

AI 制药专题

全流程赋能制药未来，成药验证未来可期

西南证券研究院

2026年9月

分析师：杜向阳

执业证号：S1250520030002

电话：021-68416017

邮箱：duxu@swsc.com.cn

联系人：张旭安

电话：021-68416017

邮箱：zhangxuan@swsc.com.cn

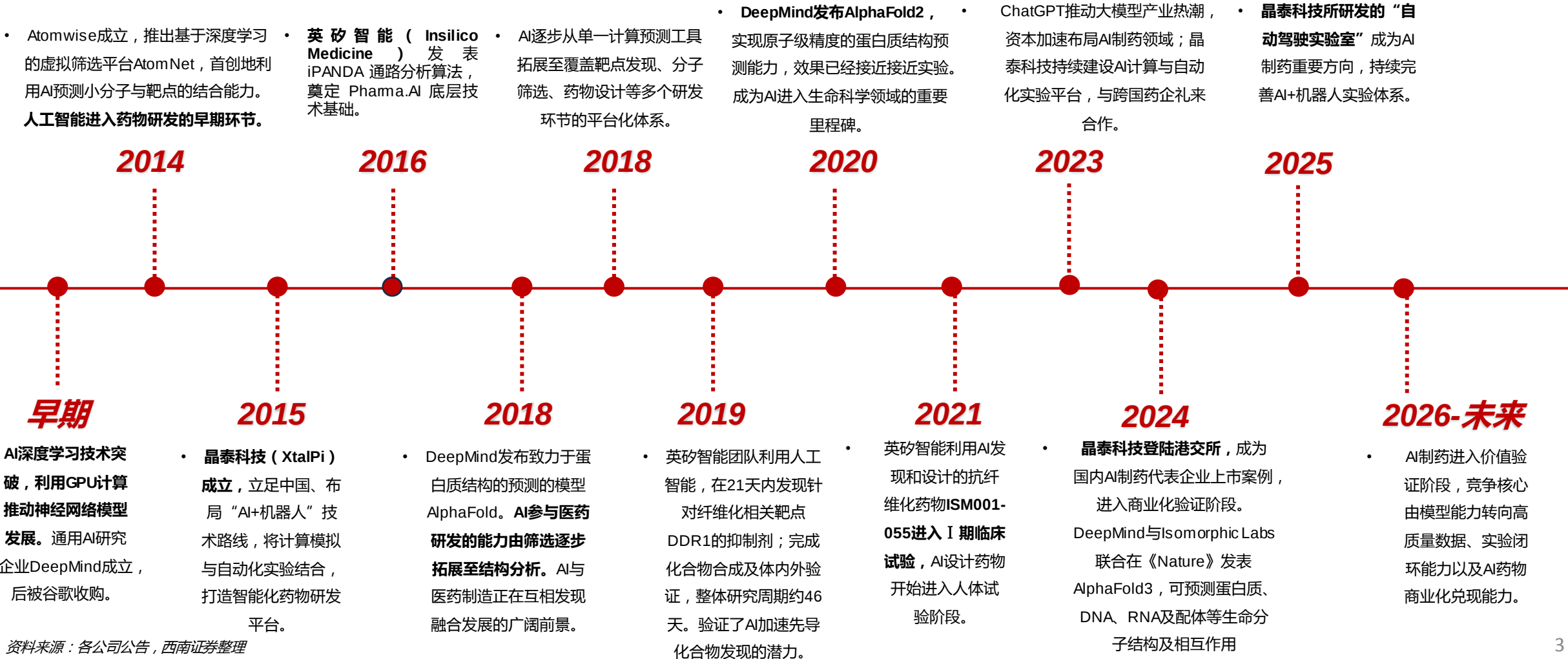
- **AI 制药行业发展现状与市场空间如何？** AI 制药行业已历经萌芽期、发展期，自 2024 年起进入成熟深化的商业化验证阶段，竞争核心由模型算法转向高质量数据、实验闭环能力以及 AI 药物商业化兑现能力。
- **AI 如何赋能药物研发全流程？** AI 应用已升级为覆盖 “药物发现 - 临床开发 - 商业化 - 制造供应” 的全链条生产力工具，核心价值体现为降本增效：药物发现阶段可节省 70%-90% 时长，临床前、临床阶段分别节省 50%-80%、50%-60% 时长，累计可降低约 50% 研发总成本。
- **AI 如何赋能药物研发细分环节/领域？** 细分环节上，靶点发现依托知识图谱与多组学融合突破 “不可成药” 瓶颈；虚拟筛选通过机器学习加速实现十亿级化合物库秒级预筛；分子生成进入 3D 扩散模型时代，直接在靶点空间生成适配分子；ADMET 预测实现早期成药性快速筛查；DMTA 自动化闭环打通虚拟设计与实体合成；临床端通过智能患者匹配、自适应试验设计破解入组难、成本高的痛点。目前 AI 已覆盖小分子、抗体、小核酸、mRNA、CAR-T 等全品类药物的研发优化。
- **AI 制药的核心竞争壁垒是什么？** 行业形成算力、数据、模型三大核心壁垒，数据与模型的重要性高于算力。干湿闭环是整合三大壁垒的终极高阶壁垒。
- **AI 制药的投资逻辑是什么？** AI 制药处于商业化价值验证关键期，建议从研发、商业化、BD 三大维度把握投资机会。**一是研发端：**关注核心技术突破与临床数据披露节点，尤其是 II/III 期成药性验证，以及行业学术大会的数据催化，具备干湿闭环能力的企业长期壁垒更突出；**二是产业链端：**关注因湿实验需求上升而获益的上游卖水/铲人，在 AI 制药验证期为核心受益者；**三是 BD 端：**全球药企与 AI 平台的 BD 交易持续活跃，大额合作、License-out 是重要股价催化剂。
- **相关标的：**围绕技术壁垒、落地进度与业绩弹性三条主线，建议重点关注以下方向及相关公司：
 - 1) **全栈平台型龙头，优先布局干湿闭环能力突出的标的：**具备端到端 AI 研发能力、自有自动化湿实验体系的企业长期壁垒最深，英矽智能、晶泰控股；
 - 2) **AI 产业链受益标的，把握业绩兑现确定性：**叠加 AI 技术升级的 CXO 企业有望率先享受行业需求红利，如 CRO+AI 平台 成都先导、泓博医药、华兰股份；综合 CXO 企业 药明康德、康龙化成，CDMO 凯莱英、药明生物、博腾股份，临床 CRO 泰格医药，同时上游测序、试剂耗材等产业链有望首先受益，基因合成 金斯瑞生物科技、和元生物，试剂耗材 诺唯赞等，血清培养基 奥浦迈等，重组蛋白试剂 百普赛斯等，模式动物 百奥赛图、南模生物等；
 - 3) **差异化技术赛道龙头，细分领域稀缺性标的：**聚焦 AI 制剂与纳米递送的差异化赛道，剂泰科技；
 - 4) **自建 AIDD 平台的本土 Pharma 龙头，AI 赋能内部新药管线迭代：**恒瑞医药、中国生物制药、复星医药、石药集团等。
- **风险提示：**AI 技术迭代不及预期风险、创新药研发失败风险、临床进展不及预期风险、行业监管政策变动风险、算力供给波动风险等。

目 录

- ◆ AI 制药概述：发展史、市场规模、监管政策
- ◆ AI 可赋能从药物发现到商业化全流程
- ◆ 中美AI制药相关公司对比

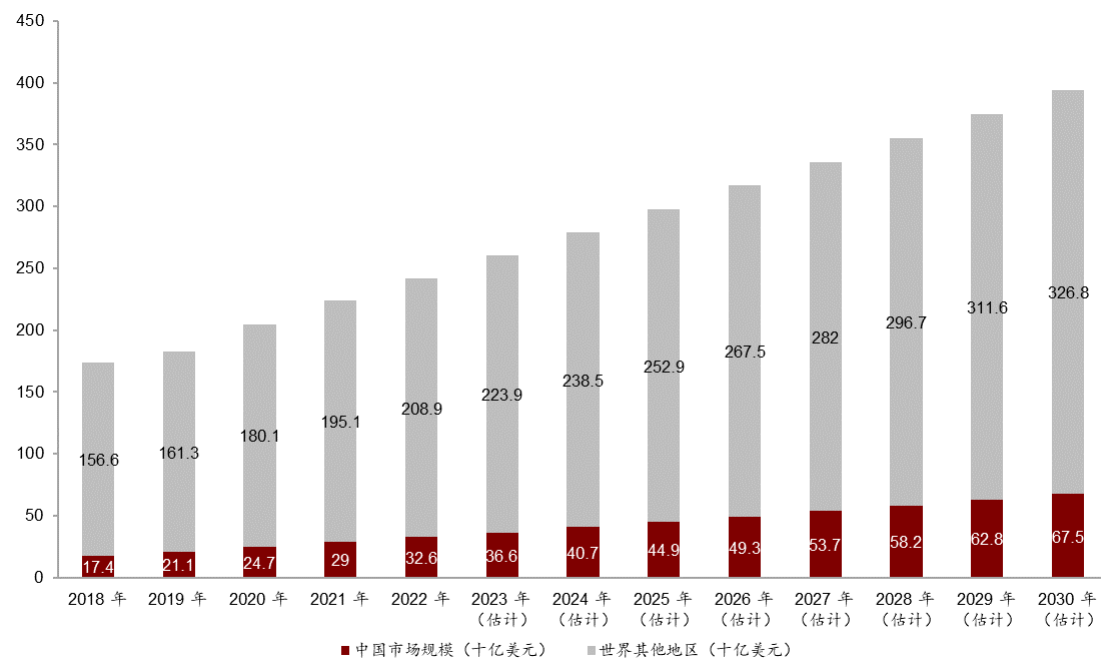
■ AI制药行业发展可分为三个时期

- 萌芽期（早期-2018）：立足优化具体研发环节，AI应用以靶点发现、药物分子筛选为主
- 发展期（2019-2023）：大模型浪潮推动AI制药极速扩张
- 成熟深化期（2024-未来）：AI制药商业化落地，等待能力验证

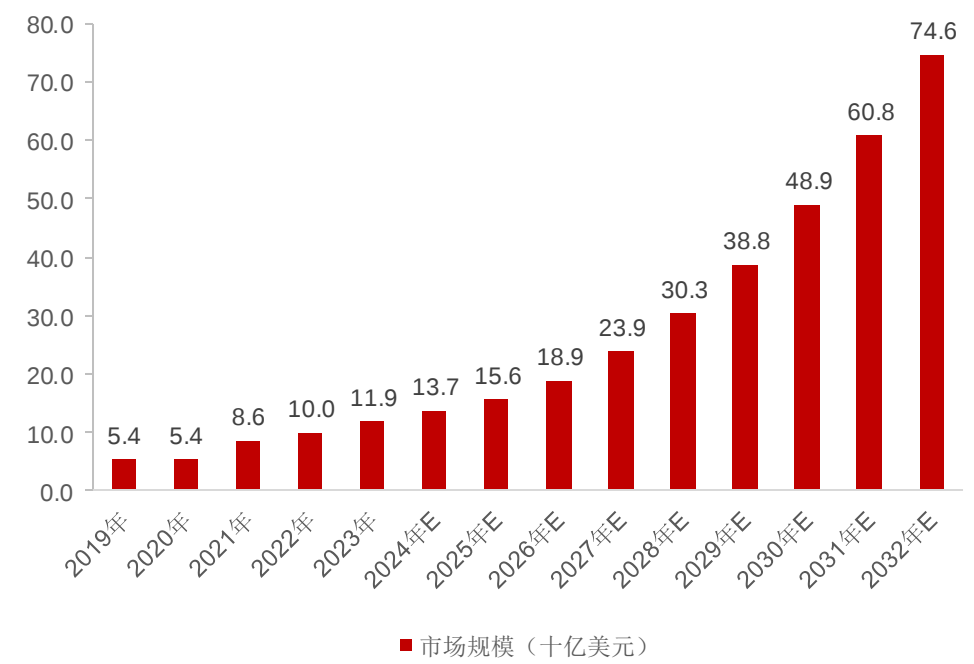


- **全球及中国药物研发支出**：根据弗若斯特沙利文测算，全球药物研发支出预计将由2023年的2,605亿美元增至2030年的3,943亿美元，CAGR为6.1%。中国的药物研发支出预计将由2023年的366亿美元进一步增至2030年的675亿美元，CAGR为9.1%。
- **AI赋能药物研发费用市场**：根据弗若斯特沙利文，预计全球AI赋能药物研发费用市场规模由2023年的119亿美元增加至2032年的746亿美元，复合年增长率为22.6%。

2018-2030全球及中国药物研发支出



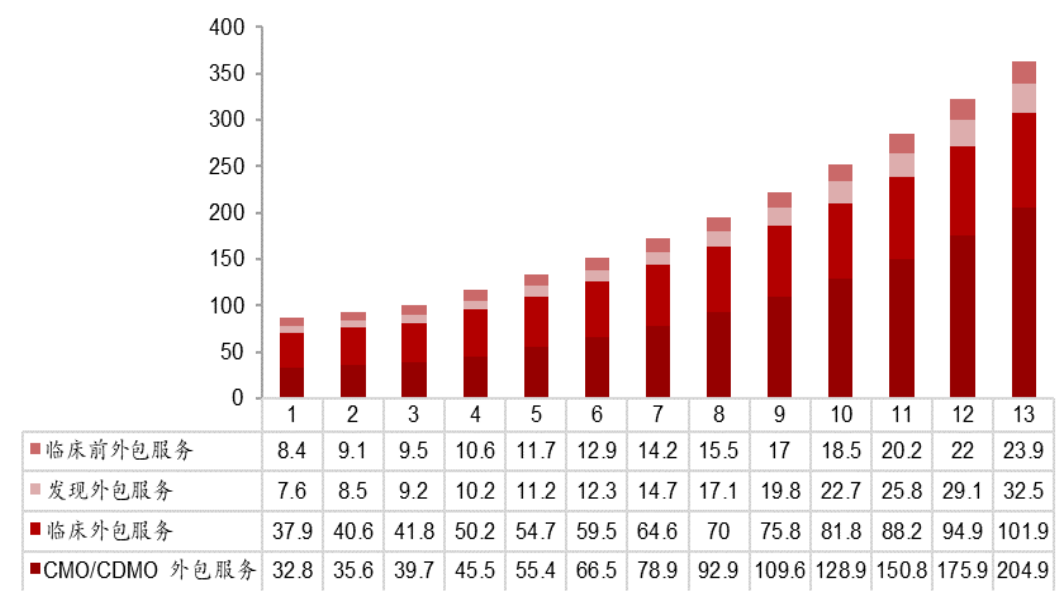
2019-2032 (估计) AI赋能药物研发费用市场规模



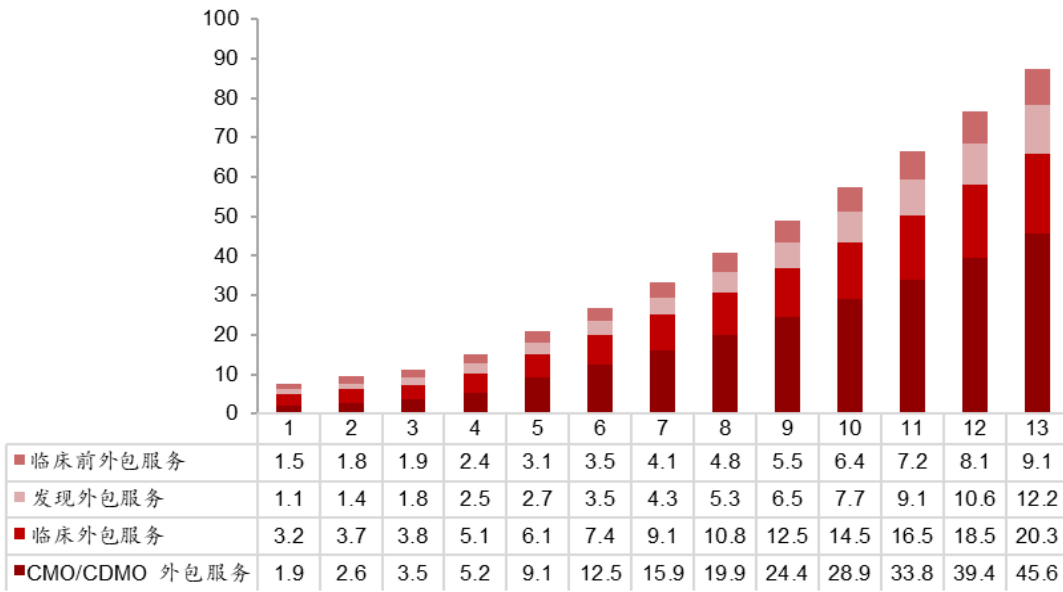
资料来源：英矽智能招股书，晶泰控股招股书，弗若斯特沙利文，西南证券整理

- **全球药物研发外包行业正处于稳健扩容阶段**：2018-2022年整体市场规模从867亿美元增长至1330亿美元，年复合增长率（CAGR）为11.3%；预计2023-2030年将延续加速增长趋势，规模从1512亿美元攀升至3632亿美元，CAGR提升至13.3%。其中，药物发现作为研发前端的核心赛道，增长动能尤为突出：2018-2022年市场规模从76亿美元增至112亿美元，CAGR为10.3%；预计2023-2030年将从123亿美元进一步扩张至325亿美元，CAGR达14.9%，增速显著高于行业整体水平，反映出全球药企对前端创新效率提升的迫切需求。
- **中国市场凭借研发成本优势与能力升级，成为全球外包产业的核心增长引擎**。中国药物研发外包市场预计2023-2030年将从269亿美元增长至871亿美元，CAGR维持在18.3%。细分至药物发现领域，中国市场预计2023-2030年将从35亿美元增至122亿美元，CAGR达19.6%，持续领跑全球细分市场。

2018-2030全球药物研发外包市场（十亿美元）



2018-2030中国药物研发外包市场（十亿美元）



资料来源：晶泰控股招股书，弗若斯特沙利文，西南证券整理

- **全球AI制药监管呈现明显分化特征：**国内以顶层规划和专项指南为核心，在鼓励技术创新的同时强化数据主权与伦理底线；海外美国 FDA 采用灵活的风险分层路径，欧盟推行强约束的分级立法监管体系。
- **政策痛点：AI生成分子专利确权——**传统专利审查体系未针对AI生成成果设立适配规则，AI生成分子的发明主体资格、算法类专利的客体适格性边界均无明确政策界定，确权结果存在较强不确定性。

国内外AI制药监管政策对比

地区	政策层级/类别	发布时间	发布机构	核心文件/举措	核心内容
中国	顶层纲领	2026年4月	国家药监局（NMPA）	《关于"人工智能+药品监管"的实施意见》	AI制药监管领域最高层级系统性政策，确立AI在药物研发、注册审评全流程应用的基础制度框架；建立全链条数据安全合规防护体系与全生命周期数据安全管理体系，强化风险监测与合规评估
中国	审评指导	2026年4月	药品审评中心（CDE）	纳入上述《实施意见》	正式确立"AI辅助、人工复核"的药品审评审批新范式；明确AI仅为技术辅助工具，不得替代专业人员的审评与研发判断，所有AI输出结果需经人工确认后方可作为申报或审评依据
中国	实操规则	2025年4月	工业和信息化部等七部门	《医药工业数智化转型实施方案（2025—2030年）》	推动AI与医药研发、生产、监管全产业链深度融合；明确技术应用准则、统一数据治理标准，为AI在药品注册申报、审评核查等关键环节的规范化应用奠定政策基础
中国	地方落地	2026年3月 2026年6月	北京海淀区 江苏省药监局	《AI新药研发产业知识产权保护指引》 "人工智能+药品监管"行动方案	地方层面落实AI研发新药监管，覆盖知识产权保护、地方监管行动方案等具体落地措施，推动国家政策在区域产业层面的执行
美国/欧盟	审批路径指导	2026年1月14日	FDA + EMA联合发布	《药物研发中良好人工智能实践指导原则》	指出AI药物可能改变传统审批路径；核心逻辑为基于风险的分级审评；审批前提要件为明确界定使用场景；审批资料核心合规标准为数据规范、模型可靠
欧盟	分级监管立法	2024年1月19日	欧盟委员会、欧洲议会、 欧盟理事会	《人工智能法》	对医疗领域AI进行风险分级监管；核心监管对象为归入高风险类别的医疗AI（医疗器械类AI、医疗服务与公共卫生类AI）；评估标准为需符合涵盖所有相关要求的统一标准

资料来源：NMPA，FDA，EMA，西南证券整理

- 9月18日，工信部等十部门联合发布《医药工业发展“十五五”规划》，在重点任务中提出要**深化人工智能赋能升级**。具体为：
- 支持医药工业企业联合医疗机构、科研院所、医药研发服务机构建设医药行业高质量数据集，打造医药健康可信数据空间，**促进医药健康数据流通和使用，加快研发医药垂类大模型与智能体**。
 - 围绕**药物发现、临床研究、工艺优化、质量管理、流通使用、智慧监管**等环节，打造AI制药高价值应用场景，加速人工智能驱动的医药研发和生产管理范式变革。

AI制药高价值应用场景

序号	应用场景	重点内容（开发应用内容）
1	智能靶点筛选与药物发现	重点开发应用AI赋能靶点筛选、药物分子设计与优化、化合物虚拟筛选、候选药物特性分析、动物模型数据挖掘、中医药人用经验数据挖掘和决策模型研究、实验室数据集成管理、辅助临床试验方案审评与科学评估等应用场景。
2	智能制药与质量管理	重点开发应用一批基于AI技术的制药全流程数据自动采集与全流程追溯系统，开发面向关键质量属性的实时预警与闭环控制AI智能化平台。
3	智能医药使用及健康管理	重点开发应用一批智能用药指导与处方辅助审核场景，结合数字孪生与AI预测模型，探索建立高仿真虚拟患者模型与疾病演进模型体系，赋能临床诊疗、真实世界研究与个性化健康管理应用。
4	智慧药械生产流通监管	重点开发应用“两品一械”（药品、化妆品和医疗器械）审评审批检查大模型与智能体，高效赋能产品智能分类、任务分配、资料审查、知识检索问题识别、报告生成及制证送达等高频业务场景。整合研发、生产、流通、使用等全生命周期数据，实现药械产品质量安全全程受控。
5	智能真实世界研究及上市后评价	建设真实世界数据研究与应用平台。支持利用人工智能等技术，系统、规范收集药械临床真实世界应用数据，纳入可信数据空间进行深度关联和挖掘分析，为依法依规开展产品全生命周期临床评价提供支持。

◆ AI 制药概述：发展史、市场规模、监管政策

◆ AI 可赋能从药物发现到商业化全流程

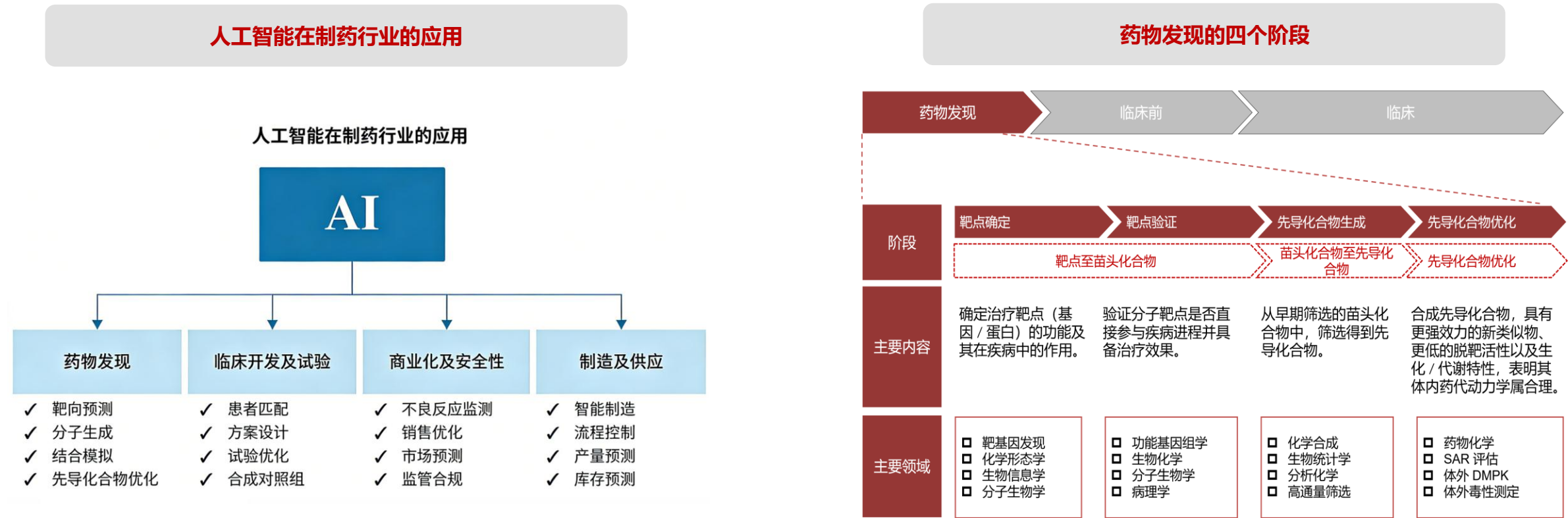
2.1 人工智能可用于制药行业的多个方面

2.2 AI 如何赋能药物研发全流程

2.3 三大核心壁垒：数据和模型重要性高于算力

◆ 相关标的

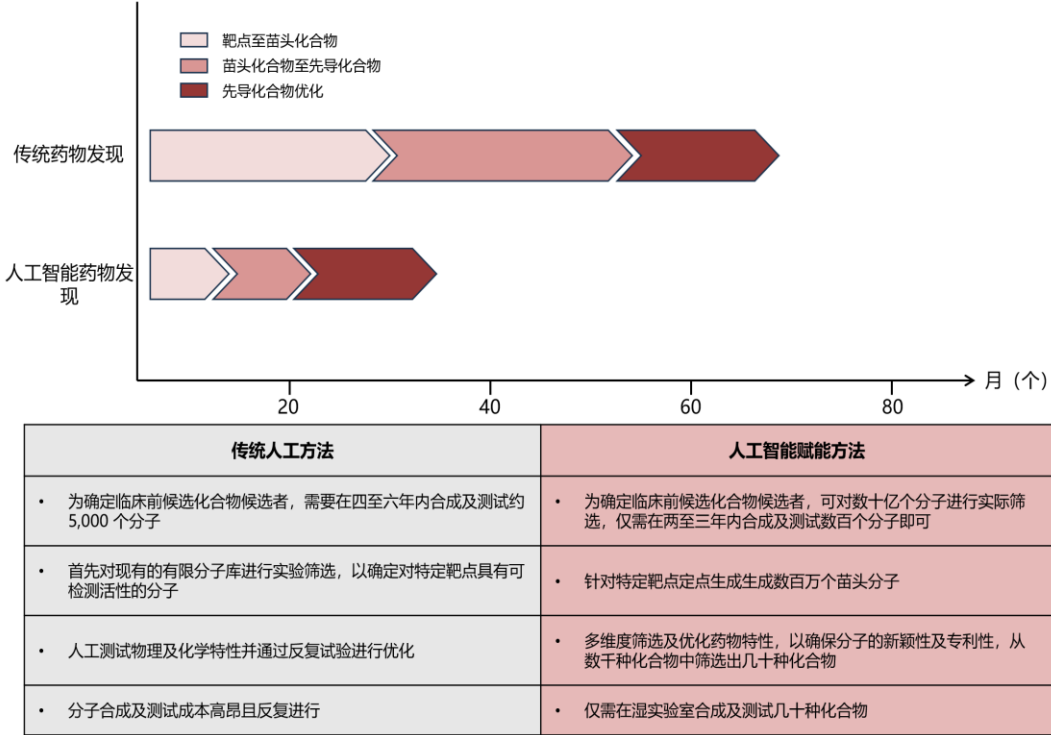
- AI可充分用于药物发现分为四个阶段：包括1）靶点确定：确定直接分子靶点；2）靶点验证（靶点至苗头化合物）：验证预测分子靶点；3）先导化合物生成（苗头化合物至先导化合物）：评估靶点分子并进行有限优化以确定有效化合物；4）先导化合物优化：确定初始靶点化合物后设计候选药物的流程。
- AI在制药行业的应用已从早期单点技术应用，升级为覆盖药物发现-临床开发-商业化-制造供应全链条的核心生产力工具。



■ 一款药物从研发启动到实现商业化落地，通常需耗时十年以上，其全流程在上市前可清晰划分为四大核心阶段：

- 1) 药物发现阶段，整体耗时4-6年，细分为靶点至苗头化合物（约25个月）、苗头化合物至先导化合物（约25个月）、先导化合物优化（约10个月）三个关键环节
- 2) 临床前候选化合物阶段，完成先导化合物的成药性验证与优化，耗时1-2年；
- 3) 临床试验阶段，通过人体试验验证药物的安全性、有效性与剂量合理性，耗时6-7年；
- 4) 监管审批阶段，完成药品上市的官方审核与认证，耗时0.5-2年。

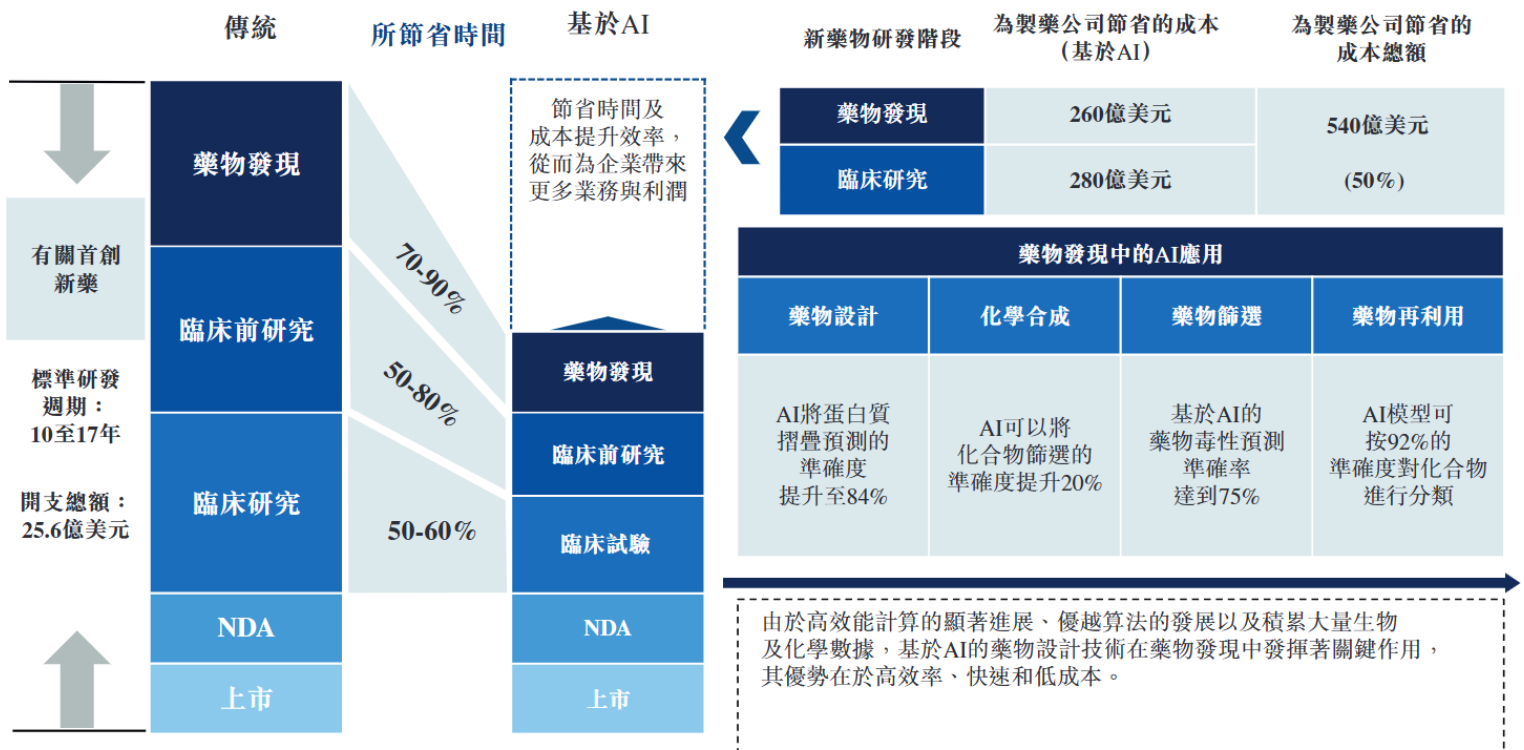
人工智能于传统人工在药物研发中的效率比较



资料来源：弗若斯特沙利文，西南证券整理

- **AI技术通过效率提升为行业拓展了更多商机与利润空间。**从全流程效率与成本维度看，传统药物研发的标准周期长达10-17年、总开支往往达数十亿美元，而基于AI的研发模式可在核心环节实现显著时间压缩：**药物发现阶段节省70-90%时长、临床前研究节省50-80%、临床研究节省50-60%**。成本端，AI驱动的新药研发可在药物发现、临床研究阶段分别为制药企业节省260亿美元、280亿美元，累计节省成本达540亿美元（对应传统研发成本的50%），直接缓解了行业长期存在的高投入压力。
- **药物发现环节AI已实现多场景性能突破：**蛋白质折叠预测准确度提升至84%、化合物筛选精准度提高20%、药物毒性预测准确率达75%、化合物分类精准度达92%，覆盖药物设计、化学合成、筛选及再利用全链条。而这一价值的底层支撑，在于高效能计算的技术进展、算法体系的持续优化，以及海量生物与化学数据的积累，使得AI药物设计具备高效、快速、低成本的核心优势。

基于AI的研发与传统研发在创新药中耗费的时间与成本对比



资料来源：英矽智能招股书，西南证券整理

◆ **AI 制药概述：发展史、市场规模、监管政策**

◆ **AI 可赋能从药物发现到商业化全流程**

2.1 人工智能可用于制药行业的多个方面

2.2 AI 如何赋能药物研发全流程

2.3 三大核心壁垒：数据和模型重要性高于算力

◆ **相关标的**

- **人类蛋白质组成药性差。** 1) 85% 蛋白缺乏有效干预：在人类庞大的蛋白质组中，仅有约15%的蛋白被成功开发为药物靶点，剩余85%的蛋白因机制不明或难以靶向，成为药物研发的“无人区”，导致大量复杂疾病（如神经退行性疾病）缺乏有效治疗方案。2) 60% 靶点被贴上“不可成药”标签：其中约60%的蛋白属于“内在无序蛋白（IDP）”，这类蛋白没有稳定的三维结构，结构高度动态，传统的基于“锁钥模型”的药物设计方法对其束手无策，是制约新药研发突破的最大技术瓶颈。
- **传统局限：**依赖体外亲和力测试、全基因组敲低筛选等实验手段，不仅耗时费力、成本高昂，且如同“大海捞针”，早期验证失败率极高，难以覆盖复杂的疾病机制。
- **基于AI的靶点发现双引擎驱动。** 1) 知识图谱与文献挖掘：利用大语言模型(LLM)将分散的论文、专利、临床试验报告等数据构建成结构化的生物医药知识图谱，自动挖掘潜在的基因-疾病-药物关联，解决传统文献阅读效率低、信息遗漏的问题。2) 多组学融合与因果推断：通过机器学习与图神经网络(GNN)深度整合转录组、蛋白质组、代谢组等多维生物数据，不仅识别直接的靶点关联，更能构建复杂的疾病分子画像，揭示依赖于特定细胞背景的间接作用机制。
- **AI重构靶点发现的底层逻辑。** 结构预测打破不可成药的理论壁垒：AlphaFold3 (Nature 2024)在AlphaFold 2的基础上进行了优化和训练，不仅支持更多种类的分子，还提升了训练效率。它能够预测所有生物大分子之间的相互作用结构，得益于其更灵活和通用的设计，准确率较传统方法提升50%，为靶点验证提供原子级结构支撑。

清华大学团队 • Science 2025 重磅发表

颠覆性性能与规模化应用成果

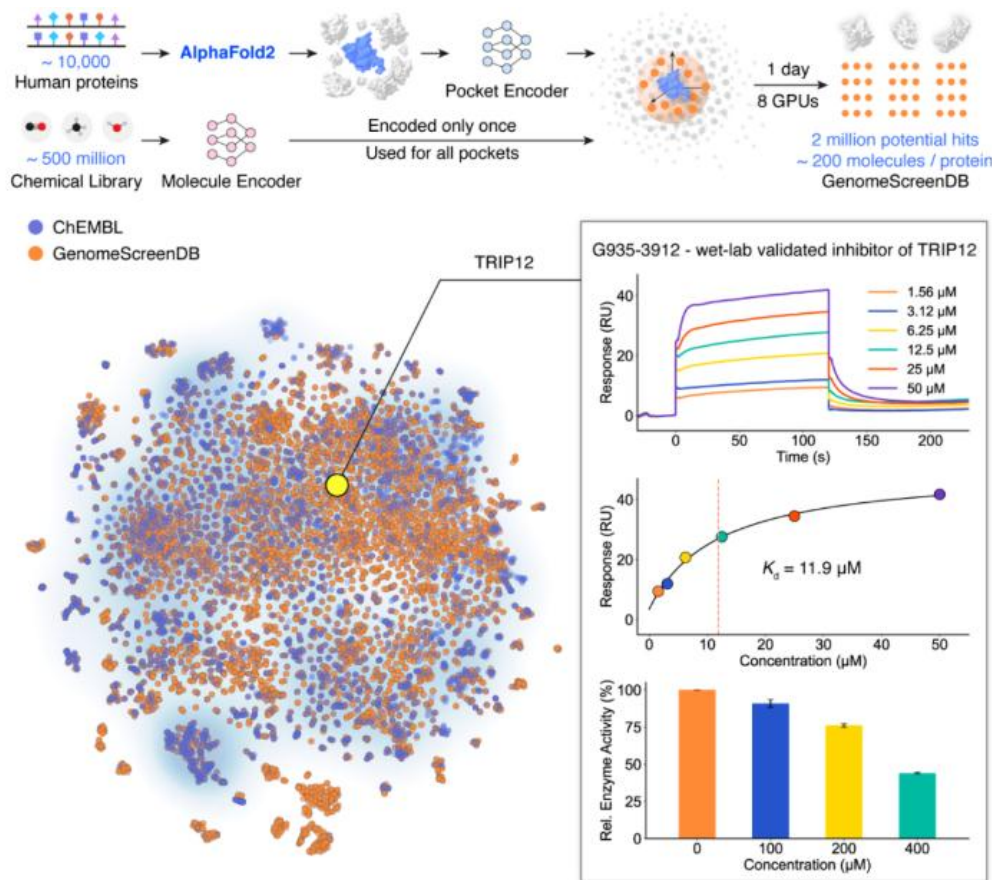


图2.基于DrugCLIP的超高速全基因组虚拟筛选

■ 速度跃升6个数量级

筛选速度较传统对接方法由数百年缩短至24小时内，将原本耗时数月的药物筛选周期缩短至秒级，极大降低了早期药物发现的时间成本与算力消耗。

■ 全新靶点高命中率

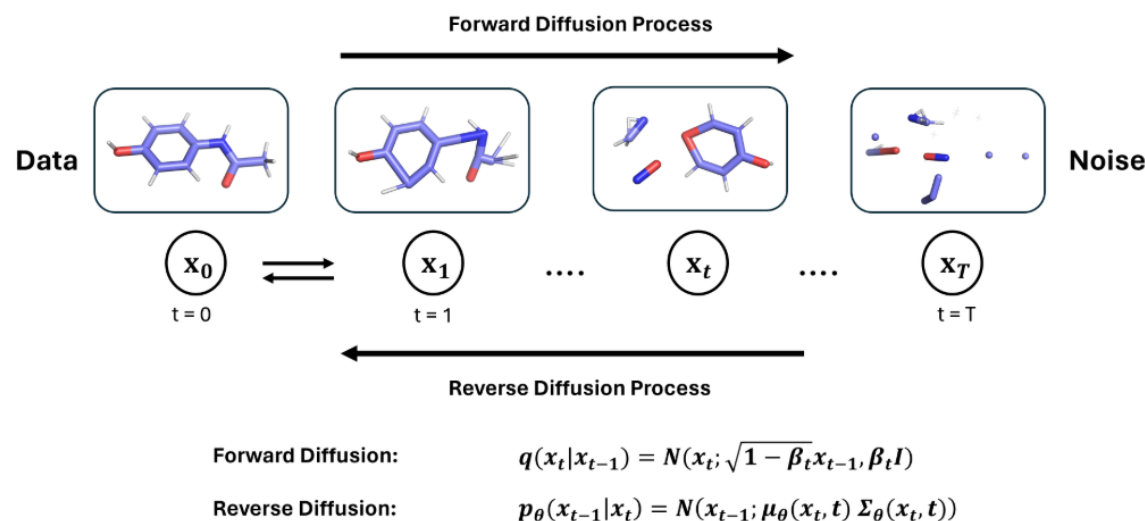
在全新未知靶点NET上实现了15%的命中率，成功发现12个结构全新的候选分子，为神经退行性疾病等难治性疾病的药物研发提供了新的潜在方向。

■ 万亿级全基因组筛选

成功完成万亿级规模的虚拟筛选，覆盖约10000个AF2预测蛋白与5亿个小分子化合物，构建了迄今最大规模的药物-靶点关联图谱。

从2D到3D：扩散模型革命

- **传统瓶颈**：传统药物分子生成依赖SMILES字符串等1D/2D表征，难以精准捕捉药物与靶点结合的三维空间构象，导致设计分子的成药活性预测存在天然偏差。
- **AI新范式**：2024年以来，源自DALL-E、Stable Diffusion的扩散模型架构被引入该领域。它能在蛋白结合口袋的真实3D坐标空间中直接生成原子位置，实现分子结构与结合构象的同步优化，开启了“所见即所得”的药物设计新纪元。
 - **DiffSBDD**：首创双扩散模型架构，直接在3D空间中为靶点蛋白生成适配的配体分子。打破了传统生成方式的维度限制，实现了从“基于片段拼接”到“空间结构驱动”的跨越。
 - **G2D-Diff**：全球首个基因型条件化扩散模型。针对特定癌症的基因突变特征（如KRAS突变），生成具有基因型特异性的个性化小分子，为肿瘤精准医疗提供了全新的药物设计工具。



从传统实验到智能预测的跨越

- **什么是ADMET？** 即吸收(Absorption)、分布(Distribution)、代谢(Metabolism)、排泄(Excretion)、毒性(Toxicity)，是决定药物能否成功成药的“五大门槛”。
- **传统研发痛点：** 依赖动物实验与细胞模型（如Caco-2），单次测试耗时数月，成本高昂且通量低，导致大量候选药物在后期因ADMET性质不佳而失败。
- **AI的破局之道：** 通过机器学习与深度学习模型，基于海量数据快速预测分子的ADMET性质，实现早期“虚拟筛选”，大幅提升药物研发的成功率与效率。

AI在ADMET的作用

ADMET 维度	AI 核心作用	传统实验痛点
A	1. GNN / 多任务模型预测 Caco-2 肠道渗透率、P-gp 底物、口服生物利用度；2. 提前剔除吸收差分子，避免后期临床前失败	细胞渗透实验周期≥2 个月、通量极低、成本高
D	1. 预测血浆蛋白结合率、血脑屏障穿透、组织分布容积 Vd；2. 结合 PBPK 生理药代模型模拟体内组织富集	动物组织分布实验耗费大量实验动物，周期长
M	1. 预测 CYP450 各亚型抑制 / 诱导、代谢产物位点；2. 识别易产生毒性代谢物的骨架，指导分子改造	体外肝微粒体实验筛选通量有限，无法覆盖海量分子库
E	1. 预测肝肾清除率、半衰期、尿液 / 粪便排泄比例；2. 筛选长效 / 快速清除差异化候选分子	体内排泄动物实验成本高，难以早期迭代分子结构
T	1. 提前预判 hERG 心脏毒性、肝毒性、遗传毒性、致癌性；2. 大模型挖掘分子毒性机制，降低临床退市风险	动物毒理实验是研发最高成本环节之一，大量候选临床期折戟

资料来源：Niu, Z., Xiao, X., Wu, W. et al. PharmaBench: Enhancing ADMET benchmarks with large language models. Sci Data 11, 985 (2024). ；康昱盛携手德睿智药，共同加速AI智能化ADME/T平台赋能新药研发；【康昱盛 x 德睿智药联合 Webinar】助力新药研发：探索AI驱动的 ADMET Ranker™ 平台；Deng Y, Zhao X, Sun H, Chen Y, Wang X, Xue X, Li L, Song J, Hsieh CY, Hou T, Pan X, Alomar TS, Ji X, Wang X. RSGPT: a generative transformer model for retrosynthesis planning pre-trained on ten billion datapoints. Nat Commun. 2025 Jul 31;16(1):7012. ；Deng, Y., Zhao, X., Sun, H. et al. RSGPT: a generative transformer model for retrosynthesis planning pre-trained on ten billion datapoints. Nat Commun 16, 7012 (2025). 西南证券整理

- **逆合成规划**：逆合成规划解决了“怎么造”的可行性问题，DMTA闭环则解决了“造得快、造得准”的效率问题。二者结合推动药物研发从传统的“试错驱动”向“数据智能驱动”的范式转变，为新药发现提供了强大的技术引擎。将复杂的目标分子逆向拆解为可商用的基础构建模块，是连接计算机虚拟分子设计与实验室实体合成的关键桥梁，解决了“如何高效合成新分子”的核心难题。
- **DMTA闭环**：自动化研发的“飞轮引擎”。构建“设计(Design)-制造(Manufacture)-测试(Test)-分析(Analyze)”的自动化循环，利用智能算法与机器人实验站实现“模型指导实验、数据反哺模型”的正向反馈，持续加速药物迭代。晶泰科技将具身智能与自主机器人技术结合，其平台协调数百个工作站，实现全天候闭环DMTA循环，实现数据治理提升40倍，实验效率提升5-8倍。

NeoDispenser™ 微型粉末分配系统	XmartChem® 智能合成工作站	ChemPlus®: 台式固体分配器
		
• 配药量低于5毫克，精±0.5毫克。由Vision-Action AI驱动。 • 处理多种粉末形态——包括静电、蓬松和内聚材料。 • 直接取自原始来源小瓶，以最大限度减少高价化合物的损失。	• 完全自动化化学合成过程。 • 无缝集成固液分液、温控反应和在线LC-MS分析，在单一无人值守的工作流程中。 • 确保实验可追溯性100%。	• AI驱动的自我优化：内置的深度学习算法自动优化配药参数。 • 1毫克到20克，准确度±0.5毫克。 • 高效与数据治理：采用紧凑设计，实现高通量无人值守操作，并通过自动记录和数字集成实现100%端到端可追溯性。

■ 直击行业三大痛点

- 成本高昂：临床试验占研发总成本60%+，资金压力巨大。
- 入组困难：肿瘤患者入组率<10%，严重拖慢试验周期。
- 代表性差：严苛入排标准导致样本偏离真实世界，削弱结果参考价值。

■ AI落地成效：患者匹配精准化

- OncoLLM + PRISM(2025 JCO)：病例审查提速80%+（ 20min/3min ），漏筛率显著降低，72%潜在受试者被提前锁定。
- GPT-4o + RAG (2025 IJROBP)：实现近乎100%的匹配敏感性与特异性，消除人工主观误差，精准解析复杂入排标准。

AI的解决方案

传统临床试验三大核心痛点	AI 全套解决方案
痛点 1：研发成本极高，临床试验占总投入 60%+	1. 自适应试验设计：AI 实时调整剂量 / 试验臂，砍掉无效路径，整体效率提升 30%；2. 数字孪生虚拟患者：构建合成对照组，缩减真实受试者样本量，降低动物 / 临床人力成本；3. 药物重定位 LLaDR 模型：老药新用跳过早期安全验证，成本降低 50%、周期缩短 4-6 年
痛点 2：患者入组极度困难，肿瘤患者入组率不足 10%	1. OncoLLM/PRISM 大语言模型自动解析病历，筛查时长 20-25min/3-12min，提前识别 72% 潜在受试者；2. GPT-4o+RAG 精准匹配入排标准，匹配敏感度接近 100%；3. NLP 挖掘电子病历非结构化文本，跨医院患者池匹配
痛点 3：入组样本代表性不足，严苛入排标准脱离真实世界人群	1. AI 数字孪生生成多样化虚拟人群，覆盖老年、合并症、罕见突变等边缘人群；2. 自适应放宽入排标准，动态分层亚组；3. 融合真实世界数据 (RWD) 训练匹配模型，减少筛选偏倚

◆ **AI 制药概述：发展史、市场规模、监管政策**

◆ **AI 可赋能从药物发现到商业化全流程**

2.1 人工智能可用于制药行业的多个方面

2.2 AI 如何赋能药物研发全流程

2.3 三大核心壁垒：数据和模型重要性高于算力

◆ **中美AI制药相关公司对比**

- 算力壁垒：算力工程化能力是核心差异化因素，能不能把算力用出效率——任务调度、异构资源管理、计算管线优化。
- 数据壁垒：持续产生自有数据形成模型预测-实验验证-数据反馈-模型迭代飞轮，最终自有自动化湿实验平台和干湿闭环数据是最高壁垒。
- 模型壁垒：底层模型架构自主可控是长期方向，机理模型和数据驱动混合模式有望成为行业主流。

AI制药三大核心壁垒分析

壁垒维度	核心本质	底层逻辑/需求来源	核心痛点	行业趋势/高阶形态
算力壁垒	成本效率与弹性调度瓶颈	绝大多数AI制药公司不自建算力，主要依赖云服务	1. 成本高企：云算力费用是刚性支出，大规模虚拟筛选、分子动力学模拟单次成本较高 2. 供给风险：高端GPU供给受地缘政治影响	算力工程化能力是核心差异化因素，能不能把算力用出效率——任务调度、异构资源管理、计算管线优化
数据壁垒	高质量注释数据的稀缺性与排他性	公开数据总量大但可用数据少；药物研发需要带完整生物学注释、覆盖全研发链路的实验数据，数据质量与深度决定模型上限	1. 公开数据局限：偏阳性结果、失败实验数据缺失、缺乏深度注释，高质量药物-靶点相互作用数据极少； 2. 数据孤岛：药企数据未结构化、不具备AI就绪状态，跨主体打通技术与沟通成本极高； 3. 合规硬约束：核心IP与患者隐私限制数据共享，法律伦理风险高	持续产生自有数据形成模型预测-实验验证-数据反馈-模型迭代飞轮，最终自有自动化湿实验平台和干湿闭环数据是最高壁垒
模型壁垒	垂直场景适配与临床转化能力	药物研发覆盖靶点发现、分子设计、ADMET预测、晶型优化、临床设计等多任务，需构建完整垂直模型体系，通用大模型无法直接解决专业问题	1. 场景适配：需多任务垂直模型矩阵而非单点算法突破；底层模型高度依赖海外开源系统（AlphaFold系列），自主可控性不足； 2. 可解释性：FDA/NMPA要求科学可解释，纯数据驱动黑箱模型无法进入核心研发流程； 3. 临床转化：基准测试表现与真实研发场景落差大，II期临床失败率未根本改善	底层模型架构自主可控是长期方向，机理模型和数据驱动混合模式有望成为行业主流

- **AI制药高度依赖成熟靶点**：当前AI药物研发高度依赖成熟靶点（PD-1、PD-L1、HER2 等），这类靶点已有大量成药数据与验证先例，AI可节约40%-50%的时间与金钱成本。但针对无成药数据的全新靶点，AI节约时间与金钱成本的比例缩减至25%-40%。其根本原因是成熟靶点拥有大量标准化数据。
- **大小分子落地进度显著分化**：小分子 AI 研发落地进度全面领先大分子。小分子结构刚性、结合口袋明确，计算边界清晰；大分子（以抗体为代表）结合面广、结构空间量级巨大，AI 应用难度天然更高，目前产业落地几乎全部集中在抗体发现环节，ADC、双抗等复杂分子仍仅覆盖抗体部分的设计。小分子领域拥有数十年的标准化数据沉淀，大分子领域的高质量结构化实验数据远少于小分子数据量级与小分子相差数个级别，直接限制了AI模型的训练精度与泛化能力。

基于是否已成熟靶点AI可节约的时间和金钱对比

Figure 13 – Potential impact of AI on time and cost of drug discovery

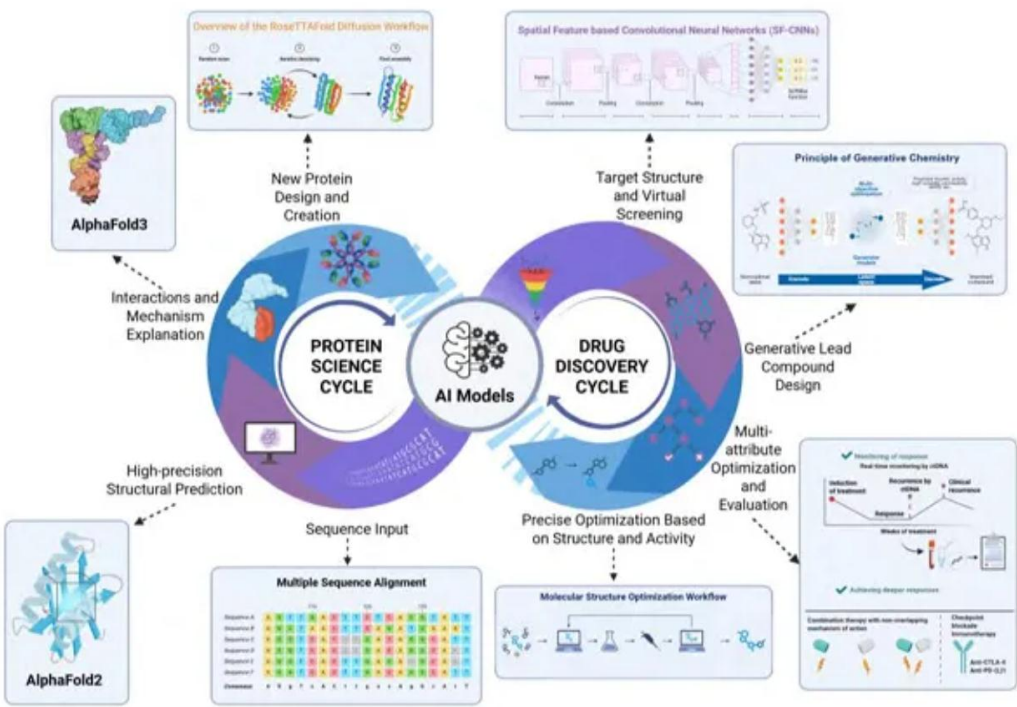
Scenario			Time to PCC (y)		Cost to PCC (\$M)	
1	New molecule for difficult or poorly understood target	Baseline ¹	8 - 11		35 - 55	
		AI - enabled workflow	5 - 7	35-40% ↓	25 - 40	25-30% ↓
2	Molecule from existing chemical series for well understood target	Baseline ¹	5 - 8		25 - 40	
		AI - enabled workflow	3 - 4	40-50% ↓	15 - 20	40-50% ↓

资料来源：Boston Consulting Group，西南证券整理

- **小分子化合物占全球已批准药物的 90%，是现代医学的核心支柱。** AI技术在小分子药物的靶点识别、虚拟筛选、先导化合物优化，以及药物的吸收、分布、代谢、排泄和毒性——即ADMET性质预测等方面均具有很强的作用。
- **传统小分子研发痛点：**
 - **靶点：**难成药靶点占比高；靶点同源性高，选择性差；靶点生物学认知不足，临床前数据与人体脱节。
 - **分子发现与设计阶段：**骨架创新不足，大量项目围绕已知骨架做修饰，me-too/me-better 扎堆，真正全新化学骨架稀缺，专利壁垒容易被绕开；针对难成药靶点，化合物库中缺乏匹配分子。
 - **成药性（ADMET）：**成药性环节因溶解度、渗透性、代谢稳定性、药物相互作用、脱靶等问题失败率上升，多参数同时优化难度极高。
- **AI 在小分子药物研发中的应用：**
 - **靶点识别与验证：**AI 解析基因组、转录组、蛋白质组、代谢组等多组学海量数据，挖掘药效小分子的潜在靶点，并对靶点可药性开展评估。
 - **虚拟筛选与先导化合物发现：**针对传统分子对接、药效团筛选效率低、假阳性高的问题，AI 依托化合物结构-活性数据构建高精度预测模型，加速先导物发掘；分子生成模型结合蛋白口袋从头设计全新分子，拓展候选化合物来源。
 - **先导化合物优化：**针对先导物常见的活性不足、选择性差、ADMET 性质不佳等问题，AI 预测分子各类关键属性，指导结构修饰，提升候选分子整体成药性。
 - **合成路线设计：**AI 预测反应产率与选择性，优化合成路径；基于强化学习的模型可自动推演合成方案，筛选成本更低、效率更优的制备路线。

■ 蛋白质模型已经从单纯的结构预测（AlphaFold 2 时代）进化到了 "通用蛋白引擎"—— 一个模型同时做折叠预测、突变扫描、对接、从头设计。ESM-3 和 AlphaFold 3 都在往这个方向走，本质上是把蛋白质当成一种 "语言" 来建模。

AI驱动的肿瘤相关蛋白与抗肿瘤药物发现工具箱:从结构解析到分子创造



AI驱动肿瘤相关蛋白结构与互作预测的代表性应用案例

靶点/蛋白质	治疗方向	AI核心技术	AI的关键贡献	关键产出/标识	开发阶段/验证
ENPP1	三阴性乳腺癌、肝癌、肝细胞癌等实体瘤	PandaOmics、Chemistry42	靶点发现与平台设计；AI分子识别并验证ENPP1在多种实体瘤中关键免疫检查点的角色	药物：ISM5939	已于2024年11月获美国FDA临床试验许可，进入临床期（NCT06724042，尚未招募）
pMHC-I复合物（如MAGE-A3）	黑色素瘤等多种实体瘤	RFdiffusion、ProteinMPNN、AlphaFold2	从头设计靶向蛋白；从零开始设计能高特异性结合肿瘤抗原pMHC-I复合物的全新蛋白（迷你结合蛋白）		临床前实验验证；设计蛋白在细胞实验中显示出高特异性的肿瘤细胞杀伤能力，已解析共结晶结构验证设计准确性
CDK2	HR+/HER2-乳腺癌、卵巢癌等实体瘤	Kinetic Ensemble	攻克"难成药"靶点；通过AI模拟蛋白质动态结构，发现传统方法难以探测的隐藏结合口袋	药物：BG-68501（ETX-197）	临床I期：首个人试验已于2024年启动（NCT06257264，招募中）
SORT1蛋白	晚期转移性实体瘤（如黑色素瘤、三阴性乳腺癌）	ProteinQure	AI驱动全新多肽设计；从头设计靶向SORT1受体的高亲和力多肽，并将其与细胞毒素偶联，形成靶向性肽药物偶联物	药物：PQ203	临床I期；首位患者已于2025年9月给药（NCT07190469，招募中）
PKMYT1	1扩增等突变的实体瘤	Chemistry42	AI设计PROTAC分子；利用生成式AI，从零设计了全新的PKMYT1抑制剂和连接体，构建了可抑制并降解靶蛋白的双功能PROTAC分子	分子：D16-M1P2	化合物阶段；在临床前模型中显示出强效抗肿瘤活性和高选择性
胶质母细胞瘤抗原（EGFRvC/D276）	胶质母细胞瘤等实体瘤	RFdiffusion	从头设计CAR-T结合域；用AI从头设计靶向肿瘤抗原（EGFRvCD276）的高亲和力结合蛋白，替代传统抗体片段（scFv）构建CAR-T		临床前研究，团队已与合作医院开展研究者发起的临床试验（IIT）
T细胞受体（TCR）	针对KRAS G12V、MART-1等抗原的癌症	TCRPPO强化学习框架	AI优化TCR亲和力；利用强化学习模型，对天然TCR序列进行定向突变优化，设计出对癌症抗原（如KRAS G12V）具有更高亲和力的增强型TCR		临床前早期；在细胞模型中验证了功能活性

■ 传统的抗体药物研发依赖于杂交瘤技术、噬菌体展示技术等，面临着周期长、成本高、成功率低的难题。AI在抗体序列优化、亲和力成熟、新型抗体设计等方面均有显著的作用。对于**单抗**AI侧重抗原-抗体结构预测、表位筛选、分子可开发性预判；**双抗**AI重点解决重轻链配对、双结合臂亲和力协同优化；**ADC** AI侧重多模块协同设计，模拟体内行为，预测 DAR、脱靶毒性、耐药突变。

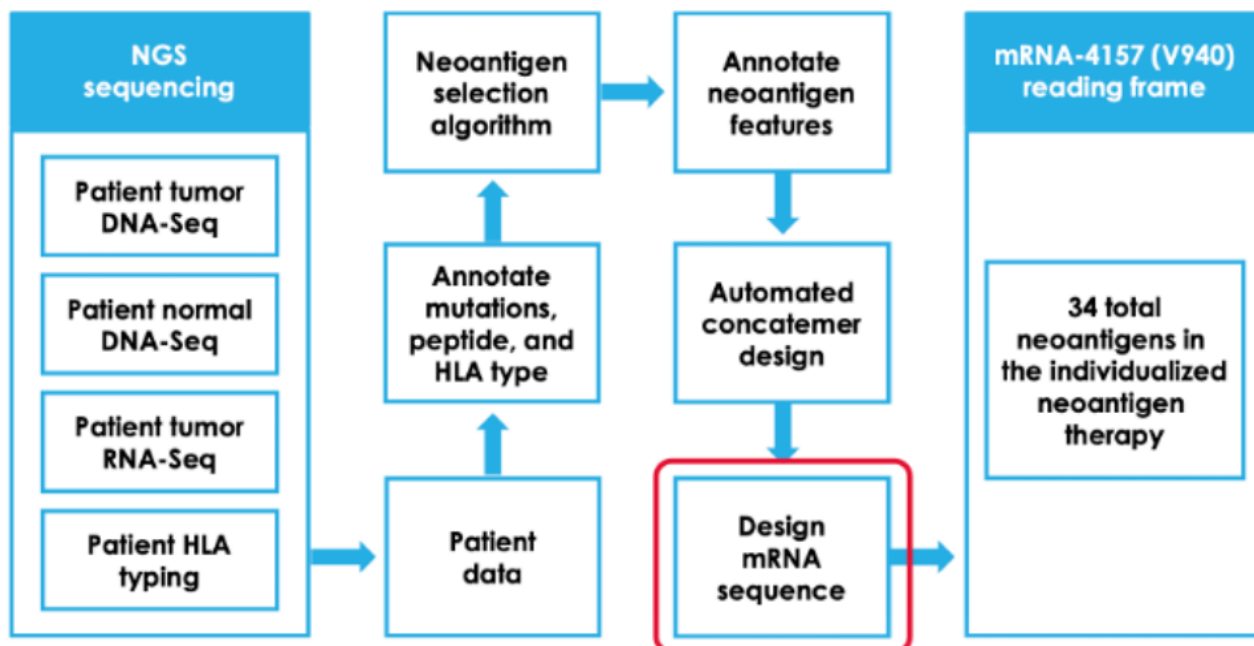
单抗、双抗、ADC研发痛点及AI相关应用

药物类型	分子层面痛点	临床开发痛点	AI核心作用
单克隆抗体 (单抗)	①抗原获取难，表位选择直接决定药效； ②分子易聚集、氧化、脱酰胺，理化稳定性差； ③存在抗药抗体（ADA）免疫原性风险； ④仅靶向胞外/膜表面抗原，实体瘤渗透有限，无口服剂型	①物种特异性强，普通小动物模型适用性差； ②存在CRS、免疫相关不良反应风险； ③热门靶点同质化内卷严重	①预测抗原-抗体复合物结构，辅助表位筛选与亲和力优化； ②预测抗体可开发性（聚集、氧化位点）与免疫原性热点，提前淘汰差序列； ③预测细胞表达水平，优化培养与纯化工艺参数； ④辅助药代与毒性风险预判，优化候选分子优先级
双特异性抗体 (双抗)	①重-轻链错配是核心痛点，产生大量非目标副产物； ②双表位同时结合要求严苛，双臂亲和力需精细平衡； ③分子工程改造后易恶化表达量与理化稳定性； ④免疫原性风险高于普通单抗	①药理机制复杂，药效-剂量关系难预测； ②CRS等免疫毒性风险更高； ③双靶点组合选择难，临床差异化获益验证困难	①辅助双抗架构选型，预测重轻链配对倾向性，降低错配副产物； ②同时优化两个结合臂亲和力，模拟三元复合物结合模式； ③预测改造后分子稳定性与免疫原性，规避表达下降与聚集风险；
抗体-药物偶联物 (ADC)	①抗体+连接子+细胞毒素三组分系统，任一模块缺陷即失败； ②DAR（药物抗体比）分布不均影响药效与毒性； ③连接子稳定性不足致毒素脱靶泄露，全身毒性大； ④分子极易聚集，理化稳定性差	①治疗窗口狭窄，疗效与毒性高度耦合； ②旁观者效应利弊并存； ③耐药机制复杂（抗原丢失、内吞缺陷、毒素外排）； ④脱靶毒性（骨髓抑制、眼毒性、神经毒性）为主要失败原因； ⑤动物模型对毒素毒性预测能力有限	①多模块协同设计：优化抗体序列与内吞能力、预测连接子稳定性与裂解行为、筛选生成新型毒素； ②预测DAR对分子稳定性、药效、毒性的综合影响； ③模拟ADC体内行为，预判脱靶毒性与潜在耐药突变； ④建模偶联反应，预测DAR分布与杂质生成规律，指导工艺优化，减少实验试错

- 针对靶向核酸进行设计的小核酸药物主要有单链反义寡核苷酸（ASOs）和小干扰RNA（siRNA），最大痛点是肝外递送难 + 脱靶与免疫原性风险 + 化学修饰多参数权衡；AI的核心价值在于在序列、修饰、递送三个高维空间中高效预测与优选，大幅降低实验筛选成本。
- 研发核心痛点：
 - 递送系统（核心）：核酸分子带负电、亲水性强，难以穿透细胞膜，体内易被核酸酶快速降解；高度依赖递送载体（GalNAc、LNP、偶联配体等），肝外递送（CNS、肌肉、肿瘤等）仍是难题；载体本身可能带来毒性、免疫原性，载体与核酸的组装比例和稳定性控制难度大。
 - 脱靶效应：与特异性siRNA/ASO 可能与非目标 mRNA 部分互补结合，导致非预期的基因沉默；种子区（seed region）介导的脱靶是 siRNA 类药物的主要风险来源；全转录组范围内脱靶位点数量庞大，实验验证成本极高。
 - 需大量化学修饰：以提升稳定性、降低免疫原性；过度修饰会降低基因沉默效率，修饰不足则稳定性差、免疫原性高；修饰位点、修饰类型的组合空间巨大，传统实验筛选效率低。
 - 药代与组织分布：核酸药物体内清除快、组织分布不均，细胞摄取与内体逃逸效率低；不同组织（肝、肾、CNS、肿瘤）的药代行为差异大，剂量-药效关系难预测。
- AI核心作用：
 - 递送系统设计：AI辅助 LNP 配方优化，预测脂质组分比例对包封率、稳定性、组织靶向性的影响，辅助配体-核酸偶联物设计。
 - 序列设计：AI 模型学习已知活性序列规律，预测 siRNA/ASO 的基因沉默效率，从海量候选序列中优选高活性分子。
 - 脱靶效应/免疫原性预测：AI 在全转录组范围内预测潜在脱靶结合位点，评估脱靶风险等级，结合序列特征预测种子区介导的脱靶概率，指导序列优化。基于序列与修饰特征，预测核酸分子激活 TLR 等免疫受体的潜力，提前识别高免疫原性序列，降低临床风险。
 - 化学修饰优化：AI 预测不同修饰组合对稳定性、活性、免疫原性的综合影响，高效筛选最优方案，减少实验试错。

- 相比较小核酸抑制靶基因，阻断致病mRNA翻译，不表达新蛋白，是做“减法”；mRNA疗法则作为体内翻译模板，指导细胞合成抗原，是做“加法”。因此，AI在小核酸研发中的核心作用聚焦于序列修饰和脱靶预测，帮助小核酸精准关掉对应的基因；而AI在mRNA研发中则聚焦于编码翻译和蛋白表达，稳定、高效、可控地翻译出目标蛋白。
- **AI 高度支持Moderna的mRNA定制疗法。** 1) 设计端，其能在短时间内处理每个患者的基因组数据，完成突变评估和靶点优先级排序，输出最终的34个新抗原组合，随后迅速编写并合成一串专属于这位患者的mRNA序列，封装进纳米脂质颗粒（LNP）中。2) 制造端，Moderna开发了一套叫Maestro的数字化系统，负责统筹每一个患者批次的生产排程，实时协调临床、制造、质检、物流等环节，确保每一支个性化疫苗按时交付给正确的患者。

INT药物实设计算法流程图

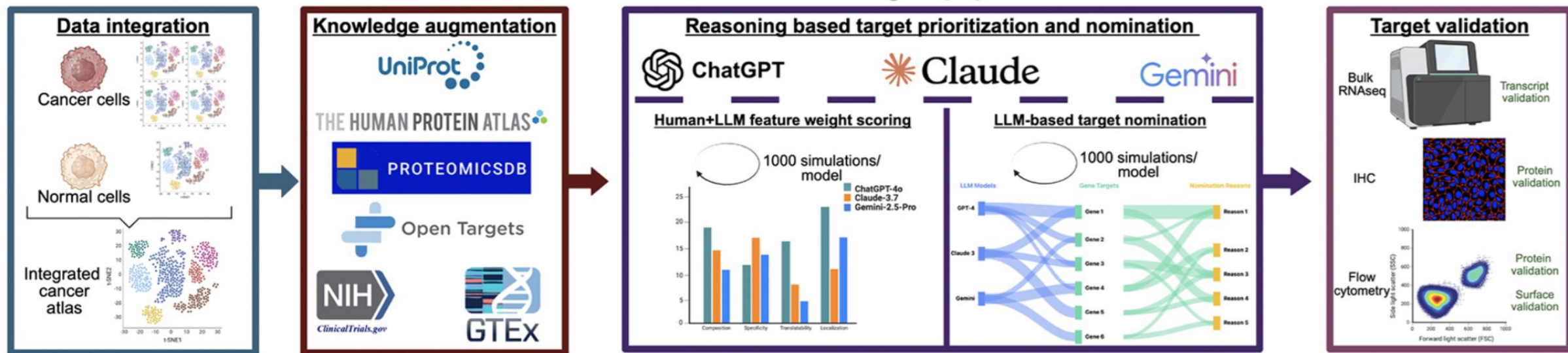


■ CAR-T 细胞疗法受制于以及患者个体间疗效异质性问题，持续制约该疗法的大规模落地与临床广泛应用。

- **挖掘高安全性靶点**：理想 CAR-T 靶点需肿瘤特异性表达。但实体瘤、髓系白血病的诸多候选靶点同时在重要正常组织表达，易引发在靶-脱瘤毒性。AI 可以对比肿瘤与正常组织抗原，缩小候选靶点范围，为后续实验筛选提供优先集合。
- **优化 CAR 分子结构**：CAR 由抗原结合区、铰链区、跨膜区、共刺激及激活结构域组成，模块组合决定 CAR-T 的识别、增殖、存续与耗竭特性。AlphaFold 等结构预测工具可优化 CAR 序列、提升结合特异性与分子稳定性；机器学习从大规模文库数据中挖掘结构-功能关联，例如基于 2300 种共刺激结构域库，预测信号基序对 CAR-T 细胞功能的调控效果。
- **预判患者临床获益**：CAR-T 产品在不同患者身上疗效差异巨大，存在长期缓解、早期复发、细胞扩增不足或快速耗竭等不同结局。AI 整合临床指标、免疫图谱、单细胞多组学、产品质量等多维数据，辅助预测治疗应答、识别复发预警信号，支撑个体化治疗。

AI-driven CAR T cell target pipeline

A.



◆ AI 制药概述：发展史、市场规模、监管政策

◆ AI 可赋能从药物发现到商业化全流程

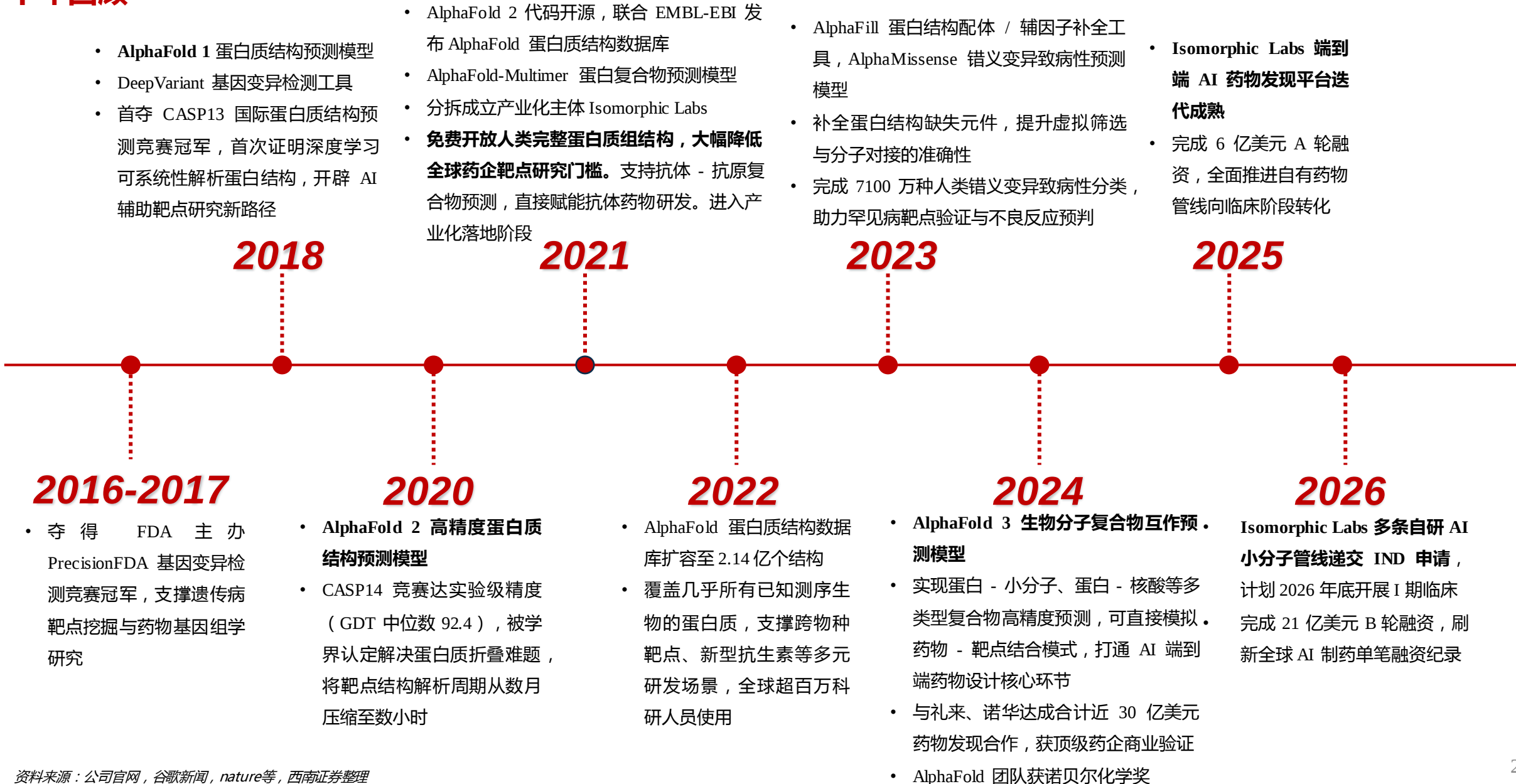
◆ 中美AI制药相关公司对比

3.1 美股相关公司：Google、Schrödinger、Recursion、Anthropic

3.2 港股相关公司：英矽智能、晶泰控股、剂泰科技

3.3 A股相关公司：成都先导、泓博医药、药石科技

十年回顾



AlphaFold发展与对比

- 从孤立预测到复杂互作模拟，AlphaFold 三代完成了三次关键跨越：
 - AlphaFold (2018)：初代模型首次将深度学习引入蛋白质结构预测，通过预测残基间距离矩阵，在CASP13上一鸣惊人，但尚未达到实验精度。
 - AlphaFold 2 (2020)：革命性地引入Evoformer模块，实现端到端预测，将单链蛋白结构预测精度推至原子级别，真正解决了困扰学界50年的蛋白质折叠难题。
 - AlphaFold 3 (2024)：颠覆上一代架构，改用扩散模型，首次统一预测蛋白质、DNA、RNA、配体等所有生物分子的复合物及修饰状态。它不再止步于蛋白本身，而是直接呈现药物分子与靶点作用的原子级全景，让AI真正从“看清结构”迈向“设计药物”。

AlphaFold 1-3对比

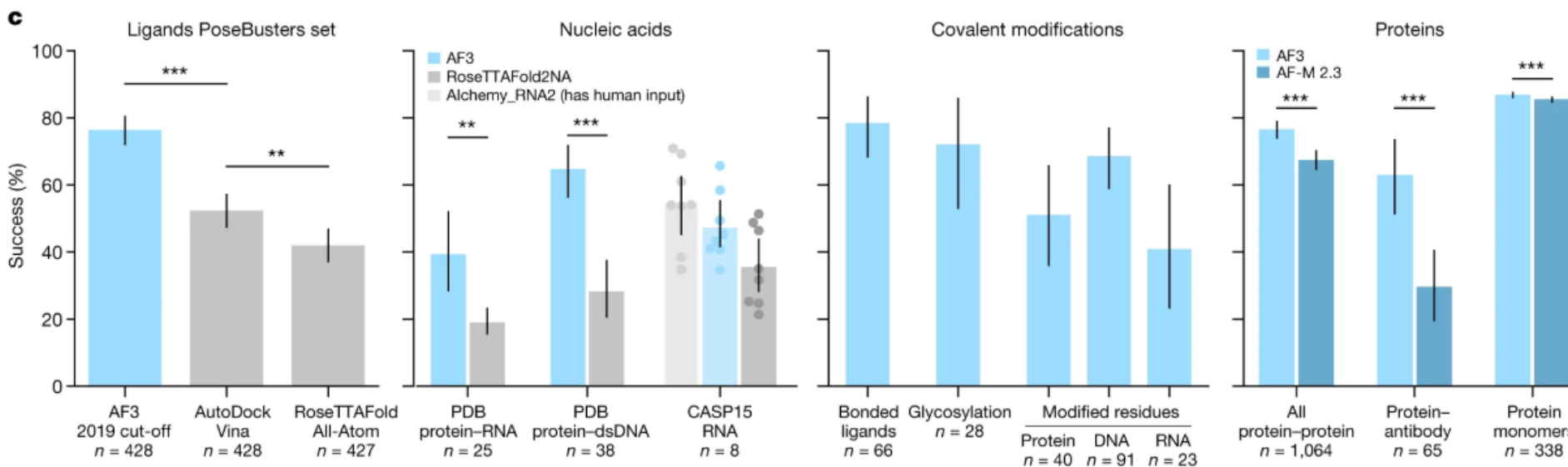
对比维度	AlphaFold 1 (2018/2020)	AlphaFold 2 (2021)	AlphaFold 3 (2024)
发布节点	2018 年 CASP13 夺冠；2020 年《Nature》正式发表	2020 年 CASP14 夺冠；2021 年《Nature》发表并开源	2024 年 5 月《Nature》发表；DeepMind×Isomorphic Labs 联合研发
核心架构	深度残差 CNN + 片段组装算法	Evoformer + SE (3) 等变 Transformer， 端到端架构	Pairformer + 扩散模型， 统一原子表征框架
预测范围	单一蛋白质链	单一蛋白质链；后续扩展支持蛋白多聚体	蛋白质、DNA、RNA、小分子配体、离子、修饰残基及复合物
核心技术创新	共进化信息提取 + 距离 / 接触图预测 + 能量函数优化	MSA 多序列比对注意力 + 残基对表征 + 3D 等变网络 + 循环迭代优化	全分子统一注意力机制 + 生成式扩散建模 + 跨类型分子互作表征
精度标杆	CASP13 自由建模 GDT-TS 中位 61.4	CASP14 整体 GDT-TS 中位 92.4 ，原子级精度 (~0.96Å)	蛋白 - 配体互作预测准确率较传统方法提升50%+，保持蛋白结构高精度
标志性突破	首次用深度学习大幅超越传统方法，证明 AI 可攻克结构预测	破解 50 年蛋白质折叠难题，精度达到实验解析级别	从单蛋白结构升级为 生物分子互作全景预测 ，直接覆盖药物研发核心场景
核心局限	非端到端，依赖片段拼接，复杂蛋白精度不足	仅支持蛋白质，无法精准预测核酸、配体等分子互作	超大复合物精度仍有限；扩散模型推理算力成本更高

资料来源：公司官网，谷歌新闻，nature等，西南证券整理

超越结构预测的四大核心技术突破

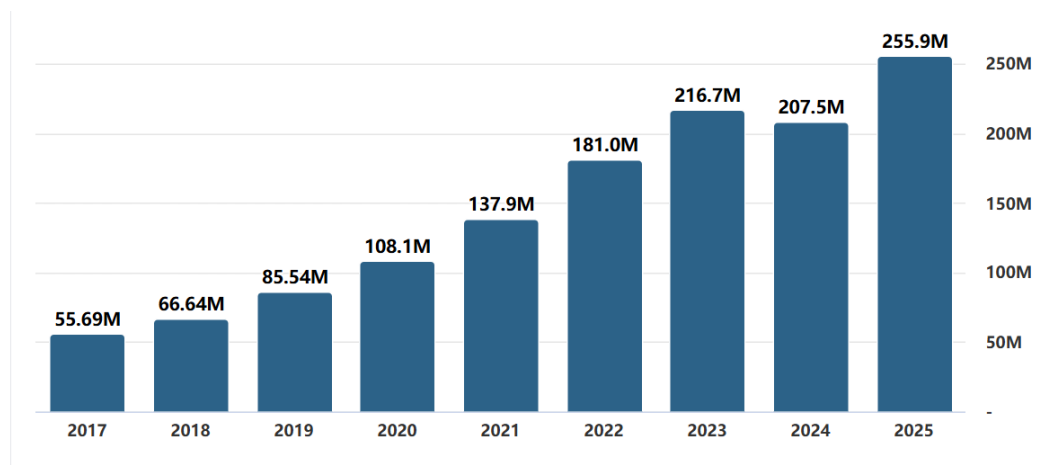
- **突变致病性精准解读代表成果：**Alpha Missense覆盖人类 7100 万种错义突变，致病性预测准确率超 90%，入选 2023 年《科学》年度十大突破；**制药价值：**支撑罕见病靶点验证、药物应答生物标志物挖掘、临床试验患者精准分层。
- **从头蛋白质功能设计核心能力：**从预测走向创造突破天然序列限制，可控设计全新折叠的功能蛋白，涵盖定制化酶、细胞因子类似物、抗体骨架；**制药价值：**突破天然蛋白成药瓶颈，赋能酶工程优化、长效蛋白药开发、难成药靶点配体设计。
- **下一代药物形式赋能覆盖前沿药物赛道，**精准预测 PROTAC 三元复合物、ADC 抗原 - 抗体偶联、RNA - 小分子互作等复杂结构；**制药价值：**助力蛋白降解剂、核酸药物、抗体偶联药物等新型研发方向的分子设计与优化。
- **抗感染新药研发突破：**聚焦耐药性全球难题，解析多重耐药菌关键靶蛋白结构，辅助发现全新作用机制的抗生素候选分子；**制药价值：**打破传统抗生素研发瓶颈，为抗耐药菌感染药物提供全新研发路径。

AlphaFold 3 能准确预测生物分子复合物的整体结构

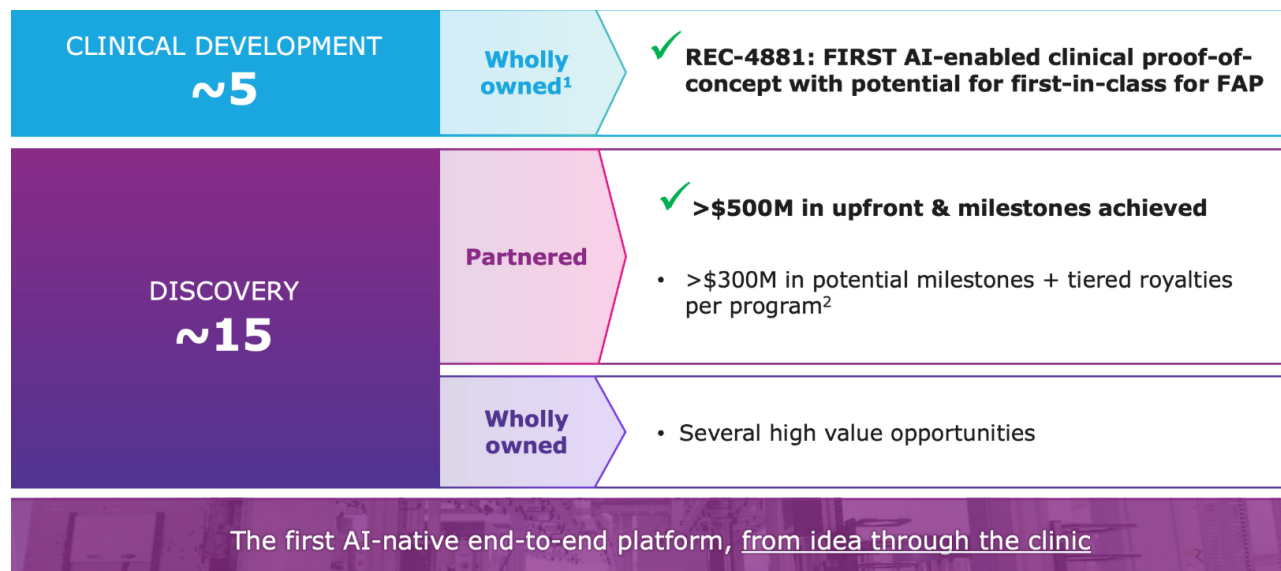


- **Schrödinger成立于1990年，2020年2月在纳斯达克上市，是全球首家上市的AI制药公司。**公司坚信分子的性质可以从第一性原理（量子物理）出发进行预测，更好的预测带来更好的药物。公司主打“物理+AI”融合的计算平台，物理模拟层基于量子物理和计算化学，能够从分子层面精确模拟分子结构与分子间相互作用，为AI预测提供精准物理基础。
- **公司形成了完整的产品矩阵：**包括支持自然语言交互、AI 赋能的分子交互建模图形界面 Maestro，整合全项目数据与前沿计算工具、覆盖小分子与大分子研究并提供 AI/ML 模型训练部署能力的云原生企业级信息学平台 LiveDesign，以及计划 2026 年夏季推出早期版本、可自主执行复杂分子发现工作流的新一代自主 AI 协同科学家 Bunsen Agentic AI。
- **在研发落地上，公司技术已在多个项目中验证价值：**与 Nimbus Therapeutics 合作 AI 辅助设计的 TYK2 抑制剂 Zasocitinib，通过优化化合物与靶点酶的拟合度大幅提升设计通量，该药物后续由武田收购推进临床，在银屑病等免疫介导炎症性疾病中展现出应用潜力；在数据稀缺的 p38 α /MK2 分子胶设计项目中，公司将从头设计工具 AutoDesigner 与 WaterMap/FEP + 物理模拟技术结合，在仅单个参考化合物、缺乏构效关系数据的条件下，仅用 4.5 小时即生成 1.2 万个满足多参数优化要求的候选分子，效率较标准筛选提升 56 倍，最终得到的化合物对 p38 α 的 pIC50 达 10.3、选择性达 451 倍，凸显了物理 + AI 路线在低数据场景下的优势。
- **商业化层面，公司构建了广泛的全球战略合作生态，**包括将礼来 AI 平台 TuneLab 集成至 LiveDesign、与诺华开展获监管批准的 AI 驱动药物发现合作、2026 年 7 月与先声药业达成全球药物发现与开发合作，以及与 Manas AI 达成战略协议，开放超大规模计算平台访问并整合双方技术能力。

施罗德2017-2025年度收入图（美元）



- **AI原生操作系统打通“生物学发现/分子设计/临床验证”的完整链条。** Recursion 依托全栈式 AI 平台 Recursion OS，在药物发现效率上实现了对传统模式的颠覆性突破，可大幅降低研发成本、缩短研发周期，为攻克复杂疾病靶点提供了可规模化复制的技术路径。公司已有多条自研管线进入临床阶段，其中 MEK1/2 抑制剂 REC-4881 实现了其 AI 平台的首个临床概念验证，II 期临床数据显示，患者治疗 12 周后息肉负担中位数减少 43%，停药 12 周后仍维持 53% 的减少幅度，这是全球首个从 AI 驱动的表型洞察出发、经临床验证有效的候选药物，印证了 AI 平台可以从源头发现新生物学机制并转化为患者临床获益。
- **商业化层面，Recursion 已与全球多家顶级制药企业建立深度合作，累计获得超过 5 亿美元的先期付款和里程碑收入：**与赛诺菲已达成 5 个项目里程碑、累计付款 1.34 亿美元，联合推进 5 个以上 AI 驱动的小分子项目；与罗氏 / 基因泰克合作中已交付 6 张表型图谱，包含源自 1 万亿个 iPSC 细胞的首张全基因组 CRISPR 敲除神经元图谱，累计收款 2.13 亿美元；与拜耳共同推进纤维化疾病治疗项目，潜在里程碑付款高达 15 亿美元加分层特许权使用费；同时还与默克在肿瘤学与神经炎症领域展开合作。
- **技术底座上，公司已建成扎实的算力与数据护城河。** 2024 年联合英伟达升级的超级计算机 BioHive-2 为 AI 模型训练与部署提供全球领先的计算能力；自有数据层面已生成数百亿个细胞数据，覆盖 50 多种细胞类型，每周可开展多达 220 万次自动化实验；模型端布局了基于 8.42 亿分子图训练的化学基础模型 MoIE、表型预测模型 Molphenix，以及与 MIT 合作开发的蛋白 - 配体结构预测模型 Boltz-2。2024 年底公司完成对 Exscientia 的收购，新增 20 余个研发项目，合并后整体里程碑机会规模超过 200 亿美元。



维度	Google (GOOGL)	施罗德 (SDGR)	Recursion (RXRX)	Anthropic
业务定位	Isomorphic Labs 聚焦药物发现+"第一性原理+AI"重新定义药物发现流程+高投入、未盈利的战略性亏损	计算物理+AI平台，软件与药物发现双轮驱动	Recursion OS统一、AI原生的端到端药物发现与开发操作系统+"自研管线+合作管线"双轮驱动	通用AI基础模型公司，以Claude大模型能力切入生命科学，定位"AI科研基础设施/科研伙伴"，非药物发现公司本身
市场定位	全球领先的AI驱动药物发现创新企业	全球领先的物理计算驱动药物发现平台企业	以AI原生平台驱动药物发现的临床阶段TechBio公司	全球领先的通用AI模型企业；生命科学场景提供科研AI底座（药企AI战略的"中间层"）
核心商业模式	AI模型平台（IsoDDE）+内部药物管线研发+对外药物研发合作	软件业务+药物发现业务	2025年实现首个AI驱动临床概念验证+持续投资Recursion OS平台端到端能力+精简管线、裁员重组、严格go/no-go决策	模型API按量付费+企业订阅（Claude Enterprise）+战略合作（与药企联合开发解决方案）
主要业务	运用AI药物设计引擎IsoDDE，基于AlphaFold技术预测蛋白质结构并设计药物。公司推进内部管线研发，并与礼来、诺华等药企开展合作。目前其AI设计的药物正准备启动首次人体试验	以基于物理学的计算平台为核心，双轮驱动：一是向全球药企提供药物发现软件（Glide、FEP+等），；二是利用该平台与诺华、BMS等合作研发并推进自有药物管线	以Recursion OS工业级AI平台为核心，结合大规模表型组学图像数据与机器学习，实现药物靶点发现与临床前分子优化	通过Claude前沿大模型+Claude Science科研工作台（2026-06-30发布）与MNC开展广泛合作
技术底座	以AlphaFold为核心，Isomorphic Labs主导开发。核心平台包括AlphaFold，升级版药物设计引擎IsoDDE（被誉为"AlphaFold 4"），依托Google Cloud提供算力与AI基础设施	基于物理学的计算平台，而非纯机器学习/AI方法。FEP+（自由能微扰）是旗舰技术：在约3,000个分子、90个项目的验证中，其亲和力和预测精度接近实验水平，数小时完成传统需数周的评估。2024年启动预测毒理学计划，预计2026年商业化发布	自动化高通量实验室（每周200万+实验）、表型组学（细胞成像）、转录组学、多组学整合、患者真实世界数据AI驱动生成式分子设计（年生成1亿+分子）、精准化学合成、物理计算方法、DMTL闭环（设计-制造-测试-学习）ClinTech AI临床开发系统	Claude前沿大模型（强调机制可解释性）+Claude Science连接PubMed等科研工具；经Amazon Bedrock部署；BMS案例中与英伟达超算、薛定谔专业计算层构成"硬件-模型-专业软件"三层生态
自研管线	Isomorphic Labs集中攻克胰腺癌、肺癌等“不可成药”靶点。针对KRAS G12D靶点的口服抑制剂ISOL-003已进入临床前研究。管线涵盖17个活跃项目，首批AI设计的抗癌药物计划于2026年启动1期临床试验。	自研管线以SGR-1505（MALT1）和SGR-3515（Wee1/Myt1）两个Phase 1药物为核心，其余临床前项目转向对外授权	自研管线聚焦肿瘤与罕见病，含5个临床阶段项目和2个临床前项目，靶点覆盖MEK1/2、CDK7、RBM39等	6月，Anthropic 宣布启动内部药物发现项目，聚焦传统药企因经济账不划算而忽视的疾病——罕见遗传病等。
客户结构与集中度	客户集中于少数跨国大药企，集中度极高	客户集中度偏高且上升：2025年单一客户占总收入17%，较2024年的10%有所上升，主要因诺华大单驱动	客户集中度极高，2025年两大客户贡献几乎全部收入	客户高度分散、跨行业；生命科学客户含辉瑞、诺和诺德、BMS、阿斯利康、基因泰克等，单客户依赖低
大分子	以AlphaFold蛋白质结构预测为核心底座，支撑抗体设计、蛋白质工程等大分子药物发现，从第一性原理重构生物药研发流程。	基于物理计算平台延伸至生物药领域，推出LiveDesign Biologics信息学解决方案，但大分子发现尚未达到与小分子同等的验证水平和价值	未披露任何大分子/生物药（抗体、蛋白疗法等）技术平台公司全部5个临床阶段管线（REC-4881/617/1245/3565/4539）及合作项目均为小分子药物	以模型能力辅助生物药研发：为基因泰克构建"自主实验室"闭环发现基础设施；BMS全链条部署；连接Benchling、10x Genomics等生物平台，支持生物推理；
小分子	核心技术平台为IsoDDE（等构药物设计引擎），基于AlphaFold预测蛋白质结构，生成并优化小分子候选物。商业模式为与礼来、诺华等药企签署合作协议，通过前期预付款、研发里程碑付款及未来销售提成获取收益，目前尚无产品上市收入	以FEP+（自由能微扰）为旗舰，结合Glide分子对接、Deep AutoQSAR机器学习模型，实现从靶点到先导化合物的全流程物理计算驱动，预测精度接近实验水平。商业模式为双轮驱动：向全球前20大药企授权软件，同时与诺华、BMS等合作研发小分子药物（前期款+里程碑+分成），并推进自研管线	以Recursion OS为核心平台，整合大规模细胞表型组学（每周200万+实验）、转录组基础模型TxFM与生成式AI化学设计（含Exscentia），实现"生物学/洞察/分子/患者"全链条闭环。商业模式为自研管线保留商业化权益+与大药企合作获取预付款和里程碑	以通用模型+Claude Science赋能药企小分子发现流程（辉瑞VOX平台自然语言检索、诺和诺德药物发现等），辅助靶点评估、文献/数据整合与研发决策
收入规模	2022-2025 收入：2828/3074/3500/4028 亿美元	2022-2025 收入：1.81/2.17/2.08/2.56 亿美元	2022-2025收入：0.40/0.45/0.59/0.75 亿美元	
盈利与毛利	毛利率 2022-2025：55.4%/56.6%/58.2%/59.6%；净盈利 599.7/738.0/1001.2/1321.7 亿美元	整体毛利率 2022-2025：55.8%/64.9%/63.6%/55.7%；净亏损1.49/-0.41/1.87/1.03亿美元	毛利率2022-2025：-21.2%/4.5%/23.1%/5.0%；净亏损2.4/3.3/4.6/6.4亿美元	
2025研发支出（亿美元）	610.9	1.731	4.75	

- 美股相关公司AI制药布局特点：
- 绝大多数科技大厂初期不卖药，卖算力 / 模型 / 云平台；只有谷歌 Isomorphic、Anthropic 开始自建药物管线，Anthropic 甚至自建内部临床管线验证模型。
- 合作对象高度集中：诺华、礼来、默沙东、赛诺菲、诺和诺德、BMS等全球 TOP 跨国药企，是 AI 制药大模型的核心客户。

公司	什么时间布局	重磅合作	商业模式
英伟达	2021年（Cambridge-1超算） 2023年（BioNeMo平台推出） 2026年1月（JPM大会与礼来共建AI联合创新实验室）	礼来：5年共建AI联合创新实验室，最高投入\$1 billion（2026.1 JPM） 罗氏/基因泰克：3500+ Blackwell GPU AI工厂（2026.3 GTC） 诺和诺德：Gefion超算合作（2025.6） 默沙东：KERMT模型合作（2025.12发布，2026.3 Merck官网报道） 阿斯利康：Cambridge-1 + MegaMolBART Chai Discovery、Boltz、Thermo Fisher等生态合作 Recursion Pharmaceuticals：5000万美元股权投资	无自有药物管线 商业模式=GPU算力+NVIDIA BioNeMo平台/SaaS+软件栈授权 同时通过股权投资（如Recursion）布局生态
谷歌	2018年（AlphaFold 1） 2021年（Isomorphic Labs成立） 2024年（AlphaFold 3）	诺华：2024年1月启动合作（预付款3750万美元，里程碑最高12亿美元），2025年2月扩展至最多6个项目 礼来：多靶点小分子发现合作（预付款4500万美元，里程碑最高17亿美元） 强生：2026年1月跨模态多靶点研究合作（小分子/抗体/多肽/分子胶） 默沙东：多年战略合作（利用AlphaFold/IsoDDE加速药物发现） 与Recursion、Anima Biotech等AI生物公司生态联动	Isomorphic Labs做自有/合作管线：IsoDDE设计候选药物，与药企合作推进临床 模式=SaaS平台授权 + 管线对外授权（里程碑+特许权使用费） Alphabet整体=平台+管线双轨；不做传统药企全栈自研
OpenAI	2023年（Moderna部署ChatGPT Enterprise） 2024年（与赛诺菲/Formation Bio合作） 2026年4月16日（发布GPT-Rosalind）	诺和诺德：全流程战略合作（2026年4月，AI覆盖药物发现/制造/供应链/商业运营，计划在未来一年内完成整合（具体时间待定）） 赛诺菲+Formation Bio：三方共建AI药物开发软件Muse（2024年） Moderna：mRNA疫苗研发整合（2023年起） 安进：GPT-Rosalind早期访问客户（2026.4） 赛默飞世尔：临床研究+制造运营（2025.10） Retro Biosciences：蛋白质工程（GPT-4b micro）	无自有药物管线 商业模式=API/订阅/企业定制 + 战略合作版税分成
微软	2019年（与诺华成立AI创新实验室） 2022年（Azure Quantum Elements 2025-2026年（深化医疗AI合作）	诺华：2019年成立AI创新实验室+Generative Chemistry合作 1910 Genetics：M12领投A轮+五年商业合作协议，共建AI制药平台 百时美施贵宝（BMS）：通过Microsoft Precision Imaging Network部署FDA批准的放射学AI算法用于肺癌早期检测（2026.1） 英矽智能：Pharma.AI on Azure（2025.6） Ginkgo Bioworks：Discovery+Cloud Lab自动化实验 Causaly：生命科学知识图谱工作流 ConcertAI：肿瘤学AI数据解决方案	无自有药物管线 商业模式=Azure云服务+AI模型授权+量子计算（未来） 同时通过M12风投布局AI制药初创公司股权
Anthropic	2025年10月（Claude for Life Sciences） 2026年4月（收购Coefficient Bio） 2026年6月30日（Claude Science+内部药物发现项目）	百时美施贵宝（BMS）：企业级Claude部署（研发/临床/制造/商业） 诺华：CEO加入董事会级深度绑定 Genmab：联合开发研发智能体 阿斯利康、赛诺菲、诺和诺德、艾伯维：临床文档与监管提交流程自动化 艾伦研究所、HHMI：基础科研多智能体系统 Coefficient Bio：约4亿美元收购（2026.4）	混合模式： ①平台服务（Claude for Life Sciences/Healthcare订阅+定制）——“卖铲人” ②自建内部临床前药物管线（聚焦被忽视疾病）——“自己挖矿” 通过内部项目验证Claude能力、积累数据、提升工具竞争力 不做对外管线授权

- 大型MNC一方面积极内部布局AI制药平台建设，另一方面同时积极探索外部合作。
- 合作生态：MNC 同时对接两类伙伴：①科技大厂（英伟达、微软、Anthropic）买算力 / 大模型底座；②AI 制药初创（英矽智能、Recursion、Exscientia、Isomorphic、Insitro 等）获取药物发现能力，合作协议普遍采用「首付 + 高额里程碑」模式。

公司	什么时间布局	重磅合作
礼来	2023年（引入英矽智能Chemistry42） 2024年10月（任命首位CAIO） 2026年1月12日（与英伟达共建AI联合创新实验室）	英伟达：5年共建AI联合创新实验室，最高投入\$1 billion（2026.1 JPM） 英矽智能：Pharma.AI平台（靶点发现+生成化学，27.5亿美元，2026.3） Chai Discovery：Chai-2生成式生物药设计平台（2026.1） Isomorphic Labs：多靶点小分子AI设计（4500万美元首付+最高17亿美元里程碑，2024.1）
罗氏	2021年（Cambridge-1超算） 2023年（与英伟达启动战略合作） 2026年3月（3500+ Blackwell GPU AI工厂）	英伟达：3500+ Blackwell GPU AI工厂（2026.3） PathAI：数字病理+AI辅助诊断（2024.2） Recursion：神经科学全基因组图谱（高达\$120亿：40个项目×最高\$3亿/项目，首付\$1.5亿） Gero：衰老相关疾病疗法（2025.7） Manifold Bio：穿越血脑屏障路径（2025.11） Oxford BioTherapeutics：肿瘤靶点发现（2025）
默沙东	2012年（与Numerate合作） 2024年起（大规模AI合作启动） 2025-2026年（持续深化）	Isomorphic Labs：AlphaFold/IsoDDE多模态药物设计（多年战略合作） AbSci：生成式生物制剂设计（最高6.1亿美元，2024） Variational AI：Enki生成式AI小分子设计（3.49亿美元，2024.1） Unnatural Products：大环类候选药物（约2.2亿美元，2024.1） Evaxion Biotech：候选疫苗（\$320万首付+每产品最高\$5.92亿里程碑 EVX-B2/EVX-B3，2024.9） 英伟达：KERMT模型合作（2025.12） Exscientia：AI小分子候选药物（预付款约2000万美元+最高约6.74亿美元里程碑款）
辉瑞	2022年（与CytoReason/PostEra合作） 2024年（AI Festival启动） 2026年1月（与Boltz战略合作）	Boltz PBC：开源生物分子基础模型定制（2026.1） PostEra：AI小分子+ADC设计（6.1亿美元，2025.1） XtalPi（晶泰科技）：AI药物发现XFEP平台（2025.6） CytoReason：免疫学/肿瘤疾病建模（2000万美元+1.1亿美元） Data4Cure：多组学知识图谱 Concerto Health AI：真实世界数据加速临床试验
阿斯利康	2019年（设立数据科学和AI部门） 2021年（Cambridge-1超算） 2026年1月（JPM期间收购Modella AI）	BenevolentAI：AI靶点发现+药物设计（CKD/IPF） Recursion：细胞成像AI+神经科学（神经科学，金额未公开披露） Modella AI：收购并整合多模态基础模型进肿瘤研发（2026.1 JPM） Absci：AI生成抗体候选（约2.47亿美元） IonQ+AWS+英伟达：量子加速药物发现（2025.6） 清华大学：AI药物研发联合研究中心（2026）
百时美施贵宝	2022年（与Owkin合作8000万美元） 2024年（与Accenture建Mosaic） 2026年（密集AI合作）	微软：Precision Imaging Network放射学AI用于肺癌早期检测（2026.1） insitro：AI靶点发现+ALS新疗法（超20亿美元） VantAI：分子胶降解剂设计（里程碑款6.74亿美元，2024） Anthropic：企业级Claude全公司部署 Owkin：心血管试验机器学习优化（8000万美元，2022） Exscientia：AI小分子发现（超12亿美元） Oxford BioTherapeutics：T细胞 engager（2026.4）

公司	什么时间布局	重磅合作
诺华	2016年（成立Biome创新实验室） 2019年（与微软成立AI创新实验室） 2024年1月（与Isomorphic Labs合作）	微软：2019年成立AI创新实验室+Generative Chemistry合作 Isomorphic Labs：小分子AI设计（3750万美元首付+最高12亿美元，2024.1扩展2025.2） Generate:Biomedicines：生成式蛋白质疗法（6500万美元首付+超10亿美元） BioAge Labs：人类长寿数据集（最高5.5亿美元） Relation Therapeutics：特异性疾病靶点（最高17亿美元，2025） Anthropic：CEO加入董事会深度绑定
强生	2024年（与Odyssey/BigHat合作） 2025年（与英伟达合作物理AI） 2026年1月（与Isomorphic Labs合作）	Isomorphic Labs：跨模态多靶点研究合作（2026.1，法律实体Janssen Biotech） Odyssey Therapeutics：难成药靶点小分子（2024.4） BigHat Biosciences：神经科学AI抗体设计（2024） 英伟达：物理AI手术模拟（2025.10） AISB联盟：联邦学习训练OpenFold3（与AbbVie等）
安进	2023年（与AWS深化合作） 2024年（任命首位CTO主管AI） 2022年1月（与Generate Biomedicines \$5000万首付+每项目最高\$3.7亿里程碑，总潜力\$19亿）	Generate:Biomedicines：生成式蛋白质/抗体设计（\$5000万首付 + 每项目最高\$3.7亿里程碑 + 个位数到低双位数版税，2022.1） AWS：生成式AI+智能制造（2023起） 英伟达BioNeMo：蛋白质工程加速（AMPLIFY发现时间缩短约一半） OpenAI：GPT-Rosalind首批接入（2026.4） Microsoft：20000名员工部署Copilot（2024）
武田	2017年起（与多家AI公司合作） 2023年（收购Nimbus TYK2资产） 2026年（密集AI合作）	英矽智能：Pharma.AI平台全球战略合作（\$600 million+ 分级版税，2026.7） Iambic Therapeutics：NeuralPlexer+自动化湿实验室（最高17亿美元，2026.2） Nabla Bio：AI蛋白质设计（超10亿美元，2025起） Schrödinger：计算化学平台（zasocitinib设计） Numerate/Recursion：早期AI合作（2017年起）
葛兰素史克	2017年起（与多家AI公司合作） 2024年（Fleming Initiative） 2026年1月（与Helix/Noetik同时签约）	Helix：GenoSphere基因组数据用于精准医疗（多年合作，2026.1.8） Noetik：虚拟细胞基础模型（5000万美元/5年，2026.1.8） Exscientia：AI小分子发现（最高3300万英镑里程碑，2022） PathAI/Tempus：数字病理+临床试验设计（2024） Oxford BioTherapeutics：肿瘤靶点发现（2025） Fleming Initiative：AMR研究（4500万英镑承诺，2024）
赛诺菲	2021年起（绑定9家AI药企） 2023年（宣布"All in AI"战略） 2026年1月（Earendil Labs 25.6亿美元）	Earendil Labs：AI双抗发现平台（累计超44亿美元：18.45亿+25.6亿） Exscientia：53亿美元小分子药物发现合作（赛诺菲首付1亿美元，若全部15个项目里程碑达成，总潜在里程碑款约52亿美元，合计53亿美元，2022.1） OpenAI+Formation Bio：Muse患者招募AI工具（2024.11） BioMap（百图生科）：LLM设计生物制剂（超10亿美元） 英矽智能：AI靶点识别+分子设计 华深智药/百图生科：双抗全球权益
艾伯维	2022年（与BigHat合作） 2024年（与Anima/Unlearn合作） 2025年（参与AISB联盟）	BigHat Biosciences：Milliner AI抗体设计平台（3000万美元首付+约3.25亿美元里程碑款，2022.12） Anima Biotech：mRNA生物学调节剂（2024） Unlearn：AI"数字孪生"临床试验（2024） Alloy Therapeutics：新型抗体发现平台（多年协议，2025） ConcertAI+Caris Life Sciences：肿瘤学AI/ML（2025） AISB联盟：联邦学习训练OpenFold3（与J&J等，2025.3）

资料来源：公司官网，西南证券整理

◆ AI 制药概述：发展史、市场规模、监管政策

◆ AI 可赋能从药物发现到商业化全流程

◆ 中美AI制药相关公司对比

3.1 美股相关公司：Google、Schrödinger、Recursion

3.2 港股相关公司：英矽智能、晶泰控股、剂泰科技

3.3 A股相关公司：成都先导、泓博医药、药石科技

- 晶泰科技是“AI for Science”领域的稀缺标的。作为港交所18C规则下“特专科技第一股”上市并快速实现扭亏为盈，其为“AI for Science”从技术概念走向产业硬实力提供了有力证明，展现了AI如何深度赋能并重塑生物医药、新材料等国家战略性产业的研发流程。
- 公司采用AI + 机器人的模式，打造了行业首创的高通量实验 - 高质量数据 - 高智能模型飞轮。机器人实验室平台已实现7×24小时进行实验，高速地积累高质量数据，这些数据正被用于训练公司的各类 AI 模型，这些模型可应用于包括靶点解析、虚拟筛选、合成策略推荐、合成反应结果预测、专利搜索及结构化地整理数据等环节。

公司固态研发方案及其相较于传统人工方法的优势



- 公司定位于全球领先的 AI 驱动药物研发平台，已形成覆盖小分子、大分子及复杂分子固态研究的全链条能力。全相较于传统需自建实验体系的 Biotech，公司采用以订单为核心的服务模式，为下游客户提供从靶点验证直至PCC交付的一站式药物发现解决方案，覆盖多种药物类型。公司的核心技术壁垒来自其自研的“AI + 量子物理计算”底层范式，在此基础上，公司构建了系统化的计算产品矩阵，包括：
- 1) AI驱动模型：小分子药物发现平台ID4Inno，大分子及抗体药物设计模型 ProteinGPT，以及抗体发现与优化模型 XupremAb；
 - 2) 量子物理计算模型：用于药物发现的 XFF、XFEP、Xpose 等高精度计算模块，以及面向固态研发的晶体结构预测平台XtalCSP；
 - 3) 自动化模型：ChemPlus平台，支撑固态研究与自动化化学合成的流程设计与执行，实现计算与机器人实验的紧密耦合。

公司各大平台及其核心功能

技术大类	平台名称	应用场景	核心功能	来源及所有权
人工智能	ID4Inno (含 ID4Idea、ID4Gibbs)	小分子药物发现	✓ 以更高效率和更低成本探索更广阔的新型药物及材料化学空间； ✓ 通过 ID4Idea 智能设计自动化实验流程并分析结果，将数据反馈给专家，由智能计算设定指标，实现闭环 AI 药物研发； ✓ ID4Idea 可根据客户需求定制，拥有超 200 个 AI 模型，覆盖分子生成、性质评估等场景； ✓ ID4Gibbs 基于物理模型和第一性原理计算，实现药物-靶标相互作用高精度预测	自 2018 年独立开发， 专有
	ProteinGPT	大分子设计和抗体药物发现	✓ 生成式算法药物和新材料设计工具，生成符合特定标准的药物和新材料； ✓ 可生成特定靶点的蛋白序列并生成结合蛋白，根据成药要求优化抗体，通过引入大语言模型（LLM）升级算法	自 2022 年独立开发， 专有
	XupremAb (含 XtaFold、XspeedPly)	抗体药物发现	✓ 包含抗体药物发现全流程关键功能，如 AI 赋能 NGS 发现、智能文库设计、亲和力和成熟、人源化、表位预测、双特异性设计和 ADC 设计； ✓ XtaFold 为抗原-抗体复合物结构预测算法，准确性高； ✓ XspeedPly 为 AI 赋能的超高通量成药型抗体展示平台	自 2021 年独立开发， 专有
基于量子物理的计算	XFF	药物发现	✓ 用于设计参数全局优化的新一代通用分子力场	自 2018 年与腾讯联合 开发，共同拥有
	XFEP	药物发现	✓ 大规模评估候选分子与生物靶点的结合亲和力，在湿实验前通过模拟筛选结果； ✓ 结合高精度、高通量力场与 AI 建模，集成增强采样算法、统计分析方法及自研 XF	自 2018 年独立开发， 专有
	XPose	药物发现	✓ 结合构象预测平台，优化不同探索及评估算法，精准预测小分子-靶点-配体的结合构象； ✓ 可构建精准构效关系（SAR）及基于结构的亲和力评估，与 XFEP 耦合预测靶点结合构象	自 2021 年独立开发， 专有
	XtalCSP	固态研发	✓ 晶型结构预测平台，全局搜索算法涵盖无实验依赖的晶型预测； ✓ 可预测多晶型系统的晶型，通过热力学稳定性评估确定不同温度下的稳定晶型	自 2015 年独立开发， 专有
自动化	ChemPlus	固态研发、自动化化学合成	✓ AI 赋能的自动化固体取样机器人，支持智能参数调整与全流程数据追踪； ✓ 可灵活、高通量处理大型、疏松、高粘度等各类固体样品； ✓ 集成先进硬件与软件，提升任务及自动化流程性能	自 2022 年独立开发， 专有

资料来源：公司公告，西南证券整理

- 生成式AI是基于Transformer等先进架构、以海量多源数据预训练为基础的新一代人工智能技术，其核心特征是具备从无到有生成全新且符合逻辑与任务约束的内容的能力，覆盖文本、图像、代码、蛋白质序列、药物分子结构等多个维度。
- 生成式AI与传统AI的核心差异在于价值定位与能力边界的本质不同：传统AI以“分析与决策”为核心价值，依赖决策树、传统CNN/RNN等任务特定的小模型，通过少量标注数据训练后，输出靶点预测、医学影像分类、患者风险分层等结构化结果，其核心作用是优化已有流程的效率与准确性，却不具备创新能力；而生成式AI以创造与生成为核心价值，基于Transformer架构的大模型，经海量未标注数据预训练后具备极强的泛化能力，可通过微调快速适配多场景，能够生成全新的非结构化或半结构化内容，其核心作用是突破传统研发的瓶颈，创造全新的研发方向与内容，尤其在生物医药等创新驱动型行业中，展现出了颠覆传统研发模式的潜力。

生成式AI与传统AI对比

核心维度	传统AI	生成式AI
核心目标	分析、决策、预测已有数据	创造全新的、符合逻辑的内容
技术架构	决策树、SVM、随机森林、传统CNN/RNN、规则引擎	Transformer架构、大模型（GPT/LLaMA）、GAN/VAE/Diffusion Model
输出类型	结构化结果（标签、数值、排名、分类）	非结构化/半结构化新内容（文本、图像、分子结构、代码、蛋白质序列）
数据需求	少量标注数据（数千至数万条）	海量未标注/弱标注数据（数十亿至万亿级 tokens）
训练方式	任务特定训练，换任务需重新训练	预训练+微调，通用能力强，可快速适配多任务
泛化能力	弱，仅适用于训练任务场景	强，支持零样本/少样本学习，适配全新任务
交互方式	单向输入输出，无上下文理解能力	多轮对话、上下文理解、复杂任务交互
创新能力	无，仅分析已有数据的规律	有，生成全新的、符合约束条件的内容
典型代表	人脸识别系统、销量预测模型、垃圾邮件过滤器、医学影像分类模型	ChatGPT、MidJourney、英矽智能药物分子生成平台、晶泰科技AI药物研发平台
应用领域	药物靶点预测、患者风险分层、医学影像分类、化疗方案推荐	全新药物分子设计、临床研究报告生成、蛋白质序列合成、胃癌治疗方案优化

- 英矽智能较早布局自主管线，核心商业模式为：Pharma.AI 平台 + 自主管线 + BD 授权模式。
- AI平台研发能力动能充足，管线BD具有持续性。已对外授权管线：USP1（BRCA 突变肿瘤）：授权 Exelixis、QPCTL（肿瘤免疫）：和礼来联合开发、KAT6 / KIF18A（实体瘤、ER+/HER2 - 乳腺癌）：授权美纳里尼、GLP-1R（肥胖代谢）：授权礼来（就是 27.5 亿美元的重磅合作项目）、Nav1.8（疼痛）：大中华区权益对外授权、PRMT5（实体瘤）：对外授权；

英矽智能核心管线



资料来源：公司官网，西南证券整理

- 特发性肺纤维化（IPF）是一种病因和发病机制尚不明确、进行性的慢性纤维化间质性肺病，随着病情进展患者的肺功能逐步丧失，最后可能因肺部组织疤痕密布而死于呼吸衰竭，影响着全球约300万人。根据弗若斯特沙利文的数据，全球IPF的发病率由2019年的55.4万例增加至2023年的61.2万例，复合年增长率为2.5%。
- 全球范围内仅有吡非尼酮（Roche/Genentech的Esbriet®）、尼达尼布（Boehringer Ingelheim的OFEV®）及那米司特（Boehringer Ingelheim的Jascayd®）获批准用于治疗 IPF。然而，现有药物和治疗手段均无法控制或逆转已受损的肺功能，吡非尼酮及尼达尼布的临床应答并不非常显著，且存在光敏反应、肝损伤及腹泻等突出不良反应，临床亟需能够综合干预疾病复杂机制且安全性更优的新型疗法。此外，吡非尼酮的专利已到期，山德士等多家制造商已上市吡非尼酮仿制药。尼达尼布仿制药预计于2026年在中国上市，并于2029年在美国上市，用于治疗IPF，届时尼达尼布相关专利将到期。

IPF 药物市场的竞争格局

通用名	品牌名称	原药制造商	FDA批准日期	药物靶点	原药获批地区
吡非尼酮	Esbriet®	Roche/Genentech	2014年10月15日	TGF-β、TNF-α及白细胞介素6	FDA、EMA、PMDA
尼达尼布	OFEV®	Boehringer Ingelheim	2014年10月15日	酪氨酸激酶	FDA、EMA、国家药监局、PMDA
那米司特	Jascayd®	Boehringer Ingelheim	2025年10月8日	磷酸二酯酶4B	FDA、国家药监局

■ 2026年7月8日，ISM001-055（Rentosertib）正式启动III期临床试验（前瞻性、随机、双盲、安慰剂对照、平行组），ISM001-055对健康受试者具有良好的安全性、耐受性及PK数据。此前II期临床结果显示，接受ISM001-055治疗的患者显示出剂量依赖性的肺功能改善，在每日一次60mg的最高剂量组中，患者的用力肺活量（FVC）与基线相比，平均提高了98.4毫升，而安慰剂组患者的FVC则下降了20.3毫升，差值达118.7毫升。与同类药物进行比较，ISM001-055观察到对肺功能的提升，而已上市药物均只能相较安慰剂延缓FVC的下降趋势，该结果提示了ISM001-055的可能“肺功能正向”潜力。

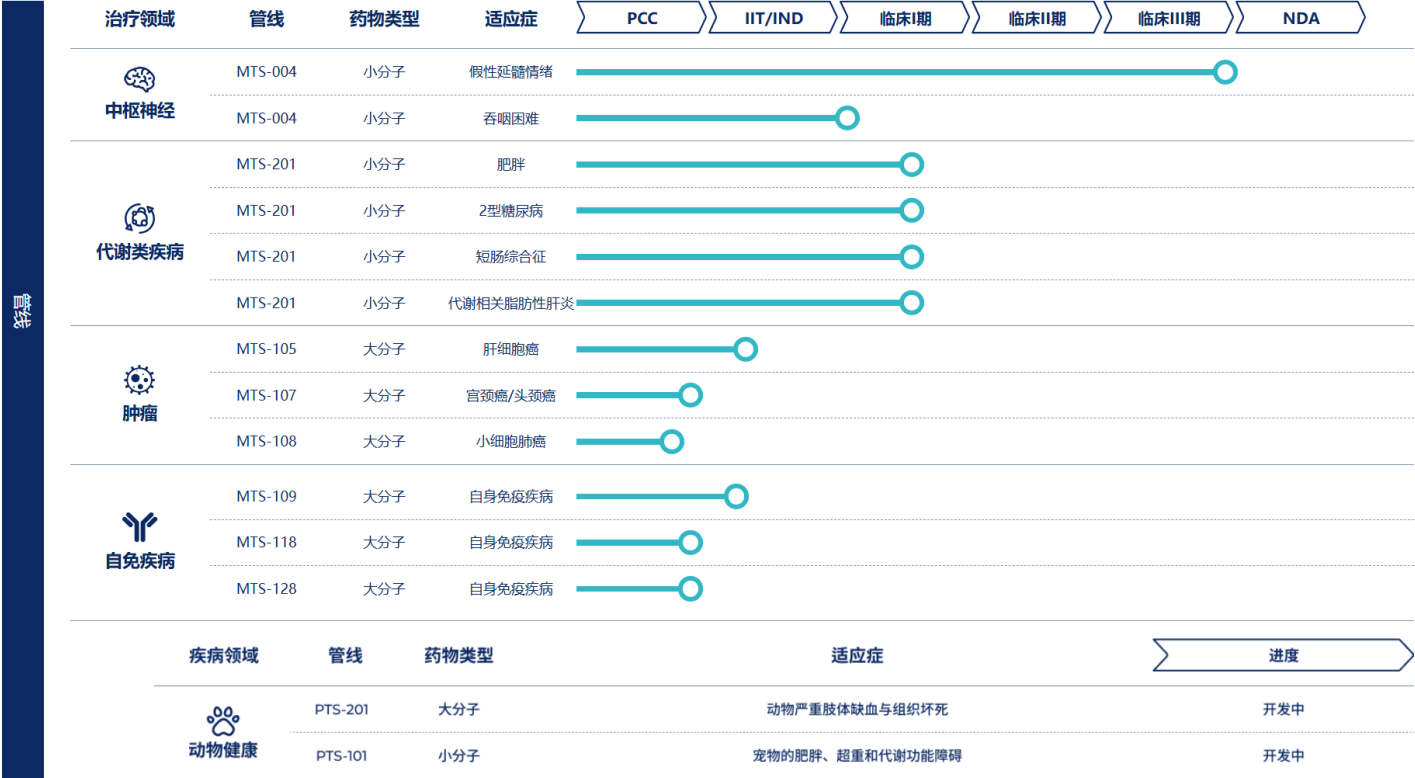
适应IPF的药物临床数据对比

名称	Rentosertib	吡非尼酮 (Pirfenidone)	尼达尼布 (Nintedanib)	那米司特	伊非尼酮	AK3280	BMS-986278
研发机构	英矽智能 (Insilico Medicine)	InterMune(现罗氏)	勃林格殷格翰	勃林格殷格翰	东阳光药	爱科百发	百时美施贵宝
靶点	TNIK	TGF-β、PDGF、bFGF等多靶点	VEGFR、FGFR、PDGFR	PDE4B	p38γ	未公开	LPAR1
临床阶段	IIa 期	已上市	已上市	已获批	III期临床	II期临床	III期临床
治疗方式	口服	口服	口服	口服	口服	口服	口服
数据来源	GENESIS-IPF (IIa 期)	ASCEND/CAPACITY/日本III期研究	INPULSIS-1/2(III期)	FIBRONEER-IPF(III期)	NCT05060822 (II期)	(II期)	IM027-040 (II期)
样本量	10vs14		638vs423	392vs391	270总	120	278vs276
中位治疗线数	一线	一线	一线	一线/二线(可联合基础治疗)	一线	一线	一线
剂量	60mg qd	600mg tid	150mg bid	18mg bid	200mg qd	400mg bid	30mg bid
周期(周)	12	15	52	52	24	24	26
FVC改善幅度 (ML)	98.4vs-20.3	(-90vs-160)	(-113.6vs-223.5)	(-114.7vs-183.5)	较安慰剂减少80ml, 延缓下降的比例 96%vs47%	增加209.4	变化率-1.2%vs-2.7%
>3级 TRAE发生率	16.7%vs5.9%			30%vs33%			
对照组	安慰剂	安慰剂	安慰剂	安慰剂	吡非尼酮；安慰剂	安慰剂	安慰剂
2020销售额 (百万美元)		1162	2281.1				
2021销售额		1124.1	2904.6				
2022销售额		753.4	3397.4				
2023销售额		218.5	3757.1				

资料来源：Insight，弗若斯特沙利文分析，西南证券整理

- **MTS-004：国内首款治疗假性延髓情绪的口腔崩解片，III期临床顺利达到终点。**MTS-004是一款源自AiTEM平台的小分子候选药物片，针对PBA患者常见吞咽困难问题，相较于NUEDEXTA®胶囊剂型，MTS-004口崩片无需用水即可在口腔中快速溶解且口感良好。
- MTS-004兼具良好的安全性与疗效，III期临床结果显示：经过12周治疗，MTS-004显著减少PBA的平均发作次数，并自第2周起即观察到疗效，治疗持续期间无发作日显著增加，且改善幅度随时间延长而增加。此外，MTS-004在CNS-LS评分、CGI-C和PGI-C评估以及SF-36心理健康指数上均提示对患者情绪控制和生活质量的明显改善，亦显著改善CNS-BFS总分，对吞咽、流涎症状也展现出明确的改善趋势。

公司在研管线



维度	英矽智能（03696.HK）	晶泰控股（2228.HK）	剂泰科技（07666.HK）
业务定位	AI+Biotech + AI Drug Discovery 平台，“平台+管线”双轮驱动	AI+CRO + AI4Science 平台，聚焦药物与材料的 R&D 服务	AiTEM 聚焦小分子制剂研发优化+NanoForge 全球首个 AI 纳米递送平台，覆盖核酸药研发全流程
市场定位	港股"AI 制药第一股 / AI+Biotech 龙头"	港股"18C 特专科技第一股 / AI4S 龙头"	AI 制剂与纳米递送创新领跑企业
核心商业模式	管线授权（首付款+里程碑+版税，2024 收入中占 93%）+ Pharma AI 软件订阅（约 5%）+ 少量非医药发现	药物发现解决方案（2025 收入 5.38 亿元，占比 67.0%）+ 智能自动化解决方案（2025 收入 2.65 亿元，占比 33.0%）	双轮驱动商业模式，以AI递送平台（AiTEM/AiLNP/AiRNA）为技术底座，通过“平台合作”赚取短期服务与许可收入，通过“产品合作”将自研管线对外授权兑现长期价值
主要业务	AI+SaaS：软件解决方案（Pharma AI 订阅/部署） AI+CRO：药物发现服务+合作项目 AI+Biotech：自研管线 + License-out	AI+CRO：药物发现解决方案 智能自动化解决方案 平台型 license-out 的雏形	AiTEM平台：AI+ 小分子制剂优化 NanoForge平台：AI + 核酸药物递送系统
技术底座	端到端生成式 AI 平台 Pharma AI（Biology42、Chemistry42、Medicine42、Science42）+ 自动化生物学实验室	量子物理+AI+云计算+机器人：智能计算平台（XtalFold、XupremAb、ID4Inno、PepIX）+ 自动化机器人湿实验室集群	端到端 AI 制剂与递送平台（AiTEM、NanoForge）+ 自动化制剂研发实验室
自研管线	>20 项临床或 IND 阶段资产；ISM001-055 为全球进展最快 AI 发现的 IPF 候选药物，IIa 完成，争取 2026 年中进入 IIb/III	不做重资产临床管线，自研定位为平台能力与部分消费材料分子（如生发分子等）	基于AiTEM小分子制剂优化平台开发的MTS-004已达到III期临床主要终点，为国内首款完成III期临床的AI制剂新药，亦是国内首个且唯一完成III期的假性延髓情绪失控(PBA)治疗药物
客户结构与集中度	与全球前 20 大药企中 13 家合作；2022-2025前五大客户收入占比 90.6%/94.1%/94.4%/74.2%	客户 300+，全球前 20 大药企中 17 家为客户；2025H1 收入高度依赖 DoveTree 首付款（4 亿元中约 3.5 亿元为首付款），单一项目集中度 高但客户总体分散	客户主要包括全球顶级制药公司、创新生物技术公司以及医学研究机构，2022-2025前五大客户收入占比98.0%/83.7/98.9%
大分子	核心平台为 Biology 42 下的 Generative Biologics，依托十余种生成/预测模型及物理工具，可靶向难成药靶点与特定表位，24 小时内生成高质量 Binder 候选物；商业模式为授权合作+灵活服务组合	核心技术含 XtalFold Ultra 结构预测、ProteinGPT 生成式 AI、XupremAb 设计平台等，通过生成式 AI+量子物理计算实现全流程自动化加速；商业模式分模块化服务（6-12 个月）与联合研发（1-3 年，按里程碑收费）	核心平台为NanoForge AI 纳米递送平台，全球首个 AI 纳米递送平台，聚焦 mRNA、核酸药物等大分子生物药的递送系统开发，实现从分子设计到剂型确定的全流程研发闭环
小分子	核心平台为 Chemistry42，以生成式 AI+物理方法为核心，简化苗头化合物筛选、先导化合物提名及优化全流程，可实现分子设计、合成路线预测、ADMET 特性优化等功能	以量子物理计算+AI为双驱动，依托 XFEP 自由能微扰平台、XFF 分子力场、ID4Inno 平台及 XPose 结合构象预测技术，精准预测靶点结合亲和力；商业模式含模块化服务与一站式服务	核心平台为AiTEM 小分子制剂优化平台，覆盖小分子药物的晶型筛选、处方开发、工艺优化全流程，支撑改良型新药与创新药的制剂研发，以 AI 算法驱动制剂设计，联动自动化实验形成数据迭代闭环，压缩传统制剂研发的试错周期与成本。
收入规模	2022-2025 收入：0.30 / 0.51 / 0.86 / 0.56 亿美元	2022-2025 收入：0.19 / 0.25 / 0.37 / 1.14 亿美元	2023-2025收入：0.013/0.002/0.145 亿美元
盈利与毛利	毛利率 2022-2025：63.4%/75.4%/90.4%/81.5%；净亏损 2.218 / 2.116 / 0.171 / 3.523 亿美元	整体毛利率 2022-2025：49.6%/27.7%/46.3%/69.7%；2025 净利润0.18 亿元，实现扭亏	毛利率2023-2025：59.8%/55.5%/98.2%；净亏损0.08/0.69/0.54亿美元
2025研发支出（亿美元）	0.814	0.81	0.37
BD 合作对象	51	35	3
22 至今 BD 总金额（亿美元）	121.35	69.99	16.20

◆ AI 制药概述：发展史、市场规模、监管政策

◆ AI 可赋能从药物发现到商业化全流程

◆ 中美AI制药相关公司对比

3.1 美股相关公司：Google、Schrödinger、Recursion

3.2 港股相关公司：英矽智能、晶泰控股、剂泰科技

3.3 A股相关公司：成都先导、泓博医药

维度		成都先导（688222）	泓博医药（301230）
业务定位		"DEL 药物发现平台" + "服务+自研双轮驱动"	AI驱动药物设计（DiOrion平台）+ CRO/CDMO/CMO一站式综合服务，"技术平台+产品管线"双轮驱动
市场定位		全球领先的DEL新药发现服务商。	小分子创新药一站式CRO/CDMO服务商
核心商业模式		新药研发服务+化合物IP转让+自研管线权益转让，远期MAH上市	药物发现（CRO）+工艺研究与开发（CRO/CDMO）+商业化生产（含CMO）
主要业务		以全球最大DEL化合物库为核心，整合FBDD/SBDD、OBT、TPD、AI五大平台通过“研发服务+IP转让+自研管线”三路径变现，累计服务600+客户、转让135个项目自研管线HG146进入II a期	DiOrion AI平台：药物设计平台为引擎 嵌入 CRO/CDMO/CMO 全产业链的AI制药服务商 “AI 预测/实验验证/交付反馈”闭环：持续强化药物发现的效率与成功率
技术底座		以DEL为核心，整合FBDD/SBDD、OBT、TPD、CPM及DEL+AI平台	自研DiOrion AI平台（九大模块）为核心+12大实验技术平台（酶化学、连续流、小核酸等），形成 “AI预测+湿实验验证” 的干湿闭环技术底座
自研管线		HG146（HDAC抑制剂，II a期）、HG381（STING激动剂，I 期）领衔，另有多项临床及PCC阶段项目，聚焦肿瘤与免疫	覆盖心血管、抗病毒、代谢、皮肤四大领域，核心品种替格瑞洛、左卡尼汀、本维莫德均已获批备案，左卡尼汀及替格瑞洛获欧洲CEP证书
客户结构与集中度		海外客户为主，客户集中度适中；2022-2025前五大客户收入占比39.36%/32.43%/34.65%/38.57%	客户高度分散，以海外大药企及Biotech为主（占营收69.22%），2022-2025前五大客户收入占比29.66%/23.21%/20.20%/21.57%
大分子		OBT寡核苷酸（siRNA/ASO+自主递送分子）、TPD蛋白降解（PROTAC/分子胶）、DEL多肽库（类环肽+线性肽超4500亿）；商业模式为寡核苷酸/多肽/降解剂研发服务（FTE+FFS）+递送分子与化合物IP转让+自研降解剂管线权益转让	小核酸药物技术平台具备sgRNA（向导RNA）研发技术，可服务于基因编辑相关的靶点发现与药物开发；多肽技术平台拥有液相（LPPS）及固相（SPPS）多肽合成能力，自研AI平台（DiOrion）集成多肽设计模块（DiOrion-PepGen），环肽药物的结构预测与AI辅助设计
小分子		DEL化合物库（1.2万亿小分子）、FBDD/SBDD（片段/结构药物设计）、ChemSer高通量合成、HAILO（DEL+AI+自动化）；商业模式新药发现研发服务（FTE+FFS）+化合物IP转让（累计135项目）+自研管线权益转让（HG146等）	AI智能设计平台（DiOrion）集成了虚拟高通量筛选（VHTS）、分子生成（MolGen）及成药性预测（PropEval）等模块，专门针对小分子进行基于结构的药物设计（SBDD）和先导化合物优化
收入规模		2022-2025 收入：3.30 / 3.71 / 4.27 / 5.26亿元	2022-2025收入：4.79/4.90/5.44/6.88 亿元
盈利与毛利		整体毛利率 2022-2025：47.67%/49.28%/51.89%/54.24%；净盈利0.25/0.41/0.51/1.10亿元	毛利率2022-2025：36.87%/30.88%/23.87%/27.41%；净盈利 0.67/0.38/0.17/0.34亿元
25研发支出（亿元）		0.72	0.37

■ 全球AI制药竞争格局：当前全球AI制药已上市一款BioXcel的改良新药；华润三九的GIPR/GLP1R肥胖适应症已申请上市；位于临床III期的共计6款，其中国内有5款；位于临床II期的共计25款。

药品成分	新药类型	研发机构	靶点	项目中国内地最高状态	项目中国内地最高状态时间	项目境外最高状态	项目境外最高状态时间	适应症中国内地最高状态	适应症境外最高状态	药物类型
BGM0504	新药	博瑞生物医药（苏州） 博瑞新创生物医药科技（无锡） 华润三九医药（Licensee）	GIPR GLP1R	申请上市	2026-06-11	临床III期	2025-07-14	申请上市: 肥胖 临床III期: 2型糖尿病	临床III期: 2型糖尿病 临床I期: 肥胖	化药
米罗那非-AR1001	改良新	ARIBIO 上海复星医药（集团）（BigPharma） （Licensee） Sk Chemicals（Licensee） 丑科智联（上海）制药（Licensee） Arcera（Licensee） 博纳西亚（合肥）医药科技	PDE5A	临床III期	2022-09-08	临床III期	2022-09-08	临床III期: 阿尔兹海默病	临床III期: 阿尔兹海默病 临床中（分期未知）: 血管性痴呆	化药
奎尼丁+右美沙芬-MTS004	改良新	杭州剂泰医药科技有限责任公司 浙江引安医药科技（Licensee）	CYP2D6 GRIN SIGMAR1	临床III期	2023-01-09	-	-	临床III期: 假性延髓效应 批准临床: 急性缺血性卒中的神经保护 临床前: 吞咽困难	-	化药
泽索替尼	新药	武田药品工业株式会社 Nimbus Lakshmi 武田（中国）国际贸易 Nimbus Therapeutics Schr ödinger	TYK2	临床III期	2023-10-18	临床III期	2023-10-18	临床III期: 斑块状银屑病, 银屑病关节炎 临床II期: 克罗恩病, 溃疡性结肠炎, 非节段型白癜风, 化脓性汗腺炎	临床III期: 斑块状银屑病, 红皮病型银屑病, 泛发性脓疱型银屑病, 银屑病关节炎 临床II期: 克罗恩病, 溃疡性结肠炎, 非节段型白癜风, 化脓性汗腺炎 临床前: 炎症性肠病	化药
MDR-001	新药	杭州德睿智药科技	GLP1R	临床III期	2025-12-10	批准临床	2022-12-23	临床III期: 肥胖 批准临床: 2型糖尿病 临床前: 代谢性疾病	批准临床: 肥胖, 2型糖尿病	化药
GB-0895	新药	Generate Biomedicines	TSLP	-	-	临床III期	2025-12-11	-	临床III期: 哮喘 临床I期: 慢性阻塞性肺疾病	生物药
布比卡因-GBI268	改良新	智耀生物医药（苏州） 苏州智耀生物科技	SCN4A	临床III期	2026-05-20	-	-	临床III期: 术后疼痛 批准临床: 麻醉, 急性疼痛	-	化药
Rentosertib	新药	英矽智能科技（上海）	TNIK	临床III期	2026-06-30	临床II期	2023-08-04	临床III期: 特发性肺纤维化	临床II期: 特发性肺纤维化 临床前: 衰老, 肾纤维化 临床II/III期: 结直肠癌	化药
GRANITE	新药	Gritstone bio	-	-	-	临床II/III期	2021-12-02	-	临床I/II期: 非小细胞肺癌, 尿路上皮癌/膀胱癌 食管癌, 胃癌	生物药
EVX-01	新药	Evaxion Biotech 默沙东制药	-	-	-	临床II期	2022-04-04	-	临床II期: 黑色素瘤 临床I/II期: 非小细胞肺癌, 尿路上皮癌/膀胱癌	生物药
OPL-0401	新药	Valo Health（暂停）	ROCK1 ROCK2	-	-	临床II期	2022-05-26	-	临床II期: 非增殖性糖尿病视网膜病变	化药
NX-13	新药	艾伯维生物制药 Landos Biopharma 上海联拓生物科技（Licensee）	NLRX1	-	-	临床II期	2023-03-27	-	临床II期: 溃疡性结肠炎	化药

资料来源：Insight，西南证券整理

药品成分	新药类型	研发机构	靶点	项目中国内地最高状态	项目中国内地最高状态时间	项目境外最高状态	项目境外最高状态时间	适应症中国内地最高状态	适应症境外最高状态
ST-1898	新药	北京赛特明强医药科技	AXL KIT PDGFRA RET VEGFR2 c-Met	临床II期	2023-09-27	-	-	临床II期: 甲状腺分化癌 临床I/II期: 肾细胞癌,黑色素瘤,透明细胞肾细胞癌 临床I期: 实体瘤,非小细胞肺癌,肠癌,胃癌,肝癌	-
GI-102 (全球 FIC)	新药	GI Innovation	CD80 IL2RB	-	-	临床II期	2025-12-24	-	临床II期: 胶质母细胞瘤,星形细胞瘤,衰老 临床I/II期: 实体瘤,黑色素瘤,非小细胞肺癌,卵巢上皮癌,Merkel细胞癌 申请临床: 前列腺癌
AR1005	新药	ARIBIO Samjin Pharmaceutical	Sodium channel	-	-	临床II期	2024-08-05	-	临床II期: 路易体痴呆 临床前: 轻度认知障碍,糖尿病并发/合并症
HLX-1502	新药	Healx	-	-	-	临床II期	2024-08-07	-	临床II期: I型神经纤维瘤病-丛状神经纤维瘤 临床前: II型神经纤维瘤病
NEU-411	新药	Neuron23	LRRK2	-	-	临床II期	2024-11-08	-	临床II期: 帕金森病
TRD205	新药	北京泰德制药 正大制药集团	AGTR2	临床II期	2025-02-19	批准临床	-	临床II期: 神经病理性疼痛,术后疼痛 临床I期: 周围神经性疼痛	批准临床: 神经病理性疼痛
Travaltrevir	新药	Traws Pharma Trawsfynydd Therapeutics	3CLpro	-	-	临床II期	2025-09-05	-	临床II期: 2019冠状病毒感染
Garutadustat	新药	英矽智能	HIFPH1 HIFPH2	临床II期	2025-09-21	临床I期	2023-08-25	临床II期: 溃疡性结肠炎 临床I期: 炎症性肠病	-
LK101	新药	北京立康生命科技	-	临床II期	2025-09-22	批准临床	2025-02-05	临床II期: 肺癌,非小细胞肺癌 临床I期: 肝细胞癌,实体瘤	批准临床: 肿瘤
CTH120	新药	Connecta Therapeutics Adknoma Health Research	NTRK2	-	-	临床II期	2025-12-01	-	临床II期: 脆性X综合征 临床前: 瑞特综合征,自闭症谱系障碍,唐氏综合征,迪乔治综合征
Rexaceract	新药	Gain Therapeutics	GBA	-	-	临床I期	2023-08-10	-	临床I期: 帕金森病 临床前: 阿尔兹海默病,戈谢病,路易体痴呆
ENV-294	新药	Enveda Biosciences	-	-	-	临床II期	2025-12-23	-	临床II期: 特应性皮炎,哮喘
ATH-63	新药	Athos Therapeutics	EHMT2	-	-	临床II期	2026-01-21	-	临床II期: 溃疡性结肠炎 临床I期: 克罗恩病,炎症性肠病,自身免疫性疾病 临床前: 系统性红斑狼疮
HX15001	新药	华深智药 Earendil Labs	TL1A	临床II期	2026-01-22	临床I期	2025-05-31	临床II期: 溃疡性结肠炎 临床前: 结肠炎,银屑病	-
Viroksavir	新药	Viriom ASAVI Traws Pharma (Licensee) Trawsfynydd Therapeutics (Licensee)	Endonuclease RdRp	-	-	临床II期	2026-01-28	-	临床II期: 乙型流感病毒感染,甲型流感病毒感染 临床I期: 流感病毒感染,禽流感
XBH25 (全球 FIC)	新药	上海寻百会生物技术	IGSF8	临床II期	2026-05-18	临床I/II期	2022-12-30	临床II期: 子宫内膜癌,宫颈癌,卵巢上皮癌,三阴性乳腺癌,前列腺癌,头颈部鳞状细胞癌,食管鳞癌,肝细胞癌,胆道癌,结直肠癌,胰腺癌,非小细胞肺癌,小细胞肺癌,黑色素瘤,实体瘤 临床I/II期: 实体瘤,子宫内膜癌,非小细胞肺癌,结直肠癌,皮肤黑色素瘤,头颈癌	临床I/II期: 睾丸癌,头颈癌,透明细胞肾细胞癌,胃癌,乳腺癌,胶质瘤
口服BGM0504	新药	博瑞生物医药 (苏州)	GIPR GLP1R	临床II期	2026-05-19	临床I期	2025-09-10	临床II期: 肥胖 临床前: 2型糖尿病	临床I期: 肥胖

项目名称	转让方	受让方	交易时间	交易总额（百万美元）	首付款（百万美元）	交易类型
每月一次注射用体重管理产品组合，三个处于临床前阶段、具备不同作用机制的研发项目，石药集团专有的缓释给药技术平台，石药集团专有的多肽药物AI发现平台，依托该平台就另外四个新增项目	Aizen Therapeutics	未披露企业	2026-08-15	100	-	合作
novel degraders for immune-mediated diseases, two programs from Monte Rosa’s growing preclinical immunology portfolio	深圳晶蛋生物医药科技有限公司	Almirall	2026-08-09	290.2	-	合作, 授权/许可
新型口服候选药物的发现和开发，AI引擎双轮驱动的高效药物发现平台	英矽智能	保瑞藥業股份有限公司	2026-07-15	2500	-	合作
Valo Opal Computational Platform™	英矽智能	康哲药业控股有限公司	2026-07-13	176.54	-	合作
Novel T treatments for Parkinson’s Disease and Related Disorders, Valo’s AI-enabled human causal biology platform	ARIBIO	上海复星医药（集团）股份有限公司	2026-07-03	28.42	7.69	投资, 期权
potentially best-in-class, novel oral therapeutics in preclinical development for certain indications	石药集团有限公司	阿斯利康制药	2026-07-02	1770	30	期权, 合作
结合英矽智能的Pharma.AI平台与保瑞在全球范围内的研发、生产、质量控制及商业化能力，探索创新的药物	英矽智能	武田药品工业株式会社	2026-07-02	600	60	合作
聚焦神经免疫性疾病领域，借助AI技术发现创新药物候选分子	杭州剂泰医药科技有限责任公司	Boulevard Bio	2026-06-30	1620	20	授权/许可
custom site-specific recombinases	Immunai	勃林格殷格翰制药	2026-06-25	15	15	授权/许可
Manifold’s proprietary tissue-targeting shuttle portfolio, Manifold’s mDesign direct-to-vivo AI-guided drug discovery engine, Multiple Next-Generation Brain Shuttles for Neurological Diseases	英矽智能	SK Biopharmaceuticals	2026-06-22	2500	4.5	合作
YS2302018	Protillion Biosciences	默克制药	2026-06-16	510	-	合作, 授权/许可
Inceptive’s generative AI models, Alnylam’s R&D engine	Orionis Biosciences	诺华制药	2026-06-10	1440	40	合作
insitro’s ChemML™ platform, discover molecules with potential as next-generation therapies for ALS	深圳晶泰科技有限公司	未披露企业	2026-06-10	400	-	合作
HXN-1003, HXN-1002	Inceptive Nucleics, Inc.	Alnylam Phamaceuticals	2026-06-03	2000	30	合作, 投资
SYH2039, 由该化合物组成或含有该化合物的任何药品	Genesis Therapeutics	Incyte Corporation	2026-05-20	1000	120	合作
针对两个靶点共同发现和开发具有治疗肾脏疾病多种适应症潜力的临床前候选药物，石药专有的siRNA药物发现平台和肝外靶向递送平台；石药专有的AI分子设计模型	ARIBIO	上海复星医药（集团）股份有限公司	2026-05-13	240	-	期权, 合作
Relation’s AI-powered drug discovery platform and human data generation capabilities	Profluent Bio	礼来制药	2026-04-28	2250	-	合作, 授权/许可
AI drug discovery	Queensland Medical	Kazia Therapeutics	2026-04-14	1.39	1.39	授权/许可
AI technology platform	英矽智能	礼来制药	2026-03-29	2750	115	授权/许可
Induced Proximity Drug Discovery	英矽智能	元舜生物	2026-03-26	94.75	-	合作
三特异性TCE：MTS-128	Dyno Therapeutics	安斯泰来制药	2026-03-24	15	15	授权/许可
molecular glue and E3-ligase pairing platform	勤浩医药（苏州）股份有限公司	吉利德制药	2026-02-13	1530	80	合作, 授权/许可
MAT2A抑制剂GH31	Iambic Therapeutics	武田药品工业株式会社	2026-02-09	1700	-	授权/许可
Oral macrocyclic peptide drugs, UNP’s proprietary drug discovery platform	石药集团有限公司	阿斯利康制药	2026-01-30	18500	1200	授权/许可, 合作
Orionis’s Allo-Glue™ platform, together with its AI-driven discovery engine, molecular glue	北京英飞智药科技有限公司	NeuAngel Biopharmaceuticals	2026-01-28	2.86	-	合作
Oral Obesity Drug, computational chemistry and structure-based drug design approach	英矽智能	齐鲁制药集团有限公司	2026-01-27	119	-	合作
AI technology platform	英矽智能	深圳衡泰生物科技有限公司	2026-01-20	64.14	10.01	合作, 授权/许可
整合生成式AI与自动化化学的技术平台	CytoReason	赛诺菲制药	2026-01-09	16	-	合作
AAV Gene Therapy Vectors	Iktos	施维雅制药	2026-01-08	1170.08	-	合作
FS001	Nimbus Therapeutics	礼来制药	2026-01-06	1300	55	合作, 授权/许可
RNA-Targeted Oligo Therapy	ARIBIO	上海复星医药（集团）股份有限公司	2026-01-06	430.67	-	授权/许可
GEMS artificial intelligence (AI) platform for collaborating on two targets to at least five new targets selected by Incyte	Variant Bio	勃林格殷格翰制药	2026-01-06	120	-	合作
Nabla’s proprietary design platform	英矽智能	施维雅制药	2026-01-05	888	-	合作

资料来源：Insight，西南证券整理；筛选条件为26年至今有交易总额的BD

项目名称	转让方	受让方	交易时间	交易总额 (百万美元) 首付款 (百万美元)		交易类型
每月一次注射用体重管理产品组合，三个处于临床前阶段、具备不同作用机制的研发项目，石药集团专有的缓释给药技术平台，石药集团专有的多肽药物AI发现平台，依托该平台就另外四个新增项目	石药集团	阿斯利康制药	2026-01-30	18500	1200	授权/许可，合作
novel degraders for immune-mediated diseases，two programs from Monte Rosa’s growing preclinical immunology portfolio	Monte Rosa Therapeutics	诺华制药	2025-09-15	5700	120	合作，期权，授权/许可
新型口服候选药物的发现和开发，AI引擎双轮驱动的高效药物发现平台	石药集团	阿斯利康制药	2025-06-13	5330	110	合作，期权
Valo Opal Computational Platform™	Valo Health	诺和诺德制药	2025-01-08	4790	190	授权/许可
Novel Treatments for Parkinson’s Disease and Related Disorders，Valo’s AI-enabled human causal biology platform	Valo Health	默克制药	2025-11-20	3000	-	合作，授权/许可
potentially best-in-class, novel oral therapeutics in preclinical development for certain indications	英矽智能	礼来制药	2026-03-29	2750	115	授权/许可
结合英矽智能的Pharma.AI平台与保瑞在全球范围内的研发、生产、质量控制及商业化能力，探索创新的药物	英矽智能	保瑞藥業	2026-07-15	2500	-	合作
聚焦神经免疫性疾病领域，借助AI技术发现创新药物候选分子	英矽智能	SK Biopharmaceuticals	2026-06-22	2500	4.5	合作
custom site-specific recombinases	Profluent Bio	礼来制药	2026-04-28	2250	-	合作，授权/许可
Manifold’s proprietary tissue-targeting shuttle portfolio，Manifold’s mDesign direct-to-vivo AI-guided drug discovery engine，Multiple Next-Generation Brain Shuttles for Neurological Diseases	Manifold Bio	罗氏制药	2025-11-01	2055	55	授权/许可，合作
YS2302018	石药集团	阿斯利康制药	2024-10-07	2020	100	授权/许可
Inceptive’s generative AI models，Alnylam’s R&D engine	Inceptive Nucleics, Inc.	Alnylam Pharmaceuticals	2026-06-03	2000	30	合作，投资
insitro’s ChemML™ platform，discover molecules with potential as next-generation therapies for ALS	insitro	百时美施贵宝制药	2025-10-14	2000	20	合作，期权
HXN-1003，HXN-1002	Earendil Labs	赛诺菲制药	2025-04-17	1845	125	授权/许可
SYH2039，由该化合物组成或含有该化合物的任何药品	石药集团	百济神州	2024-12-13	1835	150	授权/许可
针对两个靶点共同发现和开发具有治疗肾脏疾病多种适应症潜力的临床前候选药物，石药专有的siRNA药物发现平台和肝外靶向递送平台；石药专有的AI分子设计模型	石药集团	阿斯利康制药	2026-07-02	1770	30	期权，合作
Relation’s AI-powered drug discovery platform and human data generation capabilities	Relation Therapeutics	诺华制药	2025-12-09	1755	55	合作
AI drug discovery	Iambic Therapeutics	武田药品工业株式会社	2026-02-09	1700	-	授权/许可
AI technology platform	Isomorphic Labs	礼来制药	2024-01-07	1700	45	合作
Induced Proximity Drug Discovery	Proxima	蓝图药物公司	2025-05-20	1670	-	合作
三特异性TCE：MTS-128	杭州剂泰医药科技有限责任公司	Boulevard Bio	2026-06-30	1620	20	授权/许可
molecular glue and E3-ligase pairing platform	Triana Biomedicines	辉瑞制药	2024-10-15	1549	49	合作
MAT2A抑制剂GH31	勤浩医药（苏州）	吉利德制药	2026-02-13	1530	80	合作，授权/许可
Oral macrocyclic peptide drugs，UNP’s proprietary drug discovery platform	Unnatural Products	Argenx	2025-07-01	1500	-	合作，期权
Orionis’s Allo-Glue™ platform, together with its AI-driven discovery engine，molecular glue	Orionis Biosciences	诺华制药	2026-06-10	1440	40	合作
Oral Obesity Drug，computational chemistry and structure-based drug design approach	Nimbus Therapeutics	礼来制药	2026-01-06	1300	55	合作，授权/许可
AI technology platform	Isomorphic Labs	诺华制药	2024-01-07	1200	37.5	合作
整合生成式AI与自动化化学的技术平台	Iktos	施维雅制药	2026-01-08	1170.08	-	合作
AAV Gene Therapy Vectors	Dyno Therapeutics	罗氏制药	2024-10-24	1050	50	合作
FS001	昱言生物科技（北京）	益普生制药	2024-07-11	1030	-	授权/许可
RNA-Targeted Oligo Therapy	Creyon Bio	礼来制药	2025-04-29	1013	13	授权/许可，合作
GEMS artificial intelligence (AI) platform for collaborating on two targets to at least five new targets selected by Incyte	Genesis Therapeutics	Incyte Corporation	2026-05-20	1000	120	合作
Nabla’s proprietary design platform	Nabla Bio	武田药品工业株式会社	2025-10-14	1000	-	合作，授权/许可
VantAI’s frontier AI and structural proteomics discovery platform，Halda’s novel and clinically validated RIPTAC™ modality，Oncology RIPTAC，Immunology RIPTAC	Proxima	Halda Therapeutics	2025-08-19	1000	-	合作

资料来源：Insight，西南证券整理；筛选条件为24年至今有交易总额的BD

项目名称	转让方	受让方	交易时间	交易总额 (百万美元)	首付款 (百万美元)	交易类型
创新抗肿瘤疗法, Pharma.AI	英矽智能	施维雅制药	2026-01-05	888	-	合作
用于治疗乳腺癌的下一代CDK 抑制剂产品组合, 下一代CDK抑制剂	锐格医药	基因泰克	2024-09-30	850	850	转让/收购
AR1001	ARIBIO	纽科智联 (上海) 制药有限公司	2024-03-24	770	90	授权/许可
AI platform	Proxima	百时美施贵宝制药	2024-02-13	674	-	合作
drug candidates that improve muscle health and body composition , JUV-161 , JUV-112	Juvena Therapeutics	礼来制药	2025-06-11	650	-	授权/许可, 合作
small molecule program with an initial focus in Parkinson's disease , another undisclosed neurodegenerative indication	Vesalius Therapeutics	葛兰素史克制药	2024-11-12	650	80	授权/许可, 合作, 期权
Antibody-Drug-Conjugate (ADC) , PostEra's AI platform, Proton	PostEra	辉瑞制药	2025-01-07	610	12	合作
双方将依托英矽智能的Pharma.AI平台, 在武田制药选定的多个治疗领域共同推进创新候选药物研发	英矽智能	武田药品工业株式会社	2026-07-02	600	60	合作
AR1001	ARIBIO	Arcera	2025-06-10	600	-	授权/许可
EVX-B3	Evaxion Biotech	默沙东制药	2025-09-25	599.5	7.5	授权/许可
高选择性、潜在同类最佳 (best-in-class) 小分子抑制剂	英矽智能	Stemline Therapeutics , 美纳里尼	2025-01-10	550	20	授权/许可
integrated AI and wet lab technologies to design developable, selective, and functionally active protein drugs against multipass membrane protein targets	Nabla Bio	阿斯利康制药, 百时美施贵宝制药, 武田药品工业株式会社	2024-05-14	550	-	合作, 授权/许可
Protillion' s proprietary Prot-MaP™ technology	Protillion Biosciences	默克制药	2026-06-16	510	-	合作, 授权/许可
ISM5043	英矽智能	Stemline Therapeutics , 美纳里尼	2024-01-05	500	12	授权/许可
Dewpoint' s TDP-43 small molecule condensate modulator (c-mod) for amyotrophic lateral sclerosis (ALS)	Dewpoint Therapeutics	田边三菱制药株式会社	2024-12-01	480	-	授权/许可, 期权
a Novel Transcription Factor for Autoimmune Diseases	Nurix Therapeutics	赛诺菲制药	2025-04-02	465	-	授权/许可
ReSOLVE® , Small-Molecule Medicines	Ventus Therapeutics	基因泰克	2025-10-21	460	-	合作, 授权/许可
AR1001	ARIBIO	上海复星医药 (集团) 股份有限公司	2026-01-06	430.67	-	授权/许可
a heart disease program to treat dilated cardiomyopathy (DCM) patients	Dewpoint Therapeutics	拜耳医药	2024-10-24	424	-	授权/许可
ATLX-1282	Alchemab Therapeutics	礼来制药	2025-05-06	415	-	授权/许可
Genetic Leap's RNA-targeted AI platform	Genetic Leap	礼来制药	2024-09-05	409	-	合作
针对一个GPCR (G蛋白偶联受体) 靶点, 共同开发具备"同类最佳 (Best-in-Class)"潜力的创新口服小分子药物	深圳晶泰科技有限公司	未披露企业	2026-06-10	400	-	合作
AI Proteins' powerful discovery platform , miniproteins for two undisclosed targets	AI Proteins	百时美施贵宝制药	2024-12-03	400	-	合作, 期权
multi-specific antibodies , antibody-drug conjugates (ADCs) against novel therapeutic targets	Biologic Design	默克制药	2024-06-03	376	-	合作
Enki™ platform	Variational AI	默沙东制药	2025-09-23	349	-	合作, 授权/许可
AI-powered bispecific antibody engineering platform	Ailux Biologics	礼来制药	2025-11-05	345	-	合作
GEMS artificial intelligence (AI) platform , small molecule therapeutics against Incyte-selected targets	Genesis Therapeutics	Incyte Corporation	2025-02-20	325	30	合作, 期权
ion channel drug in dermatology	深圳晶蛋生物医药科技有限公司	Almirall	2026-08-09	290.2	-	合作, 授权/许可
Novel Therapies for Age-Related Diseases	Gero PTE	中外制药株式会社	2025-07-07	250	-	合作
AR1001	ARIBIO	上海复星医药 (集团) 股份有限公司	2026-05-13	240	-	期权, 合作
novel capsid for use in a gene therapy program	Dyno Therapeutics	罗氏制药	2025-01-13	227	7	授权/许可
NX-13	Landos Biopharma	艾伯维生物制药	2024-03-25	212.5	137.5	转让/收购
HCB101 (即SIRP α-Fc融合蛋白)	FBD Biologics	上海复宏汉霖生物技术股份有限公司	2025-06-30	202	10	授权/许可

资料来源：Insight，西南证券整理；筛选条件为24年至今有交易总额的BD

项目名称	转让方	受让方	交易时间	交易总额（百万美元）	首付款（百万美元）	交易类型
new CNS candidates	MapLight Therapeutics	SandboxAQ	2025-12-16	200	-	合作
AAV-GAD for Parkinson’s disease	MeiraGT x	Hologen	2025-03-13	200	200	合作
英矽智能已验证的 AI 平台与 AI 赋能创新药研发能力，中枢神经系统领域药物	英矽智能	康哲药业控股有限公司	2026-07-13	176.54	-	合作
Novel drug targets for kidney disease，Bio’s AI-powered Inference platform,	Variant Bio	勃林格殷格翰制药	2026-01-06	120	-	合作
特定靶点开展小分子抑制剂，英矽智能自有Pharma.AI解决方案	英矽智能	齐鲁制药集团有限公司	2026-01-27	119	-	合作
Advance Narcolepsy Diagnosis and Neurobiomarker Discovery	Beacon Biosignals	武田药品工业株式会社	2025-11-19	109	-	合作，授权/许可
oral peptide therapeutics，DaX™ foundation model	Aizen Therapeutics	未披露企业	2026-08-15	100	-	合作
创新靶点化合物	英矽智能	礼来制药	2025-11-10	100	-	合作
生成式AI针对具有挑战性的神经类疾病，共同开发一款具有特定属性的创新候选分子	英矽智能	元舜生物	2026-03-26	94.75	-	合作
Cambridge-GSK Translational Immunology Collaboration (CG-TIC)	剑桥大学	葛兰素史克制药	2024-10-21	65.08	-	合作
ISM8969	英矽智能	深圳衡泰生物科技有限公司	2026-01-20	64.14	10.01	合作，授权/许可
BGM0504	博瑞生物医药（苏州）股份有限公司	华润三九医药股份有限公司	2025-08-01	39.54	-	合作
GEMS AI Platfom	Genesis Therapeutics	吉利德制药	2024-09-10	35	35	合作
IBIO-600	AstralBio	iBio Inc	2025-01-02	28.75	0.75	授权/许可
AR1001	ARIBIO	上海复星医药（集团）股份有限公司	2026-07-03	28.42	7.69	投资，期权
AI Discovery Tools	Iambic Therapeutics	Revolution Medicines	2025-07-09	25	-	合作
REV102，and an associated backup molecule for the treatment of hypophosphatasia (HPP)	Rallybio	Recursion Pharmaceuticals	2025-07-08	25	7.5	转让/收购
AR1001	纽科智联（上海）制药有限公司	上海复星医药（集团）股份有限公司	2025-07-28	20.99	5.6	授权/许可
GT AEXS617	上海湃隆生物科技有限公司	Exscientia	2024-07-18	20	20	转让/收购
AI platfom	CytoReason	赛诺菲制药	2026-01-09	16	-	合作
Immunai’s single-cell AI platform，new targets on dysfunctional T cells that drive both cancers and autoimmune diseases	Immunai	勃林格殷格翰制药	2026-06-25	15	15	授权/许可
AI-designed AAV capsid	Dyno Therapeutics	安斯泰来制药	2026-03-24	15	15	授权/许可
Clinical Necroptosis Cancer Therapy Assets，AI technologies for identifying immunotherapy combinations	Oncotelic Therapeutics	Mosaic Immunoengineering	2024-04-29	15	-	转让/收购，授权/许可
MTS-004	杭州剂泰医药科技有限责任公司	浙江引安医药科技有限公司	2025-09-12	14.21	0.14	授权/许可
血液制品及其他药品	深圳晶泰科技有限公司	派斯双林生物制药股份有限公司	2025-04-01	13.88	-	合作
Molecule.ai的AI药物研发技术平台	Molecule.ai	Shuttle Pharmaceuticals	2025-10-10	10	-	转让/收购
GLP-1R/GIPR/GCGR 三重激动剂多肽创新药物	深圳碳云智肽药物科技有限公司	深圳翰宇药业股份有限公司	2025-05-13	5.28	-	合作
EVX-B2 and EVX-B3	Evaxion Biotech	默沙东制药	2024-09-26	3.2	3.2	期权
CNS疾病领域多靶点小分子药物	北京英飞智药科技有限公司	NeuAngel Biopharmaceuticals	2026-01-28	2.86	-	合作
five antibody drug candidates	Syntekabio	Panolos Bioscience	2025-12-16	1.7	0.068	授权/许可
SETDB1-targeted epigenetic drug development platform，MSETC	Queensland Medical Institute	Kazia Therapeutics	2026-04-14	1.39	1.39	授权/许可

资料来源：Insight，西南证券整理；筛选条件为24年至今有交易总额的BD

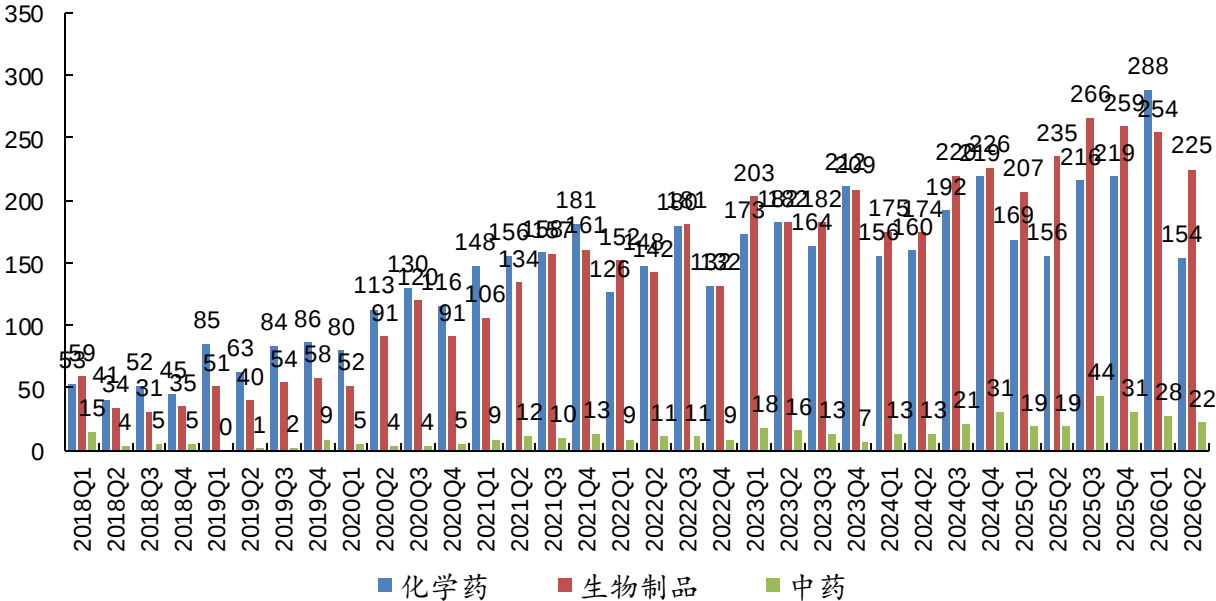
- **技术底座**：算力+数据库构筑底层支撑，以美股科技大厂和相关数据库为主；
- **上游**：基础设施与科研工具层，横向分为生物数据层、基因合成、科研试剂工具、实验动物四大赛道；
- **中下游**：覆盖 AI 制药平台、全流程 CXO、CRO 企业、CDMO / 生产服务四大领域。

AI制药产业链全景图				
技术底座	算法算力		数据	
	英伟达、谷歌、微软、亚马逊 (AWS)、IBM、Anthropic、OpenAI		PDB、GEO、UniProt、ChEMBL	
上游 AI制药基础设施与科研工具	生物数据层	基因合成	科研试剂工具	实验动物
	华大基因：全球领先基因测序企业	金斯瑞生物科技：全球基因合成龙头，布局多肽、CGT 与合成生物学	奥浦迈：国产无血清培养基龙头	百奥赛图：规模化动物模型与全链条抗体开发平台
	贝瑞基因：科研基因测序服务商	义翘神州：重组蛋白、抗体开发与基因合成服务商	百普赛斯：全球重组蛋白试剂龙头	药康生物：全球最大基因工程小鼠资源库
	诺禾致源：遗传检测与精准医疗数据服务企业	百普赛斯：依托蛋白表达技术配套基因合成业务	诺唯赞：生命科学工具酶和科研试剂供应商	南模生物：基因编辑小鼠/大鼠模型服务商
	海尔生物：全球生物医疗低温存储龙头	和元生物：基因载体合成、CGT 病毒载体开发服务商	洁特生物：国内生物实验室耗材龙头企业	昭衍新药：自建规模化实验猴繁育基地
			阿拉丁：科研试剂和实验耗材供应商	
			纳微科技：国产色谱填料龙头	
			义翘神州：国内重组蛋白试剂龙头	
			近岸蛋白：国内mRNA原料酶及试剂领军企业	
中下游 CXO/CDMO+平台	AI制药平台	全流程CXO	CRO企业	CDMO/生产服务
	晶泰控股：AI+量子物理+机器人	药明康德：全球医药研发服务龙头	泰格医药：临床试验服务龙头企业	凯莱英：全球创新药CDMO龙头
	英矽智能：生成式A平台+ Biotech	康龙化成：覆盖药物发现、临床前研究和实验服务	昭衍新药：前药物安全评价服务企业	药明生物：从早期研发到商业化生产的大分子药物全链条 CDMO 服务龙头
	剂泰科技：AI 驱动小分子与多肽药物递送制剂开发		美迪西：覆盖药物发现到临床前安全评全流程	和元生物：CGT CDMO龙头
	成都先导：拥有百亿级化合物库		益诺思：GLP临床前毒理安全评价 CRO 龙头	博腾股份：创新药工艺开发和生产服务企业
	泓博医药：CADD/AIDD平台累计服务104个新药项目		百花医药：CRO行业新锐	皓元医药：药物发现和CMC研发服务企业
	华兰股份：灵擎数智AI制药平台新锐		睿智医药：临床前CRO市场规模国内居前	药石科技：全球分子砌块龙头

■ AI制药主要从需求端影响产业上游，AI的发展将带来可观的市场增量，直接提升产业链景气度，进而带动创新药投融资回暖。此外，当前AI制药逐步进入验证期，部分药物研发已从干实验进入到湿实验以及动物实验环节，进而将带动蛋白合成与动物等试剂耗材订单增长。

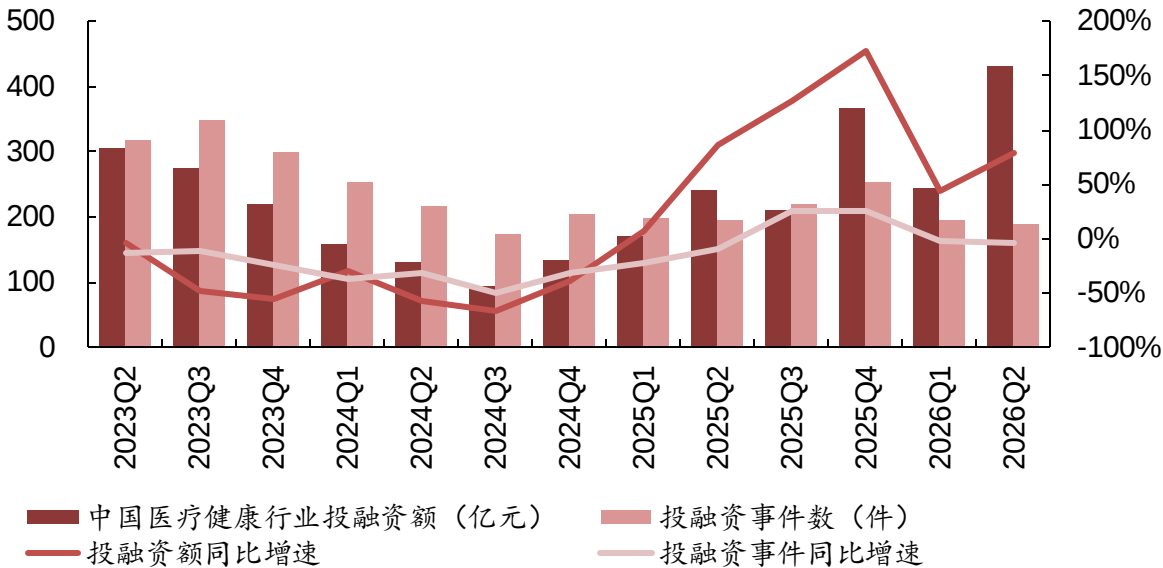
- 基因合成与蛋白表达：AI生成的候选分子数量呈指数级增长，对高通量、短周期的DNA合成（基因合成）和蛋白表达（无细胞蛋白合成、重组蛋白表达）需求激增，直接拉动了基因合成平台（如Twist Bioscience）和蛋白表达平台（如金斯瑞）的订单增长。
- 实验验证与试剂耗材：AI筛选出的候选分子需通过湿实验（体外/体内验证）进行验证，拉动了重组蛋白、抗体、生化试剂、细胞培养及检测试剂的需求，推动了上游试剂耗材企业（如百普赛斯、义翘神州）的业绩增长。
- 模式动物与临床前CRO：AI提升了候选分子的产出质量，更多高质量候选分子进入临床前验证阶段，拉动了基因编辑模式动物（如百奥赛图、药康生物）和临床前CRO（如药明康德）的需求，推动了上游实验动物和CRO的规模化发展。
- 建库与测序服务：AI对高质量训练数据的渴求，拉动了高通量测序（NGS）及多组学建库（如华大智造）的需求，推动了上游测序仪和建库试剂的升级。

CDE创新药IND申报数量（季度数据）（项）



资料来源：Insight，西南证券整理

中国季度医疗健康投融资额及事件数



- 9月16日，金斯瑞生物科技与礼来的AI/机器学习药物发现协作平台Lilly TuneLab™达成合作。根据协议，金斯瑞将向Lilly TuneLab™参与企业提供湿实验服务，助力其快速生成实验数据，将AI预测转化为生物学验证数据，加速候选药物评估。
- 作为AI 制药的湿实验验证卖铲人，AI 模型输出的蛋白 / 抗体 / 多肽序列，都需要金斯瑞把序列合成、表达、测试，产出标准化数据回灌模型，完成 DBTL 闭环。不管客户管线成败，每一轮迭代都要付费，旱涝保收。
- AI的发展不会让湿实验减少，而会因为候选分子数量爆发大大增加湿实验验证的需求，以至于目前湿实验验证端已成为瓶颈，卖铲人议价权大幅增加。9月11日，金斯瑞计划通过配售募资23.27亿港元，主要用于AIDD相关建设。上半年，公司AIDD相关业务则同比实现翻倍增长，并连续三个半年度保持快速增长。另外，其表示基因到蛋白平台约占生命科学事业群收入的66%，已经成为业务增长的重要支柱。

湿实验验证正成为AI制药环节中的关键瓶颈

AI驱动蛋白订单预期26年下半年及之后保持三位数百分比增长



01 传统研发体系难以满足AI时代的大规模、高通量实验需求

AI可在数小时内生成数千个候选分子，但湿实验验证能力难以同步扩张



02 实验验证周期仍是制约AI研发效率释放的关键瓶颈

传统的碎片化实验流程通常需要3至6周才能完成从序列到决策可用数据，限制了模型迭代与学习效率



03 产业链高度碎片化

人工环节限制生产规模
基因合成、蛋白表达、活性检测及数据产出等多个环节产业链布局破碎，导致人工错误，结果不可靠，及实验元数据缺失



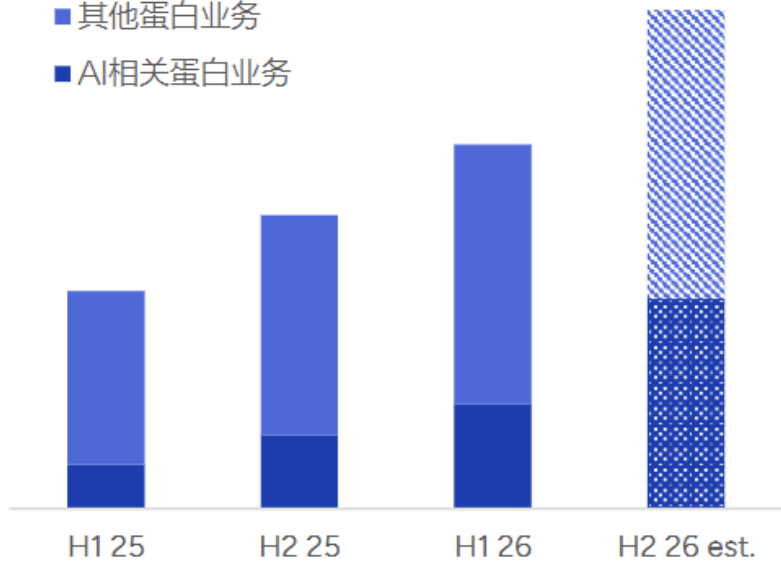
04 实验结果无法用于数据优化

实验数据无法直接用于模型训练
大量实验结果以非结构化形式存在，数据关联性不足，难以有效转化为AI驱动研发所需的高质量训练数据



市场需求: 可规模化的验证基础设施，支持AI快速迭代、海量实验验证以支持模型持续进化

■ 其他蛋白业务
■ AI相关蛋白业务



- AI 制药赛道中，AI 算法设计与湿实验验证存在明显断层，大模型亟需标准化的高质量实验数据用于迭代。公司依托 HEK293/CHO 真核表达体系、5000 + 经活性验证靶点蛋白及一体化体外验证平台，提供高通量蛋白制备与全流程功能检测，实现干湿数据同源衔接，助力客户完成 AI 药物发现闭环。**同时公司融合 AI for Science 搭建蛋白设计平台，可预测蛋白关键理化属性，已完成多款工业级蛋白 AI 改造；**技术路线持续从定向改造向蛋白从头设计升级，赋能细胞与基因治疗、合成生物学等前沿领域。
- **结构化、同源的湿实验数据集满足AI制药企业加速验证需求。**百普赛斯作为国产重组靶点蛋白试剂龙头，全球重组蛋白试剂第一梯队，是少数可对标海外品牌、进入全球 MNC 药企供应链的中国厂商。此外公司不止卖蛋白试剂，向上延伸一体化体外功能验证平台（SPR/BLI、TR-FRET、ADCC/ADCP 细胞评价），可以输出结构化、同源的湿实验数据集，适配 AI 制药干湿闭环，这是单纯蛋白试剂厂商不具备的能力。

公司AIDD-Ready核心服务体系：CHO-Direct™



- **承接AI制药的体内药效验证需求。**公司核心资产为RenMice 全人源抗体小鼠平台，拥有2000 + 靶点人源化小鼠品系，非常适配 AI 生成全人抗体的体内评估，可模拟人体免疫，测试 AI 抗体在动物体内的抗肿瘤活性、脱靶、免疫原性。
- **数据资源丰富，契合AI制药核心壁垒。**公司围绕千余个靶点免疫小鼠，产出超百万条真实全人抗体序列 + 对应的体内外功能标签数据，这是单纯 AI 虚拟生成无法获取的高质量真实生物数据；以此为底座搭建自研 RenSuper Workstation（千鼠万抗 2.0）AI 平台。
- 百奥赛图可以对外输出现货抗体分子授权，收取首付款 + 里程碑 + 销售分成，已经由单纯 “卖小鼠、做药效 CRO”，升级为抗体分子授权平台，可以让客户不用自己从头做免疫和 AI 筛选，直接采购平台上已经验证过的现货全人抗体。

英矽智能核心管线

公司	核心定位	核心资产	AI制药受益环节	商业模式	总市值(亿元)	核心优势	短板
百奥赛图	全人源抗体小鼠龙头，抗体发现平台+体内药效CRO	RenMice全人源抗体小鼠，2000+靶点人源化小鼠；千鼠万抗、RenSuper AI抗体平台	AI抗体/迷你蛋白体内药效、免疫原性评价；利用百万真实动物抗体数据训练AI，直接产出可授权抗体分子	模型销售+体内药效CRO+抗体分子授权（里程碑+分成）	565.68	大分子抗体评价能力国内最强；不只是卖小鼠，能输出经过体内验证的抗体分子；海外MNC客户占比高	研发投入高；抗体授权业务兑现周期长；管线分成收入波动大
昭衍新药	GLP临床前安评龙头，大动物（食蟹猴）资源壁垒	国内头部食蟹猴存栏（5万+），GLP安评实验室网络	AI候选分子完成小鼠体内药效后，进入临床申报前的非人灵长类毒理、免疫原性评价，属最晚期体内验证	GLP安评服务为主，模型为辅；猴资产存在公允价值变动	330.61	GLP资质壁垒极强；大分子、ADC、核酸药物大动物毒理刚需；实验猴资源护城河	小鼠模型业务弱；偏后端安评，不参与早期靶点/抗体发现；利润受猴价周期扰动大
药康生物	标准化商品化小鼠龙头	斑点鼠计划，2万+基因敲除商品化小鼠、800+药靶人源化模型；NeoMab全人抗体小鼠	AI新靶点早期体内验证；AI批量候选分子体内初筛；货架标准化模型交付快	商品化小鼠销售为主，配套药效CRO	141.72	标准化现货模型丰富，交付快，适合高通量早期靶点验证；斑点鼠货架化毛利率高	定制化模型、抗体体内评价弱于百奥赛图；海外客户占比偏低
南模生物	定制化基因编辑模型龙头	25000+基因工程动物模型，16000+标准化模型，擅长定制基因编辑动物	AI新靶点定制化动物模型构建，以及小分子、ADC、CGT候选分子体内药效评价	定制模型+标准化模型销售+药效评价服务	31.79	定制化基因编辑能力突出；覆盖小分子、CGT、核酸等多类型药物评价	规模最小，产能有限；大分子抗体药效评价能力弱，海外客户少

西南证券投资评级说明

报告中投资建议所涉及的评级分为公司评级和行业评级（另有说明的除外）。评级标准为报告发布日后6个月内的相对市场表现，即：以报告发布日后6个月内公司股价（或行业指数）相对同期相关证券市场代表性指数的涨跌幅作为基准。其中：A股市场以沪深300指数为基准，新三板市场以三板成指（针对协议转让标的）或三板做市指数（针对做市转让标的）为基准；香港市场以恒生指数为基准；美国市场以纳斯达克综合指数或标普500指数为基准。

公司评级

买入：未来6个月内，个股相对同期相关证券市场代表性指数涨幅在20%以上
持有：未来6个月内，个股相对同期相关证券市场代表性指数涨幅介于10%与20%之间
中性：未来6个月内，个股相对同期相关证券市场代表性指数涨幅介于-10%与10%之间
回避：未来6个月内，个股相对同期相关证券市场代表性指数涨幅介于-20%与-10%之间
卖出：未来6个月内，个股相对同期相关证券市场代表性指数涨幅在-20%以下

行业评级

强于大市：未来6个月内，行业整体回报高于同期相关证券市场代表性指数5%以上
跟随大市：未来6个月内，行业整体回报介于同期相关证券市场代表性指数-5%与5%之间
弱于大市：未来6个月内，行业整体回报低于同期相关证券市场代表性指数-5%以下

分析师承诺

报告署名分析师具有中国证券业协会授予的证券投资咨询执业资格并注册为证券分析师，报告所采用的数据均来自合法合规渠道，分析逻辑基于分析师的职业理解，通过合理判断得出结论，独立、客观地出具本报告。分析师承诺不曾因，不因，也将不会因本报告中的具体推荐意见或观点而直接或间接获取任何形式的补偿。

重要声明

西南证券股份有限公司（以下简称“本公司”）具有中国证券监督管理委员会核准的证券投资咨询业务资格。

本公司与作者在自身所知情范围内，与本报告中所评价或推荐的证券不存在法律法规要求披露或采取限制、静默措施的利益冲突。

《证券期货投资者适当性管理办法》于2017年7月1日起正式实施，本报告仅供本公司签约客户使用，若您并非本公司签约客户，为控制投资风险，请取消接收、订阅或使用本报告中的任何信息。本公司也不会因接收人收到、阅读或关注自媒体推送本报告中的内容而视其为客户。本公司或关联机构可能会持有报告中提到的公司所发行的证券并进行交易，还可能为这些公司提供或争取提供投资银行或财务顾问服务。

本报告中的信息均来源于公开资料，本公司对这些信息的准确性、完整性或可靠性不作任何保证。本报告所载的资料、意见及推测仅反映本公司于发布本报告当日的判断，本报告所指的证券或投资标的的价格、价值及投资收入可升可跌，过往表现不应作为日后的表现依据。在不同时期，本公司可发出与本报告所载资料、意见及推测不一致的报告，本公司不保证本报告所含信息保持在最新状态。同时，本公司对本报告所含信息可在不发出通知的情形下做出修改，投资者应当自行关注相应的更新或修改。

本报告仅供参考之用，不构成出售或购买证券或其他投资标的的要约或邀请。在任何情况下，本报告中的信息和意见均不构成对任何个人的投资建议。投资者应结合自己的投资目标和财务状况自行判断是否采用本报告所载内容和信息并自行承担风险，本公司及雇员对投资者使用本报告及其内容而造成的一切后果不承担任何法律责任。

本报告及附录版权为西南证券所有，，任何机构和个人不得以任何形式翻版、复制和发布。如引用须注明出处为“西南证券”，且不得对本报告及附录进行有悖原意的引用、删节和修改。未经授权刊载或者转发本报告及附录的，本公司将保留向其追究法律责任的权利。



西南证券研究院

上海

地址：上海市浦东新区陆家嘴21世纪大厦10楼

邮编：200120

北京

地址：北京市西城区金融大街35号国际企业大厦A座8楼

邮编：100033

深圳

地址：深圳市福田区益田路6001号太平金融大厦22楼

邮编：518038

重庆

地址：重庆市江北区金沙门路32号西南证券总部大楼21楼

邮编：400025

西南证券机构销售团队

区域	姓名	职务	手机	邮箱	姓名	职务	手机	邮箱
上海	崔露文	上海公募销售主管	15642960315	clw@swsc.com.cn	贾文婷	销售岗	13621609568	jiawent@swsc.com.cn
	张方毅	私募销售主管	15821376156	zfyi@swsc.com.cn	毛玮琳	销售岗	18721786793	mwl@swsc.com.cn
	戴剑箫	销售岗	13524484975	daijx@swsc.com.cn	张大炜	销售岗	13163027178	zhangdaw@swsc.com.cn
	李嘉隆	销售岗	15800507223	ljlong@swsc.com.cn	张怀文	销售岗	18800275611	zhanghuaiwen@swsc.com.cn
	叶佳缘	销售岗	15800609605	yejy@swsc.com.cn	苏湖	销售岗	18913127448	suhul997@swsc.com.cn
北京	李杨	北京公募销售主管	18601139362	yfly@swsc.com.cn	杨薇	销售岗	15652285702	yangwei@swsc.com.cn
	姚航	北京保险销售主管	15652026677	yhang@swsc.com.cn	王宇飞	销售岗	18500981866	wangyuf@swsc.com.cn
	张岚	销售岗	18601241803	zhanglan@swsc.com.cn	刘艳	销售岗	18456565475	liuyanyj@swsc.com.cn
广深	高欣	广深销售主管	13923418464	gaoxin@swsc.com.cn	黄诗洁	销售岗	18817316880	hsj@swsc.com.cn
	龚之涵	销售岗	15808001926	gongzh@swsc.com.cn	周玥	销售岗	18580531950	zhy1997@swsc.com.cn
	文柳茜	销售岗	13750028702	wlq@swsc.com.cn	彭志伟	销售岗	15521604635	pzhw@swsc.com.cn
	林哲睿	销售岗	15602268757	lzh@swsc.com.cn				