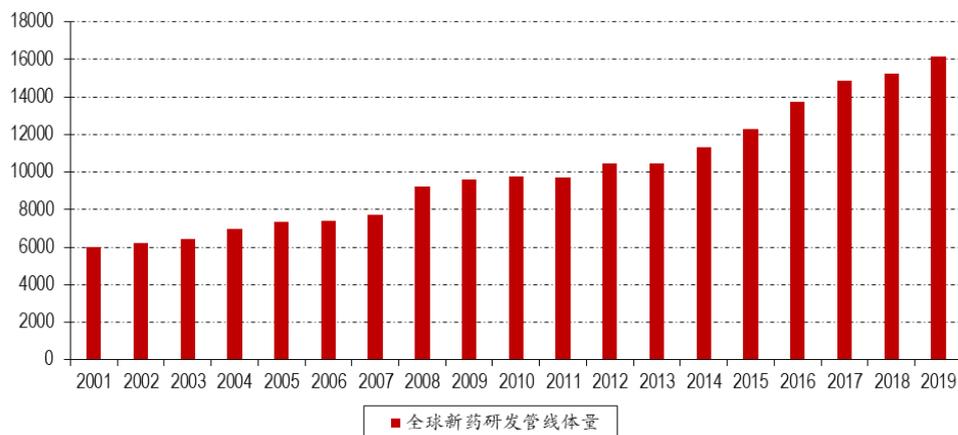
资料来源：德勤咨询，中银证券

2.4.2 全球药物研发管线情况

新药研发竞争激烈，药企追求高效率研发回报的心态愈发强烈。2019 年全球在研药物数量再创新高。根据 Pharmaprojects 统计，截止 2019 年 1 月，全球在研新药数量 16,181，在老药竞争加剧的行业格局之下，研发新药仍是药企的唯一出路。

据 Pharmaprojects 数据库显示,全球不同阶段的药物研发管线体量逐年提升(包括临床前、不同临床阶段、不同审批阶段以及上市的所有药物),2019 年的增长率近 6%,相对于 2018 年有大幅提升。

图表 40. 全球药物研发管线体量(单位: 条)

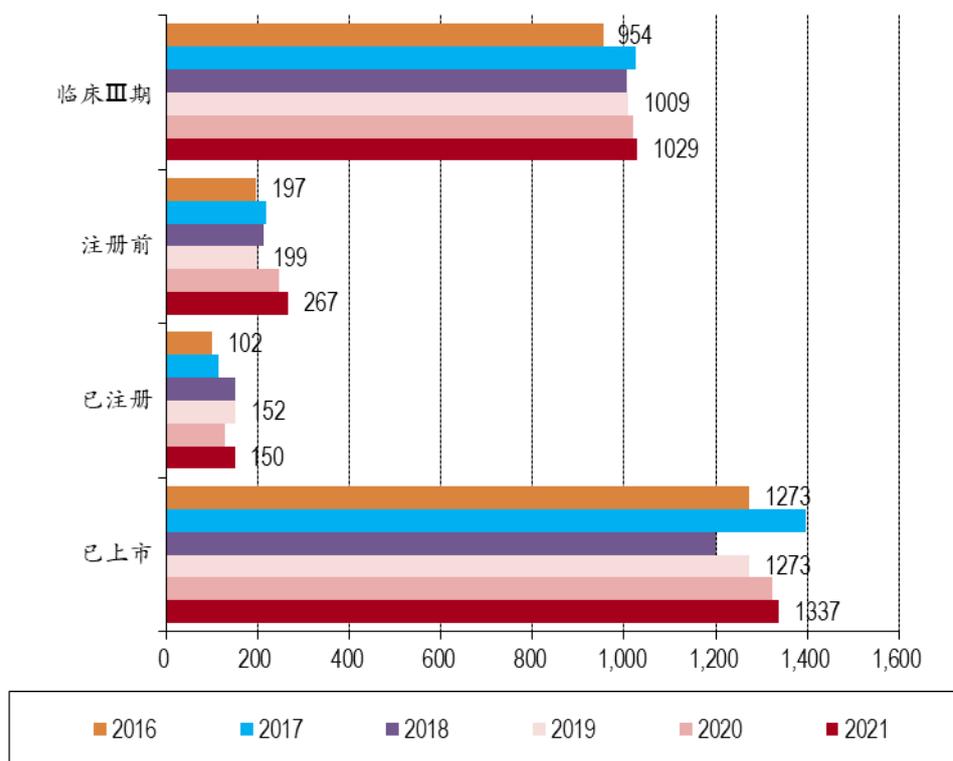


资料来源: Pharmaprojects, 中银证券

注: 其中包括临床前、不同临床阶段、不同审批阶段以及上市的所有药物

随着科技的发展和突破,全球每年获批的创新药逐年增加,除了 2020 年由于新冠疫情的影响导致全球新药上市的审批周期被拉长。自 2016 年起,从临床晚期(临床 III 期和注册前)、获批注册到成功上市的新药数量呈现稳定增长。

图表 41. 全球各开发阶段的临床晚期产品管线数量比较 (2016-2021) (单位: 条)



资料来源: PharmaProjects, 德勤研究, 中银证券

中国和美国历年生物创新药的批准上市数量皆是增长状态，中国的生物创新药获批数量在 2019 年超越美国，2020 年保持同样状态，且 2021 年有望继续维持势头。这主要归功于近几年中国一系列创新药上市政策与监管制度的改革，以及中国生物医药企业的创新药产品逐渐成功商业上市。随着数字技术在生物药创新领域的应用，以及医疗外包服务企业，如 CRO（医药合同研究组织）与 CDMO（医药合同研发生产组织）的快速崛起，未来全球的生物创新药的数量有望以更快的速度增加。

2.4.3 我国新药IND 情况

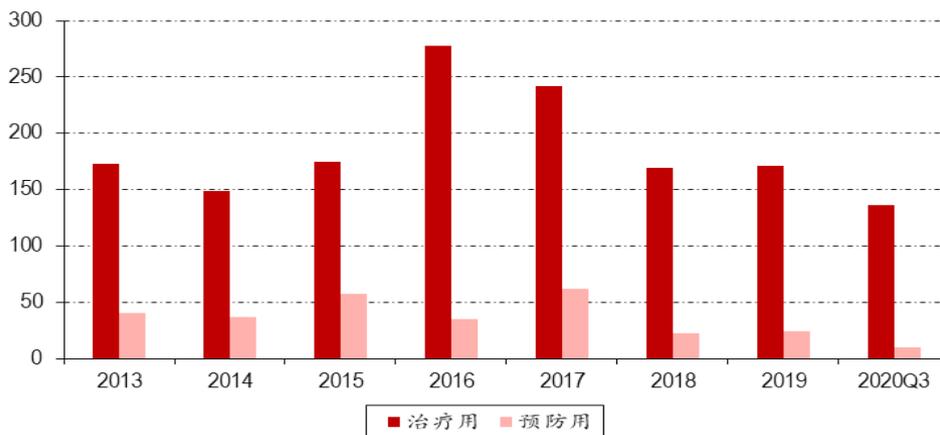
2017 年 CDE 受理了国内企业 112 个化学创新药的 IND，2019 年申报数量达到 123 个，截至 2020 年 9 月底，国内药企申报的化药创新药 IND 数量已经达到 140 个。生物制品近两年未受药品分类改革影响，虽然从受理的生物制品 IND 数量分析，近年申报数量回落，但以创新为主的生物制品申报数量不断增加，传统生物制品数量减少。

图表 42. 2014-2020Q3 国产化学创新药 IND 受理情况(单位：个)



资料来源：药智网，华经产业研究院，中银证券

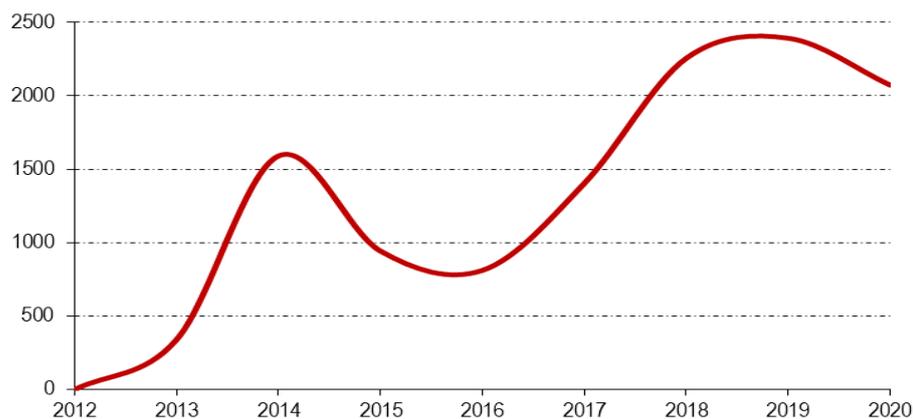
图表 43. 2013-2020Q3 国产生物制品 IND 受理数(单位：个)



资料来源：药智网，华经产业研究院，中银证券

根据药物临床信息登记与公示平台数据统计，截止至 2021 年 8 月 12 日 平台登记的试验总数为 14139 项。其中，化药项目占比 73.95%、生物药占比 19.68%、中药/天然药物占比 6.37%。

图表 44. 我国近年来临床试验数目(单位: 次)

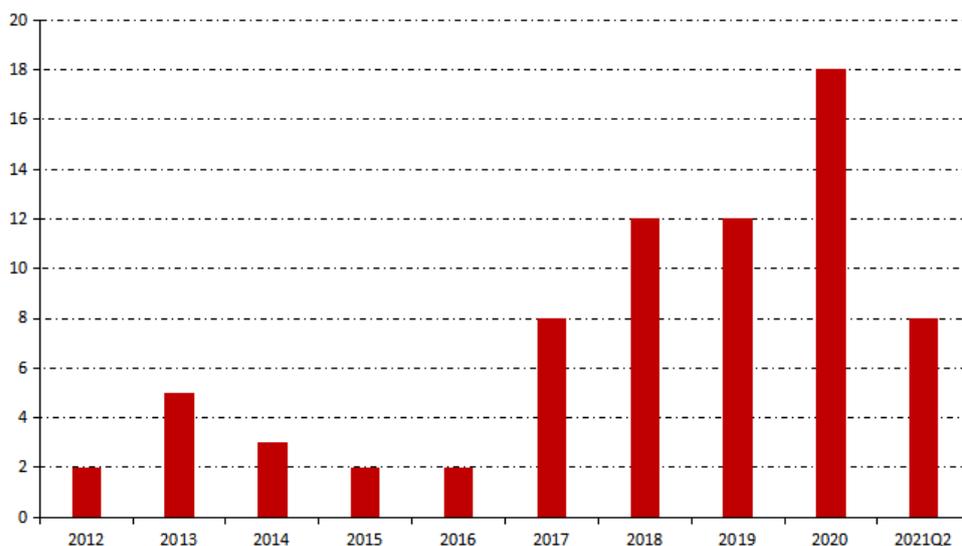


资料来源: 药物临床信息登记与公示平台, 中银证券

2.4.4 我国新药 NDA 情况

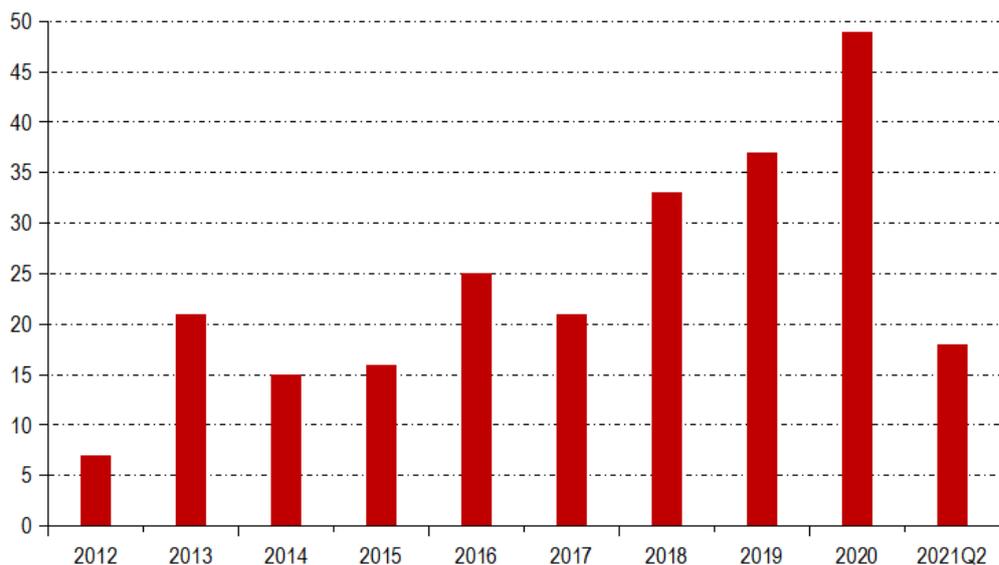
随着 2015 年以来药政审评审批政策的逐步推进, 药品审评积压的状况得到了显著的改善, MAH 等制度的试点也在很大程度上减轻了初创型研发企业的投入要求, 企业申报数量和创新药品种获批的数量较此前有了显著提升。

图表 45. 2014-2021Q2 国产化学创新药 NDA 受理数量 (个)



资料来源: 药智数据, 中银证券

图表 46. 2013-2021Q2 国产生物制品 NDA 受理数量 (个)

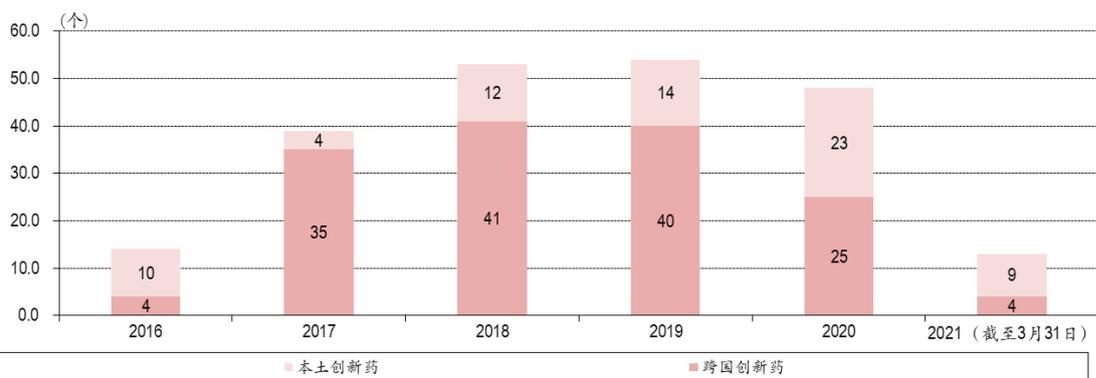


资料来源：药智数据，中银证券

2.4.5 我国创新药情况

随着近几年对创新生物药的重视度逐渐提升，本土生物医药企业的创新种类也在不断变化，从 me-too/me-better 类型的新药到普遍的创新药（Best-in-class），再到具备高临床价值的临床急需创新药（First-in-class），对于创新药的要求不断提升。2015 年，中国的生物医药审批评审制度首次改革，国务院首次将生物医药产业列为支持性产业；改革力度在 2017 年达到顶峰，中共中央办公厅和国务院办公厅共同发布了《关于深化审评审批制度改革鼓励药品医疗器械创新的意见》，推动中国生物医药产业与国际的接轨；一直到 2020 年一系列的医疗制度改革出台，创新药将迎来高峰。自 2015 年 8 月 18 日《国务院关于改革药品医疗器械审评审批制度的意见》颁布后，中国创新药的获批数量持续增长，以跨国创新化学药为主。2020 年由于新冠疫情的影响，获批创新药的数量出现了下降，但也是首次本土和跨国创新药的批准数量接近。截至 2021 年 3 月底，本土创新药获批的数量已经超过跨国创新药获批的数量。

图表 47. 中国创新药获批数量统计 (2016 年-2021 年 3 月, 个)



资料来源：医药魔方，德勤研究，中银证券

图表 48. 2020 年-2021 年 3 月我国部分企业 1 类新药申报上市情况

申报企业	药品名称	治疗领域	承办日期
贝达药业	甲磺酸贝福替尼胶囊	抗肺癌	2021-03-04
罗欣药业	替戈拉生片	十二指肠溃疡	2021-01-14
思路康瑞	恩沃利单抗注射液	抗肿瘤	2020-12-21
圣和药业	和乐布韦片	丙肝	2020-11-17
基石药业	舒格利单抗注射液	抗肿瘤	2020-11-13
百奥泰	巴替非班注射液	心血管	2020-10-14
顺健生物	奥瑞巴替尼片	白血病	2020-10-10
恒瑞医药	脯氨酸恒格列净片	糖尿病	2020-09-30
恒瑞医药	磷酸瑞格列汀片	糖尿病	2020-09-28
和记黄埔医药	索凡替尼胶囊	抗肿瘤	2020-09-19
豪森药业	艾美酚胺替诺福韦片	乙肝	2020-09-18
荣昌生物	注射用缬迪西妥单抗	抗胃癌	2020-08-28
艾迪药业	ACC007 片	抗艾滋	2020-07-25
玉溪嘉和	杰诺单抗注射液	抗肿瘤	2020-07-22
百济神州	帕米帕利胶囊	抗卵巢癌	2020-07-20
北京协和	阿兹夫定片	抗艾滋	2020-07-09
华北制药	重组人源抗狂犬病毒单抗注射液	抗狂犬病毒	2020.07.04
百济神州	帕米帕利胶囊	抗肿瘤	2020.06.29
恒瑞医药	海曲泊帕乙醇胺片	心血管	2020.07.25
君实生物	特瑞普利单抗注射液	抗肿瘤	2020.05.21
泽璟生物	甲苯磺酸多纳菲尼片	抗肿瘤	2020.05.15
海思科	环泊酚乳状注射液	麻醉药物	2020.01.22
华海药业	康泰唑胺片	抗生素	2020.01.04

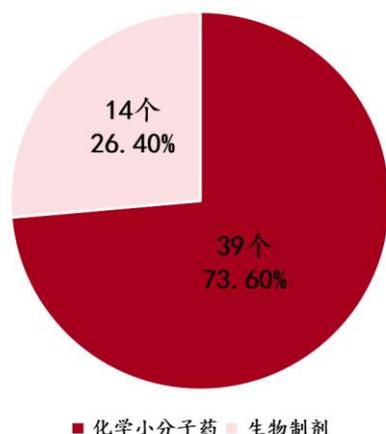
资料来源：药智网，公司官网，中银证券

2021 年上半年，我国批准创新性药物 21 个。这一数字已经超过 2020 年全年审评通过的创新药数量，刷新了我国创新药审评纪录。21 个创新药包括新冠病毒疫苗和肿瘤、免疫系统疾病、罕见病等领域的临床急需治疗药物，其中多个为我国自主研发并拥有自主知识产权产品。2021 年上半年获批的创新药中有同类首创新药（First-in-Class）；我国新冠病毒疫苗研发也稳居全球第一方阵。

2.4.6 我国和其他国家创新药近况

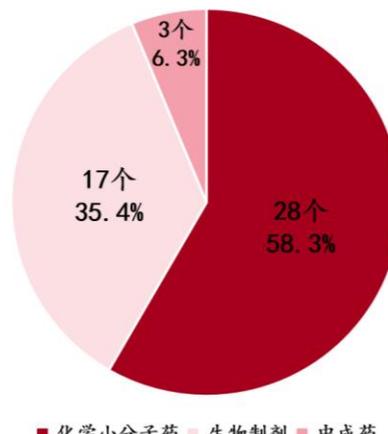
尽管生物技术的快速革新和后发优势使得生物技术药物正在进入高速发展阶段，化学小分子药仍然是新药领域中的主力军。2020 年（截至 2020.12.25）美国食品药品监督管理局（FDA）共批准新药 53 个，其中包括 39 个新化学药和 14 个新生物制剂，小分子药物占比达到 73.6%；2020 年（截至 2020.12.31）我国国家药品监督管理局（NMPA）共批准新药 48 个，其中包括 28 个化学药品，17 个生物制剂和 3 个中药，化学小分子药占比 58.3%。

图表 49. 2020 年 FDA 批准新药统计



■ 化学小分子药 ■ 生物制剂

图表 50. 2020 年 NMPA 批准新药统计

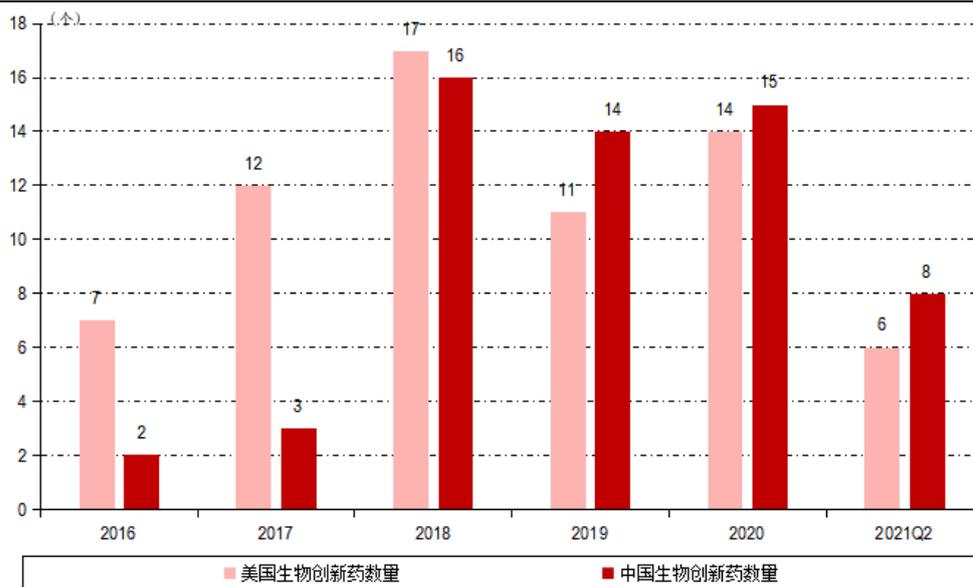


■ 化学小分子药 ■ 生物制剂 ■ 中成药

资料来源：FDA 官网，中银证券

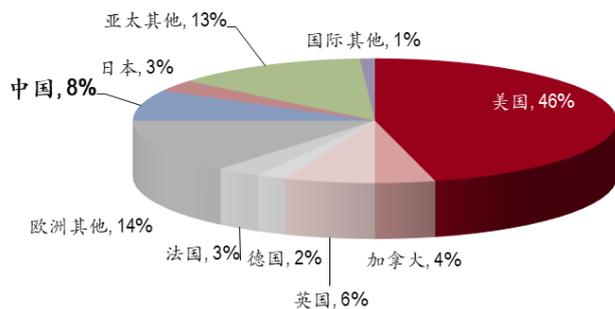
资料来源：医药魔方，中银证券

图表 51. 中美生物创新药获批数量比较 (2016 年-2021 年 3 月)



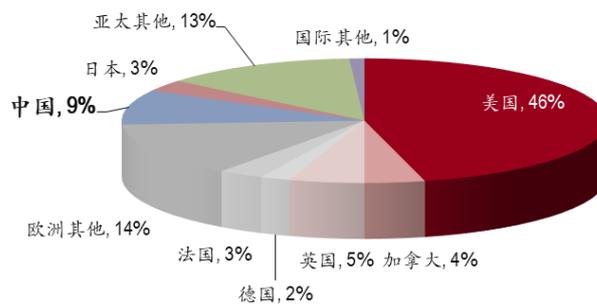
资料来源: 医药魔方, 德勤研究, 中银证券

图表 52. 2020 年全球新药研发公司分布



资料来源: PharmaProjects, 《Pharma R&D Annual Review 2021》, 德勤研究, 中银证券

图表 53. 2021 年全球新药研发公司分布



资料来源: PharmaProjects, 《Pharma R&D Annual Review 2021》, 德勤研究, 中银证券

图表 54. 2021 上半年 FDA 创新七大事件

创新药物	适应症	时间评论
Aduhelm (渤健)	首款改善疾病进展症状的药物。 程 AD 药	作为多年来最具争议的 FDA 批准之一，渤健阿尔茨海默病 (AD) 药物 Aduhelm 成为近二十年来第一种获得 FDA 批准的 AD 药物，也是第一种旨在治疗疾病进程而不仅仅是针对首款的药物。 值得注意的是，该机构使用淀粉样蛋白斑块的去除了作为替代终点，而不是根据减缓认知衰退方面的临床益处这样的硬指标数据进行批准。这是一项饱受争议的批准。Aduhelm 标价每年 56000 美元。
Breyanzi、Abecma (BMS)	CAR-T 再添两员但竞争激烈	百时美施贵宝 (BMS) 两个 CAR-T 疗法获得 FDA 批准，是 2021 年上半年最引人注目的焦点之一。 Breyanzi 在 2 月份获得 FDA 批准用于治疗某些大 B 细胞淋巴瘤。但在市场上，Breyanzi 将与诺华和吉利德的细胞疗法竞品抗衡。不过，6 月初 Breyanzi 在二线大 B 细胞淋巴瘤方面取得了积极成果。一个月后，BMS 公司又一款 CAR-T 疗法 Abecma 获得 FDA 批准。这是第一种治疗多发性骨髓瘤的 CAR-T 疗法。FDA 的决定基于一项名为 KarMMa 的 II 期试验数据：该药在近四分之三的严重预处理和高度难治性多发性骨髓瘤患者中引发反应。尽管 Abecma 在多发性骨髓瘤 CAR-T 领域具有先发优势，但其作为该领域唯一选择的时间有限。强生和 Legend Biotech 的 cilta-cel 已获得 FDA 的优先审查，与 Abecma 相比，cilta-cel 具有良好的临床应用特征。
Brexafemme (Synexis 公司)	近 20 年首个新型抗真菌类药物	6 月 1 日，Scynexis 公司的 Brexafemme 获得 FDA 的批准，成为二十多年来批准用于阴道酵母菌感染的首个新型抗真菌类药物。 阴道酵母菌感染也称为外阴阴道念珠菌病 (VVC)，至少影响约 70%~75% 的女性。尽管这种疾病很普遍，但自 1990 年代后期以来，创新一直停滞不前。 有分析人士认为，由于 Brexafemme 易于给药，加上其杀死真菌细胞的能力（辉瑞氟康唑等咪唑类药物的不足），以及“大型制药公司对抗真菌领域的兴趣日益增加”，Brexafemme 可达到重磅炸弹级别，年销售额将超过 10 亿美元。
Cabenuva (葛兰素史克)	FDA 批准首款长效 HIV 药	Cabenuva 开启了 HIV 治疗的新篇章。两种药物（葛兰素史克 cabotegravir+强生 rilpivirine 的组合）提供了第一个完整的长效 HIV 治疗方案，每月一次，肌肉注射。在两项 III 期试验中，Cabenuva 可与传统的三药疗法相媲美。 与此同时，葛兰素史克的 ViiV Healthcare 正在等待 FDA 决定，将 Cabenuva 的给药频率降低到每两个月一次。通过与 Halozyme 的新合作，ViiV 还寻求开发“超长效”皮下注射 HIV 药物，给药间隔为三个月或更长时间。 基于 cabotegravir 的 HIV 疗法和向长效药物的过渡，是葛兰素史克应对吉利德竞争的选择。目前吉利德是 HIV 市场的领导者。
Empaveli (Apellis 公司)	首个 C3 抑制剂	5 月，FDA 批准 Apellis 公司的 C3 抑制剂 Empaveli 用于治疗罕见的血液疾病阵发性夜间血红蛋白尿 (PNH)，即使对于之前未接受过任何治疗的患者也适用。这是 FDA 批准的第一个 C3 靶向药。在 FDA 做出批准决定之前，焦点在于 Empaveli 是否会被降级为用于没有接受 C5 竞争产品 (Alexion 公司的 Soliris 和 Ultomiris) 的患者。 Apellis 正在进行的一项研究显示，与标准疗法相比，Empaveli 在血红蛋白稳定和乳酸脱氢酶 (LDH) 降低方面表现出统计学优势。有了这些额外的数据加上现有的批准，Apellis 已经能够应用于 1500 名已经使用 C5 抑制剂的 PNH 患者以及每年新诊断的大约 150 人。在 Empaveli 推出期间，从 C5 抑制剂转换而来的患者中约有 60% 来自 Ultomiris。 Apellis 还在寻找地图性萎缩症和新适应症，该适应症的年销售额有望达到 10 亿美元。 Apellis 预计本季度早些时候将公布关键的 III 期数据。
Lumakras (安进)	“无成药性”靶点 KRAS 突破	在破解 KRAS “无成药性”方面，安进凭借 Lumakras 创造了历史。Lumakras 提前三个月批准用于具有 KRAS G12C 基因突变的非小细胞肺癌 (NSCLC)，是第一款对“无成药性”肿瘤靶点 KRAS 的突破。 由于 KRAS G12C 约占 NSCLC 突变的 13%，因此确定可以从 Lumakras 中受益的患者将是该药成功的关键。为此，安进与诊断专业公司 Guardant Health 和 Qiagen 合作，这两家公司与 Lumakras 一起获得了伴随诊断产品的批准。
Zynlonta (ADC 公司)	首款单抗 CD19 靶向抗体药物	虽然近年来有几种针对弥漫性大 B 细胞淋巴瘤 (DLBCL) 的新 CAR-T 药物问世，但 ADC Therapeutics 公司的 Zynlonta 采取了不同的方法治疗这种疾病。今年 4 月，随着 FDA 的批准，该公司正在推出该领域首款单抗 CD19 靶向抗体药物。 与其他新 DLBCL 药物一样，Zynlonta 被批准用于先前两次全身治疗失败的患者。但与旨在一次性治疗的竞争对手不同，Zynlonta 需要每三周给药一次。 在 II 期试验中，Zynlonta 的总体反应率为 48.3%，对于有反应的患者，反应中位持续时间为 10.3 个月。超过 24% 的患者在试验中获得了完全缓解。

资料来源：医药经济报，中银证券

图表 55. 2021 年上半年 FDA 批准新药重磅潜质

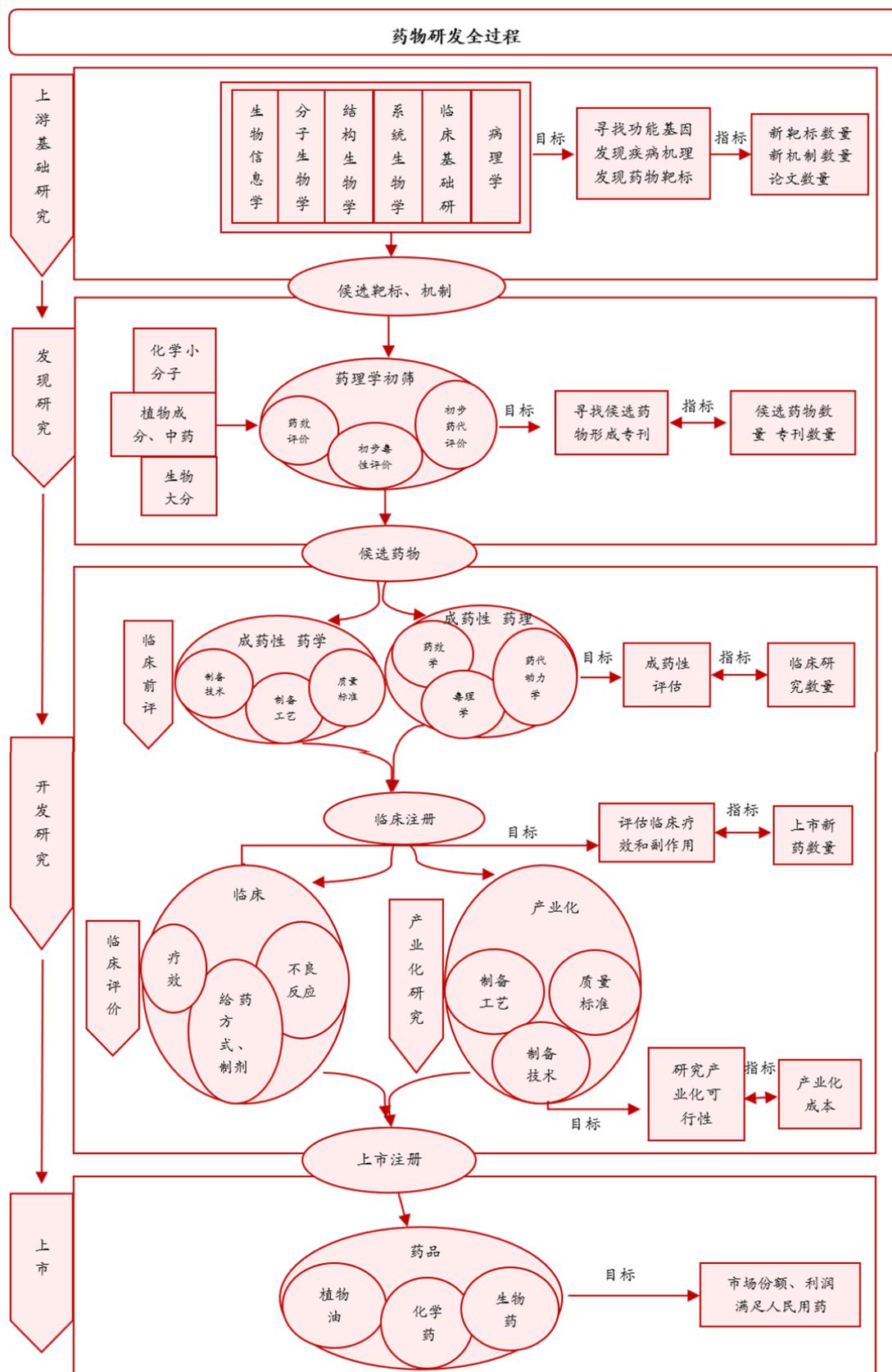
2021年上半年FDA批准新药重磅潜质						
商品名	药物	作用机制	适应症	公司	批准日期	2026年全球销售预测 (亿美元)
Verquvo	Vericiguat	鸟苷酸环化酶受体激动剂	慢性心力衰竭	拜耳/默沙东	1月19日	7.6
Cabenuva	Cabotegravir sodium rilpivirine hydrochloride	HIV1整合酶抑制剂 HIV 1 NNRTI	艾滋病	葛兰素史克	1月21日	9.6
Lupkynis	Vodospirin	钙调神经磷酸酶抑制剂	系统性红斑狼疮	Aurinia Pharmaceuticals	1月22日	10.63
Tepmetko	Tepotinib	MET抑制剂	非小细胞肺癌	德国默克	2月3日	4.68
Ukoniq	Umbralisib	CK1ε抑制剂;PI3Kδ抑制剂	非霍奇金淋巴瘤	TG Therapeutics	2月5日	2.96
Breyanzi	lisocabtagene maraleucel	CAR-T疗法	B细胞淋巴瘤	百时美施贵宝	2月5日	10.96
Evkeeza	Evinacumab	ANGPTL3 抗体	家族性高胆固醇血症	再生元	2月11日	NA
Cosela	Trilaciclib	CDK4/6抑制剂	小细胞肺癌	G1 Therapeutics	2月12日	7.73
Amondys 45	Casimersen	外显子45结合寡核苷酸	杜氏肌营养不良症	Sarepta Therapeutics	2月25日	2.02
Nulibry	Fosdenopterin	铝辅因子兴奋剂	铝辅因子缺乏症A型	BridgeBio Pharma	2月26日	3000万美元
Pepaxto	Melphalan flufenamide	肽联的DNA烷基化剂	多发性骨髓瘤	Oncopptides	3月1日	4.94
Azstarys	Serdexmethylphenidate chloride; dexmethylphenidate	多巴胺转运蛋白抑制剂, 去甲肾上腺素转运蛋白抑制剂	注意力缺陷多动障碍	KemPharm	3月2日	NA
Fotivda	Tivozanib	VEGFR1/2/3 抑制剂	肾细胞癌	AVO Oncology	3月10日	1.55
Ponvory	Ponesimod	S1P受体1调节剂	复发缓解型多发性硬化症	杨森制药	3月18日	NA
Zegalogue	Dasiglucagon	胰高血糖素受体激动剂	低血糖症	Zealand Pharma	3月22日	2.68
Abecma	idecabtagene vicleucel	CAR-T疗法	多发性骨髓瘤	百时美施贵宝	3月26日	12
Qelbree	viloxazine	5-羟色胺-去甲肾上腺素调节剂	注意力缺陷多动障碍	Supernus	4月2日	2.65
Noxstrelis	drospironone and estetrol tablets	孕激素	防止怀孕	Mithra/Mayne Pharma Group	4月15日	NA
Jemperi	dostarlimab-gxy	PD-1抗体	子宫内膜癌	葛兰素史克	4月22日	5.46
Zynlonta	loncastuximab tesirine-lpyl	抗体偶联药物	复发性或难治性大B细胞淋巴瘤	ADC Therapeutics	4月23日	10.25
Empaveli	pegcetacoplan	C3抑制剂	阵发性夜间血红蛋白尿患者	Apellis	5月14日	3.09
Rybrevent	amivantamab-vmjw	EGFR/MET双特异性抗体	非小细胞肺癌	强生	5月21日	2.5
Pylarify	piflufolastat F 18 injection	PET显像剂	前列腺癌男性前列腺特异性膜抗原阳性病变的正电子发射断层扫描成像	Lantheus Holdings	5月26日	2.33
Lumakras	sotorasib	KRAS抑制剂	非小细胞肺癌	安进	5月28日	17.56
Truseltiq	infigratinib	FGFR抑制剂	胆管癌	Bridgebio Pharma	5月28日	2.53
Lybalvi	olanzapine/samidorphan	五羟色胺多巴胺拮抗剂/阿片受体拮抗剂	精神分裂症和双相障碍	Alkermes	5月28日	3.8
Brexafemme	ibrexafungerp tablets	葡萄糖合成酶抑制剂	外阴阴道念珠菌病	Scynexis	6月1日	3.02
Aduhelm	aducanumab	β淀粉样蛋白抗体	阿尔茨海默病	渤健	6月7日	39.07
Rylaze	asparaginase erwinia chrysanthemii (recombinant)-rywn	葡聚糖(重组)天冬酰胺酶	作为化疗方案的组成部分, 对大肠杆菌衍生的天冬酰胺酶产品过敏的急性淋巴细胞白血病和淋巴瘤	Jazz	6月30日	0.33

资料来源: 医药经济报, 中银证券

2.5 新药研发“狂热”背后痛点突出

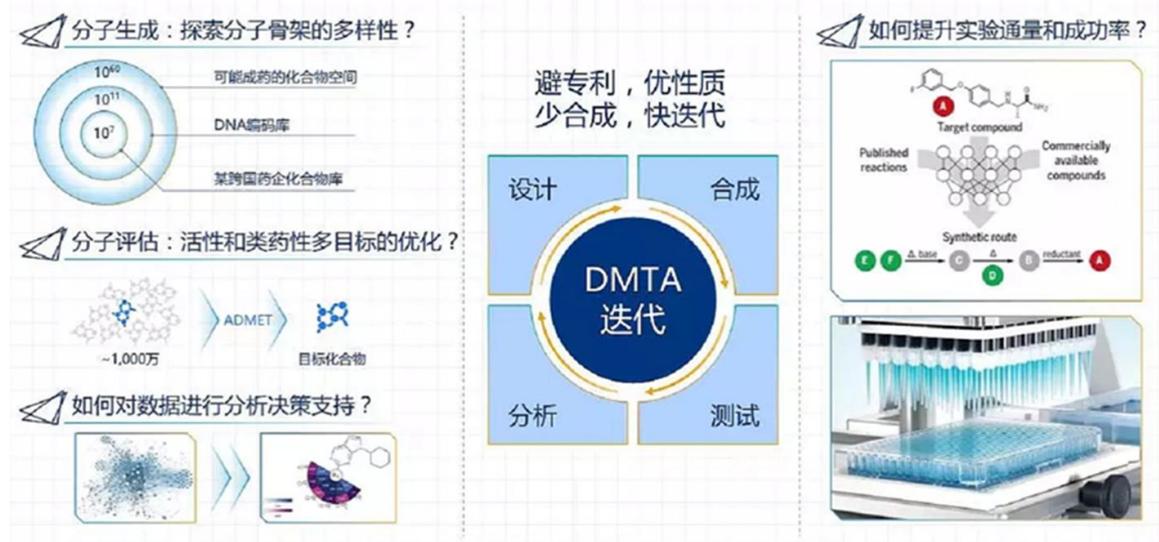
2.5.1 创新药研发时间、资金成本高

图表 56. 药物研发流程漫长



资料来源: 药智网, web of science, 医药经济报, 中银证券

图表 57. 非 AI 药物研发路径痛点及 AI 引入



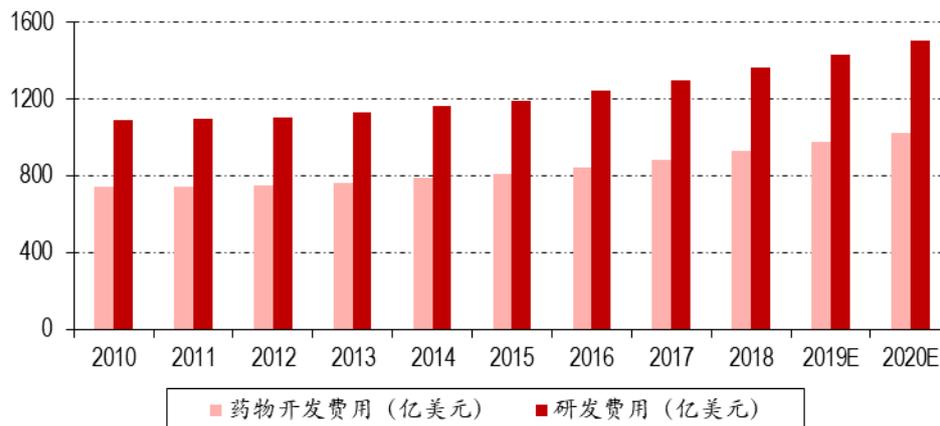
资料来源: Science, 晶泰科技, 中银证券

2.5.2 创新药研发投入逐年增加

创新研发是药企构建核心竞争力和持续发展的关键，而药物研发是一项高投入、高技术、高风险、长周期的精细化系统工程。尤其是创新药，研发周期长、前期投入巨大、技术水平要求越来越高、生产工艺开发难度越来越大。医药产业有一个颇为无奈的“双十定律”：一款新药从研发到上市，平均需要“10年+10亿”的投入。根据德勤《2019年医药创新回报评价》，一款新药的平均研发成本已经从2010年的11.9亿美元增长到2018年的21.7亿美元，而研发周期更是需要10~15年的时间。随医药工业监管法规越来越严格、可用靶点不断被前人开发，新药研发难度正逐年推高。

2010至2018年全球生物医药研发费用由1,090亿美元上升至1,366亿美元，研发费用包括了药物研究费用和药物开发费用。其中药物开发费用由741亿美元上升至929亿美元，占整体研发费用的68%。预计至2020年，全球生物医药研发费用将达到1,506亿美元，其中药物开发费用将达到1,024亿美元，年均增长率约5%。

图表 58. 2010 至 2020 年全球医药研发费用及药物开发支出情况 (亿美元)



资料来源: 上市公司年报, 欧洲制药工业协会联合会 (EFPIA), 日本制药工业协会 (JPMA), 美国药品研究和制造商协会 (PhRMA), Pharmaprojects 数据库, 威廉布莱尔公司, 成都先导招股说明书, 中银证券

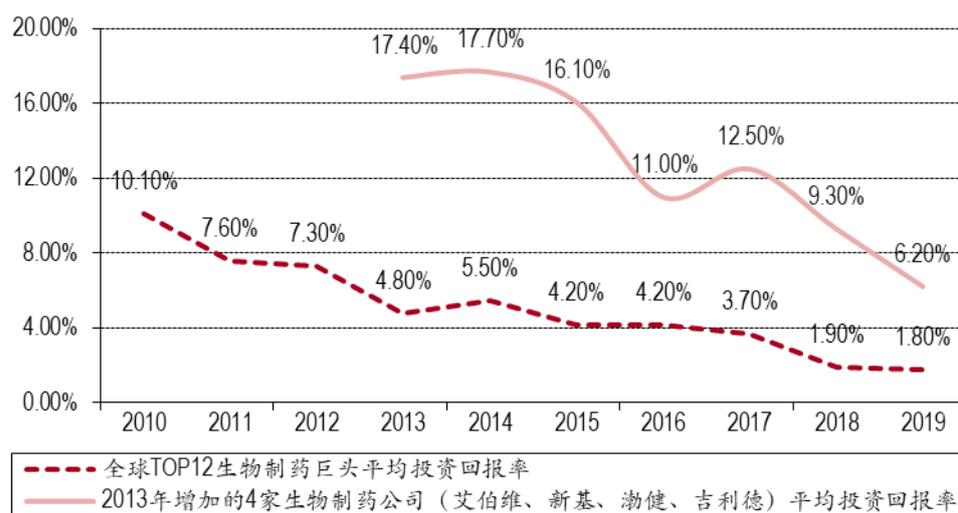
2.5.3 创新药投资回报率普遍较低

新药投资回报率稳步下降，提高研发效率刻不容缓。新药研发具有成本高、研发周期长、成功率低三大痛点。对某些复杂疾病领域更是如此，比如肌萎缩性侧索硬化症，在过去半个世纪里超过 50 项临床试验未能显示出任何积极的疗效。全球药企投入了巨额经费进行阿尔茨海默病药物的研发，1998—2017 年期间，全球已有 146 个阿尔茨海默病药物在临床中失败，临床失败率高达 97.3%。因此降低研发费用，提高成功率，缩短周期，开发有差异性、竞争力、技术门槛高的药物是各大制药公司迫切需要解决的问题。

新药开发费用大约三分之一是用于新药发现和临床前阶段，历时五到六年。一般来说筛选一万个分子只有 10 个左右能进入临床试验，并且进入临床 I 期试验的成功率略低于 10%，由此可见提高新药发现成功率对药物开发至关重要。

根据德勤咨询报告显示，2019 年，全球 TOP12 生物制药巨头在研发上的投资回报率仅有 1.8%，处于 10 年来最低水平，这一数字较 2018 年下降 0.1%，但与 2010 年的 10.1% 相比显著下滑。2013 年增加的第二梯队 4 家生物制药公司（艾伯维、新基、渤健、吉利德）比 TOP12 巨头的表现要好，但仍面临着相似的生产力挑战和回报降低的问题。

图表 59. 2010-2019 年全球生物医药巨头投资回报率



资料来源：医药魔方，德勤研究，中银证券

此外，根据德勤研究数据，成功上市一个新药的成本从 2018 年的 21.68 亿美元下降至 2019 年的 19.81 亿美元 2020 年的 25.08 亿美元，但较 2010 年的 11.88 亿美元相比增幅高达 67%。2019 年，每项后期管线资产的平均预测峰值销售首次跌破 4 亿美元，从 2018 年的 4.07 亿美元下降至 2019 年的 3.76 亿美元 2020 年的 3.96 亿美元，较 2010 年降幅超过 50%。为了提高研发效率，还需要缩短临床周期，以及更好地了解不同来源的创新以及资本市场所带来的影响。传统的小分子不会很快被完全取代，但随着下一代疗法带来个性化的药物，生物制药行业将需要调整业务和运营模式，以持续推动创新。

3、AIDD 市场活跃，正经历由 1 到 10

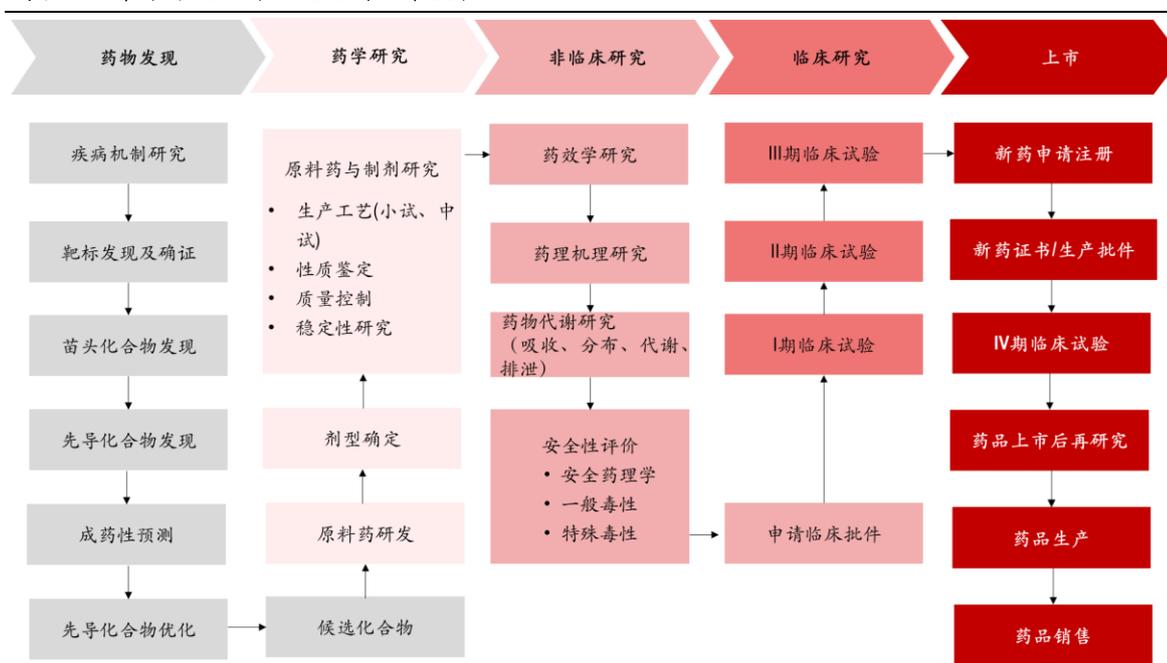
3.1 AI 或将开启 药物研发新时代

3.1.1 打破 药物研发 “三高一低” 诟病，AI 深入参与 新药研发

新药研发主要包括药物发现、临床前研究、临床研究以及审批与上市四个阶段。其中，药物发现阶段主要涉及疾病选择、靶点发现和化合物合成。而临床前研究阶段则以化合物筛选、晶型预测、化合物验证为主，包括药物的构效关系分析、稳定性分析、安全性评价和 ADMET 分析等。

药物发现阶段和临床前研究阶段是药企亟待攻关的两大难点，新药研发面临研发周期长、研发成功率低以及研发费用高等三大困境。药物研发，越往后成本越高，但如毒性、溶解度等对药物成败起关键作用的性质要在相对后期才能进行实验研究。因此，传统方法，往往在投入了大量的时间、人力、金钱成本进行研发推进后才发现一个药物候选并不适合成药，这就造成很多资源和机会上的浪费。

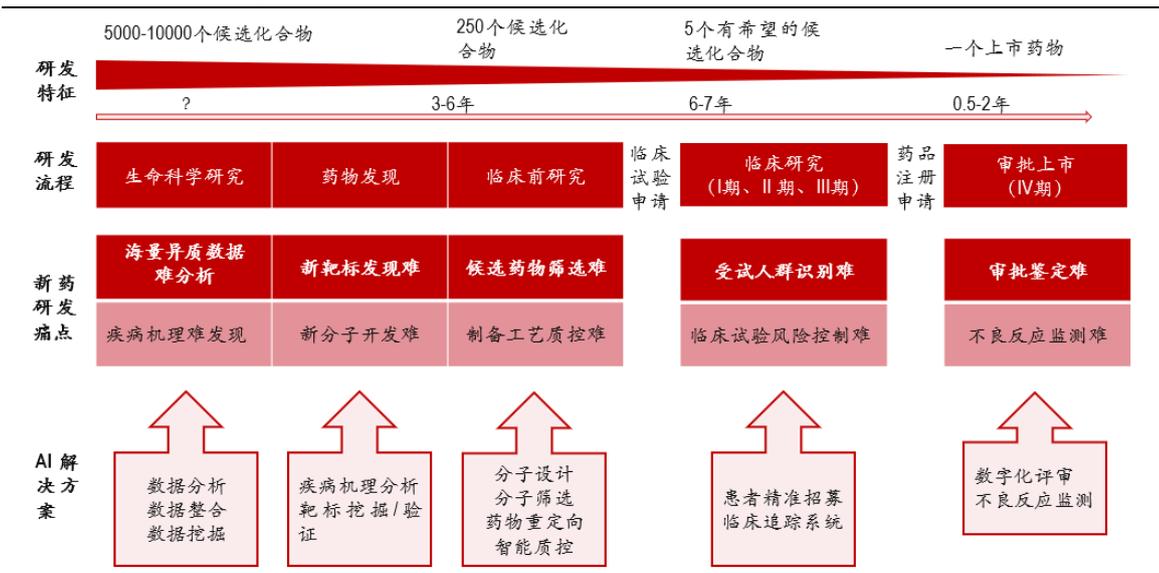
图表 60. 新药研发从药物发现到上市流程



资料来源：药智网，web of science，中银证券

各大传统药企在面临研发周期长、研发成功率低以及研发费用高的困境下，都在努力尝试通过技术创新来加快新药研发速度、提高成功率和降低成本，以能更好地满足日益增长的用药需求。这为 AI 技术在新药研发领域的应用带来了契机。目前的“AI+新药研发”技术可以应用于上述阶段的不同场景，包括靶标发现及验证、苗头化合物发现、先导化合物优化、晶型预测、患者招募、优化临床试验设计、药物重定向等等。

图表 61. AI 可参与的新药研发从药物发现到上市流程



资料来源：药智网，同写意，中银证券

AI 新药研发在应对不同场景需求时大体都需要经历问题设置、数据集整合、算法模型构建和评价过程。标注数据集、算法和模型是 AI+ 新药研发中必不可少的组成部分，其共同构筑并形成了 AI+ 新药研发过程中一条完整的虚拟计算路径：1) 获取目标训练数据集；2) AI 自主学习算法建模；3) 多次训练优化模型；4) 测试集应用以评估模型性能；5) 基于模型实现分子筛选、预测、分析等预定目标。

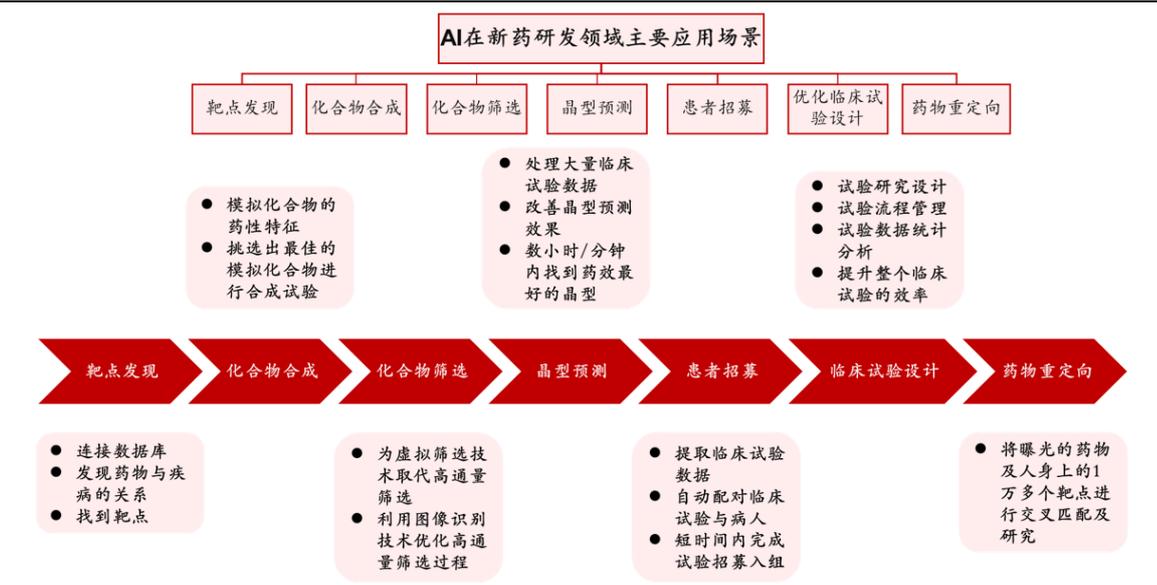
图表 62. AI 和传统药物研发优势对比

新药研发流程	新药研发步骤	新药研发数量	传统新药研发周期	传统新药研发所需资金	AI+新药研发周期	AI+新药研发所需资金
药物发现	靶标筛选 苗头化合物筛选 先导物筛选 先导物优化 从化合物筛选到	5000-10000 化合物	3-6 年	>5 亿美金	1.5-3.6 年 (节约 40-50%)	每年节约 260 亿美元化合物筛选成本
临床前研究	候选药物 临床前期	250 候选药物				
临床研究	I 期临床 II 期临床 III 期临床	5 临床药物	6-7 年	>4 亿美金	2.4-3.5 年 (节约 50-60%)	每年节约 280 亿美元临床试验费用
获批上市	注册上市	1 新药	0.5-2 年	1 亿美金	0.5-2 年	-

资料来源：Evaluate，动脉网，蛋壳研究院，中银证券

“AI+新药研发”可助力大大缩短新药发现的周期、减少新药发现的花费。蛋壳研究院通过对国内外近 80 家 AI 企业的研究发现，AI 在新药研发领域主要应用于靶点发现、化合物合成、化合物筛选、晶型预测、患者招募、优化临床试验设计和药物重定向 7 大场景。AI 在化合物合成和筛选方面比传统手段可节约 40%~50% 的时间，每年为药企节约 260 亿美元的化合物筛选成本。在临床研究阶段，可节约 50%~60% 的时间，每年可节约 280 亿美元的临床试验费用。也即是说，AI 每年能够为药企节约 540 亿美元的研发费用。

图表 63. AI 全程赋能新药研发



图表 64. AI 应用于新药研发各个环节简单梳理

药物发现	靶点发现	利用自然语言处理(NLP)技术检索分析海量的文献、专利和临床试验报告非结构化数据库,找出潜在的、被忽视的通路、蛋白和机制等与疾病的相关性,从而提出新的可供测试的假说,以发现新机制和新靶点
	先导化合物研究和化合物筛选	利用机器学习(或深度学习)技术,学习海量化学知识及资料,建立高效的模型,快速过滤“低质量”化合物,富集潜在有效分子
	化合物合成	利用机器学习(或深度学习)技术学习海量已知的化学反应,之后预测在任何单一步骤中可以使用的化学反应,解构所需分子,得到可用试剂
临床前研究	新适应症发现	借助 AI 的深度学习能力和认知计算能力,将已上市或处于研发管线的药物与疾病进行匹配,发现新靶点,扩大药物的治疗范围
	晶型预测	晶型变化会改变固体化合物的物理及化学性质(如溶解度稳定性、熔点等)导致药物在临床治疗、毒副作用、安全性方面的差异。这一多晶型现象会对药物研发造成干扰。可以利用认知计算实现高效动态配置药物晶型,预测小分子药
临床试验	临床试验设计	利用自然语言处理(NLP)技术检索过去临床试验中的成功和失败经验,使临床试验方案避免重复常见的遗漏、安全等
	患者招募	利用自然语言处理(NLP)技术提取患者数据,为临床试验匹配相应患者
药品生产	药品检查	计算机视觉检测压花、重影、划痕、分层等缺陷
药品销售	学术推广	为药械企业、医生、患者提供全流程的智能医学创新服务

资料来源: 火石创造, 中银证券

3.1.2 AI 深入参与新药研发各个环节

靶标 (Target) 发现与验证环节

选择药物作用的靶点蛋白是药物研发过程的第一步,比如有名的 ALK, EGFR 等靶点,它们在癌症里突变率高,患者多,是非常有市场的靶点。AI 可以依托自然语言处理技术 (NLP), 通过学习文献、组学数据、功能实验数据等海量医学相关资料,在短时期内发现药物和疾病之间的千万种作用关系,输出机体细胞上药物能够发挥作用的候选受体结合点(靶点); 相比而言,传统人工通过阅读科研文献和个人经验去推测潜在的 药物靶点并收集分析流行病学数据作为证据,需要耗时 2-3 年。

图表 65. AI 用于靶点发现 (基于多组学)

基于患者多组学数据的全新靶标发现及评价

传统方法依赖现有文献发表基础, 通过实验手段阐述疾病和信号通路的相关性, 耗时数月甚至数年, 发现全新靶点的可能性极低; AI可借助多组学数据识别患者样本相较于正常人体变异的部分, 再通过靶标数据库高效定位可能的靶标分子。

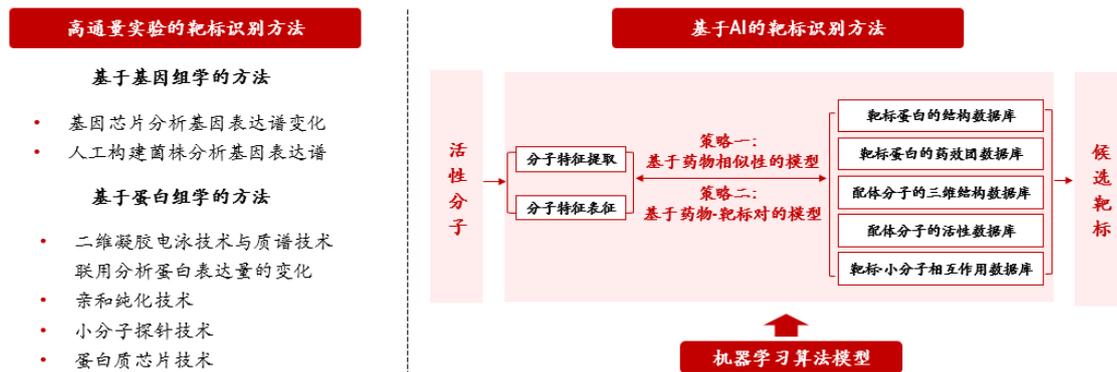


资料来源: web of science, 中银证券

图表 66. AI 用于靶点发现 (基于分子-靶标识别)

基于分子-靶标识别的分子靶标预测

预测并验证活性分子的靶标是阐明药物作用机理的重要步骤。传统的靶标识别方法主要是同位素示踪法、紫外及荧光光谱法, 效率较低; 目前常用的方法是基于基因组学和蛋白组学的高通量筛选方法, 但仍存在成本较高、实验周期长、不具有普适性等缺点; AI通过深度学习算法建立分子-靶标数据库, 来高效预测药物分子的潜在靶标。



资料来源: web of science, 中银证券

苗头化合物 (Hit) 发现

Hit 是指对特定药物靶标具有初步活性的化合物。大规模跨国药企一般都会有 50-300 万数量不等的化合物储备, 高通量筛选方式由实验机器人进行数以百万计的试验, 因此成本非常高昂。现在, 有些 AI+Drug 企业的化合物数据库达到 16B+, 远超过传统药企的实体

库可覆盖的化学空间; 同时学者们已经纷纷倡导利用 AI/ML 开发有效和准确的虚拟筛选方法, 以取代昂贵且耗时的高通量筛选过程, 常见的有两种, 一种是利用深度学习开发虚拟筛选技术以取代高通量筛选, 另一种是利用人工智能图像识别技术优化高通量筛选过程。

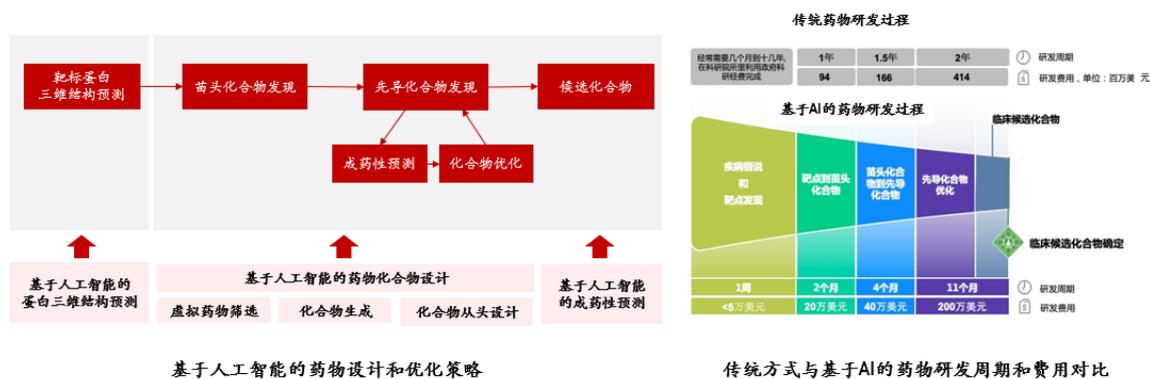
先导化合物优化 (Lead Optimization) 至临床前候选分子 (PCC molecule)

Lead 是具有较好生物活性和可成药化学结构的化合物, 用于进一步的结构改造和修饰以使得分子可以满足进入临床试验的需求。得到 Hit 后, 寻找 Lead 是新药研发中的关键一步 (Hit-to-Lead)。该过程通过采用骨架跃迁、基团替换、结构简化、分子杂交等方法对苗头化合物的化学结构进行修饰, 使 Hit 的生物活性和选择性提高, 同时物理化学性质、药代动力学和毒理学性质得到改善, 最终优化产生一个或多个有开发价值的 Lead。

通过对先导化合物化学结构的修饰，在保持其生物活性的前提下，进一步改善其选择性、物化性质、药代动力学和毒理学性质，最终优化得到一个安全有效、具有开发价值的临床前候选药物（PCC）。不论是 me too/me-better 类新药，或者是 first-in-class 类新药，其研发过程一般都需要耗费大量的资源和时间。当代药物发现有时可能有 20~30 个指标需要同时优化，而分子改造率一发而动全身，因此非常有必要引入高效的优化方法。借助 AI，能够以直观的方式定性推测物质结构与活性的关系，进而推测活性位点的结构和设计新的活性物质结构，进一步提升药物的构效关系分析的速度，快速挑选最具安全性的化合物。

图表 67. AI 用于化合物发现

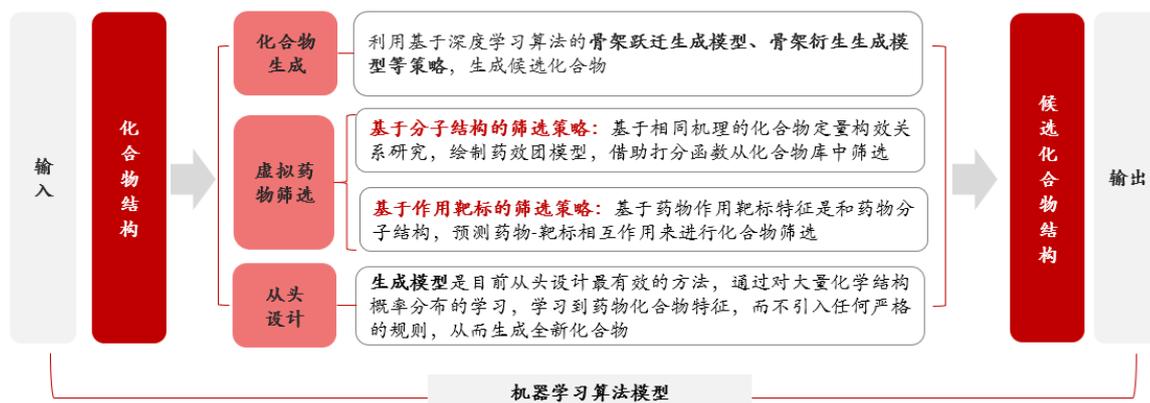
目前候选化合物的发现策略包括基于已知活性化合物设计、高通量筛选(HTS)和DNA编码化合物库(DEL)等；基于定量构效关系研究基础和日益提升的机器学习算法和算力，AI技术在药物发现中的应用越来越广泛，可参与到靶标三维结构预测、化合物从头设计、成药性预测及优化等过程中，大幅降低新药研发的时间和成本。



资料来源: web of science, 中银证券

图表 68. AI 用于化合物设计

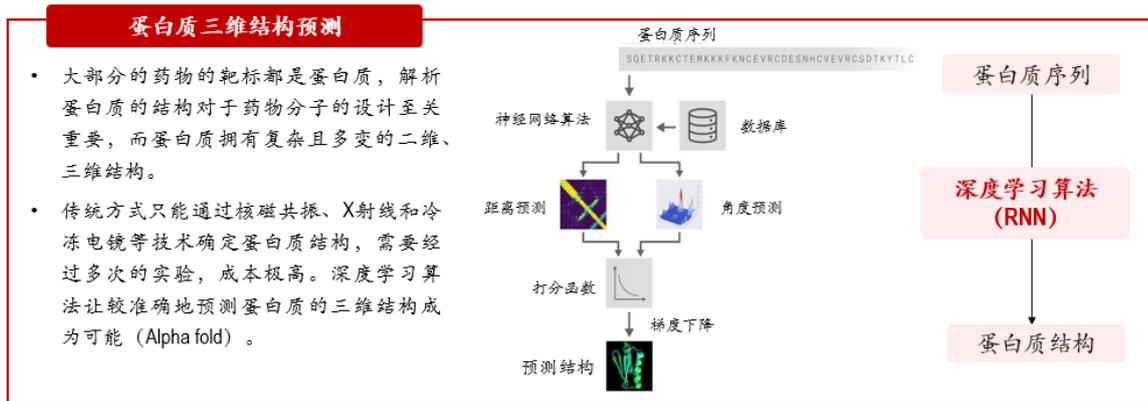
基于人工智能的药物化合物设计



资料来源: web of science, 中银证券

图表 69. AI 用于蛋白质结构预测

基于人工智能的靶标蛋白质三维结构预测

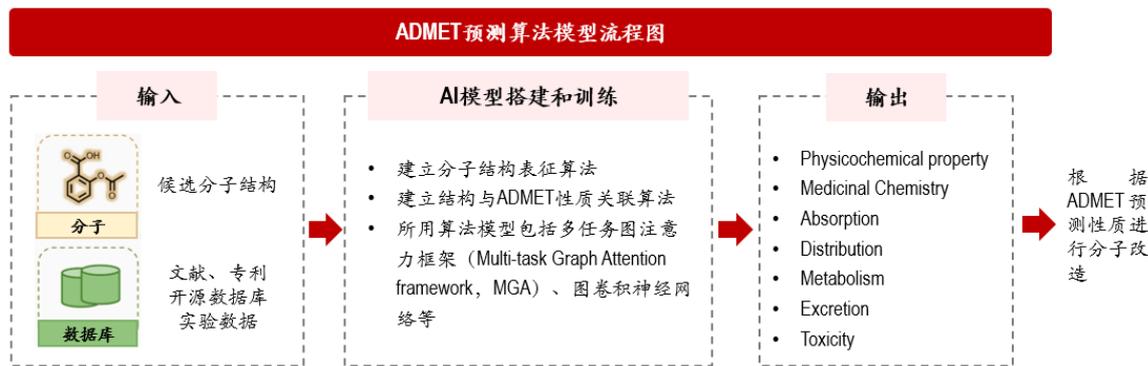


资料来源：web of science，中银证券

图表 70. AI 用于 ADMET 预测

基于人工智能的成药性预测

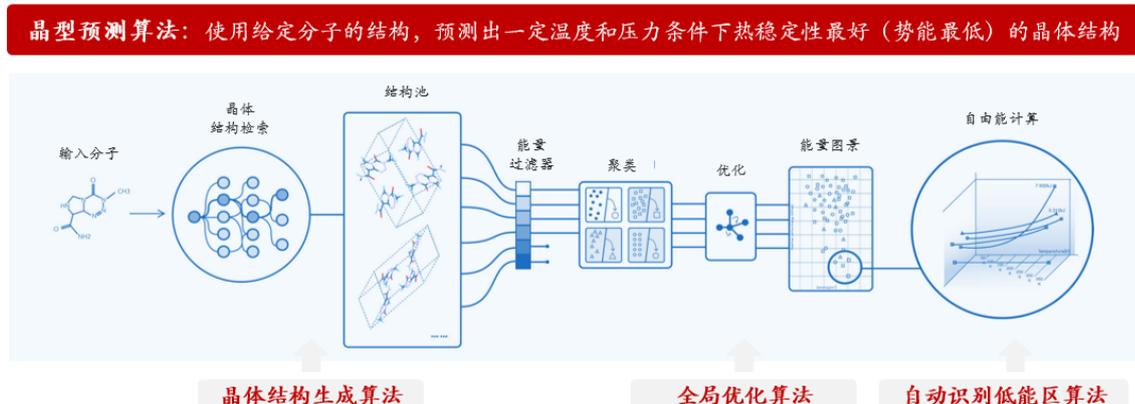
ADMET性质是指分子在有机体内的吸收、分布、代谢、排泄和毒性等性质，药物的ADMET性质与其在体内的疗效和安全性密切相关。实现对ADMET性质的预测可有效指导结构优化改造，提高药物研发的成功率以及减少药物研发成本。



资料来源：web of science，中银证券

图表 71. AI 用于晶型预测

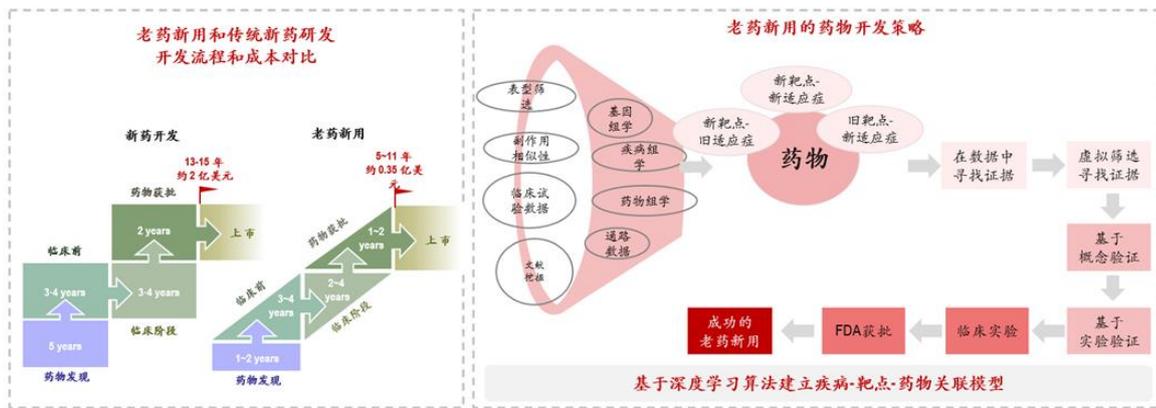
晶型与药物稳定性和溶解度等理化性质相关，可以强烈影响药物的生物利用度，最终影响药物的疗效。传统的通过实验筛选稳定性强且溶解度好的晶型，需要耗费大量时间进行试验尝试。AI结合实验的晶型预测和筛选技术可以在2~3周内预测出潜在的最佳药物晶型，有效加速研究和决策过程，大幅降低固体形态在后期应用的风险。



资料来源：晶泰科技，中银证券

图表 72. AI 用于药物重定位（老药新用）

药物重定位（老药新用）是对已经上市或上市失败的药物重新确定治疗适应症，可以省去化合物筛选及临床前验证的许多环节，是研发成本最低和研发周期最短的新药研发模式之一。



资料来源：web of science，中银证券

3.2 AI 药物研发政策环境分析

3.2.1 几个主要国家 AI 制药政策情况

图表 73. 几个主要国家 AI 制药政策环境对比

国家 政策环境分析

我国药物研发主要以“me too”和“me better”为主，基于新靶点的新药创制甚少。

国内绝大部分企业的定位都在研发下游以仿制和承接 CMO（医药生产外包服务）为主，相对来说对于小分子化药研制实力较强，生物大分子药物研发较弱。作为全球第二大药物交易市场，中国在新药研发领域依然面临严峻形势：新药研发原始创新不足，本土创新原研药数量远远落后于国外，孤儿药市场受国外垄断严重；新药研发方向同一重复现象严重，新药研发知识产权获国际专利授权比重远低于欧美国家和日本。美国在研药物数量全球份额一直稳定在 50% 以上，拥有世界上约一半的生物药公司和一半的生物药专利，而我国在研药物数量在全球占比仅为 4.1%。AI 新药研发发展对我国意义重大，国家层面已有多项基础性和支撑性的政策发布，政策环境相对稳定。2017 年 7 月，国务院发布《新一代人工智能发展规划》，特别提出基于人工智能开展大规模基因组识别、蛋白组学、代谢组学等研究和新药研发，推进医药监管智能化。而后，国家发改委《“十三五”生物产业发展规划》提出将加速新药创制和产业化；加快发展精准医学新模式；构建智能诊疗生态系统作为重点发展领域加以推动，并进一步聚焦了新药创制方向。中科院上海药物所牵头的国家“十三五”新药创制的研究项目中将 AI 技术作为最核心技术。2018 年 11 月，工信部《新一代人工智能产业创新重点任务》对于医学标准数据集建设和应用提出指标性要求。该政策的发布有利于 AI 新药研发场景标准化数据的获取和模型训练。2019 年 5 月，我国国家药品监督管理局药品审评中心 CDE 发布《真实世界证据支持新药研发的基本考虑》（征求意见稿），确定了真实世界证据 RWE 在罕见病治疗药物、修订适应症或联合用药范围、上市后药物的再评价、中药医院制剂的临床研发、指导临床研究设计、精准定位目标人群等场景中的应用。2020 年 2 月，工信部科技司向人工智能相关学（协）会、联盟、企事业单位发出《充分发挥人工智能赋能效用 协力抗击新型冠状病毒感染的肺炎疫情》倡议书，强调了优化 AI 算法和算力，助力病毒基因测序、疫苗/药物研发、蛋白筛选等药物研发攻关。

美国新药创制发展根基稳健且 AI 发展实力强劲。美国在 2016 年发布的《国家人工智能 R&D 战略计划》（National Artificial Intelligence Research and Development Strategic Plan）中提出了 AI 在医药卫生领域的愿景：

人工智能可以支持生物信息学系统，从大规模基因组研究（如全基因组关联研究、测序研究）中识别遗传风险，并预测新药的安全性和有效性。由美国发起的人类基因组计划积累了大量的基因组学数据为 AI+ 新药研发在数据层面提供了丰富的数据源。有赖于数量庞大的国际制药公司的聚集，北美地区在药物发现市场的人工智能（AI）应用中占据主导地位。美国境内以大型药企为中心的 AI 新药研发攻关集中在感染、肿瘤、内分泌、心血管、自身免疫、哮喘等疾病领域，这些疾病领域的用药特点是患病人群多、用药时间长、替代药物少、治疗棘手等。需要强调的是，在当前生物医药快速发展的情况下，美国 AI 生物药研发环境可以说是得天独厚：其具备全球最先进的技术体系、最多的成果储备，产业链成熟完善且是全球最大的生物医药市场；另在全球最强的金融系统及全球权威标准之一的 FDA 的支持下，美国生物医药产业引领全球的创新力，发展环境优越，资本市场结构合理，形成了发展势头良好的产业集群体系和独特的创新生态。这使得美国在推进 AI 在生物医药产业的切入和发挥显得顺畅，这将可能进一步升华并巩固美国新药创制的全球领导地位。

资料来源：浙江数字医疗卫生技术研究院，中银证券

续 图表 73. 几个主要国家 AI 制药政策环境对比

国家	政策环境分析
日本	<p>日本国内日益严重的老龄化促进了用药需求的持续提升，日本医药产业的发展遵循从点突破到面突破路线进而进入医药产业强国行列。日本医药企业以仿制药为突破完成国内医药研发能力的升级，得益于发达的化学工业基础，企业有效地获取、吸收国外先进技术成果，日本在此基础上实现技术的扩散及产业的不断发展与升级，形成了一个高效率的技术成果消化吸收与创新体系。面向新药研发，日本政府在 2016 年打造了一个研究联盟帮助其国内公司和机构使用日本 K 超级计算机以提高药物发现效率，日本 70 家制药厂商、医疗研究机构和 IT 相关企业都参与其中，包括了 Takeda、Fujitsu、NEC、京都大学医院、日本理化学研究所，以及提供临床资料的日本国家研究发展研究所等种种“产学研”协同作战的关键机构。</p> <p>随着人工智能技术的发展，日本在其 2017 年 3 月发布的《人工智能技术战略》中制定了 AI 新药研发的发展路线图，包括 AI 辅助药物发现、结合生物标志物和释药系统开发个性化 / 特异性药物并使用。在《AI 战略 2019》提案中日本提出将 AI 应用于药物发现和毒性评价等 (2020)，并使用 AI 构建药物发现目标搜索框架 (2021)。日本对于 AI 赋能新药研发发展路径清晰且报以厚望。</p>
印度	<p>印度是全球著名的“仿制药房”。经过 30 多年的发展已成为以原料药和仿制药为核心优势的制药强国。特定时期内部宽松的专利制度，培育了印度化工制药行业强大的仿制能力，此外印度企业基于专利前瞻性的路径选择也是其在竞争激烈的国际仿制药市场中脱颖而出的重要因素：高度垂直一体化的仿制药体系、产能提升为先导的出口区域路径选择、品种方面由 Para III (专利到期后仿制) 切入后向 Para IV (专利期内抢仿) 升级的选择等。不断优化生产工艺，把成本降得最低，把质量尽可能提高是印度药物研发的背景性走向。不过针对 AI 技术在医药领域的应用发展政策发布来看，印度更致力于为 AI 助力新药创制打下基础。2018 年 6 月，印度 NITI Aayog 在《人工智能国家战略》中提出将人工智能作为其癌症筛查和治疗的重大突破口，通过开发大型基础注释数据集建立一个附有标注的国家病理图像储存库；另一个在讨论项目为癌症成像生物库，以期建立并明确癌症表型的成像相关性。</p>

资料来源：浙江数字医疗卫生技术研究院，中银证券

3.2.2 我国 AI 制药政策环境

我国国务院部署面向 2030 年新一代 AI 发展规划

2017 年 7 月 20 日，国务院印发《新一代人工智能发展规划》，提出了面向 2030 年我国新一代人工智能发展的指导思想、战略目标、重点任务和保障措施，部署构筑我国人工智能发展的先发优势，加快建设创新型国家和世界科技强国。《规划》明确了我国新一代人工智能发展的战略目标：到 2020 年，人工智能总体技术和应用与世界先进水平同步，人工智能产业成为新的重要经济增长点，人工智能技术应用成为改善民生的新途径；到 2025 年，人工智能基础理论实现重大突破，部分技术与应用达到世界领先水平，人工智能成为我国产业升级和经济转型的主要动力，智能社会建设取得积极进展；到 2030 年，人工智能理论、技术与应用总体达到世界领先水平，成为世界主要人工智能创新中心。

近年来中国进行了广泛的投资活动。特别是，中国政府已经承诺在 AI 领域投资 50 亿美元。天津作为最大的直辖市之一，将在当地的 AI 产业中投资 160 亿美元，北京市政府将建设 21.2 亿美元的 AI 开发项目。中国还拥有至少十家估值超过 10 亿美元的私营 AI 初创企业。此外，中国一直在大力投资生物技术研发。

近年来我国 AI 发展迅速，政策环境持续优化

2021 年 4 月，中国信息通信研究院发布《人工智能核心技术产业白皮书—深度学习技术驱动下的人工智能时代》，指出我国人工智能技术体系与产业体系错位发展，深度学习理论突破速度逐步放缓，产业开始步入高速发展阶段。资本寒冬已经出现，但寒冬并非低谷，产业生态已现加速构建态势。人工智能以空前广度与深度推动社会发展，加速产业结构升级进程。

十三五以来，我国人工智能产业发展迅猛，政策环境持续优化，创新能力不断提升，产业规模进一步壮大，融合应用逐步深入，特别是新冠疫情防控期间，人工智能技术产品形成“智能抗疫军团”，有力支撑了我国疫情防控和复工复产。特别是人工智能政策环境持续优化，自 2015 年 7 月国务院出台的《关于积极推进“互联网+”行动的指导意见》首次将人工智能纳入重点任务之一，至 2017 年 7 月国务院印发《新一代人工智能发展规划》将其上升至国家战略，人工智能发展政策环境不断完善。截至 2020 年，党中央、国务院及各部门出台人工智能相关政策 10 余项，连续 4 年将人工智能写入政府工作报告，如工信部、教育部相继出台《促进新一代人工智能产业发展三年行动计划 (2018-2020 年)》、《高等学校人工智能创新行动计划》等多项政策文件，为我国人工智能发展营造了良好的发展环境，各地方超过 20 个省市自治区相继出台人工智能专项规划 60 余项。

十四五期间我国人工智能技术发展机遇空前。我国人工智能技术创新处于前所未有的活跃期。我国视觉、语音等智能任务全球比赛的参与度和入围率极高，多次在对话式问答、阅读理解、人脸识别等全球比赛中刷新智能任务的 SOTA13 模型准确率。我国发起的全球性比赛规模不断扩大，iFLYTEKA.I. 开发者大赛 2020 年参与团队达 9000 余支，腾讯广告算法大赛参与人次达万余名。

图表 74. 中国促进人工智能新技术发展相关政策整理

发布日期	主要政策	相关单位	发布内容
2014 年 12 月	《深圳市人民政府关于印发机器人、可穿戴设备和智能装备产业发展规划(2014—2020 年)的通知》	深圳市政府	主动谋划、布局高端, 加快发展机器人、可穿戴设备、智能装备产业是我市培育未来经济增长点、构建梯次型现代产业体系的内在要求, 是建设国家创新型城市和国家自主创新示范区、打造“深圳质量”和“深圳标准”的关键环节, 是全面贯彻落实“三个定位、两个率先”、转变发展方式、实现科学发展的重大举措。
2015 年 5 月	《中国制造 2025》	国务院	加快推动新一代信息技术与制造技术融合发展, 把智能制造作为两化深度融合的主攻方向;着力发展智能装备和智能产品, 推进生产过程智能化。
2015 年 7 月	《国务院关于积极推进“互联网+”行动的指导意见》	国务院	培育发展人工智能新兴产业;推进重点领域智能产品创新;提升终端产品智能化水平。主要目标是加快人工智能核心技术突破, 促进人工智能在智能家居、智能终端、智能汽车、机器人等领域的推广应用。
2016 年 3 月	《中华人民共和国国民经济和社会发展第十三个五年规划纲要》	人大	加快信息网络新技术开发应用, 重点突破大数据和云计算关键技术、自主可控操作系统、高端工业和大型管理软件、新兴领域人工智能技术, 人工智能写入“十三五”规划纲要。
2016 年 4 月	《机器人产业发展规划(2016-2020 年)》	工信部、发改委、财政部	到 2020 年, 自主品牌工业机器人年产量达到 10 万台, 六轴及以上工业机器人年产量达到 5 万台以上。服务机器人年销售收入超过 300 亿元;工业机器人主要技术指标达到国外同类产品水平;机器人用精密减速器、伺服电机及驱动器等关键零部件取得重大突破。
2016 年 7 月	《“十三五”国家科技创新规划》	国务院	发展新一代信息技术, 其中人工智能方面, 重点发展大数据驱动的类人智能技术方法, 在基于大数据分析的类人智能方向取得重要突破。
2016 年 9 月	《智能硬件产业创新发展专项行动(2016-2018 年)》	工信部、发改委	重点发展智能穿戴设备、智能车载设备、智能医疗健康设备、智能服务机器人、工业级智能硬件设备等。
2016 年 11 月	《“十三五”国家战略性新兴产业发展规划》	国务院	发展人工智能, 培育人工智能产业生态, 推动人工智能技术向各行业全面融合渗透。具体包括: 加快人工智能支撑体系建设;推动人工智能技术在各领域应用, 鼓励各行业加强与人工智能融合, 逐步实现智能化升级。
2017 年 3 月	《2017 年政府工作报告》	国务院	一方面要加快培育新材料、人工智能、集成电路、生物制药、第五代移动通信等新兴产业, 另一方面要应用大数据、云计算、物联网等技术加快改造提升传统产业, 把发展智能制造作为主攻方向。
2017 年 7 月	《国务院关于印发新一代人工智能发展规划的通知》	国务院	确定新一代人工智能发展三步走战略目标, 人工智能上升为国家战略层面。到 2020 年, 人工智能技术和应用与世界先进水平同步, 人工智能核心产业规模超过 1500 亿元, 带动相关产业规模超过 1 万亿元;2025 年, 人工智能基础理论实现重大突破, 部分技术与应用达到世界领先水平, 核心产业规模超过 4000 亿元, 带动相关产业规模超过 5 万亿元;2030 年, 人工智能理论、技术与应用总体达到世界领先水平, 核心产业规模超过 1 万亿元, 带动相关产业规模超过 10 万亿元。
2017 年 12 月	《促进新一代人工智能产业发展三年行动计划(2018-2020 年)》	工信部	从推动产业发展角度出发, 结合“中国制造 2025”, 对《新一代人工智能发展规划》相关任务进行了细化和落实, 以信息技术与制造技术深度融合为主线, 以新一代人工智能技术的产业化和集成应用为重点, 推动人工智能和实体经济深度融合。
2018 年 3 月	《2018 年政府工作报告》	国务院	加强新一代人工智能研发应用;在医疗、养老、教育、文化、体育等多领域推进“互联网+”;发展智能产业, 拓展智能生活。
2018 年 4 月	《高等学校人工智能创新行动计划》	教育部	到 2020 年, 基本完成适应新一代人工智能发展的高校科技创新体系和学科体系的优化布局, 高校在新一代人工智能基础理论和关键技术研究等方面取得新突破, 人才培养和科学研究的优势进一步提升, 并推动人工智能技术广泛应用。
2018 年 11 月	《新一代人工智能产业创新发展重点任务揭榜工作方案》	工信部	通过在人工智能主要细分领域, 选拔领头羊、先锋队, 树立标杆企业, 培育创新发展的主力军, 加快我国人工智能产业与实体经济深度融合。

资料来源: 政府官网, 中银证券

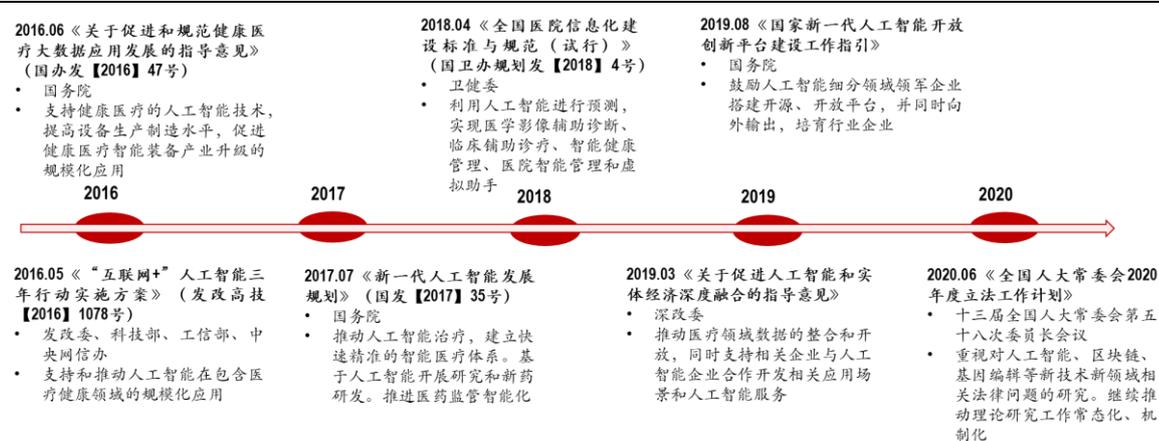
续 图表 74. 中国促进人工智能新技术发展相关政策整理

发布日期	主要政策	相关单位	发布内容
2019年3月	《2019年政府工作报告》	国务院	将人工智能升级为智能+, 要推动传统产业改造提升, 特别是要打造工业互联网平台, 拓展“智能+”, 为制造业转型升级赋能。要促进新兴产业加快发展, 深化大数据、人工智能等研发应用, 培育新一代信息技术、高端装备、生物医药、新能源汽车、新材料等新兴产业集群, 壮大数字经济。
2019年3月	《关于促进人工智能和实体经济深度融合的指导意见》	深改组	把握新一代人工智能的发展特点, 结合不同行业、不同区域特点, 探索创新成果应用转化的路径和方法, 构建数据驱动、人机协同、跨界融合、共创分享的智能经济形态。
2019年3月	《教育部关于公布2018年度普通高等学校本科专业备案和审批结果的通知》	教育部	全国共有35所高校获得首批人工智能专业建设资格。
2019年6月	《新一代人工智能治理原则——发展负责任的人工智能治理专业委员会》	国家新一代人工智能专家咨询委员会	突出了发展负责任的人工智能这一主题, 强调了和谐友好、公平公正、包容共享、尊重隐私、安全可控、共担责任、开放协作、敏捷治理等八条原则。
2020年1月	《关于“双一流”建设高校促进学科融合加快人工智能领域研究生培养的若干意见》	教育部、发改委、财政部	提出要构建基础理论人才与“人工智能+X”复合型人才并重的培养体系, 着力提升人工智能领域研究生培养水平。
2020年3月	《教育部关于公布2019年度普通高等学校本科专业备案和审批结果的通知》	教育部	80所高校开设人工智能专业
2020年3月	《加强“从0到1”基础研究工作方案》	科技部、发改委、教育部、中科院、自然科学基金会	提出要加强基础研究人才培养, 建立健全基础研究人才培养机制、实施青年科学家长期项目、在国家科技计划中支持青年科学家
2020年6月	《全国人大常委会2020年度立法工作计划》	人大	重视对人工智能、区块链、基因编辑等新技术新领域相关法律问题的研究, 继续推动理论研究工作常态化、机制化, 发挥科研机构、智库等“外脑”作用, 加强与有关方面的交流合作, 抓紧形成高质量的研究成果
2020年8月	《国家新一代人工智能标准体系建设指南》	国家标准化管理委员会、网信办、发改委、工信部	建立国家新一代人工智能标准体系, 加强标准顶层设计与宏观指导。深化人工智能标准国际交流与合作, 注重国际国内标准协同性, 充分发挥标准对人工智能发展的支撑引领作用
2021年1月	《工业互联网创新发展行动计划(2021-2023年)》	工信部	推动智能化制造发展。鼓励大型企业加大5G、大数据、人工智能等数字化技术应用力度, 全面提升研发设计、工艺仿真、生产制造、设备管理、产品检测等智能化水平, 实现全流程动态优化和精准决策。支持工业人工智能芯片、工业视觉传感器等基础硬件的研发突破

资料来源: 政府官网, 中银证券

中国生物医药相关的人工智能创新发展政策演变历程

图表 75. 中国生物医药相关的人工智能创新发展政策演变历程

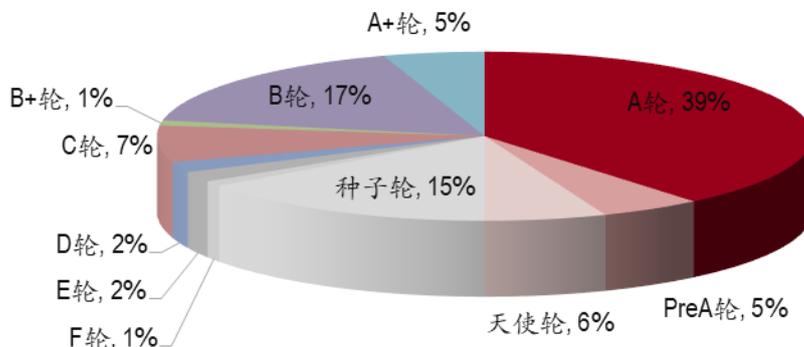


资料来源: 国务院, 36Kr, 德勤研究, 中银证券

3.3 AI 制药领域初创公司融资情况

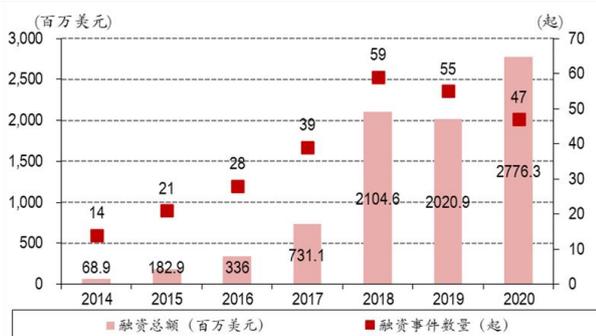
3.3.1 全球 AI 制药领域融资情况

图表 76. 全球 AI+制药企业不同融资轮次占比



资料来源：动脉橙，中银证券

图表 77. 全球 AI+制药企业 2014-2020 年融资金额和数量变化趋势



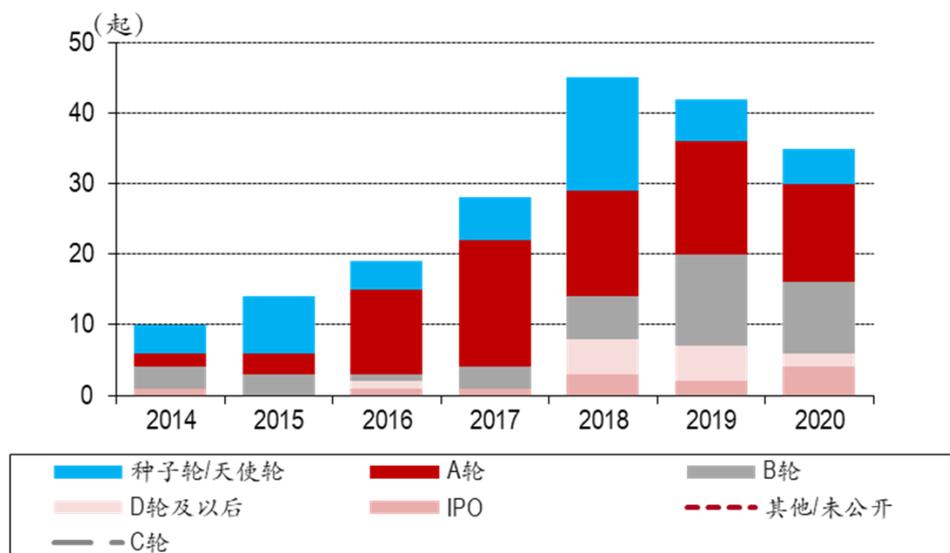
资料来源：动脉橙，中银证券

AI+制药初创公司在近六年来发展成阶梯式抬升，2014-2015 处在行业起步期，第一批成长起来的头部企业(Relay Therapeutics、Recursion、Atomwise)大多在这一时间段完成种子轮/天使轮融资；2016-2017 年经历了行业缓慢发展的过渡期，2018-2020 年则进入行业加速发展的成长期，一方面头部企业开始抢占市场份额，另一方面，在头部企业的刺激下，更多初创公司也加入了这一赛道进行角逐，Insitro 等一批在 2018 年成立的初创公司发展尤其迅速。

2020 年起，AI 制药的初创公司如雨后春笋、投资机构蜂拥而至、很多高科技互联网公司也来占位、制药巨头、传统药企逐步布局 AI，领先的制药公司与 AI 驱动的生物技术公司和 AI 技术供应商之间的合作关系越来越多，AI 专题会议激增，甚至很多科研团队开始转型，AI 制药转瞬间成为了医药行业最具商业价值的方向之一，甚至被认为将有机会引起一场颠覆式的制药革命。

整体而言，根据 AI+制药领域公司所处轮次判断该领域处在活跃发展、竞争加剧的阶段：有金字塔顶端的少数完成 D 轮及以后（包括 IPO）融资的公司，亦有新进入玩家。如今越老越多的头部企业已经拿到顶级药企的合作订单，大量正处在 A 轮和 B 轮融资之间的企业，他们或将面临更残酷的竞争。通过种子轮/天使轮融资情况预估，创业项目进入 AI+制药领域最为频繁的两个时间点是 2014 年和 2018 年。2019 年后，B 轮企业数量增长较多，可见 2016 年前成立的不少企业开始走向成熟，进入新的发展阶段。另外，AI+制药企业进入下一轮融资的几率也不低，约 53% 的 A 轮公司进入 B 轮；38% 的 B 轮公司顺利进入 C 轮；46% 的 C 轮公司进入到了 D 轮。

图表 78. 全球 2014-2020 年 AI+制药企业融资轮次分布变化趋势



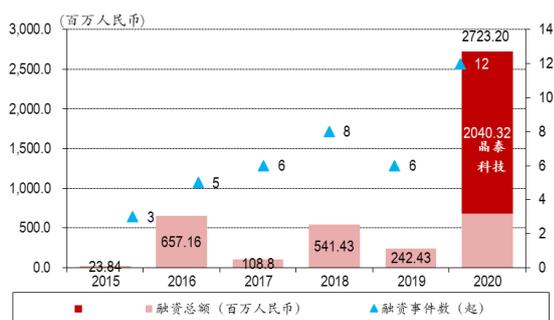
资料来源：动脉橙，中银证券

3.3.2 2020 年中国 AI 制药领域融资情况

相比国外，中国 AI+制药方面创新则显得更为稀罕，自 2015 年起开始出现少量事件，每年不到 10 起融资，总融资额不过几个亿人民币，这种局面直到 2020 年才被打破。

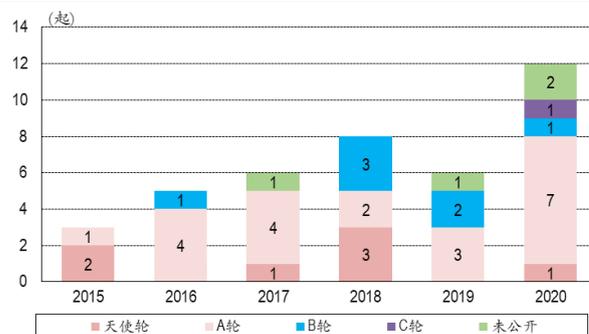
2020 年对中国的 AI+制药领域同样是至关重要的一年。中国 AI+制药融资项目数量已经翻倍，且同年融资总额出现了同比约 10 倍的增长。其中，晶泰科技融资超 3 亿美金；此外，宇道生物、剂泰医药和费米子科技融资额也均超过一亿人民币，且后三家的融资才刚刚起步（Pre-A 轮或 A 轮）。

图表 79. 中国 AI+制药 2015-2020 年融资事件和金额变化趋势



资料来源：动脉橙，中银证券

图表 80. 中国 2015-2020 年 AI+制药企业融资轮次变化趋势



资料来源：动脉橙，中银证券

图表 81. 2020 年中国 AI 制药领域融资情况

公司	最新融资时间	最新轮次	面向领域	阶段性成果
星亢原生物	2020.07.30	Pre-A 轮	新抗原、PROTAC、抗体药物开发领域	AI 新药研发平台 neoXTM
望石智慧	2020.12.23	B 轮	AI+小分子药物设计	智能化药物研发平台
晶泰科技	2020.09.28	C 轮	数字化药物开发	ID4 智能药物研发平台
费米子科技	2020.11.12	A 轮	研发针对小分子化药的 AI 辅助制药技术平台	基于深度学习的 FermiNet 小分子研发平台
未知君	2020.11.27	B+轮	微生物生态药物研发	关于 aGvHD(移植抗宿主病)微生物药物
METIS	2020.12.03	Pre-A 轮	AI 驱动药物制剂开发	
冰洲石	2020.12.07	B 轮	AI 驱动药物开发	云计算平台 Orbital Drug Design
宇道生物	2020.12.14	Pre-A 轮	变动机制小分子药物研发	ACISS 系列 (药物研发信息化产品) 和 AILLO 系列 (药物研发智能化产品)
星药科技	2020.12.29	A/A+轮	临床前药物研发	PyxirTM 药物研发平台

资料来源: 36 氪, 中银证券

3.3.3 对 AI 初创公司投资情况特点

AI+制药领域活跃机构 TOP5 中, 更多投资机构会继续参投原有投资标的。背靠科技公司的风投机构更偏爱投资 AI+制药领域。除 TOP5 外, 整体而言 AI+制药的活跃的投资机构还存在一个显著特点, 即药企参与投资。如新基 (Celgene) 对四家 AI+制药公司投资 6 次, 药明康德也投资 5 家公司。

图表 82. AI+制药领域活跃投资机构 TOP5

投资机构	投资次数/公司数	多次投资的公司	介入阶段	布局特点
GV	19 次/12 家	Schrodinger、Relay Therapeutics、Owkin、insitro、BlackThorn、Therapeutics、Alector	A 轮-F 轮	布局稍迟, 17 次出手在 2017 年后; 但狩猎广阔, 其中几家被投资企业进入后期轮次, Schrodinger 已上市
AME Cloud Ventures Alexandria Venture Investments	12 次/6 家	Strateos、Recursion、BioAge、Atomwise	种子轮-C 轮	2014-2016 年投资第一波新兴公司, 2018-2020 年继续开启第二轮对 AI+制药的投资
Data Collective	10 次/3 家	Strateos、Recursion、Atomwise	种子轮开始持续跟投	介入非常早期, 2014 年-2015 年参与了 Strateos 和 Atomwise 两家公司的种子轮, 并一直跟进
五源资本	9 次/5 家	星药科技、星亢原、未知君	Pre-A 轮为主	参与了三家国内 AI+制药企业的 Pre-A 轮融资
Felicis Ventures	9 次/5 家	Recursion、BioAge	种子轮-C 轮分布均匀	16 年开始有所关注; 19-20 年在这一领域发力, 投资布局集中在这一时期

资料来源: 动脉橙, 中银证券

3.4 AI 制药初创公司梳理

3.4.1 AI 制药公司梳理

图表 83. 不同年份 AI 制药初创公司梳理



资料来源：公司官网及公众号，中银证券

图表 84. AIDD 初创公司简介

公司名称	成立时间	所属地	当前融资轮次 (上市标红)	主要业务
中以海德	2019/12/20	广东	股权融资	全球首个人工智能新药研发孵化一体化平台。针对中国乙肝疾病，建立全新的新药研发模式。
智药科技	2017/4/10	浙江	天使轮	专注于人工智能的药物研发技术在抗病毒药物领域的应用，采用 KangTech 技术，对药物重新定位并进行药物研发，业务涵盖传染性等疾病等医疗领域。
智化科技	2018/12/28	湖北	A+轮	一家 AI 药物研发商。智化科技采用基于数据和机器学习的合成路线产生技术，目标是实现化学合成智能化，预计未来将带来分子合成效率的大幅度提升，为各个领域的分子研发创新提供服务。
云深智药	2020/7/9	中国	腾讯药物研发平台	将 AI 模型应用到实际药物研发项目中
宇道生物	2013/12/5	上海	Pre-A+A 轮	立足于变构机制小分子药物研发，拥有系统性的变构相关技术积累及深厚的科学背景，是全球为数不多的既拥有变构药物研发平台并同时推进 First-in-Class (FIC) 变构药物管线的生物技术公司之一。
英矽智能 (Insilico Medicine)	2014/1/1	上海	C 轮	是一家抗衰老及癌症治疗药物研发商，依托基因组学、医疗大数据及 AI 技术等技术手段，专注于癌症治疗、抗衰老药物的研发、生产及销售，同时面向用户提供健康管理、癌症预防等服务，致力于加速药物发现与开发中三个领域的发展：疾病靶点发现、生成全新分子结构（生成化学）及合成生物数据的生成（生成生物学），以及临床试验结果预测。
英飞智药	2018/11/29	北京	Pre-A 轮	致力于开发和推广基于人工智能的新药研发平台，为医药工业提供智能创新药物研发服务和新一代解决方案，提升创新药物研发能力；同时依托自身前沿技术开展自主创新药物品种研发。
亿药科技	2018/7/26	北京	天使轮	基于人工智能的药物研发商，自主开发具有深度学习能力的算法系统，对研发药物中各种不同的化合物以及化学物质进行分析和预测，致力于为药物研发企业提供临床试验候选药物。
星药科技	2020/4/26	北京	A+轮战略融资	致力于使用尖端人工智能技术，聚焦临床前药物研发。其自主研发的人工智能药物发现平台致力于帮助药物研发科学家大幅度节省药物开发环节的时间和成本，并能够为所研发药物提供完善的专利保护覆盖。
星亢原	2018/8/24	北京	A+轮	将人工智能 (AI) 与生物物理相结合，进行药物设计研发的生物高科技公司。星亢原专注大分子和多特异性分子药物研发，尤其是在肿瘤免疫治疗领域。针对治疗药物的早期发现，星亢原通过表征蛋白质-蛋白质相互作用 (PPI) 设计开发了一个强大的研发平台。星亢原已经与国内外生物医药公司建立合作，布局药物研发管线。
未知君	2017/11/6	广东	B+轮	依托创新型药物开发模式和自研的药物开发平台，将人工智能与肠道微生态技术相结合，实现数据高质量分析、沉淀与产出，打通从“数据”到“药物”的转化链路，实现微生态药物研发的完整闭环，极大地提高了药物开发的效率和成功率。未知君根据不同适应症患者肠道菌群的特异性，针对性地研发肠道菌群药物，用于多个适应症的治疗，有力将微生态制药从实验室阶段的科学探索，推向产业化的落地。
望石智慧	2018/7/9	北京	B+轮	人工智能驱动新药研发商，致力于用人工智能驱动新药研发，改变以往以专家为核心的单引擎药品研发模式，构建以科技为推动力的机器+专家的双引擎研发模式，结合人工智能、计算物理、计算化学、计算生物学、微流控等技术，打造新型的药品研发平台。
索智生物	2021/1/19	浙江	天使轮	专注于自身免疫系统和神经退行性疾病领域的新药研发，力图去打造一个以 AI 为基础的新型新药研发范式。
燧坤智能	2018/9/4	南京	Pre-A 轮	依托南京图灵人工智能研究院，致力于运用人工智能方法系统性整合药物大数据，深度赋能药物研发全过程。
生全智能	2018/11/1	北京	—	致力于生物医药研制过程 AI 化，专注人工智能辅助药物研发，目前开展病理切片人工智能辅助阅片项目。
深势科技	2018/11/29	北京	A 轮	药物研发算法科技公司，致力于运用新一代分子模拟技术解决药物研发难题，实现药物分子的理性发现和设计。
深度智耀	2017/9/22	北京	B+轮	致力于用最先进的人工智能技术赋能新药临床开发与申报全流程，帮助全球的药企更快更好的研发新药。公司核心团队由来自跨国药企新药开发部门资深专家以及世界级的 NLP 专家组成。

资料来源：公司官网及公众号，中银证券

续 图表 84. AIDD 初创公司简况

公司名称	成立时间	所属地	当前融资轮次 (上市标红)	主要业务
普瑞基准	2015/7/6	北京	股权融资 A 轮	自主研发了 AI 驱动的面向癌症药物研发的大数据系统 (AIBERT)，专注于“创新药研发的深水区”，解决四大核心问题，即：潜力靶点的评估，适应症的选择，生物标志物的发现，耐药机制的研究（以及相关的药物联用方案）。通过提供 AI 支持的新型生物信息和转化医学服务，成为肿瘤新药研发企业的战略伙伴。
湃隆生物	2019/3/26	上海	种子轮战略融资	利用人工智能技术开发具有突破性进展的在研新药，继而在整个新药研发过程中-从靶点选择，到化合物筛选，再到临床前研究的优化及临床试验，极大提高新药研发的效率。
科辉智药	2018/9/27	广东	股权融资 Pre-A 轮	专注于计算化学驱动的新药设计，致力成为智能驱动的研发型创新药企业。公司核心业务是发展计算驱动的药物发现平台，以及基于该平台开发一系列具有自主知识产权的小分子靶向药物。
康迈迪森	2020/9/10	北京	Pre-A 股权融资	专注于计算化学驱动新药研发的平台公司。利用全球领先的基于蛋白三维结构的超大规模虚拟筛选与人工智能等核心技术，为全球药企和科研单位提供小分子创新药物的早期开发服务，快速鉴定先导化合物，满足小分子创新药物研发从 0 到 1 的迫切需求。
晶泰科技	2015/9/11	广东	D 轮	以计算驱动创新的药物研发公司，其 ID4 (Intelligent Digital Drug Discovery and Development) 智能药物研发平台结合量子物理、人工智能与云计算技术，可以准确预测小分子药物的多种重要特性，加速药物临床前研究的效率与成功率。
剂泰医药 (METIS Pharmaceutica ls)	2020/1/10	浙江	Pre-A 轮	结合了突破性的高通量制剂实验平台及前沿计算物理、人工智能与云计算等技术，致力于快速、精确的智能化药物制剂开发。目前在肺癌、乙型肝炎等疾病开发新药，预计一两年内进入临床。
焕一生物	2019/1/9	上海	Pre-A 轮	中国领先的将 AI+ 系统免疫学应用于临床的创新型生物科技公司。以 AI+ 系统免疫技术平台为驱动，自主研发针对不同临床场景的多组学诊断产品及精准诊疗解决方案。产品与业务包括肿瘤及自体免疫疾病的早期筛查、用药应答、治疗监测、及生物标记物为导向的新药研发服务等。焕一生物已与国内外多家知名医疗机构、科研机构 and 药企开展全方位、深层次的合作。
分迪科技	2014/10/16	四川	——	致力于为生物医药、能源材料、环境保护、食品皮革等领域提供分子模拟与设计服务和计算平台的高科技创新型企业。公司技术团队具有深厚的生物信息学、蛋白结构学、计算生物学、计算化学、药物化学、计算材料学等专业知识，且长期从事分子对接、同源建模、分子动力学、药物设计（含农药、兽药）、蛋白设计、化合物库设计等工作，具有非常丰富的实践经验。
费米子科技	2015/5/4	广东	A 轮	创新药开发科技公司，利用自主开发的基于深度学习的虚拟筛选、基因替换、结构生成、ADMET 预测与靶标预测技术加速创新药物的研究与开发。
答魔数据	2016/6/14	湖南	战略融资 A 轮	致力于将人工智能技术与药学、化学、生物学等学科相结合，打造 AI+ 药物研发数据平台，运用大数据、人工智能技术赋能药企的药物研发进程。
冰洲石 (AccutarBio)	2016/1/6	上海	战略融资 B 轮	AI 技术提高筛选药物准确性和效率，打造算法平台，加速新一代药物开发。
北科德源	2015/12/7	北京	股权融资	致力于人工智能技术开发和应用、为精准靶向药物研发提供技术服务的公司。主要是利用人工智能系统优化新药研发进程、加快研发速度、降低研发费用，同时通过预警药物的潜在毒副作用降低药物研发过程中的错误发生率。服务项目包括生物医药大数据分析、药物作用靶点分析、计算机辅助药物筛选和设计、药物作用机制分析、药物 ADMET 分析等。
百图生科	2020/8/24	北京	被百度收购 A 轮	中国首家生物计算技术驱动的生命科学平台，利用前沿算法、智能传感器、智能芯片、微纳机器人等 AI 能力解决生命科学问题。通过自主研发和产业投资双轮驱动，赋能创业企业和科研机构的技术成果转化，共同为行业伙伴带来先进组学数据采集、多维数据挖掘分析、计算药物设计、高通量自动实验验证等先进能力。利用技术+资本，加速药物设计、靶点发现、精准诊断数字医疗等精准生命科学产品的研发，助力人类健康事业发展。

资料来源：公司官网及公众号，中银证券

续 图表 84. AIDD 初创公司简况

公司名称	成立时间	所属地	当前融资轮次 (上市标红)	主要业务
X-37	—	美国	A 轮	人工智能药物研发商，X-37 的开发计划包括调节重要药物靶点的新疗法，以解决未满足的临床需求。具体疗法有针对自身免疫性疾病的 ZAP-70、针对癌症的 PIM3 和 SHP2 以及针对抗凝的 XIIa 因子。还将确定其他高价值药物靶点。使用 Atomwise 的世界级 AI 平台进行基于结构化的药物设计并开发这些药物项目与医学有关的拐点，在那里 (AI 平台) 可以由大型制药公司收购或与之合作以将其推向市场。
Verge Genomics	2015/1/1	美国	A 轮	一家 AI 新药物研发商。Verge Genomics 的研究主要和奥兹海默症、帕金森综合征、肌萎缩侧索硬化等其他神经退类疾病。Verge Genomics 的机器学习模型是通过患者及实验室数据训练的，它能识别疾病网络中的基因，预测哪些化合物可能会阻碍这些基因的活动。公司的研究人员在动物以及干细胞分化出的神经上测试了这些化合物，并利用这些结果来进一步优化这个模型。
twoxar	2014/1/1	美国	A 轮	twoXAR 通过其 DUMA™ 药物研发平台来评估大型公共和私有数据集，从而可以在数分钟时间内识别药物，并对药物和疾病的匹配度按照概率进行排序。
Schroödinger (薛定谔)	1990/1/1	美国	IPO 上市	从创立至今已经发布了 7 项关键技术平台。包含可对化合物进行高通量筛选的 Glide、Prime 全集成蛋白结构预测程序、WaterMap 首个计算蛋白结合水位置和能量的方法、FEP+ 首个精确预测具有共同核心的不同分子的不同亲和力的方法、LiveDesign 协同蛋白设计的平台以及与冷冻电镜研发相关的 Cyro-EM Initiative
Reverie Labs	2017	美国	A 轮	运用机器学习算法优化药物开发流程。Reverie Labs 基于生物微分子的特性开发出最佳的结构预测模型，处理药物开发过程中的实验数据，并运用生物分子优化器分析最佳的生物微分子组合，确定最佳的药物品种，加速药物开发进程。
Relay Therapeutics	2016/1/1	美国	IPO 上市	致力于研发将蛋白质运动置于药物发现的核心可以极大地扩展治疗可能性
Redesign Science	2017/1/1	美国	战略融资 A 轮	专注于以创新技术加速早期小分子药物研发进程。通过云端并行分子动力学模拟技术，Redesign Science 重点研究难以成药的蛋白质靶点——而在传统计算化学中，这些靶点蛋白质因缺乏足够数据支撑，往往难以获得多样性的小分子药物。
Recursion Pharmaceuticals	2013/11/5	美国	IPO 上市	一家运用计算机视觉技术来处理细胞图像，通过分析细胞特征来评估疾病细胞药后反应结果的公司。他们使用先进的成像技术和人工智能技术进行高通量的细胞模型实验，致力于在上百种疾病的细胞模型中进行上千种候选药物的检测，最终找出对应不同疾病的新药。Recursion Pharmaceuticals 的独特之处是结合机器自动化和人工智能技术，大规模地并行多个实验。现在，Recursion 的实验室每周可以进行 3 万个实验。在不久的将来他们可以每周进行几十万个实验。
Qrativ	2017/7/16	美国	A 轮	一家美国神经网络新药研发商，利用神经网络和深度学习技术，并联合临床专业知识推进药物的开发，为罕见疾病和针对性的患者群体提供疾病治疗方案。其合作伙伴可以利用该公司的药物治疗平台 Darwin.ai 来寻找候选药物的用途。
Phenomic AI	2017/1/1	加拿大	种子轮	利用 AI/ML 揭示了细胞与细胞相互作用产生的药物靶标，并推动了针对具有挑战性的疾病的新型抗体药物发现。由 Phenomic AI 首席执行官 Sam Cooper 领导的 Phenomic AI 是一家针对癌症和纤维化的药物开发公司。该公司的平台整合了先进的 AI/ML 工具，可在多细胞系统中大规模筛选复杂的相互作用，从而发现可在内部或与合作伙伴共同开发的新型药物靶标。
Owkin	2016/8/1	美国	战略融资 A 轮	建立了数学模型和算法，可以解析各类组学 (omics) 数据、可视化数据和患者概况信息等。这类解析方式方法将达到前所未有的水平，从新靶点发现、药物设计、临床试验、到患者给药等各个环节，通过利用 AI 大数据辅助分析，加快药物发现和优化药物开发，最终愿景目标是帮助每个患者获得更好的预后效果。
Oncocross	2015/1/1	韩国	战略融资 B 轮	应用 AI 平台技术探索新药候选物质及在研药物中寻找新适应症的新药高新技术企业。Oncocross 主要定位于进入临床阶段的新药候选物质，或者已上市销售安全性已获得认证的药物等领域，与该领域的制药企业进行合作。
Numerate	2007/3/18	美国	B 轮	试图通过应用新的机器学习算法来克服药物发现的重大挑战。

资料来源：公司官网及公众号，中银证券

续 图表 84. AIDD 初创公司简况

公司名称	成立时间	所属地	当前融资轮次 (上市标红)	主要业务
NuMedii	2008/1/1	美国	A 轮	一家硅谷的生物技术公司，致力于用大数据分析技术和人工智能为新药研发带来革命性的变革。
Molecule.one	2016/11/1	波兰	天使轮	一个拓展药物合成人工智能平台。
Macromoltek	2010/1/1	美国	种子轮	提供分子建模软件，应用于分析潜在的抗体候选药物，软件使用专有的算法来优化抗体组合的选择过程。Macromoltek 通过预测抗体的结构来协助制药公司设计新的药物免疫体组合来治疗疾病。平均研发一款新药物需要 15 至 25 年的时间，Macromoltek 和上一期 YC 的公司 Atomwise 都能利用算法有效提高研究的效率。
Lantern Pharma	2013/1/1	美国	IPO 上市	通过大数据与人工智能的技术大大提高药物与癌症患者的匹配度，从而缩减新药研发在临床 2 期的周期与成本。
LAM Therapeutics	2013/1/1	美国	C 轮	将患者、人工智能技术与下一代基因测序技术相结合，在临床试验中测试 LAM 药物，然后通过分析基因组学与蛋白质组学数据，将药物与患者匹配。
Healx	2014/1/1	英国	B 轮	使用机器学习算法和计算生物学来识别罕见疾病的新型药物应用。它与患者团体和慈善机构合作，帮助确定药物再利用的机会，并帮助把基础研究转化为切实可行的潜在疗法。
Frontier Medicines Corporation	2018/1/1	美国	B 轮	一家临床前阶段生物制药研发商，专注于化学蛋白质组学研究，通过识别蛋白质上潜在的新结合靶点，从而开发小分子药物。此外，其技术平台还集成了先进的计算和机器学习的能力。
Exscientia	2012/1/1	英国	D 轮	利用已开发的人工智能平台进行自动化药物的研发指导，利用大数据和机器学习方法，根据已有药物研发数据自动设计出上百万种与特定靶标相关的小分子化合物，并根据药效、选择性、ADME 等其他条件对化合物进行评估和筛选，然后对筛选出来的化合物进行实验检测，并反馈到 AI 系统中进行筛选，旨在缩短新药研发进程。
Euretos	2012/1/1	荷兰	——	使用人工智能来识别和连接分子疾病和药物研究的相关信息。
Envisagenics	2014/4/22	美国	种子轮	一家由人工智能驱动的生物技术公司，专注于发现导致癌症和其他遗传疾病的新型 RNA 剪接变体。公司的主要技术是 SpliceCore® 发现平台。该平台采用已验证以外显子为中心的方法，结合机器学习演算法和高性能计算，重新构建人类基因组。其发现新靶点的概率是以基因为中心的发现工具的 250 倍。
Engine Biosciences	2014/1/1	美国	A 轮	Engine 的自有专利技术包括面向基因组的生物实验数据生成方法以及用于数据分析、细胞内过程图谱的构建和预测的人工智能算法。
Deepmind	2010/1/1	英国	已被谷歌收购	将机器学习和系统神经科学的最先进技术结合起来，建立强大的通用学习算法。AlphaGo 的开发团队。已经被 Google 收购。
Cyclica	2013/5/30	加拿大	B 轮	一家加拿大 AI 辅助药物研发服务提供商，利用生物物理学、生物信息学和 AI 技术等原理，为医药公司用户提供评估药物安全性和有效性的服务，指引药物发现管线，并基于蛋白库识别蛋白靶点，筛选潜在的小分子药物；旗下主要产品有 Ligand Express。
BenevolentAI	2013/11/13	英国	战略融资	致力于应用人工智能开发疑难疾病的新药。它是第一家完全集成的 AI 公司，同时拥有药物发现和临床开发能力。BenevolentAI 的先进技术以更低的成本，更高的成功率和更短的研发流程打破了医药行业的传统模式。BenevolentAI 目前的药物研发产品组合表明，它可以将早期药物研发的时间缩短四年，并有潜力在整个药物研发过程中，提高药物研发平均效率的 60%。
Atomwise	2012/1/1	美国	B 轮	利用超级计算机、AI 和复杂的算法模拟制药过程，来预测新药物的效果，同时降低研发成本，其开创性技术 AtomNet 可以像人工智能学习识别图像一样，通过识别模式判断分子间的相互作用。
1910 Genetics	2018/1/1	美国	A 轮	AI 药物研发商，运营着一个用人工智能筛选蛋白质药物的平台 —— ROSROSLYND，他们希望找到从蛋白质序列中预测蛋白质功能的方式。
Biovista	1999/1/1	美国	——	Biovista 是 AI 和系统药物重新定位的先驱。他们应用他们的系统发现人工智能平台开发他们在神经退行性疾病，癫痫，肿瘤和孤儿疾病等疾病领域重新定位候选药物的渠道。他们还与合作者合作，主动定位和重新定位自己的资产，无论是新化学实体还是现有化合物。他们的科学家利用 Biovista 的技术平台分析大量数据资源，并识别化合物，分子靶点和疾病之间非显而易见的基于作用机制的关联。

资料来源：公司官网及公众号，中银证券

续 图表 84. AIDD 初创公司简介

公司名称	成立时间	所属地	当前融资轮次 (上市标红)	主要业务
C4X discovery	2007/1/1	英国	战略融资 IPO 上市	C4X Discovery 为药物发现带来了新的发展方向。使用其独特的基于核磁共振的技术来确定 3D 分子。C4X Discovery 专注于优化药物的设计和开发，并与制药行业合作，以生成更好，更安全的产品。C4X Discovery 能够确定各种生物学重要分子的生物活性 3D 结构，包括药物，天然存在的配体和酶辅因子，并且独立于传统方法（例如计算建模和 X 射线晶体学）
therapeutics	2003/1/1	英国	Post—IPO Equity	e-Therapeutics plc 是一家药物发现和开发公司。它开发了专有的计算系统，可以快速准确地分析和预测药物如何与体内细胞相互作用，希望能够优化鉴定具有理想疗效和最小副作用的候选药物的可能性。
Insitro	2018/1/1	美国	C 轮	insitro 是一家数据驱动的药物发现和开发公司，利用机器学习和高通量生物学来改变药物发现和交付给患者的方式。该公司正在应用生物工程的最新技术来创建大量的数据集，使现代机器学习方法的能力能够在药物研发的关键瓶颈上发挥作用。由此产生的预测模型可用于加速靶点选择，设计和开发有效的治疗方法，以及指导临床策略。
Iktos	2016/10/1	法国	战略融资	专注于开发应用于化学研究的人工智能解决方案，尤其是药物化学和新药发现。Iktos 正在开发一项专利和创新技术，使用深度学习生成模型，利用现有的数据来设计经过模拟优化的分子，以满足药物发现项目的所有目标。Iktos 技术的使用使早期药物研发的生产率大大提高
BERG	2006/1/1	美国	—	BERG 是一家临床阶段的公司。该平台通过应用基于贝叶斯算法和概率的人工智能来分析大量患者的基因型、表型和其他特征，从而识别治疗方法和生物标志物，用于癌症、糖尿病和神经病学领域的候选治疗产品和诊断。BERG 的平台聚焦在生物学、技术和人工智能分析的交叉领域，集成了许多关于患者生活方式、人口统计学和生物学方面的数据特征。该平台通过更好地了解患者的疾病概况，从而识别和揭示分子特征，指导和加速候选药物的选择和开发。
DeepMatter	2015/1/1	英国	IPO 上市 Post-IPO Equity	DeepMatter 提供一个集成的硬件和软件平台，基于传感器、人工智能和基于机器学习的软件，允许将实验数据记录、编码并输入云中，以便与其他科学家实时共享。该平台旨在改善和加速新药开发的复合合成阶段，尤其是先导物鉴定和优化。
Gatehouse Bio	2016/4/16	美国	— 种子轮	Gatehouse Bio 是一家生物数据公司，致力于加速下一代治疗技术的发展。他们的 sRNAlytics 平台通过对小 RNA 的深入分析了疾病的分子通路，然后将其转化为治疗靶点和辅助诊断。
ProteinQure	2017/10/1	加拿大	— 种子轮	ProteinQure 为蛋白质疗法的设计搭建一个计算平台，利用人工智能和量子计算来进行蛋白质药物的计算设计。ProteinQure 致力于开发传统化学领域之外的新疗法，从而创造一个设计药物而不是发现药物的世界。
Sensyne Health	2018/1/1	英国	IPO 上市 Post-IPO Equity	Sensyne Health plc 是一家临床 AI 公司，他们与 NHS 信托合作，通过分析来自匿名患者数据的大型数据库的真实证据，加速新药的发现和开发，改善患者护理，从而创造价值。
Nanna Therapeutics	2012/12/12	英国	ASTELLAS 并购	Nanna Therapeutics 建立基于机器学习的全集成药物引擎平台 (TIME)，带来药物发现的速度、效率和质量的革命性转变，并显著增强安全性分析以提高临床成功率。Nanna Therapeutics 正在开发突破性药物，用于治疗涉及线粒体功能缺陷的疾病，例如 MELAS 和 LHON 以及中枢神经系统疾病，帕金森氏症，阿尔茨海默氏病和肌萎缩性侧索硬化症 (ALS)
Sirenas	2011/1/1	美国	—	Sirenas 是一家生物技术公司，利用计算机方法来发现源自全球微生物组的疗法。Sirenas 通过其专有的数据挖掘技术 ATLANTIS™ 应用于广泛分子分类，并与内部下一代合成化学方法相结合，为药物发现提供了新思路。
Standigm	2015/5/4	韩国	D 轮	Standigm 是一家药物发现公司，通过使用经过生物医学大数据培训的人工智能搜索治疗性先导化合物。使用 Standigm 的最新机器学习技术，制药研究公司可以消除药物发现过程中的某些不确定性，这使得针对有效治疗的重点研究成为可能。
Strateos	2012/2/14	美国	B++ 轮	Strateos 将药物化学、生物学分析和合成生物学自动化到闭环机器人实验室中，以加速研究人员的药物发现工作，使他们能够远程进行有效、可重复和快速的实验，从而让研究人员可以专注于加速发现，而不是劳动密集的工作。

资料来源：公司官网及公众号，中银证券

续 图表 84. AIDD 初创公司简况

公司名称	成立时间	所属地	当前融资轮次 (上市标红)	主要业务
A2A Pharmaceuticals	2016/1/1	美国	可转债融资种子轮	A2A Pharmaceuticals Inc. 致力于开发新型治疗剂，重点领域是肿瘤学和杜兴氏肌营养不良症的治疗计划。A2A 在平台内集成了人工智能/深度学习工具，通过系统的设计从根本上加速先导药物的发现和优化，从而为难以实现药物靶向的疾病创造多种高度选择性的新药物候选物。
Cloud Pharmaceuticals	2009/1/1	美国	种子轮	Cloud Pharmaceuticals 结合了人工智能和云计算来搜索虚拟分子空间，并结合复杂的分子模型来设计新药。该过程能够以较低的成本和较高的成功率实现更快的药物开发进度，并更好地寻找药物的适应症。该公司在药物开发的各个阶段（从发现到临床）都进行合作，并正在建立涵盖广泛适应症的产品线。
Genesis Therapeutics	2019/11/1	美国	A 轮	Genesis Therapeutics 帮助药物开发人员使用业界先进的小分子发现平台，以加快和优化新药的开发。在技术上，Genesis Therapeutics 将新颖的深度神经网络、生物物理模拟和大规模可扩展的计算基础架构相结合，以在分子生成和特性预测方面达到行业领先水平。
Saama	1997/1/1	美国	B 轮	Saama 是 AI 临床分析平台排名第一的公司，致力于使生命科学行业能够进行更快、更安全的临床开发和监管计划。超过 50 家生物技术公司在超过 1500 项研究中使用了 Saama 的生命科学分析云 (LSAC) 平台。LSAC 丰富的应用程序可对全面的临床研究数据进行全面的监督，使公司能够更有效地提交新药申请 (NDA) 并更快地将药品推向市场。
BioSymetrics	2015/1/1	美国	——	BioSymetrics 是一家生物医学 AI 公司，以领先的数据科学专业知识为医疗保健和研发创新提供支持。BioSymetrics 通过使用正在申请专利的 Contingent-AI 框架并结合临床试验来建立更全面的人类健康和药物研究视野，从而加快早期药物研发。
Genedata	1997/1/1	瑞士	种子轮	Genedata 的 Biopharma 平台致力于将生物制药研发过程数字化，简化了整个研发工作流程，以提高通量并改善数据质量。
Dyno Therapeutics	2018/1/1	美国	A 轮	Dyno Therapeutics 正在开创一种以人工智能为动力的基因治疗方法。利用机器学习和定量高通量体内实验，Dyno 正在构建针对疾病的基因治疗载体，从而实现全新的治疗方法。
Researchably	2016/1/1	美国	——种子轮	Researchably 的平台通过人工智能技术对科学论文进行分类，阅读它们以获取特定细节，然后根据专业和兴趣向研究人员定制合适的论文，这将大大加快药物研发的理论研究阶段。
PsychoGenics	1999/1/1	美国	——	PsychoGenics 为各种规模的生物制药公司提供广泛的高度预测性疾病模型产品组合，并通过丰富的执行经验，使客户能够为患者提供急需的优质临床候选药物。PsychoGenics 利用计算机视觉和人工智能从小鼠中提取和分析行为和生理数据，并为发现和开发下一代中枢神经系统疾病突破疗法提供有效方法。
Deep Genomics	2014/1/1	加拿大	C 轮	Deep Genomics 正在构建一个人工智能驱动的药物发现平台，该平台集自动化、先进的生物医学知识、大数据采集和机器学习于一体，支持基因药物的发现和早期研发。Deep Genomics 正在使用多种核酸治疗方法来解决代谢、神经退行性疾病和神经肌肉疾病。
Turbine	2015/1/1	匈牙利	A 轮	Turbine 的专用平台利用先进的数字细胞模型，结合细胞行为模拟技术和分子生物学，来了解复杂的肿瘤机制并针对它们设计药物。通过在发现和早期开发的最关键阶段进行仿真，Turbine 为自己和合作伙伴的产品线提供更大的临床成功机会。

资料来源：公司官网及公众号，中银证券

图表 85.AI 制药公司的基本信息

公司名称	成立年份	所在地	累计融资金额	融资轮次	研发人员数量	合作高校/研究机构/平台数量	在研管线数量	合作药企数目
Schrodinger	1990	美国	3.75 亿美金	IPO	150	1250	5 (自研) +28 (合作)	10+
Relay Therapeutics	2016	美国	8.63 亿美金	IPO	70	—	3 (2 个 I 期)	—
Recursion Pharmaceuticals	2013	美国	7.89 亿美金	IPO	—	—	35 (4 个 I 期)	拜耳
Lantern Pharma	2013	美国	9300 万美金	IPO	—	—	3 (2 个 I 期临床)	自研
Insilico Medicine	2014 年	美国	3.06 亿美金	C 轮	67	约翰霍普金斯大学、哥本哈根大学	15 (只做 IND 前, license-out)	药明康德、JUVENESCENCE、葛兰素史克、诺华、强生、安斯泰拜尔、新基、罗氏、赛诺菲、Celgene、住友、Diamond Light Source、Scripps Research、BMS
Exscientia	2012 年	美国	4.3 亿美金	D 轮	148	—	26 (3 个 I 期, 几乎都是与药企共同开发)	—
Atomwise	2012 年	美国	1.7 亿美金	B 轮	69	—	500+ (自研)、8 (合作)	4
Owkin	2016 年	美国	4300 万美金	A+	110	—	提供技术服务	—
BenevolentAI	2013 年	英国	2.02 亿美金	战略投资	240	10	31 (1 个 I 期)	2 个 (阿斯利康、诺华)
晶泰科技	2014 年	中国广东	7.8 亿美金	D 轮	—	—	提供技术服务	70+ (包括罗氏、辉瑞)
Insitro	2018 年	美国	6.43 亿美金	C 轮	84	—	—	BMS、吉利德科学
Numerate	2007 年	美国	1500 万美金	B 轮	—	—	—	默沙东、武田制药、灵北制药、Servier
百图生科	2020 年	中国北京	未揭露	百度收购	—	—	—	—
星亢原	2018 年	中国北京	近亿美金	A+ 轮	—	—	10+ (尚无项目进入临床)	—
冰洲石	2016	中国上海	数千万美金	战略投资	—	—	提供技术服务	—
LAM Therapeutics	2013 年	美国	9800 万美金	C 轮	—	—	10 (3 个已完成 II 期, 4 个 II 期)	—
云深智药	2020 年	中国广东	腾讯旗下 AI 制药平台	—	—	—	提供技术服务	—
望石智慧	2018 年	中国北京	超 1 亿美元	B+ 轮	—	—	提供技术服务	泰德制药
Deepmind	2010	英国	5.25 亿美金	谷歌并购	—	—	—	—
深度智耀	2017	中国北京	数千万美金	B 轮	—	—	提供技术服务	11
宇道生物	2013 年	中国上海	超一亿	A 轮	—	—	针对全新靶点的 First-in-Class 管线	百图生科、青煜医药
Verge Genomics	2015 年	美国	3612 万美元	A 轮	—	—	6 条在研管线, 其中包括三条针对 ALS 的临床前管线。其中进展最快是针对 PIKfyve 酶的管线, 预计明年开始进入临床阶段	礼来
英飞智药	2018 年	中国北京	未知	Pre-A 轮	—	—	—	北京海步医药、丽珠医药
科辉智药	2018 年	中国广东	超 1.5 亿人民币	Pre-A 轮	—	—	—	—
twoxar	2018 年	美国	1000 万美元	A 轮	—	—	—	—
费米子科技	2015 年	中国广东	超一亿人民币	A 轮	—	—	—	—
Healx	2016 年	英国	6650 万美元	B 轮	—	—	—	—
剂泰医药	2020 年	中国浙江	未知	Pre-A 轮	—	—	—	康芝药业、博腾药业、煥一生物
燧坤智能	2018 年	中国江苏	数千万人民币	Pre-A 轮	—	—	—	维亚生物、保诺科技、艾博生物
零氦科技	2014 年	中国北京	超 17 亿人民币	战略投资	—	—	—	恒瑞医药、赛生药业

资料来源: 公司官网及公众号, 中银证券

续 图表 85.AI 制药公司的基本信息

公司名称	成立年份	所在地	累计融资金额	融资轮次	研发人员数量	合作高校/研究机构/平台数量	在研管线数量	合作药企数目
Cloud Pharmaceuticals	1999年	美国	超 9000 万人民币	定向增发	—	—	—	GSK
Iktos	2016年	美国	未知	战略融资	—	—	—	辉瑞、Facio Therapies
康迈迪森	2020年	中国北京	未融资	Pre-A	—	—	—	—
智药科技	2018年	中国浙江	近千万人民币	天使轮	—	—	—	—
未知君	2017年	中国广东	过亿人民币	B+轮	—	—	自有药物管线包括抗 PD-1 肿瘤免疫的联合治疗、自闭症、aGvHD（移植抗宿主病）等多个适应症的方向	安序源
焕一生物	2019年	中国上海	数千万人民币	Pre-A	—	—	—	剂泰医药
智化科技	2018年	中国浙江	4500 万人民币	A+轮	—	—	—	法国 CRO 公司
湃隆生物	2019年	中国上海	2700 万美元	种子轮	—	—	CDK 管线、特异性 CDK7 抑制剂以及合成致死抗肿瘤产品管线	Exscientia
星药科技	2019年	中国广东	数千万美元	战略融资	—	—	—	五元药业
亿药科技	2018年	中国北京	数百万人民币	天使轮	—	—	NASH 肥胖症 高尿酸血症 衰老 肌腱愈合 癌症	—
Qrativ	2017年	美国	830 万美元	A 轮	—	—	—	—
NuMedii	2017年	美国	未融资	A 轮	—	—	—	—
Cyclica	2013年	加拿大	4550 万美元	C 轮	—	—	—	中国医学科学院药物研究所
Oncocross	2015年	韩国	2000 万美元以上	战略投资	—	—	—	DaeWoong
中以海德	2019年	中国广东	未知	股权融资	—	—	—	—
答魔数据	2016年	中国湖南	未知	A 轮	—	—	—	—
北科德源	2015年	中国北京	未知	股权融资	—	—	—	武汉盛世华康达
索智生物	2021年	中国浙江	5000 万人民币	天使轮	—	—	—	百图生科

资料来源：公司官网及公众号，中银证券

3.4.2 各 AI 制药公司业务情况梳理

AI 制药公司大约有 300 家以上，根据主营业务布局领域或者公司主要技术平台从新药研发的环节角度对公司进行分类，先导化合物设计、优化及合成，化合物筛选，靶点发现环节布局公司最多，其次，ADMET 预测、药物重定位（老药新用）也有较多公司布局。值得注意的是我国的晶泰科技和剂泰医药两家公司分别在晶型预测和剂型设计两方面形成优势。

图表 86. AI 制药公司在各阶段的业务情况

公司	靶点发现	化合物筛选	先导化合物设计、优化、合成	晶型预测	剂型设计	ADMET 预测	临床前实验结果预测	临床试验设计	患者招募	分組	药物重定位 (老药重用)
Schrodinger (薛定谔)											
Relay Therapeutics											
Recursion Pharmaceuticals											
Lantern Pharma											
Insilico Medicine (英矽智能)											
Exscientia											
Atomwise											
Owkin											
BenevolentAI											
晶泰科技											
Inaitro											
Numerate											
百图生科											
星亢原											
冰洲石 (AccutarBio)											
LAM Therapeutics											
云深智药											
望石智慧											
Deepmind											
深度智耀											
宇道生物											
Verge Genomics											
英飞制药											
科辉智药											
twoxar											
费米子科技											
Healx											
剂泰医药 (METIS Pharmaceuticals)											
燧坤智能											
零氦科技											
Cloud Pharmaceuticals											
Iktos											
康迈迪森											
智药科技											
未知君											
焕一生物											
智化科技											
湃隆生物											
星药科技											
亿药											
Qrativ											
NuMedii											
Cyclica											
Oncocross											
中以海德											
答鹿数据											
北科德源											
索智生物											

资料来源：公司官网及公众号，中银证券

图表 87. 新药研发各阶段 AI 制药公司情况

新药研发环节	主要参与者
靶点发现	Schrodinger(薛定谔)、Relay Therapeutics、Recursion Pharmaceuticals、Insilico Medicine(英矽智能)、Owkin、BenevolentAI、Inaitro、云深智药、Deepmind、英飞制药、科辉智药、费米子科技、燧坤智能、焕一生物、星药科技、亿药、NuMedii
化合物筛选	Schrodinger(薛定谔)、Relay Therapeutics、Recursion Pharmaceuticals、Insilico Medicine(英矽智能)、Exscientia、Atomwise、Owkin、BenevolentAI、晶泰科技、Inaitro、Numerate、百图生科、星亢原、冰洲石(AccutarBio)、云深智药、望石智慧、宇道生物、英飞制药、科辉智药、twoxar、费米子科技、Healx、剂泰医药、燧坤智能、Cloud Pharmaceuticals、Iktos、康迈迪森、智药科技、星药科技、亿药、NuMedii、Cyclica、中以海德、北科德源、索智生物
先导化合物设计、优化、合成	Schrodinger(薛定谔)、Relay Therapeutics、Insilico Medicine(英矽智能)、Exscientia、Atomwise、Owkin、BenevolentAI、晶泰科技、Inaitro、Numerate、百图生科、星亢原、冰洲石(AccutarBio)、云深智药、望石智慧、Deepmind、深度智耀、宇道生物、英飞制药、科辉智药、twoxar、费米子科技、剂泰医药、燧坤智能、Cloud Pharmaceuticals、Iktos、康迈迪森、智药科技、智化科技、星药科技、亿药、NuMedii、Cyclica、北科德源、索智生物
晶型预测	晶泰科技
剂型设计	剂泰医药
ADMET 预测	Schrodinger(薛定谔)、Exscientia、晶泰科技、Numerate、云深智药、望石智慧、英飞制药、twoxar、费米子科技、剂泰医药、星药科技、北科德源
临床前实验结果预测	Insilico Medicine(英矽智能)、Inaitro、冰洲石(AccutarBio)、焕一生物
临床试验设计	Lantern Pharma、Owkin、LAM Therapeutics、云深智药、零氦科技
患者招募、分組	Lantern Pharma、Owkin、LAM Therapeutics、零氦科技
药物重定位 (老药重用)	Lantern Pharma、Atomwise、BenevolentAI、Inaitro、冰洲石(AccutarBio)、LAM Therapeutics、Healx、剂泰医药、燧坤智能、康迈迪森、焕一生物、Qrativ、NuMedii、Oncocross、中以海德

资料来源：公司官网及公众号，中银证券

图表 88. 参与与 TOP 药企商业合作的代表型 AI 制药公司

公司名称	合作药企	适应症
Exscientia	罗氏、拜耳、赛尔基因、赛诺菲、GSK、Evotec、日本住友制药等	肿瘤、心血管疾病
Concerto HealthAI	强生、杨森制药、辉瑞（2次）、阿斯泰来、BMS 等	肿瘤、白血病
Ikto	默克（2次）、强生、Servier、Almirall 等	-
Atomwise	翰森制药公司（2次）、豪森药业、礼来、辉瑞	肿瘤、免疫性疾病
Schrödinger	拜耳、阿斯利康、武田制药、小野制药等	肿瘤、自身免疫病、炎症、新城代谢疾病

资料来源：动脉橙，速石科技，公司官网，中银证券

3.4.3 国内外药企参与 AI 服务情况梳理

AI 公司、IT-云服务商和高校是药企在 AI 辅助药物研发上主要合作对象。

中国药企也顺应国际趋势，积极进行 AI 领域的投资合作。如，2018 年 6 月，药明康德与 Insilico Medicine 建立紧密战略合作关系将人工智能应用于新药发现。2019 年 6 月，先声药业率先在与宝德达成 HPC 高性能计算与 AI 平台的合作协议，助力其药物研发。2019 年 9 月，豪森药业和 Atomwise 达成战略合作协议，针对多达 11 个靶标开发新药，根据双方合作协议，此次合作对 Atomwise 的潜在总价值将超 15 亿美元。

图表 89. 部分国内药企参与 AI 行动的细节

公司名	药企与 AI 初创公司、与 IT-云服务平台、与高校开展的 AI 相关的合作，以及药企对 AI 初创公司的投资事件
恒瑞医药	<p>2020 年 9 月，恒瑞医药与普瑞基准达成伴随诊断战略合作，并共同启动氟唑帕利胶囊伴随诊断的开发。启动项目：氟唑帕利胶囊在转移性胰腺癌的伴随诊断试剂盒，目前还在研发。</p> <p>2018 年 11 月，恒瑞医药联合全球领先的生命科学领域临床研究领域云解决方案供应商 Medidata 开展临床研究战略合作。该供应商的生命科学智能平台由人工智能提供技术支持，帮助制药企业加速创造研究价值。目前正在合作。</p> <p>2019 年 9 月，零氦科技与恒瑞医药签订战略合作协议，启动“智邻相伴，科延慧集”项目，“患者服务科创平台”项目同时启动。恒瑞医药联合零氦旗下邻客 DTP 药房作为“患者服务科创平台示范点”，在全国开展患者教育、随访与创新科研工作。这将助力零氦智慧药房 3.0 模式升级为国内首个且唯一的科研型药房，邻客智慧药房也成为行业唯一开展创新 RWS 的药房。</p>
正大天晴	<p>2018 年 9 月，正大天晴与阿里云合作采用 AI 制药，以缓解传统新药研发周期长、投入大等痛点。与传统计算机辅助药物设计方法相比，这套新方法可提高筛选准确率 20%。</p>
中国生物制药	<p>2020 年 3 月，中国生物制药附属公司北京泰德制药股份有限公司携手创新人工智能公司 Insilico Medicine 共同签署“AI 辅助抗癌药开发计划案”，启动战略联盟合作。在 AI 辅助药物开发方面投入更多资源。透过双方的优势与资源整合，大幅提升药物开发的速度和效率，协力寻找治愈癌症的崭新方法。</p> <p>2019 年 10 月，中国生物制药公司附属公司江苏正大丰海制药有限公司与 Insilico Medicine 签订了两个项目的 AI 技术开发服务合同，其中包含了一些复杂高难度而且传统上无法设计药物的靶点，特别是对三阴性乳腺癌患者的治疗，药物开发结合了创新的 AI 技术，可望加速开发成果。目前研究正在进行。</p>
复星医药	<p>2017 年 8 月，复星医药与推想科技、晶泰科技、浙江大学睿医人工智能研究中心成立“复星医药互联健康创新中心”。四方共同举办了 C2M 医疗区块链峰会</p> <p>2016 年 7 月，复星集团与蚂蚁金融服务集团签署战略合作协议。复星集团将与蚂蚁金服共同打造面向复星集团用户的数字化服务平台。</p> <p>2021 年 6 月，复星医药对杏脉科技进行 Pre-A 轮融资。杏脉科技拥有独树一帜的“AI+X”产品形态，有效赋能远程诊疗体系建设，形成了促进我国分级诊疗与精准医疗落地的有效解决方案。</p>
再鼎医药	<p>2021 年 3 月，再鼎医药与阿尔脉生物科技有限公司签订新药发现合作协议。阿尔脉生物利用 AI 技术、大数据和独特的 iDEL 平台以及相关技术与再鼎医药共同开发肿瘤等疾病领域的创新靶点药物。</p> <p>2020 年 6 月，再鼎医药与依图医疗、中国卫生信息与健康医疗大数据学会共同建设“首爱相助-脑胶质瘤患者全病程智能管理大数据平台”。该平台融汇影像视觉识别等先进人工智能及大数据技术，通过汇聚 MRI 影像等数据，经过 AI 治理及解析，形成高质量的脑胶质瘤大数据平台，全面推动中国脑胶质瘤患者医教研管水平的提升。</p>
天境生物	<p>2021 年 7 月，天境生物将与拥有自主专利的 mRNA 生物技术公司嘉晨西海 (Immorna) 和人工智能新药设计研发公司星元原生物 (neoX Biotech) 展开项目合作，通过颠覆性技术平台研发新一代创新大分子药物，进一步加强公司创新药管线的全球竞争力。天境生物将利用嘉晨西海全球领先的自复制 mRNA 技术，开发体内合成型 (in vivo) 抗肿瘤抗体药物。此外，天境生物将运用星元原独特的人工智能 (AI) 算法引擎，合作开发多达 10 个创新大分子新药项目。项目目前正在顺利进展中。</p>

资料来源：公司官网及公众号，中银证券

续 图表 89. 部分国内药企参与 AI 行动的细节

公司名	药企与 AI 初创公司、与 IT-云服务平台、与高校开展的 AI 相关的合作，以及药企对 AI 初创公司的投资事件
泽璟制药	<p>2021 年 6 月，.泽璟制药与零氦科技签署战略合作协议，打通创新药品线上线下专业诊疗渠道、建立数字化健康管理体系和设计创新支付项目。</p> <p>2019 年 9 月，豪森药业与 AI 药物发现公司 Atomwise 签署战略合作协议，并于 2021 年 4 月双方再次进一步扩大在 AI 药物发现领域的战略合作关系。</p>
豪森药业	<p>2019 年首次合作中，双方聚焦于难以成药靶点的活性化合物发现工作。Atomwise 使用其具有自主知识产权的 AI 分子筛选平台 AtomNet 为翰森制药进行多个抗肿瘤靶点的筛选工作。使用 AtomNet，该合作能够对超过 120 亿个化合物进行虚拟筛选，通过单次虚拟筛选，在 2 周内即可发现 200 个具有靶点特异性的候选活性化合物。</p> <p>2021 年再次合作是为了进一步扩大合作关系是延续双方先前的活性化合物发现合作，在首次合作中，双方成功发现了数个抗肿瘤活性化合物，该抗肿瘤药物靶点的新药发现工作在之前被认为极具挑战性。目前新药正在研发中。</p> <p>2018 年 6 月，药明康德与 Insilico Medicine 签署一项合作协议。</p> <p>Insilico Medicine 公司使用其独有的生成对抗网络 (GAN) 和强化学习 (RL) 等新型算法生成的新药研发管线将在药明康德的新药研发服务平台上进行测试。两家公司制定了一系列里程碑计划，旨在针对全新的以及具有挑战性的生物靶点，例如未知晶体结构或配体的靶点，利用下一代人工智能技术开发理想临床前药物候选分子。</p> <p>目前项目正在研发中。</p> <p>2018 年 5 月，MIT 携手药明康德等八大药厂，成立药物开发机器学习联盟，有助于提高大量化学数据分析及研究的效率，像是规划化学合成的路径，探索新的化学分子等，对于改善制药行业以及新药研发效率有很大的改善潜力。</p> <p>2016 年 11 月，参与 Strateos (Transcriptic) A 轮融资，金额 1340 万美元。Strateos 将化学、生物学和组织分析自动化到闭环机器人实验室中，以加速药物发现。</p>
药明康德	<p>2018 年 1 月参与 Engine Biosciences 种子轮融资，金额 1000 万美元。</p> <p>2021 年 5 月参与该公司 4300 万美元 A 轮融资。</p> <p>研发策略结合其专利的组合基因组学系统、化学和药物发现，涵盖数据科学、机器学习和高通量生物学实验平台。其技术使研究人员和药物开发人员能够以比传统方法更快更经济的方式揭示疾病基因的相互作用和生物网络。</p> <p>2018 年 6 月和 2019 年 8 月分别参与 Insilico Medicine A 轮和 B 轮融资，金额分别是 600 万美元和 3700 万美元。</p> <p>人工智能和新药开发方面取得全球首个突破-首次将生物学和化学生成学相结合，利用相互关联的深度学习和先进 AI 技术，发现一种全新机制的用于治疗特发性肺纤维化 (IPF) 的临床候选新药，并且通过多次人类细胞和动物模型实验验证。</p> <p>2019 年 1 月，参与 Schrödinger Pre-IPO 轮融资，金额 8500 万美元。该公司利用其先进的分子模拟技术，Schrödinger 能显著加快药物发现的速度，提供更快的先导物识别、性质预测和大规模分子评估，提升药物发现的效率。</p>
凯莱英	<p>2019 年 5 月，由凯莱英发起成立的天津市药物临床研究中心，与清华大学和医渡云联合成立的智慧自主医疗系统联合研究中心，首次合作 NGCD1.0 课题。</p> <p>清华大学在课题研究的数据挖掘和人工智能技术方面给予大力支持，通过整合药物临床研究优势资源来打造一个药物临床研究创新服务平台。</p>
博腾股份	<p>2020 年 3 月，博腾股份与晶泰科技签约合作，博腾股份药物结晶中心的专家与晶泰科技一同把人工智能和计算化学方法有效地应用在解决与晶体相关的药物研发瓶颈问题上。</p> <p>博腾股份全资子公司 J-STAR Research, Inc.与晶泰科技于 2020 年 10 月 7 日-8 日联合在线举办首届药物结晶峰会，双方合作渐入佳境。</p> <p>2021 年 3 月，博腾药业与人工智能制剂研发公司剂泰医药达成战略合作，双方在制剂研发与生产制程智能化等方面开展全方位的合作。进一步推动探索智能化在 CDMO 场景的应用，共同提升药物制剂研发和生产效率为客户提供更高效的服务。</p> <p>目前研究正在进展中。</p>
维亚生物	<p>2021 年 5 月，维亚生物与百图生科智能技术有限公司共同签署战略合作协议，本次战略合作基于百图生科的 AI+生物计算引擎，与维亚生物基于结构的综合性新药发现平台形成技术互补，共同加速推进生物创新药物研发设计。目前合作正在顺利开展。</p> <p>2021 年 4 月，由百图生科领投，维亚生物跟投，AI 新药研发公司索智生物完成五千万人民币天使轮融资。</p> <p>作为战略投资人，百图生科和维亚生物还将会在 AI 技术、计算能力、底层多维数据、蛋白质结构解析、药化试验等多方面为索智生物提供全方位的深度支持。索智生物未来会专注于自身免疫系统和神经退行性疾病领域的新药研发，力图去打造一个以 AI 为基础的新型新药研发范式。</p>
维亚生物	<p>2021 年 2 月，维亚生物与燧坤智能签订新药研发战略合作协议，维亚生物将与燧坤智能在创新药研发上进行合作，为行业提供以人工智能为基础的新一代苗头和先导化合物发现和优化技术平台，同时为维亚生物独特的服务换股权 (EFS) 生态圈赋能创新动力。维亚生物在基于结构的药物发现上有着丰富的经验，燧坤智能基于大数据和人工智能技术开发的创新药研发综合平台 AI4D 与维亚生物的 SBDD 和 FBDD 新药筛选平台合作，利用多种技术手段来促进苗头和先导化合物的发现及优化。目前研究正在有序开展中。</p> <p>2020 年 10 月，由维亚生物创新中心投资孵化，致力于将 AI 技术商业化用于药物研发的生物医药初创公司 Phenomic AI 完成金额 600 万美元的种子轮融资，投资方有 Luminous Ventures、Viva BioInnovator 等。该公司的平台整合了先进的 AI / ML 工具，可在多细胞系统中大规模筛选复杂的相互作用，从而发现可在内部或与合作伙伴共同开发的新型药物靶标。</p>

资料来源：公司官网及公众号，中银证券

续 图表 89. 部分国内药企参与 AI 行动的细节

公司名	药企与 AI 初创公司、与 IT-云服务平台、与高校开展的 AI 相关的合作，以及药企对 AI 初创公司的投资事件
维亚生物	<p>2020 年 12 月，维亚生物与阿尔脉生物科技有限公司签订新药发现技术合作协议。维亚生物将与阿尔脉生物在创新药发现技术上合作，为客户提供以 AI 为基础的新一代 DNA 编码化合物库 (Intelligent DEL, iDEL) 筛选技术平台，用以筛选肿瘤、中枢神经、自身免疫等疾病领域的一系列特定靶点的先导化合物。阿尔脉的新型 DNA 编码化合物库平台 iDEL 将人工智能技术和 DEL 大数据赋能于生物制药科学，有望显著提升药物发现与研发关键环节的效率与成功率，促进制药企业智能化升级。iDEL 技术平台将与维亚生物的亲和力质谱筛选平台及基于结构的药物发现技术形成互补，加速助力更多创新药的研发。目前研发正在进行中。</p> <p>2021 年 6 月，维亚生物投资孵化公司 Totient 与 AbSci 达成收购协议，通过 Totient 的技术与 AbSci 平台相结合，可为计算机靶向药物设计提供构架和数据，以最终实现为患者提供最佳药物的目标。Totient 利用其独特的从肿瘤组织数据库进行虚拟筛选抗肿瘤抗体药物的平台与 AbSci 强大的 Denovium AI 平台合作，将进一步提升 Totient 的靶标发现能力，以获得验证药物开发的新机会。</p>
美迪西	<p>2021 年 6 月，美迪西与 Insilico Medicine 达成了战略合作，两家公司的结合旨在让新药研发更快一步，人类离健康再近一步。Insilico Medicine 可以为制药公司提供早期的设计和 AI 工作。美迪西的强项是做临床试验，化合药物合成、测试，特别对蛋白质降解技术 (PROTAC) 的完善和激酶抑制剂的小分子药物研发平台的建设，自身技术平台达到全能高效。目前合作正在有序开展中。</p>

资料来源：公司官网及公众号，中银证券

图表 90. 部分国外药企参与 AI 行动的细节

公司名	药企与 AI 初创公司、与 IT-云服务平台、与高校开展的 AI 相关的合作，以及药企对 AI 初创公司的投资事件
葛兰素史克	<p>2017 年葛兰素史克与指导药物研发的初创公司 Exscientia 在药物研发达成战略合作，Exscientia 通过 AI 药物研发平台为 GSK 的 10 个疾病靶点开发创新小分子药物，并且针对这些靶点药物发现临床候选药物。2019 年 4 月 Exscientia 宣布交付一种高效的靶向治疗慢性阻塞性肺炎的先导化合物。</p> <p>2017 年 8 月，Insilicon Medicine 与葛兰素史克建立合作关系，以发现新兴的生物靶点和分子。</p> <p>2018 年 5 月，Cloud Pharmaceuticals 宣布已与葛兰素史克合作，将 AI 用于新型小分子药物设计。</p> <p>2018 年 6 月，葛兰素史克研究人员与 Google 研究人员合作，将 AI 应用于药物发现，包括开发用于识别蛋白质晶体的机器学习算法。</p>
阿斯利康	<p>2017 年 8 月 28 日，Berg 宣布与阿斯利康开展合作，以鉴别和评估治疗帕金森病等神经系统疾病的新靶点和药物。</p> <p>2019 年 4 月，阿斯利康和 BenevolentAI 开始了长期合作，阿斯利康的基因组学、化学和临床数据将与 BenevolentAI 的靶标鉴定平台和生物医学知识图谱结合，来发现和开发用于慢性肾脏疾病和特发性肺纤维化的新药。</p> <p>2019 年 9 月，Schrödinger 宣布与阿斯利康合作，部署 Schrödinger 先进的计算平台以帮助阿斯利康加快药物发现工作。阿斯利康的药物和计算化学家将使用 Schrödinger 的平台来改进化合物的设计，挖掘潜在的治疗药物。</p> <p>2019 年 12 月，DeepMatter 将为阿斯利康提供 AI 驱动的化合物合成平台。</p> <p>2019 年 12 月，生物数据公司 Gatehouse Bio 宣布与阿斯利康合作，利用其 AI 平台探索呼吸系统疾病和心血管疾病的药物新靶点。Gatehouse 于 2018 年加入阿斯利康波士顿生物中心孵化器。</p>
吉利德	<p>2019 年 4 月，吉利德和 Insitro 宣布了关于 NASH 的战略合作。根据为期三年的合作条款，Insitro 的 AI 平台将用于创建 NASH 的疾病模型，并发现影响疾病临床进展的靶点。</p> <p>2019 年 10 月，吉利德和 Glympse 宣布了关于非酒精性脂肪性肝炎 (NASH) 的战略合作，吉利德将利用 Glympse 的 AI 驱动的生物标志物技术，来分析临床试验受试者在初筛时的疾病发展阶段以及他们对治疗的反应。</p>
辉瑞	<p>2016 年 12 月，IBM 与辉瑞合作，协助辉瑞的免疫肿瘤药物研发。IBM 的 Watson 机器人可以快速分析大量的文本数据，使用大量实验室数据、临床报告，用来寻找潜在药物。</p> <p>2018 年，辉瑞和 Genesys Capital 共同参与对 AI 药物发现公司 AdapsynBioscience 的融资。</p> <p>2018 年 5 月，晶泰科技宣布与辉瑞公司合作，融合量子物理与 AI 技术，简历小分子药物模拟算法平台，提高算法的精准度和适用广泛度，驱动小分子药物的创新。</p> <p>2018 年 9 月，Atomwise 与辉瑞公司签订评估协议，辉瑞将评估 Atomwise 的平台，Atomwise 将寻找由辉瑞提供的 3 种靶蛋白的潜在候选药物。</p> <p>2019 年 1 月，CytoReason 宣布与辉瑞达成一项合作协议，该协议将利用 CytoReason 的以细胞为中心的免疫系统机器学习模型，进行药物发现。</p> <p>2019 年 5 月，Concerto Health AI 宣布与辉瑞建立合作关系，在肿瘤疗法开发中使用 AI 和真实世界数据。</p> <p>2020 年 1 月，Insilicon Medicine 宣布与辉瑞合作，利用其 AI 药物靶点发现平台 Pandomics，为多种疾病的寻找潜在的治疗靶标及找到真实世界证据。</p>

资料来源：公司官网及公众号，中银证券

续 图表 90. 部分国外药企参与 AI 行动的细节

公司名	药企与 AI 初创公司、与 IT-云服务平台、与高校开展的 AI 相关的合作，以及药企对 AI 初创公司的投资事件
拜耳	<p>2018 年 8 月 30 日，Cyclica 宣布已加入拜耳的 Grants4Apps 计划。Cyclica 将与拜耳合作，以加快其差异化药物设计（DDD）技术的部署。2018 年 11 月，Cyclica 与拜耳继续合作，通过深入了解小分子的多向药理学特征来推进药物发现计划，同时进一步发展 Cyclica 的集成网络。</p> <p>2020 年 9 月，拜耳股份旗下影响力投资部门 Leaps by Bayer 领投 Recursion 的 D 轮融资，投资 5000 万美元</p> <p>2018 年 11 月，Genpact 宣布与拜耳合作，Genpact 的 AI 药物警戒功能套件将应用于拜耳现有的药物警戒数据库和 IT 系统。Genpact 的技术能够自动从源文档中提取不良反应数据。</p> <p>2019 年 7 月，英国临床 AI 技术公司 Sensyne 宣布，它已与拜耳签署了为期两年的初步合作协议，拜耳将使用 Sensyne 专有的临床 AI 技术平台加速心血管疾病药物的开发。</p> <p>2020 年 1 月，Schrödinger 与拜耳宣布了一项为期五年的技术合作，Schrödinger 为拜耳创建一种新的解决方案，以挖掘、筛选和评估可合成的虚拟化合物。</p> <p>2020 年 1 月，拜耳和 Exscientia 开始了为期三年的合作。该合作旨在识别和优化针对心血管和肿瘤的新的先导化合物结构。</p> <p>2020 年 9 月，拜耳与 Recursion Pharmaceuticals 已达成战略合作协议。该合作伙伴关系将利用 Recursion 专门构建的人工智能引导药物发现平台和拜耳的小分子化合物库和深厚的科学专业知识，发现和开发肺、肾、心脏等纤维化疾病的新疗法。</p>
诺华	<p>2019 年 9 月，诺华与 BenevolentAI 签署了一项协议，以寻找在演的肿瘤药的潜在新适应症。</p> <p>2018 年 1 月，诺华与麦肯锡旗下的 QuantumBlack 合作，通过机器学习来分析临床实验操作。</p> <p>2019 年 1 月，诺华宣布与牛津大学大数据研究所建立合作，用 AI 来预测患者对药物的反应情况。</p> <p>2020 年 2 月，BenchSci 获得 B 轮 2000 万美元融资，并宣布扩大与诺华的合同。</p> <p>2018 年 5 月，诺华与英特尔合作使用深度神经网络来加速药物的高通量筛选</p> <p>2019 年 10 月，制药公司诺华宣布成立诺华 AI 创新实验室，并选择 Microsoft 作为其战略 AI 和数据科学合作伙伴，通过将 AI 方法应用于大型临床和临床前数据集来加速药物发现。</p>
赛诺菲	<p>2016 年 4 月 25 日，RecursionPharmaceuticals 与赛诺菲签署了一项研究协议，旨在利用 Recursion 的平台为某些遗传疾病寻找候选药物。</p> <p>2019 年 6 月，赛诺菲宣布与谷歌合作，共建医疗创新实验室，谷歌将其 AI 和云计算能力引入与赛诺菲的合作中。</p> <p>2017 年，赛诺菲与苏格兰 Exscientia 公司签署了一项潜在价值为 2.5 亿欧元（约 2.8 亿美金）的合作和许可交易，用于开发针对代谢疾病的双特异性小分子药物。2019 年 8 月，Exscientia 宣布，赛诺菲将选择由 Exscientia 开发的双特异性小分子来治疗免疫学疾病。</p> <p>2017 年 10 月，Berg 与赛诺菲签订合作协议，Berg 将利用其 InterrogativeBiology 平台获得数据并进行建模，以数据驱动的方式评估流感疫苗的潜在生物标志物</p>
百时美施贵宝	<p>2018 年 2 月，百时美施贵宝与 Sirenas 合作，针对某些未公开的具有挑战性的治疗靶点部署 Sirenas 的药物发现平台，识别潜在的候选药物</p> <p>2019 年 3 月 28 日，百时美施贵宝与 Concerto Health AI 签署了一项多年战略合作协议。双方的合作整合了多个数据源，涵盖多种癌症，并应用 AI 和机器学习来加速临床试验。两家公司也将推进真实世界证据的使用，改善癌症患者的临床结局</p>
武田制药	<p>2017 年 6 月，加州圣布鲁诺的 Numerate 公司与武田药业正式签约，就使用 Numerate 公司的人工智能技术，寻找肿瘤学、胃肠病学和中枢神经系统疾病的小分子药物展开合作</p> <p>2019 年 1 月，Recursion 宣布与武田扩大合作，以评估确定罕见病的新型临床前候选药物</p> <p>2020 年 5 月，Recursion 使用其自动药物发现平台，对武田的 200 多种潜在分子进行了测试，发现了 TAK-733 靶向肿瘤的潜力，后签署全球许可协议。根据该协议的条款，Recursion 将获得 TAK-733 的开发和商业化的全球独家权利。</p>
勃林格殷格翰	<p>2020 年 1 月，勃林格殷格翰宣布将与 AI 软件公司 Kairitech 的自然语言处理平台 Sherpa 合作。</p> <p>2020 年 4 月，Insilico Medicine 宣布，它已与勃林格殷格翰开展研究合作，利用 Insilico 的生成式机器学习技术和专有的 Pandemics 平台帮助勃林格殷格翰识别潜在的疾病治疗靶点。</p>
艾伯维	<p>2014 年 9 月，艾伯维与 Alphabet 的抗衰老研究公司 Calico 的合作，基于 AI 技术，以发现新的用于与老龄化相关疾病的治疗药物。</p> <p>2016 年 9 月，AiCure 宣布了一项新的研究结果：艾伯维使用 AiCure 的基于 AI 的患者监测平台，显著提高了一项精神分裂症 II 期临床试验中患者的依从性。</p>

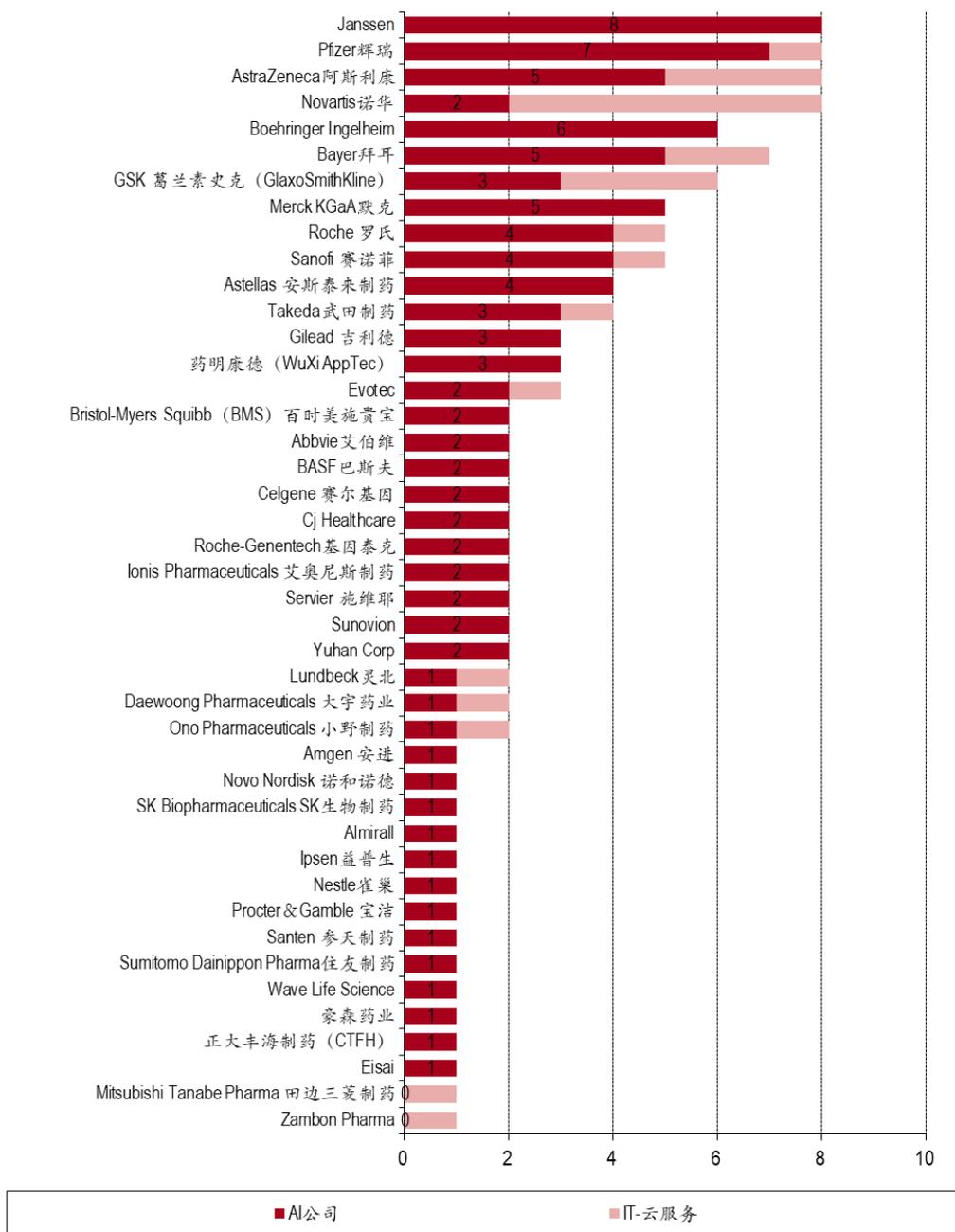
资料来源：公司官网及公众号，中银证券

续 图表 90. 部分国外药企参与 AI 行动的细节

公司名	药企与 AI 初创公司、与 IT-云服务平台、与高校开展的 AI 相关的合作，以及药企对 AI 初创公司的投资事件
强生	2016 年 11 月，强生与英国 AI 技术开发和应用公司 BenevolentAI 达成新药研发合作，强生把尚处于试验中的小分子化合物转交给了 BenevolentAI，进行新药挖掘开发。
	2019 年 1 月，Winterlight Labs 宣布已与强生达成合作。该合作最初将专注于开发一种敏感的数字生物标志物，以区分轻度认知障碍患者(阿尔茨海默症的早期阶段)和健康的老年受试者。
	2019 年 4 月，将生成模型应用于药物发现的先驱公司 Iktos 宣布与强生合作。这项合作将在小分子药物发现项目中使用 Iktos 的虚拟药物设计技术。
	2019 年 7 月，Celsius Therapeutics 宣布与强生合作。根据协议，Celsius 将使用其专有的单细胞基因组学和机器学习平台，来识别杨森的一项 II 期临床研究中溃疡性结肠炎患者的生物标志物。
	2019 年 12 月，强生将一些已经进入临床阶段的试验药物连带专利一起特许给 BenevolentAI，后者将利用 AI 系统来指导临床试验的进行和数据的收集。
安进	2020 年 11 月，Insilico Medicine 宣布与强生的制药子公司杨森制药签订一项多靶点药物发现协议，根据双方协议，Insilico Medicine 将针对杨森提出的靶点设计具有特定性质的苗头化合物小分子，并获得预付款和里程碑付款。
	2017 年 8 月 23 日，安进的投资部门领投了 GNS Healthcare 的 600 万美元的融资。
罗氏	2017 年 6 月，罗氏集团的成员基因泰克宣布与 GNS 医疗公司（一家精准医疗公司）进行癌症疗法方面的合作。基因泰克致力于使用机器学习将高体量的癌症患者数据转化至计算模型中，从而用来识别癌症治疗的新靶点。
	2018 年 5 月，罗氏与 AI 诊断公司 Owkin 合作，以加快药物的发现，开发和试验的速度。
	2019 年 12 月，罗氏与临床试验 AI 公司 Sensyne Health 达成合作，旨在寻找某个疾病的患者人群，并对匿名患者电子病历信息进行评估和整理，以规划临床实验。
礼来	2020 年 7 月，罗氏旗下基因泰克和 AI 新药发现公司 Reverie Labs 达成多靶点合作协议，将利用其技术平台对多个激酶抑制剂发现项目进行虚拟筛选，推进药物发现。
	2019 年 6 月，Atomwise 宣布与礼来就多达 10 种药物展开合作，礼来将使 Atomwise 的技术筛选合成具有治疗潜力的分子。
	2018 年 7 月，机器人云实验室提供商 Transcriptic 宣布，礼来将利用其人工智能技术，实现按需药物发现业务。
	2014 年 6 月，Numerate 获 800 万美元 C 轮融资，投资方包括礼来风投等知名投资机构。
	2021 年 7 月 8 日，总部位于旧金山的人工智能驱动初创公司 Verge Genomics 宣布与制药巨头礼来达成合作，研究和开发治疗肌萎缩侧索硬化 (ALS) 的新型疗法。通过这项为期三年的新交易，Verge 将使用其人工智能来识别 ALS 的潜在药物。礼来可以从中选择最多四个候选产品进行临床开发。据了解，Verge 的主要项目是针对酶 PIKfyve 的 ALS 治疗，临床试验预计将于 2022 年开始。
默沙东	2019 年 9 月 Insilico Medicine 完成了 3700 万美元的 B 轮融资，其中由启明创投领投，斯道资本、F-Prime Capital、礼来亚洲基金、创新工场、百度风投等其他投资方跟投。
	2012 年，默沙东与 Numerate 达成了协议，进行心血管疾病靶点的研究。
	2015 年，默沙东与 Atomwise 合作，其开创性的 AtomNet 技术平台能像人类药物化学家一般逻辑思考，它每天使用强大的深度学习算法和超级计算机工具分析数百万的潜在疗法，从而加快药物研发进程，主要针对的是新药的有效性和安全性预测。
	2018 年 12 月，Cyclica 与默沙东建立合作伙伴关系，以使用其 AI 增强的蛋白质组学筛选平台阐明小分子作用机制，评估安全性并探索其他适应症。
	2019 年 3 月，默克宣布与 Iktos 建立合作关系。该合作关系将使默克能够使用 Iktos 的生成设计技术来开发药物。
梯瓦	2020 年 11 月 17 日，Insilico Medicine 宣布默沙东将成为首个部署其旗舰产品生成化学 AI 平台 Chemistry42™ 的合作伙伴，将 Chemistry42™ 整合到默克集团药物发现项目中，以实现快速高效的药物设计。Insilico Medicine 将在默沙东集团最为先进的高性能计算 (HPC) 基础设施上部署 Chemistry42 v1.0 定制化服务。
	2021 年 6 月 22 日，Insilico Medicine 宣布与 Teva 公司合作，以利用 Insilico 的生成机器学习技术和专有的 PandaOmics 药物发现平台，该平台旨在确定新的治疗靶点涉及多种疾病。
卫材	2016 年 12 月，卫材和日本 Keio University 宣布了一项针对痴呆症的新药发现和开发合作。合作的一个组成部分是使用 AI 确定新的药物靶点。
安斯泰来	2015 年 12 月，Biovista 宣布已与安斯泰来开展药物重定位合作。该合作的重点是利用 Biovista 的 COSS 平台，探索安斯泰来的许多未公开的化合物的新适应症。
	2016 年 11 月 1 日，NuMedii 宣布与安斯泰来达成合作，利用 NuMedii 的大数据智能预测技术，确定安斯泰来的一系列未公开的化合物的新适应症。
	2020 年 4 月，Insilico Medicine 宣布与安斯泰来制药展开研究合作，利用 Insilico 新型生成人工智能系统以加速针对传统上极富挑战性的靶点家族来开发候选药物。这项合作建立在 Insilico 所开发的 AI 平台上，并将运用安斯泰来在药物发现领域的专业知识。
住友制药	2020 年 1 月，日本住友制药与 Exscientia 利用人工智能 (AI) 制造的化合物 “DSP-1181” 进入临床第一实验阶段，这是用 AI 制造出来的药物首次被承认可以用于临床试验。

资料来源：公司官网及公众号，中银证券

图表 91. 头部药企与 AI 初创公司、IT-云服务商合作次数



资料来源：速石科技，中银证券

注：数据截止时间 2020 年 11 月

部分药企对 AI 初创公司做了投资。如默克、百时美施贵宝，国内的药企药明康德等。

图表 92. 部分药企对 AI 初创公司的投资情况列举

公司名	投资公司	投资年份	投资金额 (万美元)
Merck KGaA 默克	PathAI	2019	3,750
	GNS Healthcare	2020	2,800
Bristol-Myers Squibb (BBS) 百时美施贵宝	PathAI	2019	3,750
药明康德 (WuXi AppTec)	Adagene	2016	未知
	Engine	2018	1,000
SK Biopharmaceuticals SK 生物制药	Standigm	2019	855
Lundbeck 灵北	BenevolentAI	2013	800
Amgen 安进	GNS Healthcare	2017	600
Zambon Pharma	GNS Healthcare	2017	未知
Roche 罗氏	以色列, 每年 3 家	2020	未知

资料来源: 速石科技, 中银证券

注: 数据截止时间 2020 年 11 月

国际大药企近年的净收入及发展 AI 后的盈收状况

2020 年 6 月, Drug Discovery Today 期刊发表了一篇短文综述《The upside of being a digital pharma player》, 文章分析了全球跨国制药巨头研发部门中 AI 应用的现状。结果表明, AI+新药领域尽管仍处于早期, 但已经趋于成熟。该文章分析了各大制药巨头的收益和研究投入, 发现仅赛诺菲、勃林格殷格翰和吉利德 3 家企业的投入大于收益, 阿斯利康和诺华两家企业则是收益远远大于研究投入的代表。

图表 93. 国际大药企近年的净收入及发展 AI 后的盈收状况

公司	2013	2014	2015	2016	2017	2018	趋向
安进	5.08	5.16	6.94	7.72	1.98	8.93	+
阿斯泰来	0.88	0.88	1.24	1.61	1.95	1.55	+
阿斯利康	2.56	1.23	2.83	3.50	3.00	2.05	-
拜耳	3.62	3.89	4.66	5.14	8.33		+
勃林格殷格翰	1.72	1.36	2.05	2.40	-0.30		-
百时美施贵宝	2.56	2.00	1.57	4.46	1.01	4.95	+
德科电气	-0.03	0.09	0.02	0.03	0.03	0.07	+
葛兰素史克	8.81	4.67	12.88	1.24	1.97	4.84	+
礼来制药厂	4.685	2.391	2.408	2.738	-0.204	3.232	+
强生	13.83	16.32	15.41	16.54	1.30	15.30	+
默克	4.40	11.92	4.44	3.92	2.39	6.22	+
诺华	9.18	10.21	17.78	6.71	7.70	12.61	+
辉瑞	22.00	9.14	6.96	7.22	21.31	11.15	+
罗氏	11.30	9.54	9.06	9.73	8.83	10.87	+
赛诺菲	4.94	5.84	4.76	5.21	9.53	5.09	-

公司开始在药物开发中使用人工智能的年份

资料来源: <Drug Discovery Today> The upside of being a digital pharma player, 中银证券

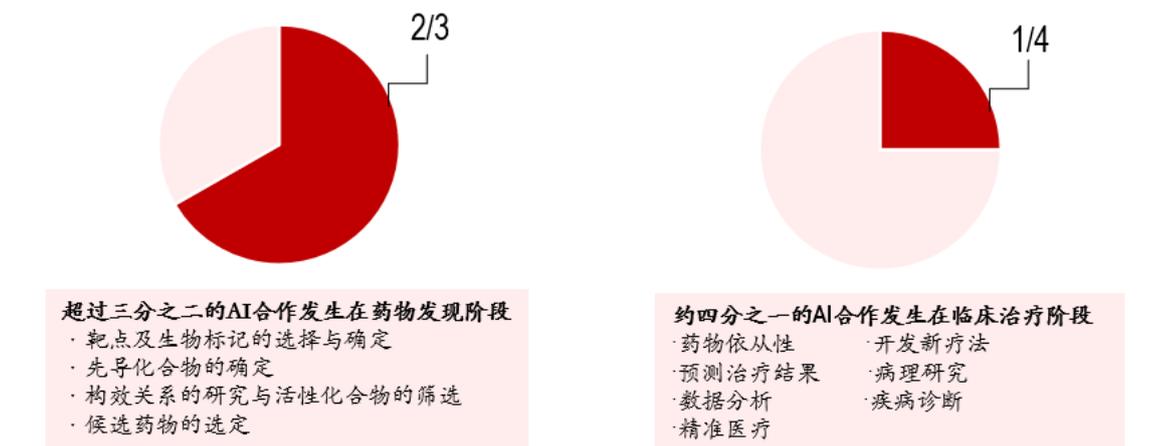
3.5 AI 制药企业在细分赛道上的相关情况

3.5.1 药物发现阶段的 AI+ 制药公司在所有该领域初创企业的比重最高

在细分赛道中, 致力于药物发现阶段的 AI+ 制药公司在所有该领域初创企业的比重最高。因为药物发现阶段也是整个制药过程的核心环节, 其中涉及的化合物筛选和优化部分, 人工智能凭借机器学习的训练能力能够将候选药物发现的速度和效率大幅提升, 从而最为直接地解决医药研发成本高、速度慢的困境。

根据速石科技报告，将其统计的所有药企的 AI 合作按制药阶段分类统计，超过三分之二的行动（共 66 次）集中在药物发现阶段，包括靶点及生物标记物的选择与确定、先导化合物的确定、构效关系的研究与活性化合物的筛选、候选药物的选定等。其次是临床治疗阶段，共 23 次行动，占总数的约四分之一，包括药物依从性、预测治疗结果、数据分析、精准医疗、开发新疗法、病理研究、疾病诊断等。

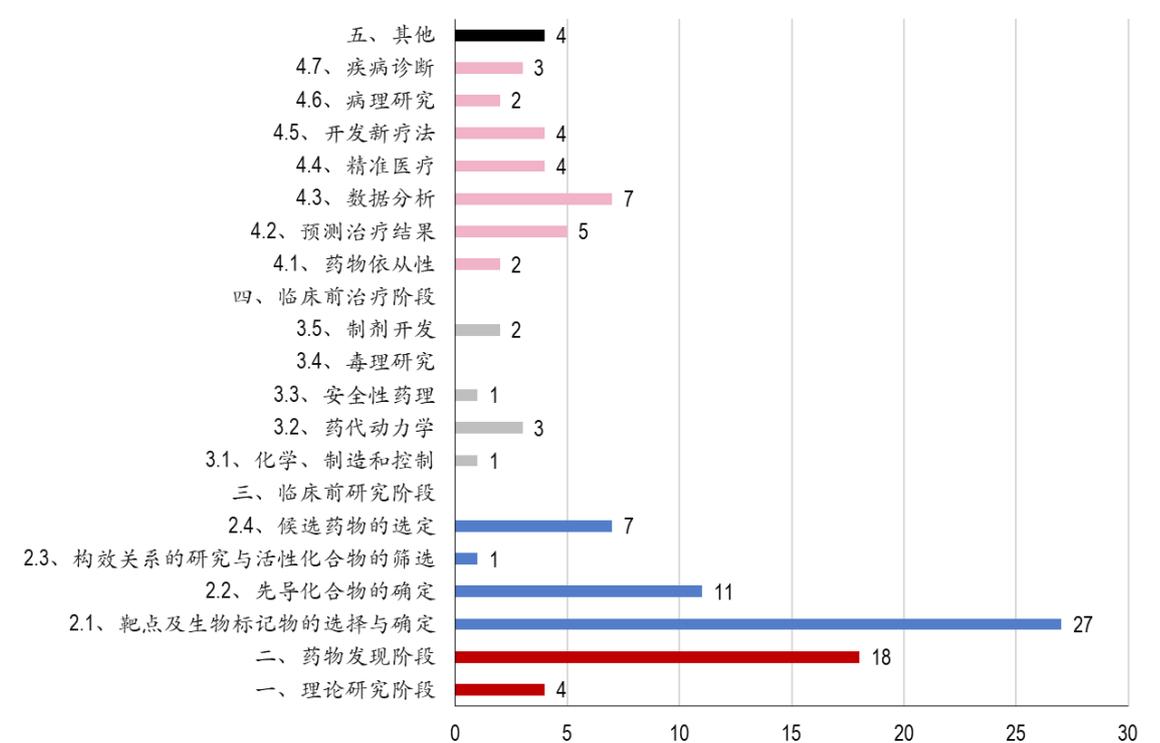
图表 94. 药企参与 AI 制药的各个阶段具体分布



资料来源：速石科技，同写意，中银证券

注：数据截止于2020年11月

图表 95. 不同药物研发阶段 AI 布局数量



资料来源：速石科技，同写意，中银证券

注：数据截止于2020年11月

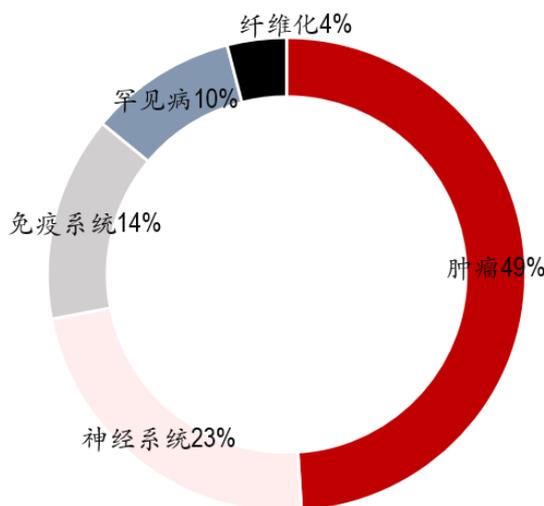
图表 96. 参与 AI 制药的各阶段的代表药企

研发阶段	细分阶段	AI 结合点	代表企业
药物发现	靶点发现和炎症	AI+文本分析 AI+靶点筛选	IBM Watson, Exscientia, Numerate, Benevolent AI
	先导化合物筛选	计算机视觉+高通量筛选	N/A
	先导化合物合成	AI+构效关系优化	Insilico Medicine, Numedii
临床前研究	药物晶型测试	AI+晶型预测	晶泰科技
	安全性和毒性测试	大数据提取有效信息 AI+患者识别与招募	Molplex, Atomwise
临床研究	临床研究	人脸识别+服药依从性管理 机器学习/可穿戴设备	零氪科技
其他	基因分析	AI 破译基因库信息	Engine Biosciences
	辅助分析	AI+文本分析	IBM Watson

资料来源：公司官网，中银证券

3.5.2 药企在 AI 合作上聚焦疾病的情况

图表 97. AI+制药研发管线适应症分布



资料来源：速石科技，中银证券

根据速石科技数据显示，近 200 家 AI+制药公司中超过 20% 公司披露了其研发管线；其中将近 50% 管线聚焦于肿瘤，占主导；神经系统疾病成为第二热门的适应症，占比约 23%；肿瘤与神经系统疾病也是目前药物研发难度高研发需求又最为强烈的病症之一。

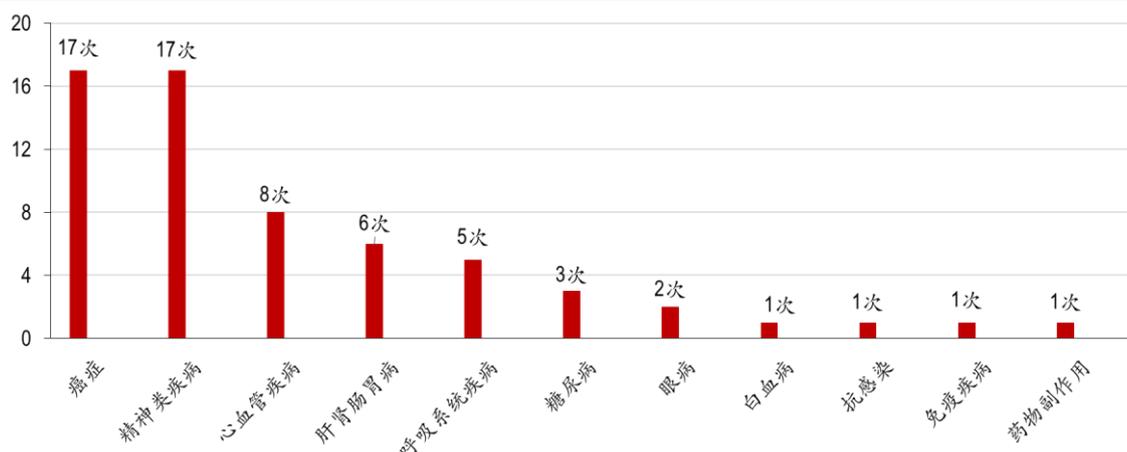
图表 98. 药企在 AI 合作上聚焦的疾病方向

癌症 (17)	Bayer 拜耳 (2)	精神类疾病 (17)	Lundbeck 灵北 (6)	心脑血管疾病 (8)	Bayer 拜耳 (2)
	Pfizer 辉瑞 (2)		Janssen (2)		AstraZeneca 阿斯利康
	CJ Healthcare (2)		Abbvie 艾伯维		Merck KGaA 默克
	Bristol-Myers Squibb (BMS) 百时美施贵宝		AstraZeneca 阿斯利康		Norvatis 诺华
	Celgene 赛尔基因		Eisai		Procter & Gamble 宝洁
	Daewoong Pharmaceuticals 大宇药业		Roche 罗氏		Servier 施维耶
	Evotec		Sumitomo Dainippon Pharma 住友制药		豪森药业 (Hansoh Pharma)
	Roche-Genetech 基因塞克		Sunovion		
	Janssen		Takeda 武田制药		
	Norvatis 诺华		Wave Life Science		
	SK Biopharmaceuticals SK 生物制药		豪森药业 (Hansoh Pharma)		
	Takeda 武田制药				
豪森药业 (Hansoh Pharma)					
正大丰海制药 (CTFH)					
肝肾肠胃疾病 (6)	AstraZeneca 阿斯利康 (2)	呼吸系统疾病 (5)	AstraZeneca 阿斯利康 (2)	糖尿病 (3)	Norvatis 诺华
	Gilead 吉利德 (2)		Eli Lilly 礼来		Novo Nordisk 诺和诺德
	豪森药业 (Hansoh Pharma)		Janssen		豪森药业 (Hansoh Pharma)
	Takeda 武田制药		Sanofi 赛诺菲		
眼病 (2)	Norvatis 诺华	白血病 (1)	Astellas 阿斯泰来制药	抗感染 (1)	豪森药业 (Hansoh Pharma)
	Santen 参天制药				
免疫疾病 (1)	Pfizer 辉瑞	药物副作用 (1)	Bayer 拜耳		

资料来源：速石科技，中银证券

注：数据截止时间 2020 年 11 月

图表 99. 各大药企在 AI 合作上聚焦的疾病方向



资料来源：速石科技，中银证券

注：时间截止 2020 年 11 月

据 2020 年速石科技 2020 年报告显示各大药企在 AI 合作上聚焦的疾病方向，除去未明确指出疾病类型的的数据，药企在癌症和精神类疾病上进行 AI 合作最多，均为 17 次，分别占有有效数据的 27%；其次为心脑血管疾病，占比为 13% (8 次)。

图表 100. 药企在 AI 合作上聚焦疾病的细节 (待更新)

公司名	疾病									
Abbie 艾伯维	精神分裂症	不明								
Almirall	不明									
Amgen 安进	不明									
Astellas 安斯泰来制药	不明	不明	白血病	不明						
AstraZeneca 阿斯利康	肾病	肺纤维化	帕金森	不明	不明	肾病	不明	呼吸系统疾病	心血管病	不明
BASF 巴斯夫	不明	不明								
Bayer 拜耳	癌症	不明	不明	药物副作用	心血管疾病	心血管疾病	癌症			
Boehringer Ingelheim	不明	不明	不明	不明	不明	不明				
Bristol-Myers Squibb (BMS) 百时美施贵宝	癌症	不明								
Celgene 赛尔基因	癌症	不明								
CJ Healthcare	癌症	癌症								
Daewoong Pharmaceuticals 大宇药业	癌症			不明						
Eisai	痴呆症									
Eli Lilly 礼来	不明	不明	冠状病毒							
Evotec	癌症	不明								
GSK 葛兰素史克 (GlaxoSmithKline)	不明	不明	不明	不明	不明					
Roche-Genetech 基因塞克	癌症	不明								
Gilead 吉利德	肝炎	肝炎	不明							
Ionis Pharmaceuticals 艾奥尼斯制药	不明	不明								
Ipsen 益普生	不明									
Janssen	不明	痴呆症	神经退行性疾病	不明	不明	不明	冠状病毒	不明	癌症	
Lundbeck 灵北	抑郁症	精神病	帕金森	癫痫	精神分裂症	神经退行性疾病				
Merck KGaA 默克	心血管疾病	不明	不明	不明	不明					
Mitsubishi Tanabe Pharma 田边三菱制药	不明	不明								
Nestle 雀巢	不明									
Norvatis 诺华	不明	不明	癌症	不明	不明	不明	心血管疾病	黄斑部退化	糖尿病	不明
Novo Nordisk 诺和诺德	糖尿病									
Ono Pharmaceuticals 小野制药	不明	不明								
Pfizer 辉瑞	不明	不明	癌症	癌症	免疫疾病	不明	不明	不明		
Procter & Gamble 宝洁	心血管疾病									
Roche 罗氏	不明	帕金森	不明	不明	不明					
SK Biopharmaceuticals SK 生物制药	癌症									
Sanofi 赛诺菲	不明	不明	流感	不明	不明					
Santen 参天制药	青光眼									
Servier 施维耶	心血管疾病	不明								
Sumitomo Dainippon Pharma 住友制药	精神病									
Sunovion	精神病	不明								
Takeda 武田制药	癌症	肠胃病	神经系统疾病	不明	不明	不明				
Wave Life Science	神经系统疾病									
Yunhan Corp	不明	不明								
Zambon Pharma										
豪森药业 (Hansoh Pharma)	神经系统疾病	癌症	糖尿病	抗感染	肠胃病	心血管疾病				
正大丰海制药 (CTFH)	癌症									
药明康德 (WuXi AppTec)	不明	不明	不明							

资料来源: 公司官网及公众号, 中银证券

续 图表 100. 药企在 AI 合作上聚焦疾病的细节 (待更新)

公司名	疾病									
Abbvie 艾伯维	精神分裂症	免疫学疾病								
Almirall	皮肤病									
Amgen 安进	神经科学- 小儿偏头痛									
Astellas 阿斯泰来	失明与再生	免疫肿瘤学	白血病	基因调控						
AstraZeneca 阿斯利康	肾病	肺纤维化	帕金森	患者诊疗	分子与蛋白质结合	肾病	麻醉	呼吸系统疾病		不明
BASF 巴斯夫	炎症-多肽	不明								
Bayer 拜耳	癌症	心脏病	药物副作用	心血管疾病	眼科	药物警戒				
Boehringer Ingelheim	精神分裂症	阿尔茨海默症	新型小分子先导化合物	不明	不明	不明				
Bristol-Myers Squibb 百时美施贵宝	癌症	病毒学								
Celgene 赛尔基因	癌症	病毒学	(被 BMS 收购)							
CJ Health care	癌症	癌症								
Daewoong Pharmaceuticals 大宇药业	癌症	不明								
Eisai	痴呆症									
Eli Lilly 礼来	糖尿病	肿瘤	冠状病毒	与 atomwise 合作						
Evotec	癌症	皮肤再生								
GSK 葛兰素史克	靶向慢性阻塞性肺病新通路的“高效”先导分子	新型选择性小分子	新型的生物靶点和通路	识别蛋白质晶体	合成化学					
Roche-Genetech 基因泰克	癌症	糖尿病视网膜病变								
Gilead 吉利德	非酒精性脂肪性肝炎	不明								
Ionis Pharmaceuticals 艾奥尼斯制药	心脏、肾脏疾病	新陈代谢								
Ipsen 益普生	与 Owkin 合作, 研究不明									
Janssen	帕金森	痴呆症	神经退行性疾病	溃疡性结肠炎患者	虚拟药物设计	药物发现	冠状病毒	临床试验		
Lundbeck 灵北	抑郁症	神经病	帕金森	癫痫	精神分裂症	神经退行性疾病				
Merck KGaA 默克	心血管疾病靶标生成新型小分子药物先导物	蛋白质组学筛选	与 Atomwise 有一个合作的项目	不明	不明					
Mitsubishi Tanabe Pharma 田边三菱制药	AI 优化临床试验	不明								
Nestle 雀巢	营养治疗: 食品中的治疗性多肽									
Norvatis 诺华	临床试验, 预测药物疗效	高内涵筛选	癌症	预测患者对药物反应	细胞和基因疗法	药物设计	心血管疾病	黄斑部退化		
Novo Nordisk 诺和诺德	糖尿病									
Ono Pharmaceuticals 小野制药	神经系统疾病	不明								

资料来源: 公司官网及公众号, 中银证券

3.5.2 新型 AI 制药企业药物研发合作及最新进展

图表 101. 新型 AI 制药企业药物研发合作及最新进展

公司名称	最新进展
中以海德	2021 年旗下通过 AI 赋能的四款乙肝项目创新药物已完成药物生物学验证，并将与 2021 年中进行临床研究。
智药科技	2020 年 1 月智药科技通过深度神经网络在研的药物研发管线包括非洲猪瘟病毒项目 (ASFV)、肿瘤免疫治疗靶点项目 (HPK1)、唐氏综合症与阿尔兹海默症靶点项目 (DYRK)、受体酪氨酸激酶样孤儿受体 1 项目 (ROR1)。其中 ASFV 已经进入了临床前阶段，其他三种正在药物发现阶段。
智化科技	2021 年公司自主研发的化合物智能规划平台 (Chemical.AI) 已经和国内 30 多家头部 CRO，医药公司，跨国大型医药企业和高县科研机构提供了合作和试用，该平台提供对已知分子和相似分子，快速生产可分享的整体路线及相应化合物的报告，对于未知分子，提供新思路 and 策略，辅助完成高可行性的路线设计，通过系统整合，全面掌握和利用外部和内部数据。2021 年 3 月，公司宣布完成超 3000 万人民币的 A 轮融资。
云深智药	2020 年 11 月公司称，与腾讯 AI Lab 合作的项目采用“从头折叠”的蛋白质结构预测方法帮助解析了 SRD5A2 晶体结构，并通过自研 AI 工具“fFold”有效提升了蛋白质结构预测精度，该项联合研究成果于近日登上了国际顶级期刊 Nature 子刊《Nature Communications》。目前平台上已经运行十个左右研发项目，包括对抗新冠病毒药物的虚拟筛选和性质预测（正在对筛选结果进行实验验证）。
宇道生物	公司官网 2021 年 7 月 11 日显示，公司目前现有 5 款在研药物，UD001（主要治疗方向为实体瘤）正处于药物发现阶段，UD002（主要治疗方向为结肠癌）正处于临床前阶段，UD003（主要治疗方向为乳腺癌），正处于临床前阶段，UD004（主要治疗方向为前列腺癌）正处于临床前阶段，UD005（主要治疗方向为实体瘤）正处于临床前阶段。
英矽智能 (Insilico Medicine)	英矽智能与 2021 年 2 月 24 日公布，其利用自主研发的 AI 新药靶点发现平台 PandaOmics 和 AI 分子生成和设计平台 Chemistry42 平台，获得了全球首例完全由 AI 驱动发现的特发性肺纤维化 (IPF) 疾病新靶点，以及针对该靶点设计的全新化合物。该候选药物成功进入临床前研究阶段，并即将开展临床阶段研究
英飞制药	英飞制药开发的 AI 新药开发平台“智药大脑”已初具规模，该平台利用先进的人工智能药物研发技术 (AIDD) 融合计算机辅助药物设计技术 (CADD)，深度覆盖从靶标发现到临床前候选化合物全流程。据公众号 2021 年 7 月 9 日消息表示，公司在研 Bruton 酪氨酸激酶及其抑制剂。2021 年 5 月 26 日，公司宣布完成近 4000 万元 Pre-A 轮融资。
亿药	公司自主研发的 AI 制药平台灵素系统于 2021 年 6 月 17 日登上 nature 子刊，基于这套药物研发系统，亿药科技已经自建了数条临床前管线，包括在延长寿命、肥胖、高尿酸血症、非酒精性脂肪性肝炎、骨质疏松等方向都进行了药物开发，并取得了非常好的动物实验效果。除了以上管线布局，亿药科技理论上还可以实现 800 个靶点的药物设计，并且其中已经申请了十几项化合物功能专利，现处于 PCC 研究阶段，公司未来管线将拓展到 30 种疾病领域。
星药科技	2021 年 1 月，星药顺利完成了针对疑难疾病类型的创新基因靶点的药物生成和筛选评价模型开发；另一方面，星药现有的药物研发管线均取得了良好进展，已经陆续进入体内和体外实验室验证阶段。公司自研 Pyxir 药物研发平台涵盖从靶点开发到临床前候选药物发现的全流程。2020 年 8 月，公司宣布完成近千万美金 Pre-A 轮融资。
星亢原	据公司 CEO 于 2021 年 2 月透露，目前星亢原主要发力于诱导蛋白降解的双特异性小分子，在多个靶点上已经获得高活性和高选择性的候选化合物，预计于 2021 年年底或 2022 年初达到 PCC（临床前候选化合物）阶段。目前通过自主管线搭建以及与合作药企共建管线的方式，目前已经高校得推进了 10 多个在研项目，其中进展最快的是基于蛋白降解技术的药物管线。
未知君	公司已在 2020 年 10 月向美国 FDA 递交了关于 aGvHD（移植物抗宿主病）的 IND 申请，目标主要针对急性移植物抗宿主病。据公开信息报道（2020 年 11 月 27 日），公司已完成数千万美元的 B+轮融资。
望石智慧	2021 年 4 月 12 日，望石智慧宣布完成了 B+轮和 B 轮融资，融资总额一亿美元。2021 年 6 月 30 日望石智慧宣布于北京泰德制药进行进一步合作，在首次合作中，双方针对某国际领先肿瘤靶点进行小分子药物的共同开发，望石智慧利用复合的临床前研发团队、AI 分子生产平台和超高同量筛选平台，在短时间内获得了数个有专利空间、活性达成药性级别的全新化学骨架。同时，望石智慧已经完成了面向小分子新药发现的智能化药物分子设计平台及知识图谱两大平台的建设。
索智生物	索智生物已于 2021 年 4 月 26 日宣布完成五千万人民币天使轮融资并与百图生科、维亚生物达成合作，推动“计算自身免疫药物”研发。
燧坤智能	公司公众号于 2020 年 2 月 4 日宣布已与清华大学交叉学院曾坚阳团队合作，使用自主开发 AI 工具，已完成对 2019-nCoV、SARS 及 MERS 病毒 spike 蛋白的 MHC 亲和力分析 (MHC Class I binding affinity) 与比较，并完成针对 2019-nCoV 病毒全蛋白的 MHC 亲和力分析。2020 年 12 月 3 日，保诺科技与燧坤智能达成战略合作，双方将整合各自优势资源形成合力，促使人工智能更好地助力新药研发。
深势科技	公司致力于以「多尺度建模+机器学习+高性能计算」新范式解决微观尺度分子模拟问题，在药物研发、新材料研发等领域提出了极具革命性的解决方案。2020 年，基于深度势的分子模拟案例获得高性能计算最高奖项戈登贝尔奖。2021 年，通过与百度飞桨合作，实现飞桨机器学习框架与 DeepMD-kit 的结合，及 DeepMD-kit 在 ROCm 硬件平台上的高效运行。2021 年正积极推进科学计算流程在云平台上的高效稳定部署。
深度智耀	2020 年 2 月 10 日-深度智耀宣布，正在生成、筛选并将公布针对 2019 年新型冠状病毒中多个蛋白为靶点的病毒蛋白降解剂。深度智耀自主研发的 AI 智能系统和相关服务覆盖新药研发全链条，包括药物发现、有机合成、药物警戒、文本智能（医学写作、医学翻译、eCTD 报批、文档管理）等各环节。公司的深度智耀的 AI 药物警戒系统和 AI 自动翻译申报系统已实现较大规模商业化；AI 驱动的早期药物发现平台和 AI 辅助有机合成系统（化学合成和工艺改善）即将进入商业化阶段。

资料来源：公司官网及公众号，中银证券

续 图表 101. 新型 AI 制药企业药物研发合作及最新进展

公司名称	最新进展
普瑞基准	目前据公司官网 2021 年 7 月 12 日显示, 公司已上市 5 款产品, 分别为昂可星 (主要针对泛癌种实体瘤), 昂可清 (主要针对泛癌种实体瘤), 昂可迪系列 (主要针对泛癌种实体瘤), Lynch 基因检测 (主要针对子宫内腺瘤, 卵巢瘤, 直肠癌) 和 BRCA 基因检测系列 (主要针对乳腺癌和卵巢癌)。
湃隆生物	湃隆生物“AI 赋能药物发现平台”项目终于于 2020 年 9 月 11 日在上海浦东新区竣工。公司已于 2019 年 6 月成功募资 2700 万美元, 公司的“AI 赋能药物发现平台”未来将开发出更多为全球患者带来突破性疗效的新分子实体药物, 长远目标是在自主开发与新技术引进的基础上, 将 AI 技术贯穿到靶点发现、药物研发、临床试验等全过程, 从根本上提高新药研发效率。
科辉智药	2021 年 3 月 31 日, 科辉智药宣布完成 1.5 亿元人民币的 Pre-A 轮融资, 本轮融资将用于公司在研管线的推进与扩展, 计算及 AI 研发平台的优化, 新研发实验室的建设及仪器设备的购置。科辉智药是一家 AI 驱动的创新药研发平台, 致力于解决神经退行性疾病、肿瘤和自身免疫性疾病的药物开发公司。据官网介绍, 科辉智药旗下 AI 驱动的研发平台 eLEAD 可以覆盖研发全流程, 包含靶标搜索、靶点确认、发现和优化先导化合物、候选物筛选以及临床试验。
康迈迪森	康迈迪森医药成立于 2020 年 9 月, 是国内专注于计算化学驱动新药研发的平台公司。公司利用全球领先的基于蛋白三维结构超大规模虚拟筛选和人工智能等核心技术, 为全球药企和科研单位提供小分子创新药物的早期开发服务, 从而推动科研成果的产业化, 加速原创新药的研发。
晶泰科技	公司已与 2020 年 9 月 28 日获得 3.2 亿美元 C 轮融资。2021 年 2 月 3 日, 晶泰科技宣布与新格元签署合作, 以 AI 和单细胞测序为新肿瘤靶点研发靶向药。2021 年 7 月, 晶泰科技的首个 RET 靶点化合物专利公开。目前, 晶泰科技的智能药物研发平台已服务于超过 30 款新药分子的发现工作, 其中进展最快的项目已进入临床前研究。
剂泰医药 (METIS Pharmaceuticals)	据剂泰医药官网 2021 年 7 月 13 日显示, 目前公司在研新药有四种, 分别为 MTS001 (治疗方向为肝癌和甲状腺癌靶药物), MTS002 (治疗方向为子宫颈癌), MTS003 (治疗方向为 HIV 和乙肝抑制剂), MTS004 (特发性纤维化治疗), 这四种在研新药均处于药物发现阶段。
焕一生物	2020 年 12 月, 焕一生物宣布获得数千万没有天使轮融资, 本轮融资主要用于现有产品管线研发的推进, AI+ 系统免疫技术平台的持续优化, 并进一步拓展国内外的产学研合作。2021 年 6 月 28 日, 焕一生物宣布与剂泰医药达成合作, 在自体免疫疾病领域开展差异化创新生物药的联合研发, 有望推出全球最快基于 AI 平台驱动研发, 从生物标志物和靶点发现到制剂递送, 再到临床获批的新形态治疗药物。
分迪科技	据官网 2021 年 7 月 13 日研发管道显示, 分迪科技目前在研 5 种癌症相关药物, 3 种与病毒有关的药物, 这些药物都处于药物发现阶段。
费米子科技	2020 年 11 月 12 日, 公司宣布完成累计上亿元 A 轮融资, 该轮融资资金将主要用于团队的升级、公司在技术模型和数据模型上的完善以及相关产品管线合作数量的扩增。公司自研基于深度学习的 FermiNet 小分子研发平台, 费米子能覆盖靶标到 PCC 临床前候选化合物全流程。
答魔数据	据公司公众号 2021 年 4 月 6 日称, 答魔数据已经完成了 3 万多种小分子药物和生物药的知识图谱搭建, 数据约 PB 量级, 近期更有重磅的逆合成反应预测、药物筛选等多个药物研发模块即将落地, 这将进一步加深公司在药物研发领域的的数据优势。
冰洲石 (AccutarBio)	据公司公众号 2021 年 4 月 8 日称, AccutarBio 已建成一条共计超过 10 个生物新药的产品管线, 涵盖 first-in-class 和 best-in-class 药物靶点。其中 2 个管线 (乳腺癌和前列腺癌) 预计于今年下半年在美国进入临床实验, 另外 2 个管线将于 2022 年初进行美国临床申报。
北科德源	公司专注于为精准靶向新药发现提供计算和分析服务, 其中包括基于蛋白靶标的虚拟筛选、反向虚拟筛选、基于药效团的虚拟筛选等。
百图生科	2021 年 6 月 15 日, 百图生科“免疫图谱卓越计划”首批队列研究和转化医学项目正式对外招聘正式启动, 为肿瘤、自身免疫性疾病、纤维化疾病的免疫机理研究等中国特色/高发疾病转化医学项目提供研究资金、技术引擎及科研 PI、图谱和队列合作等支撑。百图生科已与暑假 AI 生物科技公司进行了盟约合作, 包括晶准生物、维亚生物、和铂医药等药物研发领域的领军企业; 索智生物、宇道生物等 AI 药物研发企业; 深势科技、燧坤智能等计算药物设计企业。
X-37	截至 2021 年 7 月 13 日, 公司目前有 5 款自研药物, 包括 2 款自身免疫药物 ZAP-70 和 cGas/sting 和 2 款癌症相关药物 PIM3 和 SHP2 和一款抗凝血药物 FactorXIIa, 5 款药物皆在药物发现阶段。
Verge Genomics	截至 2021 年 7 月 13 日, 公司官网显示目前有 6 款在研药物, 其中有三种研究方向为肌萎缩侧索硬化症, 一款为老年痴呆症方向, 二款为额颞叶痴呆症方向, 除一款药物处于药物发现阶段以外, 其他 5 款药物皆进入了临床前阶段。
twoxar	截至 2021 年 7 月 13 日, 公司官网显示目前在研药物有 18 款, 其中 5 款药物为新陈代谢疾病方向, 5 款药物为自身免疫及炎症方向, 4 款为肿瘤方向, 其他未披露药物为 4 款, 18 款在研药物, 18 款在研药物 12 款药物已经进入了临床前阶段。
Schrödinger (薛定谔)	截至 2021 年 7 月 13 日, 公司现在一共有 6 款在研药物, 其中一款治疗复发/耐药非霍奇金淋巴瘤正处于临床前阶段, 其余 5 款包括一款治疗血液癌症和实体瘤药物, 一款治疗妇科癌症和其他实体瘤, 一款治疗肾细胞癌, 一款鼠类肉瘤病毒相关的癌症和一款未披露的药物皆处于药物发现阶段。

资料来源: 公司官网及公众号, 中银证券

续 图表 101. 新型 AI 制药企业药物研发合作及最新进展

公司名称	最新进展
Reverie Labs	2021 年 2 月 3 日, Reverie Labs 率先应用机器学习技术开发下一代小分子激酶抑制剂, 宣布完成其 2500 万美元的 A 轮融资, Reverie 将利用所得收益将其内部和合作的药物发现项目推向临床, 进一步开发其创新的计算发现平台, 并发展其世界一流的跨学科科学家和工程师团队。
Relay Therapeutics	据官网 2021 年 7 月 15 日显示, 公司目前在研 3 款药物, 两款治疗晚期或转移性实体瘤均进入了临床阶段, 一款于 PI3Ka 靶点相关的药物正处于药物发现阶段。
Redesign Science	公司与 2019 年 10 月获得数百万美元的融资用来拓展科学和工程团队来部署云端计算平台, 增加平台的扩展性和自动化。公司已完成自研平台 AlphaSpace 物理引擎平台的构建, 可在原子级别精度对药物靶点蛋白进行超长时间分子动力学模拟, 快速筛选上亿级别的小分子数据库。据报道, 公司已建立多个新药研发合作伙伴关系, 针对的疾病邻域包括癌症以及 IBD (炎性肠疾病)。
Recursion Pharmaceuticals	公司官网 2021 年 7 月 15 日显示, 目前已披露在研药物多达 10 款, 涵盖肿瘤、癌症、精神性疾病等多种疾病, 其中 4 款药物已经进入了临床阶段, 2 款药物正处于临床前阶段, 4 款药物正处于药物发现阶段, 另外还有 25 款未披露药物覆盖从药物发现阶段到临床前阶段各个阶段。
Qrativ	Qrativ 已于 2017 年 7 月获得 800 万美金 A 轮融资, 用来研发自研药物平台 Darmin.AI, 以发现罕见疾病的治疗方法。
Phenomic AI	公司已于 2020 年 10 月获得 600 万美元种子轮融资, 筹集的资金将支持对通过该公司的平台发现的两个经过验证的癌症药物靶标进行临床前研究, 以及发现其他药物靶标并将其推进公司的产品线。
Owkin	公司于 2020 年 5 月获得 2500 万美元融资以支持其新项目 Owkin Studio 虚拟实验室当中。公司目前已建立起名为苏格拉底的平台, 该平台可以通过机器学习和深度学习算法, 让用户可以轻松创建预测模型, 并在应用在医学研究的每个领域, 包括优化药物开发、生存预测、目标发现、临床试验还有药品市场分析。
Oncocross	公司已与 2020 年 8 月获得 1400 万美元的 B 轮融资。据官网信息显示, 公司目前有 9 款自研药物, 其中 3 款进入了临床阶段, 4 款药物进入了临床前阶段, 2 款药物处于药物发现阶段, 其治疗范围涵盖了肝病、肿瘤、肌肉减少症、传染病、皮肤类疾病以及罕见病。公司目前在研合作药物有 8 款, 其中一款未披露药物已经进入了临床阶段, 另一款未披露项目进入了临床前阶段, 其他 6 款药物皆处于药物发现阶段, 其治疗范围涵盖传染病、中枢神经系统疾病、肿瘤、代谢疾病及罕见病。
Numerate	公司已于 2019 年 11 月 1 日被 Valo Health (这是一家利用机器学习、云计算和大数据实现药物发现的初创公司。该公司即将通过 28 亿美元的空白支票公司的并购进行上市。) 收购。
NuMedii	公司与 2020 年 9 月称其与耶鲁医学院、贝勒医学院、布莱根妇女医院合作的项目创建了世界上第一个特发性肺纤维化单细胞测序图谱, 该项目运用了 NuMedii 的人工智能技术, 将其应用与研究特发性纤维化机制的研究。
Molecule.one	公司在 2021 年 6 月 1 日宣布获得 4 百万美元种子轮融资, 该轮融资将主要用于扩建公司团队以及持续扩张, 并计划将在美国和西欧开办工作室。
Macromoltek	Macromoltek 在 2020 年 4 月与 Cytovia Therapeutics 展开合作, 运用其计算抗体设计平台设计免疫治疗药物来展开对新冠病毒的研究和治疗。
Lantern Pharma	根据公司官网 2021 年 7 月 16 日显示, 公司目前有 5 款在研药物, 其中一款治疗前列腺癌的药物和一款肺癌的药物已经进入了临床阶段, 一款治疗实体瘤和一款治疗胶质母细胞瘤和中枢神经系统癌的药物正在临床前阶段, 另外的一款治疗实体瘤的药物正在药物发现阶段。
LAM Therapeutics	根据公司官网 2021 年 7 月 16 日显示, 公司已将四种药物推进临床阶段: 用于治疗闭塞性细支气管炎、肺结节病和淋巴管肌瘤病的 LAM-001、用于肌萎缩侧索硬化的 AIT-101、用于 Covid-19 的 LAM-002A 和用于面部血管纤维瘤和皮肤肉瘤病的 LAM-004。此外, 公司治疗肌萎缩侧索硬化的 AIT-101 已经进入了临床阶段, 治疗罕见病的 AIT-102 也进入了临床前阶段。
Iktos	据公司官网显示, 2020 年 1 月公司自主研发 AI 驱动的用于从头药物设计的药物平台 Ma'kya 已经与默克制药达成了合作进行药物设计开发。
Healx	据公司官网 2021 年 7 月 16 日显示, 公司目前在研 18 款药物, 涵盖各种罕见的神经发育疾病、肾疾病、肿瘤、炎症、神经肌肉疾病、呼吸疾病、骨类疾病以及眼科疾病等, 其中 13 款药物进入了临床前阶段, 5 款药物正处于药物发现阶段。
Frontier Medicines Corporation	据公司官网显示, 公司已于 2020 年 9 月与艾伯维生物制药公司达成全球合作, 共同发现和开发针对难于药物靶点的新疗法和 E3 降解剂。在多年的合作中, 艾伯维和 Frontier 将利用 Frontier 的专有化学蛋白质组学平台来识别针对新型 E3 连接酶和某些肿瘤学和免疫学目标的程序的小分子。
Exscientia	2021 年 5 月 13 日, 牛津, Exscientia Ltd. 和日本住友制药前宣布将在美国启动 DSP-0038 的 1 期临床研究, 以治疗阿尔茨海默氏病精神病。据公司官网显示 (2021 年 7 月 16 日), 公司目前有 26 款在研药物, 其中一款免疫肿瘤类药物和两款精神类药物已经进入了临床阶段, 两款肿瘤类药物和一款治疗炎症和免疫类药物已经进入了临床前阶段, 其余的 20 款药物皆处于药物发现阶段。公司在研药物涵盖免疫疾病、肿瘤、炎症、罕见病、呼吸疾病等多种疾病。
Euretos	据官网资料显示, 公司于 2021 年 6 月 11 日免费开放其自研 AI 平台给学术研究人员以支持早期疾病和药物研究。
Envisagenics	2021 年 5 月, 渤健公司和 Envisagenics 公司宣布了一项新的合作, 旨在推进中枢神经系统疾病中的核糖核酸剪接研究。作为合作的一部分, 渤健将利用 Envisagenics 专有的人工智能驱动 RNA 剪接平台 SpliceCore 明确和了解 CNS 细胞类型中不同 RNA 异构体的调节。

资料来源: 公司官网及公众号, 中银证券

续 图表 101. 新型 AI 制药企业药物研发合作及最新进展

公司名称	最新进展
Engine Biosciences	公司于 2021 年 5 月宣布完成 4300 万美元的 A 轮融资，此轮融资资金将用于通过机器学习和下一代组合遗传学破译新药的遗传密码。据公开消息报道，公司的癌症疾病治疗药物正处于药物发现阶段，预计 2022 年公司的第一个候选药物将进入临床前阶段，2023 年进入临床阶段。
Deepmind	谷歌旗下 DeepMind 公司于 2020 年 11 月 30 日宣布，其开发的 AI 程序 AlphaFold 可以准确地预测蛋白质三维空间结构——而高效地破解和疾病有关的蛋白质结构，有助于研究人员发现新型药物。
Cyclica	2020 年 6 月，公司成功完成 2300 万加拿大美元的 B 轮融资，本轮融资将支持围绕 Cyclica 的综合蛋白质组药物发现平台的持续创新，并将扩大其在制药行业的应用。它还将支持扩展到邻近行业，例如农用化学品。2021 年 5 月，公司与 Precisionlife 签立了战略合作伙伴，旨在结合先进数据驱动的生物和化学平台来制造药物发现的快速引擎。
BenevolentAI	据公司官网消息 2021 年 7 月 17 日显示，公司目前披露的 11 款在研新药，其中一款治疗特应性皮炎的新药已经进入了临床阶段，其余 10 款新药涵盖肌肉萎缩硬化症，肿瘤，传染病，慢性肝病，神经退行性疾病等多个方向，这些药物都处于临床前阶段。此外还有 20 余款未披露药物处于早期药物发现阶段。
Atomwise	据公司官网消息 2021 年 7 月 17 日显示，公司目前在研项目多大 500 多种，400 多种独家的靶点。在研项目中，38% 为肿瘤，26% 为传染病。此外，公司还与 X37, Organ AI, Sengine, Atropos Therapeutics 开展了合作项目，一款与 X37 合作的项目已经进入了临床前阶段。
1910 Genetics	2021 年 3 月，公司在完成其 2200 万美元的 A 轮融资后正式成立。该公司的核心任务是减少药物开发的时间表和成本，同时提高将药物提供给患者的成功率。
Biovista	据公司官网 2021 年 7 月 17 日显示，公司目前有 8 款在研药物，涵盖了神经退行性疾病、神经中枢系统疾病、肿瘤及免疫等治疗方向，目前 8 个项目皆处于临床前阶段。
C4X discovery	据公司官网 2021 年 7 月 17 日显示，目前公司有 11 款在研药物，皆处于药物发现阶段，其治疗方向涵盖炎症、肿瘤、神经退行性疾病等治疗方向。
e-therapeutics	2021 年 7 月 2 日，公司宣布它与 Galapagos NV 的合作达到了一个重要的里程碑，Galapagos NV 是一家专门从事发现和开发具有新作用模式的小分子药物，重点是炎症、纤维化和肾脏疾病。该项目的目标是确定新的治疗方法，以调节涉及特发性肺纤维化和其他纤维化适应症的特定机制。
Insitro	公司于 2021 年 3 月宣布完成 4 亿美元的 C 轮融资，本轮融资获得的资金将用于进一步提升该平台的技术能力，扩展可以使用的数据库，以及收购通过该公司的独特策略去风险化 (de-risked) 的潜在候选药物。在 2020 年，公司与百时美施贵宝达成 5 年长期合作计划，在这一合作中，insitro 不但将使用机器学习发现治疗神经退行性疾病的靶点，还将协助开发潜在候选药物。
BERG	据公司官网 2021 年 7 月 17 日显示，公司的治疗肿瘤类疾病的药物 BPM31510 和治疗化疗引起的脱发的药物 BPM31543 正处于临床阶段。此外公司还有 2 款正处于临床前阶段治疗肿瘤类药物 BPM28740 和 BPM42522 和 5 款正在药物发现阶段的治疗神经类疾病的药物。
DeepMatter	公司于 2021 年 6 月宣布，公司被利兹大学选为合作伙伴共同开发自动精准的药物制造方案，其他合作伙伴包括谢菲尔德大学、阿斯利康、Somaserve 和三星。DeepMatter 将提供其 DigitalGlassware® 平台，这是一个基于云的平台，允许化学家实时共享数据并数字化扩展先进纳米颗粒产品。
Gatehouse Bio	2019 年 12 月 4 日，Gatehouse Bio 宣布与阿斯利康合作共同探索治疗呼吸疾病和心血管疾病领域的新的靶点，该合作将使用 Gatehouse Bio 的 AI 赋能平台进行靶点筛选识别。
ProteinQure	公司于 2020 年 7 月宣布与阿斯利康达成合作，将基于结构的设计应用于创建治疗库，旨在加速肽疗法的研究和开发。此次合作将利用 ProteinQure 在计算方法和基于结构的药物设计方面的专业知识。阿斯利康将利用该公司在生物制剂方面的广泛专业知识进行实验验证。
Sensyne Health	据公司 2020 年财报显示，公司的 4 款基于人工智能的疾病筛查和诊断治疗程序已通过临床验证并成功上市，其中包括治疗孕期糖尿病的 GDM-Health、治疗孕期高血压的 BPM-Health，新冠自查程序 CVM-Health 和提供医学建议的 SEND。此外还有一款治疗孕期高血压的 BPM-health 正在官方临床审查中，一款虚拟医院和一款临床算法引擎在概念验证。
Nanna Therapeutics	2020 年 4 月，安斯泰来宣布收购了英国生物技术公司 Nanna Therapeutics Limited，计划将 Nanna 先进的化合物筛选技术应用到线粒体相关疾病的药物早期研发。
Sirenas	据公司官网 2021 年 7 月 17 日显示，公司目前在研 3 款药物，分别为一款治疗逆转 T 细胞耗竭的药物，一款 RIG-I 激动剂和一款 cGAS-拮抗剂，三款药物均处于药物发现阶段。
Standigm	2021 年 3 月 5 日，公司宣布，该公司已完成由 SKS PE 和 Daishin Private Equity 共同领投的 4450 万美元 Pre-IPO 融资。Standigm 目前拥有 20 多个临床前管线，横跨各个治疗领域。追求全栈式、AI 驱动的产业化药物发现，Standigm 通过 DarkMolFactory™ 实现了分子设计工作流程的自动化，并在 Standigm AI 平台的基础上将自动化工作扩展到整个药物发现过程，包括用于靶点发现的 Standigm ASK™、用于先导化合物筛选的 Standigm BEST™ 和用于药物重定向的 Standigm Insight™。
Strateos	2021 年 6 月，公司宣布完成 5600 万美元的 B 轮融资，通过此次融资，Strateos 将继续推动其 SmartLab Platform™ 的创新，该平台将数据生成和人工智能支持与其独特而灵活的自动化相结合，以加速制药和合成生物学的研发。

资料来源：公司官网及公众号，中银证券

续 图表 101. 新型 AI 制药企业药物研发合作及最新进展

公司名称	最新进展
A2A Pharmaceuticals	据公司官网 2021 年 7 月 17 日显示, 公司目前有自研的 4 款治疗实体瘤项目 Transcription regulator、YAP-TEAD、KARS degrader、CLK 皆处于药物发现阶段, 其中 Transcription 预计于 2021 年年内进入临床前阶段、YAP-TEAD、KARS degrader、CLK 预计于 2022 年进入临床前阶段。此外, 公司和 Biomea 合作的治疗白血病和实体瘤的项目 MLL-Menin 已经处于临床前阶段, 和 Daewoong 公司合作的未披露白血病和实体瘤正处于药物发现阶段。
Cloud Pharmaceuticals	据公司官网 2021 年 7 月 17 日显示, 公司目前在研 8 款新药, 其中一款胰腺癌 mRNA 疫苗, 一款治疗高血压的个性化鸡尾酒药物, 一款治疗血栓的新型 EP3 抑制剂预计 2022 年进入临床阶段, 一款针对多种冠状病毒的靶向单克隆抗体 B6 的肽药物, 一款用于减少化疗副作用以破坏 β -CR 的药物和一款用于局部皮炎的新型 Jak3 抑制剂处于临床前阶段, 此外一款用于免疫肿瘤学的 PD-1 抑制剂和一款用于罕见疾病的 PDKK2 抑制剂处于药物发现阶段。
Genesis Therapeutics	2020 年 12 月, 公司宣布成功获得 5200 万美元的 A 轮融资, 这笔融资将进一步开拓用于药物开发的人工智能技术和推进公司的治疗管道。
Saama	2021 年 3 月, 公司宣布与 Oracle 达成合作, 将 Saama 的智能应用程序与 Oracle Health Sciences Clinical One 平台集成。这种合作赋予制药公司以人工智能驱动的洞察力, 以加快临床试验。Saama 的智能应用程序被称为“游戏规则改变者”, 因为它们能够加快临床试验数据的验证并缩短药物开发时间。Saama 的智能应用程序将作为 Oracle Clinical One 平台的集成附加组件提供, 包括 Clinical One 数据收集和数据管理工作台。
BioSymetrics	2020 年 8 月, 公司宣布与强生和 Sema4 达成合作利用机器学习预测不同人群中新冠病毒的发病率和严重程度。作为合作的一部分, 双方将在多个项目中使用 BioSymetrics 的 Contingent-AI™ 引擎来表征高风险人群, 根据生物风险因素和治疗过程测量和预测疾病进展, 并确定临床表型和严重程度的标志物疾病。
Genedata	2021 年 7 月, 公司宣布全球领先的生物制药公司赛诺菲已延长其对 Genedata Selector® 的许可, 以促进其菌株工程和优化工作流程的数字化。赛诺菲和 Genedata 长期合作, 使用 Genedata Selector 来集中管理他们的菌株基因组并协调他们的基因组分析过程。赛诺菲科学家使用 Genedata Selector 通过复杂的基因型分析和表型数据来识别高性能菌株。此外, Genedata 提供咨询服务以支持赛诺菲扩大 NGS 数据处理能力
Dyno Therapeutics	2021 年 5 月, 公司宣布获得由 Andreessen Horowitz 领投的 1 亿美元 A 轮融资。此次融资所得资金将直接资助公司 CapsidMap™ 平台的扩展, 该平台使用人工智能技术设计新型腺相关病毒 (AAV) 基因治疗载体, 扩大功能并增强 Dyno 生物制药开发的基因疗法的治疗影响 伙伴。Dyno 还将通过扩大其运营、知识产权、业务发展和合作伙伴成功团队, 将所得款项用于支持其与领先的基因治疗生物制药公司的多种合作伙伴关系。
Researchably	2018 年 10 月, 公司宣布了他们的自然语言处理 AI 解决方案, 该解决方案能够阅读和审查科学文章, 并更快地确定与哪些药物最相关, 其出错率远低于专家读者。目前公司正在与赛诺菲进行试点合作服务。
PsychoGenics	据公司官网 2021 年 7 月 17 日显示, 公司目前在研 11 款药物, 其中治疗精神分裂症和帕金森症的 SEP856, 躁郁症的 SEP608, 难治性抑郁症的 SEP614 以及治疗阿尔茨海默病中的躁动病状的 SEP135 均进入了临床阶段。此外, 未披露治疗方向的三款药物处于临床前阶段, 三款药物处于药物发现阶段。
Deep Genomics	据公司官网 2021 年 7 月 17 日显示, 公司目前在研 10 款药物, 其中有 4 款治疗中枢神经系统的药物, 2 款治疗新陈代谢药物, 4 款与 Biomarin 合作的未披露方向药物, 此 10 款药物皆处于药物发现阶段。
Turbine	据公司官网 2021 年 7 月 17 日显示, 公司目前自研 2 款 DNA 损伤反应疾病和一款未探索的激酶靶点皆处于药物发现阶段, 公司和塞梅维什大学合作的一款 BTK / BCL 2 抑制剂已经进入了商业化阶段, 公司与拜尔合作的 RTK 抑制剂和激素受体拮抗剂已经进入了临床阶段, 一款激酶正处于药物发现阶段。公司与未披露合作对象的两款药物 RARP 抑制剂和多种 DNA 损伤反应疾病抑制剂已经进入了临床阶段。此外还有两款与未披露合作对象的药物正处于临床前阶段。

资料来源: 公司官网及公众号, 中银证券

4、AIDD 概览篇小结

由大数据支撑的广泛互联、高度智能、开放互动和可持续发展的医药产业，是未来发展的趋势，借助人工智能技术推动医药产业发展具有重要意义。人工智能技术在医药产业各专业领域已有较多的应用研究，目前 AIDD 行业处于发展初期阶段，人工智能技术将为医药研发带来无限可能。

AI 制药领域需要人工智能和药物研发的深度交叉过程，AI 制药企业的三大技术核心是数据、算力和算法。全国 AI 制药企业从机器学习为起始点，经过深度学习缩短药物研发时间、降低成本，提高预测准确率，确保药效，将人工智能赋能药物研发全过程。

4.1 AIDD 对于我国创新药产业的意义

对于我国而言，我国创新药起步晚于欧美等发达国家，并且现在国内创新药产业也显著落后于头部新药研发外企。但是 AIDD 的出现或许为我国创新药产业带来一定的发展契机。第一，AIDD 新药研发一旦落地凭借其突出的优势或将变革新药研发行业，近年来，随着一级市场资本的青睐以及我国特有的人口红利和工程师红利等，我国 AIDD 企业从数量和质量上来看都具备一定的竞争力。再叠加我国政府对人工智能、健康产业相关支撑性政策，都将为我国创新药行业赋能。第二，因为我国创新药产业起步晚相比欧美发达国家有差距，这或将成为我国 AIDD 产业更快更好发展的驱动因素之一，因为我国新药研发企业的追赶或者自我驱动意识将会更强，历史包袱轻，企业或将有可能加大 AIDD 发展力度。

4.2 现存 AIDD 初创公司商业模式

提供最先进的计算机软硬件工具，帮助药企更好更快地完成研发任务；为相关药企、CRO 公司等药物研发公司提供外包服务，商业模式类似于 CRO 企业；自有或者合作共同拥有药物研发管线。目前来说，国内方面从制药行业生态、市场规模等角度出发来看拥有自己药物研发管线的 AIDD 公司或将更有优势。

4.3 AIDD 初创公司的主要关注因素

商业模式、复合背景（需要既懂 AI 又懂医药/生物/化学，如计算化学背景等）人才团队储备及建设、和大型药企合作情况、新药研发管线推进情况、AIDD 学术推广情况等。

4.4 AI 制药领域的痛点

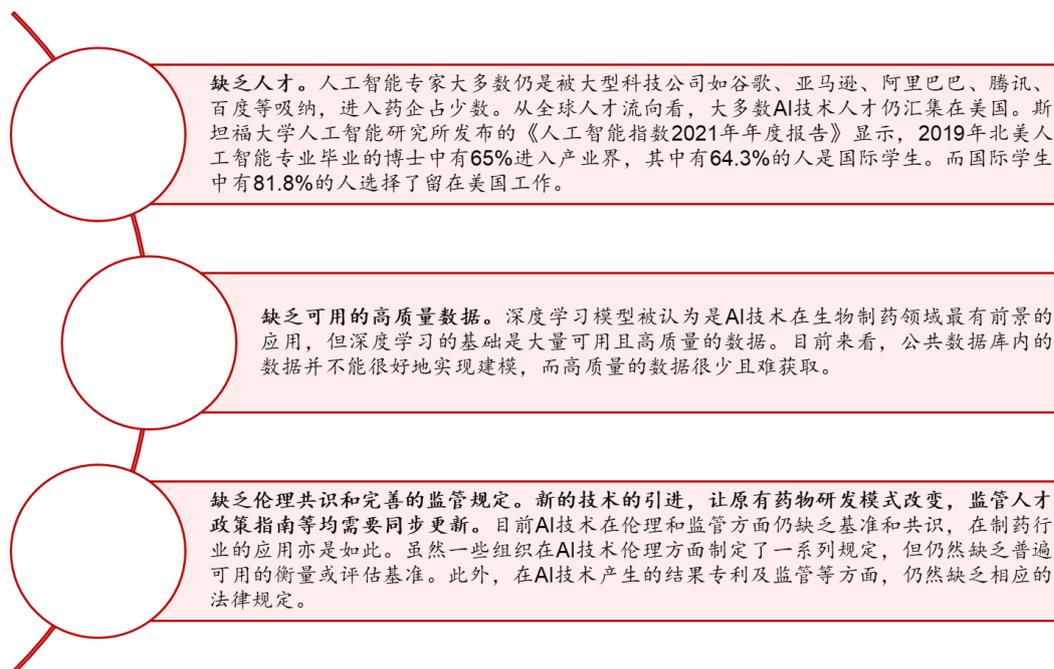
1、全球 AI 人才短缺仍然是生物制药行业面临的严峻挑战。目前，人工智能与药学的融合提升了对人才的需求，高校产出人才远远少于市场需求。

2、缺乏可用的高质量数据。深度学习算法需要大量高质量数据，而生物技术领域的大数据并不总是能够很好地进行建模，或者由于隐私原因无法访问。以药物毒性研究为例，基于现有评估指标下的毒性数据，人们可以利用 AI 构建一个毒性预测模型，但是利用这个模型并不能有效去判断一个候选分子的毒性，还需要综合考虑种属差异、剂量、体内暴露情况等多种因素的影响。生物体系的复杂性使得我们很难对影响毒性的因素进行清晰明确的定义。

国内创新药研发起步较晚，与国外相比，对于优质数据的积累还有一定距离。制药行业的专业门槛很高，而且链条很长。此外，医药领域的监管政策和体制改革也很频繁，使得获得连接历史药物数据变得困难。这些都会导致医药数据统计在完整度和精准度上的不足，从而影响相关决策。

3、AI 在医药科学领域应用的伦理、法律和监管问题。AI 的可解释性、AI 产生的结果的专利性质、各国的法规等放慢了 AI 技术的进展和应用，特别是在制药行业。对于监管机构会如何监管 AI 药物，就药物审评审批来说，化合物应该遵照“安全有效”的评价标准，审批和监管体系短时间内很难改变。

图表 102. AI 创新药研发存在的问题



资料来源：E 药经理人，中银证券

5、AIDD 行业投资风险

1. 研究报告使用的公开资料可能存在信息滞后或更新不及时的风险；
2. AIDD 技术是生物学、药学、计算机科学、化学等众多学科交叉作用的产物，该行业是高度依赖人才的行业，所以关键技术人才的流失会对相关企业产生重大影响；
3. 截至目前为止，还没有一款完全凭借 AIDD 获取的上市新药。AIDD 行业也是处于成长期的初期阶段，技术是否落地，以及技术落地的可操作性存在一定的不确定性风险；
4. 生物医药的创新药研发环节相关的数据是相对保密或者说是高度保密的，而大量高质量数据又是 AI 及互联网得以发生作用的基础。所以传统大型药企如果对新药研发的核心数据形成垄断甚至抵制和 AIDD 相关公司合作，将对 AIDD 行业产生一定影响；
5. 因社会群体对 AIDD 认知不够，对 AI 手段获得新药的安全性存疑也将对行业产生一定影响；
6. 和 AIDD 相关的配套政策不完善或者政策波动带来的行业影响等。

披露声明

本报告准确表述了证券分析师的个人观点。该证券分析师声明，本人未在公司内、外部机构兼任有损本人独立性与客观性的其他职务，没有担任本报告评论的上市公司的董事、监事或高级管理人员；也不拥有与该上市公司有关的任何财务权益；本报告评论的上市公司或其它第三方都没有或没有承诺向本人提供与本报告有关的任何补偿或其它利益。

中银国际证券股份有限公司同时声明，将通过公司网站披露本公司授权公众媒体及其他机构刊载或者转发证券研究报告有关情况。如有投资者于未经授权的公众媒体看到或从其他机构获得本研究报告的，请慎重使用所获得的研究报告，以防止被误导，中银国际证券股份有限公司不对其报告理解和使用承担任何责任。

评级体系说明

以报告发布日后公司股价/行业指数涨跌幅相对同期相关市场指数的涨跌幅的表现为基准：

公司投资评级：

- 买入：预计该公司股价在未来 6-12 个月内超越基准指数 20%以上；
- 增持：预计该公司股价在未来 6-12 个月内超越基准指数 10%-20%；
- 中性：预计该公司股价在未来 6-12 个月内相对基准指数变动幅度在-10%-10%之间；
- 减持：预计该公司股价在未来 6-12 个月内相对基准指数跌幅在 10%以上；
- 未有评级：因无法获取必要的资料或者其他原因，未能给出明确的投资评级。

行业投资评级：

- 强于大市：预计该行业指数在未来 6-12 个月内表现强于基准指数；
- 中性：预计该行业指数在未来 6-12 个月内表现基本与基准指数持平；
- 弱于大市：预计该行业指数在未来 6-12 个月内表现弱于基准指数。
- 未有评级：因无法获取必要的资料或者其他原因，未能给出明确的投资评级。

沪深市场基准指数为沪深 300 指数；新三板市场基准指数为三板成指或三板做市指数；香港市场基准指数为恒生指数或恒生中国企业指数；美股市场基准指数为纳斯达克综合指数或标普 500 指数。

风险提示及免责声明

本报告由中银国际证券股份有限公司证券分析师撰写并向特定客户发布。

本报告发布的特定客户包括：1) 基金、保险、QFII、QDII 等能够充分理解证券研究报告，具备专业信息处理能力的中银国际证券股份有限公司的机构客户；2) 中银国际证券股份有限公司的证券投资顾问服务团队，其可参考使用本报告。中银国际证券股份有限公司的证券投资顾问服务团队可能以本报告为基础，整合形成证券投资顾问服务建议或产品，提供给接受其证券投资顾问服务的客户。

中银国际证券股份有限公司不以任何方式或渠道向除上述特定客户外的公司个人客户提供本报告。中银国际证券股份有限公司的个人客户从任何外部渠道获得本报告的，亦不应直接依据所获得的研究报告作出投资决策；需充分咨询证券投资顾问意见，独立作出投资决策。中银国际证券股份有限公司不承担由此产生的任何责任及损失等。

本报告内含保密信息，仅供收件人使用。阁下作为收件人，不得出于任何目的直接或间接复制、派发或转发此报告全部或部分内容予任何其他人士，或将此报告全部或部分公开发表。如发现本研究报告被私自刊载或转发的，中银国际证券股份有限公司将及时采取维权措施，追究有关媒体或者机构的责任。所有本报告内使用的商标、服务标记及标记均为中银国际证券股份有限公司或其附属及关联公司（统称“中银国际集团”）的商标、服务标记、注册商标或注册服务标记。

本报告及其所载的任何信息、材料或内容只提供给阁下作参考之用，并未考虑到任何特别的投资目的、财务状况或特殊需要，不能成为或被视为出售或购买或认购证券或其它金融票据的要约或邀请，亦不构成任何合约或承诺的基础。中银国际证券股份有限公司不能确保本报告中提及的投资产品适合任何特定投资者。本报告的内容不构成对任何人的投资建议，阁下不会因为收到本报告而成为中银国际集团的客户。阁下收到或阅读本报告须在承诺购买任何报告中所指之投资产品之前，就该投资产品的适合性，包括阁下的特殊投资目的、财务状况及其特别需要寻求阁下相关投资顾问的意见。

尽管本报告所载资料的来源及观点都是中银国际证券股份有限公司及其证券分析师从相信可靠的来源取得或达到，但撰写本报告的证券分析师或中银国际集团的任何成员及其董事、高管、员工或其他任何个人（包括其关联方）都不能保证它们的准确性或完整性。除非法律或规则规定必须承担的责任外，中银国际集团任何成员不对使用本报告的材料而引致的损失负任何责任。本报告对其中所包含的或讨论的信息或意见的准确性、完整性或公平性不作任何明示或暗示的声明或保证。阁下不应单纯依靠本报告而取代个人的独立判断。本报告仅反映证券分析师在撰写本报告时的设想、见解及分析方法。中银国际集团成员可发布其它与本报告所载资料不一致及有不同结论的报告，亦有可能采取与本报告观点不同的投资策略。为免生疑问，本报告所载的观点并不代表中银国际集团成员的立场。

本报告可能附载其它网站的地址或超级链接。对于本报告可能涉及到中银国际集团本身网站以外的资料，中银国际集团未有参阅有关网站，也不对它们的内容负责。提供这些地址或超级链接（包括连接到中银国际集团网站的地址及超级链接）的目的，纯粹为了阁下的方便及参考，连结网站的内容不构成本报告的任何部份。阁下须承担浏览这些网站的风险。

本报告所载的资料、意见及推测仅基于现状，不构成任何保证，可随时更改，毋须提前通知。本报告不构成投资、法律、会计或税务建议或保证任何投资或策略适用于阁下个别情况。本报告不能作为阁下私人投资的建议。

过往的表现不能被视作将来表现的指示或保证，也不能代表或对将来表现做出任何明示或暗示的保障。本报告所载的资料、意见及预测只是反映证券分析师在本报告所载日期的判断，可随时更改。本报告中涉及证券或金融工具的价格、价值及收入可能出现上升或下跌。

部分投资可能不会轻易变现，可能在出售或变现投资时存在难度。同样，阁下获得有关投资的价值或风险的可靠信息也存在困难。本报告中包含或涉及的投资及服务可能未必适合阁下。如上所述，阁下须在做出任何投资决策之前，包括买卖本报告涉及的任何证券，寻求阁下相关投资顾问的意见。

中银国际证券股份有限公司及其附属及关联公司版权所有。保留一切权利。

中银国际证券股份有限公司

中国上海浦东
银城中路 200 号
中银大厦 39 楼
邮编 200121
电话: (8621) 6860 4866
传真: (8621) 5888 3554

相关关联机构:

中银国际研究有限公司

香港花园道一号
中银大厦二十楼
电话: (852) 3988 6333
致电香港免费电话:
中国网通 10 省市客户请拨打: 10800 8521065
中国电信 21 省市客户请拨打: 10800 1521065
新加坡客户请拨打: 800 852 3392
传真: (852) 2147 9513

中银国际证券有限公司

香港花园道一号
中银大厦二十楼
电话: (852) 3988 6333
传真: (852) 2147 9513

中银国际控股有限公司北京代表处

中国北京市西城区
西单北大街 110 号 8 层
邮编: 100032
电话: (8610) 8326 2000
传真: (8610) 8326 2291

中银国际(英国)有限公司

2/F, 1 Lothbury
London EC2R 7DB
United Kingdom
电话: (4420) 3651 8888
传真: (4420) 3651 8877

中银国际(美国)有限公司

美国纽约市美国大道 1045 号
7 Bryant Park 15 楼
NY 10018
电话: (1) 212 259 0888
传真: (1) 212 259 0889

中银国际(新加坡)有限公司

注册编号 199303046Z
新加坡百得利路四号
中国银行大厦四楼(049908)
电话: (65) 6692 6829 / 6534 5587
传真: (65) 6534 3996 / 6532 3371