



头豹
LeadLeo

2026年 医药早研智能体行业词条报告

头豹分类/科学研究和技术服务/研究和试验发展/医学研究和
试验发展

早研智擎——AI驱动下的药物发现范式跃迁与效率革命 头豹词条报告系列



廖子烨 · 头豹分析师

2026-07-09

未经平台授权，禁止转载

行业分类： 科学研究和技术服务/医学研究和试验发展

摘要 医药早研智能体是面向药物研发早期阶段的专业型AI系统，强调以研发目标为牵引，联动多方资源，解决数据分散、成本高等痛点，提升研发效率。其行业特征包括：技术价值集中在早研效率提升；产品形态从单点模型走向任务编排；发展前景明确但短期验证周期较长。2020-2025年，行业市场规模由0.19亿增至8.53亿，预计2026-2030年将增至40.47亿，这得益于创新药研发活跃度提升、AI早研平台商业化加速，以及未来创新药审评提速、商业化兑现率提升等因素。

行业定义

医药早研智能体是指面向药物研发早期阶段，围绕靶点发现与验证、疾病机制解析、文献与多组学证据整合、先导分子筛选及优化方案生成等任务，构建的具备信息检索、知识推理、工具调用和多步骤任务协同能力的专业型人工智能系统。与单一预测模型不同，医药早研智能体更强调以研发目标为牵引，在研究人员监督下，联动数据库、算法模型与专业软件，对复杂研发问题进行拆解、分析和迭代。该行业的出现，源于医药早研环节长期存在数据来源分散、证据整合成本高、候选方案筛选周期长、跨学科工具使用门槛高等痛点。其实际作用，是将传统人逐项检索、人工判断和分散调用工具的工作流，转化为更连续的“问题理解-证据汇总-方案生成-结果反馈”流程，从而提升早期研发的知识处理效率、假设生成能力与候选分子探索效率。

行业分类

医药早研智能体的核心价值体现在基于药物发现早期任务，将文献、组学数据、靶点知识、分子结构、药效毒性预测模型及研发工具串联为可执行的任务流程。因此，行业分类更适合从研发任务环节维度展开。美国食品药品监督管理局（FDA）在药物开发人工智能的讨论文件中，将药物发现阶段的AI应用集中描述为靶点识别、选择与优先级排序，以及化合物筛选和药物设计；学术研究综述也将大语言模型与自主智能体在化学和药物发现中的作用归纳为分子设计、性质预测、合成规划、工具调用与自动化实验协同等方向。

根据研发任务环节分类

按研发任务环节分类，是医药早研智能体最基础、也最符合产业落地逻辑的分类方式。医药早研覆盖从疾病机制理解、靶点发现、候选分子产生到早期安全性和成药性评估的连续流程，不同环节的数据类型、模型能力和结果验证方式差异明显。

靶点发现与疾病机制智能体

该类智能体主要服务于药物研发的起点环节，围绕疾病机制、靶点关联性、通路网络、遗传证据和多组学证据进行自动检索、整合与推理。其功能包括文献证据抽取、基因/蛋白与疾病关系分析、靶点可成药性初筛、靶点优先级排序等。这类智能体能够将分散在论文、专利、公共数据库和组学数据中的证据转化为结构化判断，帮助研究人员更快形成“为什么选择该靶点、该靶点是否具备验证基础、后续实验应如何设计”的初步假设。

分子生成与虚拟筛选智能体

该类智能体面向候选分子发现阶段，主要围绕小分子、抗体、肽类或其他治疗分子开展结构生成、活性预测、分子对接、相似性检索和虚拟筛选。其核心作用是从大规模化合物空间中快速筛选可能与目标靶点发生作用的候选分子，并结合亲和力、选择性、毒性风险和合成可行性等指标进行多目标优化。这类智能体更类似“分子设计助手”，能够提高候选方案生成效率，其产业价值取决于预测结果与实验验证之间的一致性。

ADMET（吸收、分布、代谢、排泄与毒性）与早期成药性评估智能体

该类智能体主要用于候选分子进入更深入实验前的早期风险识别，覆盖吸收、分布、代谢、排泄、毒性以及药代动力学（PK）与药效动力学（PD）相关预测。其功能帮助研究团队在早期压缩低质量候选分子，降低后续实验资源浪费。这类智能体更偏向研发决策支持，其价值

体现在提升候选分子的可开发性判断效率，而不是替代实验室毒理或正式临床前研究。

行业特征

医药早研智能体的行业特征包括技术价值集中在早研效率提升、产品形态从单点模型走向任务编排、发展前景明确但短期验证周期较长。

技术价值集中在早研效率提升

行业实践表明，医药早研智能体的核心需求源于药物发现早期环节的高不确定性，具体覆盖靶点发现、靶点优先级排序、化合物筛选及药物设计等任务。该智能体并非通用大模型在医药行业的简单迁移，而是围绕早期研发假设生成、候选方案筛选及证据链整理任务构建的专业工具。其行业价值集中体现于缩短信息处理与候选方案形成的周期，降低早期决策的时间成本。需明确的是，医药早研智能体无法替代湿实验验证、临床前研究及监管认可流程，其价值边界聚焦于研发效率的提升而非实验结果的直接输出。

产品形态从单点模型走向任务编排

医药早研智能体与传统AI药物发现模型的本质差异，在于其能够拆解研发任务、调用专业工具并串联多步骤流程。文献综述表明，大语言模型驱动的自主智能体已在化学领域承担论文信息抽取、自动化实验平台接口调用及合成路线规划等任务。另有研究提出，多智能体框架可通过规划器生成高层研发思路，整合领域知识完成药物发现相关的机器学习建模任务。由此推断，医药早研智能体的发展不仅依赖算法性能突破，更需适配工具链、强化任务规划能力并建立可复现的结果评价机制，产品形态正从单一功能模型向编排式智能体演进。

发展前景明确但短期验证周期较长

医药早研智能体具备较明确的发展前景，原因在于药物发现长期面临研发周期长、成本高及失败率高的困境，早研阶段的错误判断会在后续临床前与临床阶段被放大成本。FDA、学术界及产业界持续关注AI/ML技术在靶点选择、化合物筛选、药物设计及毒性预测等任务中的应用。然而，该智能体的商业价值不能仅凭演示效果评估，而需考察其能否持续产生经实验验证的候选分子、可靠的靶点假设及可复用的研发流程。行业发展需依次解决工具层落地、流程层深化及闭环研发长期验证等问题。短期收入可能来源于软件订阅与项目服务，中长期价值取决于智能体对研发成功率和资产转化效率的实际提升作用。

发展历程

医药早研智能体的发展主线呈现从“机器学习辅助药物发现”向“大模型驱动的多步骤研发任务执行”的演进路径。早期行业重点聚焦于靶点识别、性质预测及虚拟筛选等单点模型应用。AlphaFold等结构预测模型的突破显著提升了蛋白结构数据的可获得性。生成式AI与大语言模型成熟后，系统开始从单一预测工具转向可调用数据库、模型、代码及实验工具的智能体形态。当前行业处于高速发展期，但尚未进入成熟期，核心制约因素包括实验验证、模型可解释性、数据安全及监管接受度，这些因素仍将决定其产业化边界。

萌芽期 · 2019-01-01~2020-01-01

机器学习开始系统性进入药物发现流程，应用范围覆盖靶点验证、预后生物标志物识别、分子性质预测等环节。2020年，MIT等研究团队在《Cell》发表深度学习抗生素发现研究，通过模型筛选发现具有抗菌活性的Halicin，显示AI可用于大规模化合物空间搜索。这一阶段尚未形成严格意义上的“早研智能体”，行业主要以单点AI模型和算法工具为主。其核心变化在于，AI开始从文献研究和计算化学辅助工具，进入可验证的药物发现任务。机器学习的价值主要体现在对明确问题进行预测和筛选，例如活性预测、靶点关联判

断、候选化合物优先级排序等。但这一时期模型之间相对割裂，难以自主完成任务拆解、工具调用和结果反馈，因此属于医药早研智能体的技术准备阶段。

启动期 · 2021-01-01~2024-01-01

2021年，AlphaFold2在《Nature》发表，提出可在无相似结构情况下实现接近原子级准确度的蛋白结构预测方法。2022年，AlphaFold蛋白结构数据库扩展至约2亿个蛋白结构预测结果，显著提高结构生物学数据的可获得性。2023年，FDA发布AI用于药物及生物制品开发的讨论文件，将早期药物发现列为AI应用活跃领域，覆盖靶点识别、靶点选择、优先级排序、化合物筛选和药物设计。2024年，AlphaFold3发表，可预测蛋白、核酸、小分子、离子等复合物的联合结构。

这一阶段是医药早研智能体行业的启动期，核心变化是早研AI从单点预测工具逐步具备场景化落地基础。AlphaFold2及其数据库扩展提升了蛋白结构信息的可获得性，推动靶点可成药性判断、蛋白-配体相互作用分析和结构基础药物设计进入更高效率阶段；AlphaFold3进一步把结构预测从单一蛋白扩展至多类生物分子复合物，为分子设计和相互作用判断提供更强工具基础。该阶段的主要产品仍以模型、平台和专业工具为主，智能体能力刚开始出现，行业尚未形成稳定商业范式。

高速发展期 · 2025-01-01~至今

文献综述指出，大语言模型自主智能体已在化学领域用于论文抓取、自动化实验室接口、合成规划等任务。药物发现相关智能体研究开始强调多智能体协同、检索增强生成（RAG）、工具调用和端到端任务执行。行业产品开始从“模型能力展示”转向“知识检索、分子设计、ADMET预测、代码执行、实验方案生成”的流程化组合。

当前医药早研智能体进入高速发展期。行业竞争重点开始从单一模型性能，转向能否把文献、数据库、分子生成模型、ADMET预测、代码环境和实验工具串联为可执行工作流。该阶段的核心特征是“任务编排能力”成为产品价值中心，智能体参与早研假设生成、候选方案筛选和分析报告输出。未来行业将沿着工具层标准化、企业私有化部署和实验闭环协同三个方向发展，但成熟度仍取决于数据质量、验证体系、模型可解释性和药企内部研发系统集成能力。

产业链分析

医药早研智能体产业链的发展现状

医药早研智能体行业产业链上游为AI算力、云计算、医药数据与专业研发工具基础设施环节，主要作用早研智能体提供模型训练与推理算力、生命科学数据资源、药物计算工具和数据安全底座；产业链中游为医药早研智能体平台与AI药物发现服务商环节，主要作用将数据、模型、药物计算工具和药化经验编排为靶点论证、分子生成、虚拟筛选、ADMET预测和实验验证工作流；产业链下游为药企、生物科技公司、合同研究组织与科研转化客户环节，主要作用在具体创新药管线中提出早研需求，并将智能体嵌入候选分子优选、成药性评估和新药临床试验申请前决策节点。

医药早研智能体行业产业链主要有以下核心研究观点：

产业链瓶颈由“资源供给”转向“研发可用性验证”，中游平台的议价能力取决于项目交付结果

1. 数据、算力和专业工具已具备基础供给，但产业链核心约束在于能否转化为可验证研发结果。

上游资源已形成一定基础，例如国家基因组科学数据中心已发布15大数据资源体系、40个数据库，覆盖组学原始数据、基因组序列、基因组变异数据和生物信息工具等内容；但医药早研智能体并不能直接使用分散数据，仍需完成数据清洗、权限管理、研发语义映射和实验条件标注。中游平台的议价能力因此不来自单一模型或数据库入口，而来自将数据、模型、药化规则和实验验证串成项目流程。晶泰科技2025年药物发现解决方

案收入5.38亿元，同比增长418.9%；华为联合望石智慧发布的AI药研解决方案覆盖苗头化合物发现至临床候选化合物优化流程，并缩短苗头化合物发现周期。由此判断，产业链定价权更容易向能交付候选分子筛选、成药性评估和实验验证结果的平台方集中。

需求释放不取决于渠道铺设，而取决于早研智能体能否嵌入药企管线节点

1. 下游创新研发强度提供需求基础，但客户付费主要绑定靶点论证、分子优选和新药临床试验申请前决策节点。

2025年药审中心共受理各类药品注册申请20,149件，审结19,375件，全年批准1类创新药76个，显示创新研发项目数量和复杂度同步提升。英矽智能2025年药物发现业务收入2,495.2万美元、软件解决方案收入491.3万美元，并披露Pharma.AI平台已产生逾20项处于临床或新药临床试验申请申报阶段的药物资产；成都先导2026年投资者交流中披露，HAILO平台已在分子胶等项目中验证加速优化能力，并通过投资摩熵智能增强AI药物发现平台HAILO和HANDS的数据维度与技术支持。由此判断，早研智能体的商业化并非“工具销售”逻辑，而是“项目节点嵌入”逻辑；能在真实管线中形成可复用交付结果，将决定产业链规模化速度。

上 产业链上游环节分析

生产制造端

AI算力、云计算、医药数据与专业研发工具基础设施

上游厂商

华为云计算技术有限公司	阿里云计算有限公司	腾讯云计算（北京）有限责任公司	北京百度网讯科技有限公司	北京火山引擎科技有限公司
曙光信息产业股份有限公司	浪潮电子信息产业股份有限公司	新华三技术有限公司	英伟达半导体科技（上海）有限公司	
英特尔（中国）有限公司	超威半导体（中国）有限公司	微软（中国）有限公司	深圳华大智造科技股份有限公司	深圳华大基因股份有限公司
北京诺禾致源科技股份有限公司	赛默飞世尔科技（中国）有限公司	安捷伦科技（中国）有限公司	沃特世科技（上海）有限公司	

上游分析

上游数据资源正在从分散积累转向合规汇聚，数据治理能力决定早研智能体可用性

1. 本土生命科学数据底座已具备规模基础，但可直接服务早研智能体的数据仍需再加工。

国家基因组科学数据中心已形成15大数据资源体系、40个数据库，覆盖生物项目数据、生物样本数据、组学原始数据、基因组序列、基因组变异数据、生物信息工具等内容；国家人口健康科学数据仓储覆盖项目1,282个、数据集19,078个、数据总量1.20PB，涉及基础医学、临床医学、药学、公共卫生、中医药学等方向。上述资源为靶点识别、疾病机制研究、组学证据整合和药物安全性分析提供基础数据供给。但早研智能体并不能直接将“数据存在”转化为“研发可用”，仍需完成数据清洗、医学语义映射、实验条件标注、证据等级区分及跨库关联等再加工流程。

2. 合规与标准化是数据资源转化为产业资产的关键环节。

医药早研智能体涉及人类遗传资源、临床表型、组学数据和实验记录等高敏感数据，数据流通和使用必须满足权限管理、备份留痕和风险审查要求。《人类遗传资源管理条例实施细则》要求相关单位加强管理制度建设，并对涉及人类遗传资源的研究目的和研究方案进行审查。《“数据要素×”三年行动计划（2024-2026年）》提出提升群众就医便捷度，推进电子病历数据共享，在医疗机构间推广检查检验结果数据标准统一和共享互认。由此看，上游数据的产业壁垒不止在于单一数据规模的积累，更在于能否在合规前提下形成可调用、可追溯、可审计的研发知识资产，以支撑中游智能体完成连续推理和任务编排。

中 产业链中游环节分析

品牌端

医药早研智能体平台与AI药物发现服务商

中游厂商

深圳晶泰科技有限公司

英矽智能科技（上海）有限公司

北京深势科技股份有限公司

北京望石智慧科技有限公司

百图生科（北京）智能技术有限公司

北京分子之心科技有限公司

星药科技（北京）有限公司

北京英飞智药科技有限公司

南京燧坤智能科技有限公司

冰洲石生物科技（上海）有限公司

上海湃隆生物科技有限公司

剂泰科技（北京）股份有限公司

广州费米子科技有限责任公司

上海宇道生物技术有限公司

成都先导药物开发股份有限公司

维亚生物科技（上海）股份有限公司

康龙化成（北京）新药技术股份有限公司

上海药明康德新药开发有限公司

中游分析

中游技术路线正从单点AI模型转向“分子生成平台+多智能体编排+干湿实验闭环”

以英矽智能和望石智慧为代表的中游平台，正在从单一分子生成工具升级为早研任务执行系统。

早期AI药物发现工具多集中在虚拟筛选、分子生成或性质预测等单点任务，难以覆盖从靶点口袋分析、分子设计、成药性评估到实验反馈的连续流程。英矽智能Pharma.AI平台则围绕靶点发现、生成化学、临床试验结果预测等方向形成软件和药物发现业务。望石智慧技术平台已覆盖MolVado多模态AI3D分子生成模型、化合物结构与分子信息提取工具、蛋白-配体相互作用分析、扭转能扫描、子结构检索等模块。公开信息显示，望石智慧将MolVortex定义为以多模态AI大模型为基座、以药物化学思维链为基础的小分子药物智能设计研发平台，可根据自然语言需求拆解任务、调用子工具进行分子设计和评估，并与研发人员循环交互，最终落脚于湿实验验证闭环。由此看，中游技术路线正将模型、工具和药化经验组织成可执行、可迭代的研发流程。

真实药企项目验证正在成为中游厂商技术成熟度的核心判断标准。

医药早研智能体的价值不能仅以生成分子数量或模型指标衡量，而需看其能否进入药企真实项目，并支撑药企的化合物发现、先导优化及新药临床试验申请（IND）前研究。以英矽智能与齐鲁制药合作为例，双方于2026年达成总额9.31亿港元的药物研发合作，合作内容围绕英矽智能Pharma.AI平台与齐鲁制药研发资源展开，体现出生成式AI药物发现平台正在进入药企真实管线开发环节。此外，在复宏汉霖与深势科技的合作案例中，其聚焦AI与物理建模结合，应用于潜在FIC小分子、ADClinker切割位点预测、抗体发现与成药性优化等方向。上述案例说明，中游厂商的竞争重点正在从“算法可用”转向“平台能否嵌入药企工作流并形成研发结果”。

产业链下游环节分析

渠道端及终端客户

药企、生物科技公司、合同研究组织与科研转化客户

渠道端

江苏恒瑞医药股份有限公司

百济神州（北京）生物科技有限公司

信达生物制药（苏州）有限公司

上海复星医药（集团）股份有限公司

石药控股集团有限公司

正大制药投资（北京）集团有限公司

上海君实生物医药科技股份有限公司

翰森製藥集團有限公司

中山康方生物科技有限公司	荣昌生物制药（烟台）股份有限公司	再鼎医药（上海）有限公司	上海和黄药业有限公司
四川科伦博泰生物医药股份有限公司	上海药明康德新药开发有限公司	康龙化成（北京）新药技术股份有限公司	杭州泰格医药科技股份有限公司
北京昭衍新药研究中心股份有限公司	辉瑞投资有限公司	罗氏研发（中国）有限公司	阿斯利康投资（中国）有限公司
诺华（中国）生物医学研究有限公司	默沙东研发（中国）有限公司		

下游分析

下游需求由创新药研发强度驱动，核心客户从“工具试用”转向“项目嵌入”

- 1. 创新药研发和管线扩张形成早研工具需求，药企是核心使用方。**

早研智能体主要服务于靶点选择、分子生成、虚拟筛选、ADMET预测和临床前候选物优化等前置环节，其需求强度与创新研发项目数量直接相关。2025年药审中心共受理各类药品注册申请20,149件，同比增长3%；审结各类注册申请19,375件，同比增长6.11%；全年批准1类创新药76个，其中新机制新靶点药物11个，均创历史新高。企业侧看，恒瑞医药2025年研发支出87.24亿元，较2024年的82.28亿元继续提升；百济神州2025年营业总收入382.05亿元，同比增长40.4%，归母净利润14.22亿元，经营转正后仍维持较大规模产品和管线推进能力。由此看，下游客户并非购买通用AI工具，而是希望通过早研智能体压缩靶点验证、苗头化合物发现、先导优化和临床前决策的试错成本。
- 2. 新药临床试验申请前决策窗口被压缩，核心客户更倾向于把早研智能体嵌入具体管线节点。**

下游客户从“工具试用”转向“项目嵌入”，核心原因是临床试验申请前的证据准备、风险评估和申报沟通正在前置化。2025年，国家药监局明确对符合要求的创新药临床试验申请，在受理后30个工作日内完成审评审批，适用对象包括中药、化学药品、生物制品1类创新药临床试验申请，这意味着药企需要在新药临床试验提交前更充分地完成靶点合理性、候选分子质量、非临床风险和试验启动条件准备。在华为联合望石智慧的案例中，其发布的AI药研解决方案已覆盖从苗头化合物发现到临床候选化合物优化流程，为创新药开发提供了全链条解决方案。由此看，早研智能体的采购逻辑正在从“单点试用”转向“嵌入靶点论证、分子优选、成药性评估和新药临床试验前的决策节点”。

行业规模

医药早研智能体行业规模的概况

2020年—2025年，医药早研智能体行业市场规模由0.19亿人民币元增长至8.53亿人民币元，期间年复合增长率114.65%。预计2026年—2030年，医药早研智能体行业市场规模由12.55亿人民币元增长至40.47亿人民币元，期间年复合增长率34.00%。

医药早研智能体行业市场规模历史变化的原因如下：

创新药研发活跃度提升，扩大了早研智能体的潜在项目需求池

- 1. 创新药申报与临床试验项目增加，带动早研阶段工具需求上升。**

2020年至2025年，医药早研智能体市场规模由0.19亿元增长至8.53亿元，核心驱动力源于创新药研发活动的持续活跃。靶点论证、候选分子筛选、ADMET预测及IND前风险识别等早研任务需求量与创新药项目数量呈现强相关性。2025年，国家药监局药品审评中心共受理各类药品注册申请20,149件，全年批准1类创新药76个，其中新机制新靶点药物11个，两项数据均创历史新高，表明创新药研发项目仍处于高活跃状态。
- 2. 复杂创新项目占比维持高位，提高了智能体适配比例。**

2024年注册分类为1类的药物共登记临床试验1,735项，占新药临床试验总数68.3%；细胞和基因治疗类产品登记临床试验115项，较2023年增加42.0%。此类项目在研发早期更依赖靶点证据整合、分子设计和成药性评估等复杂任务，传统研发工具难以满足效率需求，从而推动早研智能体从“可选工具”逐步进入项目早期决策流程。

AI早研平台商业化加速，使市场规模从概念验证进入收入兑现阶段

1. 平台型企业收入兑现强化了行业规模增长的可验证性。

2020年至2023年，行业规模基数较低，主要处于AI模型、虚拟筛选和分子生成工具的自由试用与POC验证阶段。2024年至2025年，规模增速明显抬升，核心驱动力来自AI早研平台逐步形成稳定的项目收入和里程碑收入。晶泰科技2025年药物发现解决方案收入达5.38亿元，同比增长418.9%，表明AI药物发现服务已从研发演示阶段转向通过真实项目交付实现商业化兑现。

2. 技术供给从单点模型走向流程化平台，提高了单项目付费强度。

早期AI药物发现工具以单点模型为主，难以支撑完整研发流程。当前，中游平台产品形态已从分散工具升级为覆盖苗头化合物发现至临床候选化合物优化的流程化平台。如望石智慧联合华为发布的AI药研解决方案，可将苗头化合物发现周期从传统的12-18个月缩短至1-3个月。由此看，市场规模扩张的核心逻辑在于“项目嵌入深度提升”，而非简单的软件订阅铺量。平台方通过嵌入更多早研环节并提升单项目交付价值，推动单项目平均付费强度持续提升。

医药早研智能体行业市场规模未来变化的原因主要包括：

创新药审评提速与新药临床试验申请前准备前置，将继续扩大早研智能体的应用窗口

1. IND/临床试验相关早研项目基数稳步增长，为智能体提供持续的需求支撑。

2026-2030年，受注册申请活跃度延续及创新药审评审批机制持续优化带动，临床试验/IND相关早研项目储备预计由4,075件增至5,071件，行业需求基础进一步夯实。2025年，国家药监局发布第86号公告，明确对符合要求的1类创新药临床试验申请在受理后30个工作日内完成审评审批。审评提速降低了药企的项目启动时间成本，有助于刺激更多创新药项目进入IND申报阶段，从而为上游AI早研工具创造增量需求。

2. 新药临床试验申请前证据质量要求提升，使智能体更容易嵌入关键节点。

创新药临床试验申请的30日审评并不意味着申报前准备工作量减少。相反，更短的审评周期要求申请人在提交前更为充分地完成靶点合理性论证、候选分子质量验证、非临床风险评估及试验方案规划等前置工作。未来早研智能体的需求将更多来自靶点论证、分子优选、成药性评估和IND前证据整理等环节，而非简单的文献问答或模型试用。这种“门槛提升型”需求结构比“数量增长型”对行业规模的拉动作用更为显著。

商业化兑现率和单项目付费强度同步提升，将成为未来规模增长的主要弹性来源

1. AI早研智能体深度嵌入研发流程，推动单项目付费强度持续提升。

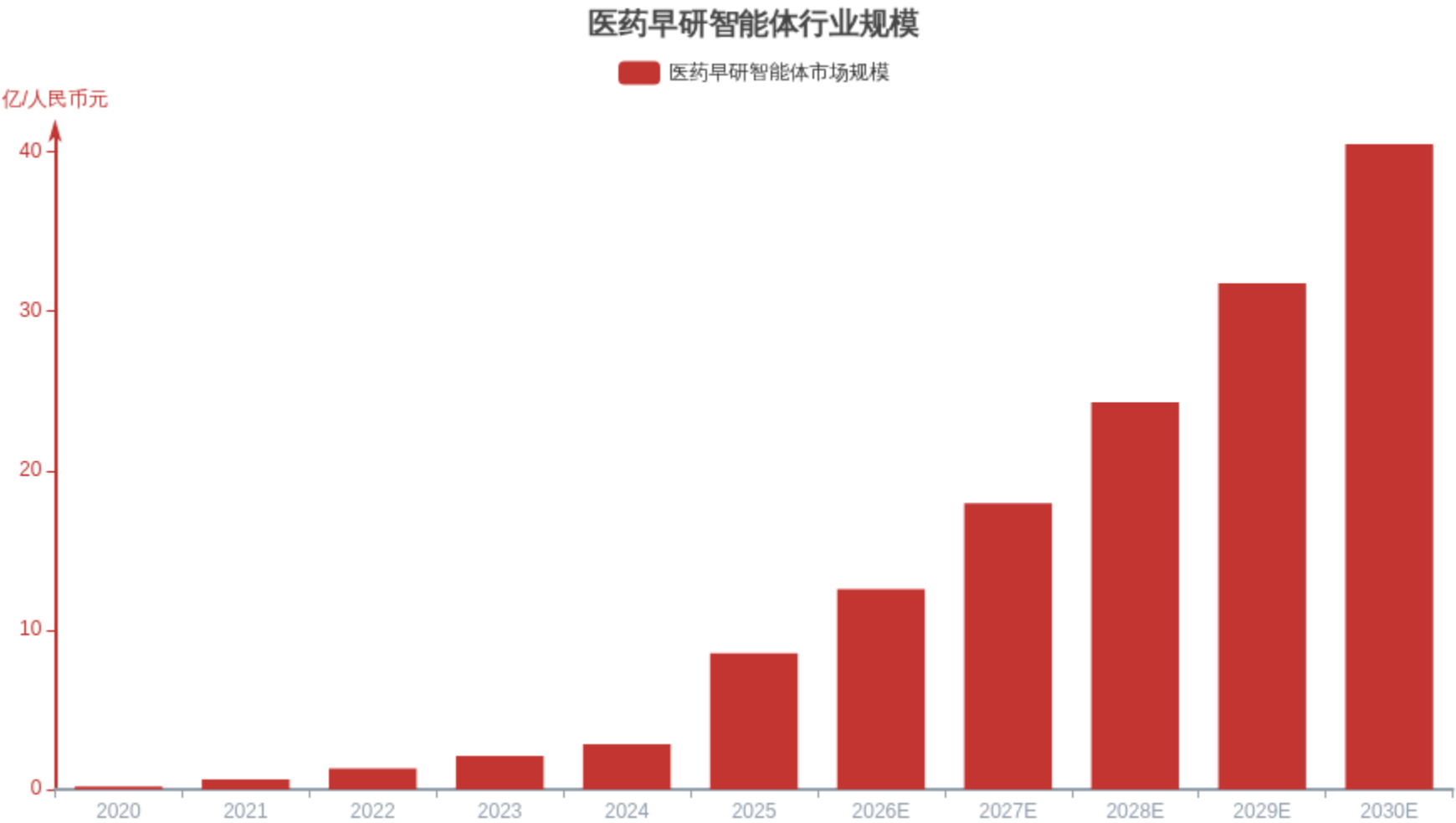
预计单项目AI早研智能体付费强度将随服务边界拓展而持续提升。核心原因在于，AI早研智能体的价值已不再局限于单点模型调用，而是从分子生成、虚拟筛选、性质预测等基础环节，逐步延伸至靶点证据整合、先导化合物优化、ADMET预测、成药性评估及IND前决策支持等更贴近研发关键节点的高价值环节。随着智能体由工具型能力向研发流程深度嵌入，其在单个项目中承担的技术服务内容、决策辅助价值和交付深度同步提升，进而打开更高的客户付费空间。从企业收入结构看，英矽智能2025年药物发现业务收入2,495万美元，软件解决方案收入491万美元，表明AI药物发现企业已逐步形成“项目服务+软件平台”并行的复合商业化模式。

2. 早研智能体的商业化兑现能力将随外部平台采购、联合研发和软件解决方案收入增加而逐步增强。

核心原因在于，药企和生物科技企业对于早研智能体的应用正从概念验证转向真实管线节点嵌入，采购需求逐渐由试点型工具使用升级为研发流程中的持续性服务。随着望石智慧、晶泰科技、英矽智能等平台逐步进入药企的真实研发项目并形成可验证的交付成果，外部采购和联合研发模式正在加速替代内部自研实验和外包服务。政策端，《数据要素×三年行动计划（2024-2026年）》推进医疗数据共享互认标准的统一，有望进一步降低平台方与药企间的数据对接门槛，加速商业化兑现进程。预计行业规模将由2026年的12.55亿元增长至2030年的40.47亿元。

规模预测

医药早研智能体行业规模



政策梳理

	政策名称	颁布主体	生效日期	影响
	《国家药监局关于“人工智能+药品监管”的实施意见》	国家药监局	2026-04-02	8
政策内容	推进人工智能与药品监管融合，建设高质量数据集、垂直大模型和智能体，应用于审评审批、监督检查等场景。			
政策解读	该政策说明药品监管体系开始系统引入AI和智能体能力，对医药早研智能体形成间接利好。监管侧AI化会推动行业形成更标准化的数据、证据和审评交互体系，企业侧智能体若能围绕审评要求输出可追溯证据，将更容易进入药企研发流程。			
政策性质	指导性政策			

	政策名称	颁布主体	生效日期	影响
	《国家药监局关于优化创新药临床试验审评审批有关事项的公告》	国家药监局	2025-09-12	8
政策内容	对符合要求的1类创新药临床试验申请设置30日通道，要求申请人提前完成申报材料、伦理、项目立项和风险评估准备。			
政策解读	该政策压缩创新药新药临床试验申请审评审批周期，使药企在临床试验申请前必须更快完成证据整理、风险判断和项目准备。早研智能体可嵌入靶点论证、候选分子优选、成药性评估和新药临床试验申请前资料准备节点，需求从“工具试用”转向“项目嵌入”。			
政策性质	鼓励性政策			

	政策名称	颁布主体	生效日期	影响
	《国务院关于深入实施“人工智能+”行动的意见》	国务院	2025-08-21	9
政策内容	推动人工智能与科学技术、产业发展等领域深度融合，支持科学大模型、智能化研发工具和平台推广应用。			
政策解读	该政策为医药早研智能体提供顶层政策依据。其重点不只是支持通用AI，而是鼓励AI赋能科研范式、技术研发和产业场景落地，有利于AI制药平台、药物计算平台、分子生成工具和研发智能体从概念验证进入真实研发项目。			
政策性质	指导性政策			

	政策名称	颁布主体	生效日期	影响
	《支持创新药高质量发展的若干措施》	国家医保局、国家卫生健康委	2025-07-01	8
政策内容	从研发支持、医保目录、商保目录、真实世界研究、挂网和临床应用等方面提出支持创新药发展的16条措施。			
政策解读	该政策强化创新药从研发到支付、准入和临床使用的全链条支持，有利于提高药企研发投入确定性。对医药早研智能体而言，政策鼓励“真创新”和差异化创新，将推动药企更重视早期靶点选择、差异化分子设计和临床价值判断。			
政策性质	鼓励性政策			

	政策名称	颁布主体	生效日期	影响
	《“数据要素×”三年行动计划（2024-2026年）》	国家数据局等17部门	2023-12-31	7
政策内容	在医疗健康领域推进电子病历数据共享、检查检验结果标准统一和共享互认，有序释放健康医疗数据价值。			
政策解读	该政策有利于改善医药早研智能体上游数据基础。虽然临床、组学和医疗数据仍受合规约束，但政策明确推动医疗健康数据标准化和融合创新，为疾病机制研究、真实世界证据分析、靶点发现和药物安全性评估提供更好的数据环境。			
政策性质	指导性政策			

竞争格局

医药早研智能体竞争格局概况

医药早研智能体行业呈现以下梯队情况: 第一梯队公司有深圳晶泰科技有限公司、英矽智能科技（上海）有限公司、北京望石智慧科技有限公司、北京深势科技股份有限公司等; 第二梯队公司有剂泰科技（北京）股份有限公司、成都先导药物开发股份有限公司、百图生科（北京）智能技术有限公司、北京分子之心科技有限公司等; 第三梯队公司有星药科技（北京）有限公司、北京英飞智药科技有限公司、南京燧坤智能科技有限公司、上海湃隆生物科技有限公司等。

医药早研智能体行业竞争格局形成的历史原因如下:

行业早期竞争并非关注单一模型，而是围绕“药物研发问题能否被流程化拆解”形成分层

1. 头部企业竞争重心由模型性能转向研发流程覆盖能力。

医药早研任务链条涵盖靶点理解、分子设计、性质预测、成药性评估及实验验证等多个环节，单一算法模型只能覆盖局部环节，难以形成端到端的研发支撑能力。因此，早期形成领先地位的企业通常并非单纯拥有高性能模型，而是能够将模型、工具和药化经验组织成可复用的研发流程。望石智慧的MolVado（多模态AI3D分子生成模型）与MolVortex（多智能体药物设计平台）覆盖苗头化合物发现至临床候选化合物优化的全流程；深势科技的Hermite药物计算平台融合人工智能、物理建模和高性能计算，为临床前药物研发提供包括蛋白结构预测、药靶结合模式预测、苗头化合物筛选及先导化合物优化等核心功能模块。上述特征表明，头部企业的竞争起点已从单一“模型性能”转向综合“流程覆盖度”。

2. 垂直技术路线的多元化带来多梯队并存。

不同早研环节对技术能力的要求存在显著差异：小分子生成依赖药化经验与结构建模，蛋白设计依赖大模型和结构预测，AI递送需要材料学和制剂学的知识储备，结构生物学驱动的CRO早研服务则强调项目交付能力。剂泰科技的NanoForge平台可在3个月内实现小分子药物的剂型研发，并可靶向肝脏、肌肉、肿瘤及免疫系统等8个器官或组织的精准药物递送。此外，百图生科聚焦生命科学AI大模型，分子之心自主研发AI蛋白质优化与设计平台MoleculeOS。多技术路线的并存使行业未能形成单一路线的垄断，而是呈现出多梯队分化的竞争态势。

商业化验证差异拉开企业梯队，真实药企项目比技术展示更能决定竞争位置

1. 收入、客户和盈利验证加速兑现，头部AI制药企业率先拉开梯队差距。

早期AI制药企业普遍面临“模型有效但收入不稳”的困境，竞争格局的真正分层发生在此类企业开始获得药企合作、项目里程碑、软件平台收入和授权交易之后。晶泰科技2025年药物发现解决方案收入达5.38亿元，同比增长418.9%，累计已覆盖全球前20大药企中的17家，并于2025年首次实现年度盈利。英矽智能2025年药物发现业务收入达2,495.2万美元，软件解决方案业务收入为491.3万美元，Pharma.AI软件平台客户已覆盖全球前20大药企中的13家。上述头部企业在收入规模、客户覆盖和盈利验证层面的数据表现，使其在梯队分化中率先脱离概念验证阶段。

2. 技术型平台凭借标杆客户、真实项目和交付结果，形成商业化竞争力。

除了已形成明确财务表现的头部企业，部分技术型平台更多依靠药企合作、解决方案落地和项目结果来证明竞争能力。望石智慧与华为联合发布AI药研解决方案，依托华为昇腾、鲲鹏技术底座实现自主创新AI药研模型的首次生产业务验证，同时与广药集团、翰森制药等药企在AI小分子药物早期研发领域建立了深度合作关系。上述标杆合作使望石智慧在商业化能力维度上具备了与上市头部企业竞争的能力。由此看，行业梯队划分不能只看企业是否已经形成大规模收入，还要看其能否通过标杆客户、真实项目和可复核结果验证平台能力；能够进入药企研发流程并形成项目结果的企业，更容易在后续竞争中获得持续订单和生态合作机会。

医药早研智能体行业竞争格局未来变化的趋势如下：

行业不会快速走向单一垄断，而会形成“平台型龙头+垂直技术公司+服务型承接方”的错位竞争

1. 不同早研任务对应不同的能力结构组合，单一企业难以覆盖全场景。

小分子药物设计需要药化经验和结构建模，蛋白设计依赖大模型和结构预测，递送制剂优化需要材料、制剂和高通量筛选能力，CRO早研服务则强调客户项目和实验交付。不同技术路线对应的能力壁垒和商业化路径存在明显差异，企业竞争优势也开始向细分场景沉淀。如剂泰科技2026年以AI纳米递送平台NanoForge登陆港股，其平台已在全球拥有超过30个制药及生物技术合作伙伴。说明AI早研竞争正在从传统分子发现延伸到递送、制剂和临床前优化等细分场景。

2. 平台型企业会占据综合项目入口，垂直企业仍可通过技术深度获得订单。

平台型企业更容易争取药企早研入口，原因在于药企希望减少多工具切换、数据重复验证和项目管理成本，更倾向选择能承接连续研发任务的综合平台；垂直企业仍有空间，原因在于蛋白设计、递送优化、结构预测、自由能计算等环节具有较高专业门槛，单一综合平台难以完全替代细分技术能力。由此判断，晶泰科技、英矽智能、望石智慧、深势科技更可能争夺药企早研平台入口；百图生科、分子之心、剂泰科技等更可能在蛋白设计、生命科学模型、递送优化等场景形成差异化位置。未来行业竞争格局将呈现平台化整合与垂直化深耕并存的错位竞争，而非简单价格竞争或单一龙头垄断。

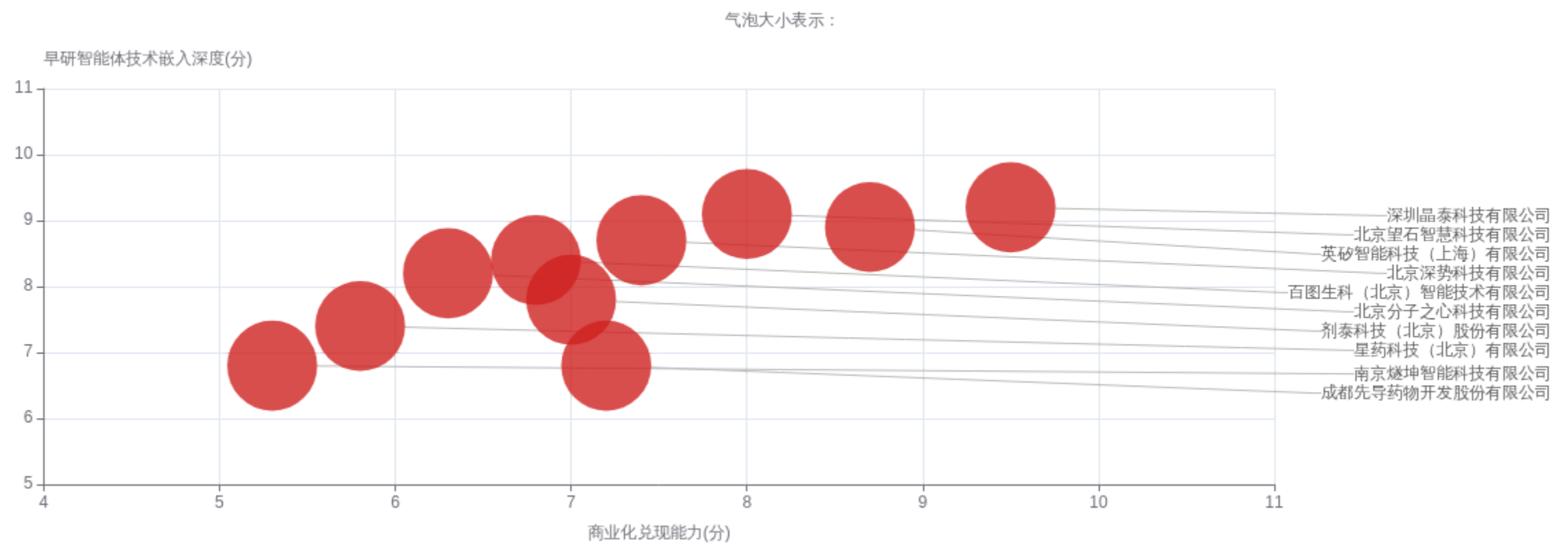
竞争重心将从“模型能力证明”转向“项目结果兑现”，商业化弱的企业将面临出清压力

1. 早研智能体竞争核心将从模型指标转向项目效率与管线推进能力。

随着早研智能体从“免费试用”走向“项目嵌入”，客户评估标准将从生成分子数量、模型指标和演示效果转向更实质的维度：是否能够支撑靶点论证、候选分子优选、成药性评估及IND前决策。华为联合望石智慧发布的AI药研解决方案披露，搭载望石智慧MolVado与MolVortex后，可在1-2周内快速锁定苗头化合物并完成计算层面评估；在单轮生成320个分子的实测中，效率较行业水平提升1.08倍。上述成果表明，未来竞争的核心将围绕“节省项目时间、提高候选物质量、加速管线推进”展开，而非单纯比拼模型参数。

2. 收入不稳定与研发投入高企将推动行业持续分化。

AI制药行业具有前期研发投入高、收入兑现周期长的内在特征，这一结构将决定行业优胜劣汰的进程。英矽智能2025年药物发现、软件解决方案和管线开发均已有收入披露，但其收入结构仍受授权交易、合作进展和管线节点影响。晶泰科技2025年首次实现年度盈利，也反映头部企业需要较长时间才能完成商业化兑现。具备收入、客户、平台和实验验证闭环的企业将继续扩大优势，而技术展示型的中小企业若在可见周期内无法实现项目转化，可能被并购、转型或退出，行业集中度预计将逐步提升。



上市公司速览

晶泰控股（2228.HK）				英矽智能（3696.HK）			
总市值	营收规模	同比增长(%)	毛利率(%)	总市值	营收规模	同比增长(%)	毛利率(%)
346.4亿 >	8.0亿 >	-	-	275.3亿 >	5624.0万 >	-	-

成都先导药物开发股份有限公司（688222）				康龙化成(北京)新药技术股份有限公司（300759）			
总市值	营收规模	同比增长(%)	毛利率(%)	总市值	营收规模	同比增长(%)	毛利率(%)
-	1.1亿元 >	54.4	54.8	-	85.6亿元 >	15.6	36.0

剂泰科技（7666.HK）			
总市值	营收规模	同比增长(%)	毛利率(%)
199.0亿 >	1.1亿 >	-	-

企业分析

- 1

北京望石智慧科技有限公司

■ 公司信息			
企业状态	存续	注册资本	100万人民币
企业总部	北京市	行业	科技推广和应用服务业
法人	周杰龙	统一社会信用代码	91110108MA01DC7P0P
企业类型	有限责任公司(自然人独资)	成立时间	2018-07-08
品牌名称	北京望石智慧科技有限公司	经营范围	技术开发、技术转让、技术咨询、技术服务；计算机系统服务。（市场主体依法自主选择经营项目，开展经营活动；依法须经批准的项目，经相关部门批准后依批准的内容开展经营活动；不得从事国家和本市产业政策禁止和限制类项目的经营活动。）



公司竞争优势

■ 竞争优势
望石智慧科技具备覆盖小分子早研任务模型与工具组合的技术优势。望石智慧平台包括MolVado多模态AI3D分子生成模型、Collector化合物结构与分子信息提取工具、基于分子动力学模拟的蛋白-配体相互作用分析、扭转能扫描、子结构检索等模块，能够覆盖分子生成、结构识别、蛋白-配体分析和药物化学辅助判断等任务。相比只提供单一虚拟筛选或性质预测工具的企业，望石智慧更接近“分子设计工作台+多智能体任务编排”的产品形态，适合嵌入苗头化合物发现和先导优化阶段。

望石智慧科技公司官网

2

深圳晶泰科技有限公司

▪ 公司信息			
企业状态	存续	注册资本	30000万美元
企业总部	深圳市	行业	专业技术服务业
法人	温书豪	统一社会信用代码	91440300357887900E
企业类型	有限责任公司（港澳台法人独资）	成立时间	2015-09-10
品牌名称	深圳晶泰科技有限公司	经营范围	一般经营项目：云计算技术开发；医药技术开发及技术转让；保健用品的技术开发；生物技术开发；一类医疗设备研发与销售；国内贸易（不含专营、专卖、专控商品）；文化交流；文化活动策划；礼仪服务、会务服务；展览展示策划；经营进出口业务；工业机器人制造；企业形象策划；市场营销策划；技术服务、技术开发、技术咨询、技术交流、技术转让、技术推广；化工产品销售（不含许可类化工产品）；工业机器人销售；工业机器人安装、维修；智能机器人的研发；智能机器人销售；机械设备销售；机械设备租赁；机械设备研发；专用设备制造（不含许可类专业设备制造）；专用设备修理；信息系统集成服务；人工智能应用软件开发；药物检测仪器销售；药物检测仪器制造；实验分析仪器制造；实验分析仪器销售；软件销售。（除依法须经批准的项目外，凭营业执照依法自主开展经营活动）许可经营项目：无。



公司竞争优势

▪ 竞争优势
晶泰科技的客户资源构成其竞争优势。公司公开信息显示，其已与全球17家头部药企达成合作，客户覆盖超过300家国际企业及科研机构。2025年，公司与DoveTree达成近60亿美元潜在合作，并已收到首付款5100万美元；其全资子公司Ailux与礼来签订3.45亿美元双抗开发平台合作协议。头部药企合作对早研智能体企业具有较高验证价值，药企客户更关注结果可复核、项目可推进和数据安全，说明其平台能力已通过较高门槛客户验证。

晶泰科技公司官网

| 附录



权利归属：头豹上关于页面内容的补充说明、描述，以及其中包含的头豹标识、版面设计、排版方式、文本、图片、图形等，相关知识产权归头豹所有，均受著作权法、商标法及其它法律保护。

尊重原创：头豹上发布的内容（包括但不限于页面中呈现的数据、文字、图表、图像等），著作权均归发布者所有。头豹有权但无义务对用户发布的内容进行审核，有权根据相关证据结合法律法规对侵权信息进行处理。头豹不对发布者发布内容的知识产权权属进行保证，并且尊重权利人的知识产权及其他合法权益。如果权利人认为头豹平台上发布者发布的内容侵犯自身的知识产权及其他合法权益，可依法向头豹（联系邮箱：support@leadleo.com）发出书面说明，并应提供具有证明效力的证据材料。头豹在书面审核相关材料后，有权根据《中华人民共和国侵权责任法》等法律法规删除相关内容，并依法保留相关数据。

内容使用：未经发布方及头豹事先书面许可，任何人不得以任何方式直接或间接地复制、再造、传播、出版、引用、改编、汇编上述内容，或用于任何商业目的。任何第三方如需转载、引用或基于任何商业目的使用本页面上的任何内容（包括但不限于数据、文字、图表、图像等），可根据页面相关的指引进行授权操作；或联系头豹取得相应授权，联系邮箱：support@leadleo.com。

合作维权：头豹已获得发布方的授权，如果任何第三方侵犯了发布方相关的权利，发布方或将授权头豹或其指定的代理人代表头豹自身或发布方对该第三方提出警告、投诉、发起诉讼、进行上诉，或谈判和解，或在认为必要的情况下参与共同维权。

完整性：以上声明和本页内容以及本平台所有内容（包括但不限于文字、图片、图表、视频、数据）构成不可分割的部分，在未详细阅读并认可本声明所有条款的前提下，请勿对本页面以及头豹所有内容做任何形式的浏览、点击、引用或下载。

成为头豹会员—享专属权益

- 成为头豹会员，尊享头豹海量数据库内容及定制化研究咨询服务
- 头豹已累积上万本行业报告、词条报告，拥有20万+注册用户，沉淀100万+原创数据元素
- 头豹优势：行业覆盖全、数据量庞大、研究内容应用场景广泛，并有专业分析师团队为您提供定制化服务，助力企业展业

报告次卡

任意10本报告
阅读权益（一年有效）

¥598 /年

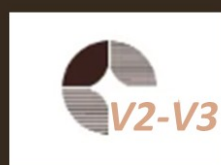
企业标准版



适用于研究频次高的用户或企业
无限量阅读全站报告
升级报告下载量
专享企业服务
定制词条报告

¥50,000 /年

企业专业版/旗舰版



满足定制研究需求的企业用户
定制深度研究报告
按需下载报告
分析师一对一沟通
专享所有核心功能

¥150,000+ /年

购买与咨询

咨询邮箱：

nancy.wang@frostchina.com

客服电话：

400-072-5588



头豹
LeadLeo

www.leadleo.com
400-072-5588