下载日志已记录，仅供内部参考

中信建投证券
CHINA SECURITIES

证券研究报告·医药行业深度

AI制药：技术及商业突破，湿实验产业链率先受益

袁清慧
yuanqinghui@csc.com.cn
SAC 编号：S1440520030001
SFC 编号:BPW879

成雨佳
chengyujia@csc.com.cn
SAC 编号:S1440525120003
SFC 编号:BIQ365

王云鹏
wangyunpeng@csc.com.cn
SAC 编号:S1440524070020

发布日期：2026年10月22日

本报告由中信建投证券股份有限公司在中华人民共和国（仅为本报告目的，不包括香港、澳门、台湾）提供。在遵守适用的法律法规情况下，本报告亦可能由中信建投（国际）证券有限公司在香港提供。请务必阅读正文之后的免责条款和声明。

下载日志已记录，仅供内部参考

核心观点

- **核心观点：**AI制药领域正经历着快速的迭代和变革，算法的更新迭代和算力的支持为AI在制药领域的应用打下了良好的技术基础。传统药物开发过程花费时间长、成本高，且成功率较低，随着已有靶点的新药陆续获批，新药开发难度逐渐上升。目前AI在结构预测、靶点筛选、虚拟筛选、分子生成及多参数优化等早期环节已体现效率价值，有望缩小候选分子范围、减少低价值实验并降低单个合格Hit的发现成本。相关干实验投入增加以及湿实验需求的持续增长有望为下游产业链持续带来增量。
- **AIDD首先重塑药物发现与临床前研发流程。**小分子发现正向AI参与的DMTA（设计-合成-测试-分析）闭环演进，虚拟筛选、分子生成、多参数优化、ADMET（吸收、分布、代谢、排泄、毒性）药代动力学和安全性特征预测及合成路线设计等环节受益较为明显。大分子研发则逐步形成以序列和结构设计为起点，进一步走向涵盖功能预测、抗体生成及多参数优化后的DBTL闭环。
- **高质量实验数据和高通量验证能力正在成为AI制药进一步发展的关键约束，产业链增量有望率先在早期实验环节兑现。**模型对高质量实验数据的依赖进一步增强，需要持续进行基因合成、文库构建、蛋白/抗体表达、结合与功能检测以及多组学分析，并将实验结果反哺模型训练。因此，随着AI模型迭代速度加快、单次设计候选数量提升以及更多药企将AI嵌入早期研发流程，湿实验需求有望持续增长，基因合成、蛋白表达、科研试剂及CRO等产业链环节有望持续受益AI制药渗透率提升带来的增量市场。具备高通量、自动化、标准化实验及结构化数据交付能力的服务商更有望承接增量。
- **行业正在由模型能力验证转向临床价值和商业价值验证，头部项目与合作已出现积极信号，但整体仍处于早期阶段。** Rentosertib、GB-0895等代表性管线已进入临床中后期，为观察AI辅助药物发现的临床转化能力提供了更高阶段样本；MNC对外合作、资产授权及平台部署持续增加。AI制药企业主要采用平台及软件授权、AI研发服务、自研管线及资产授权三类模式，三者现金流形成时间、临床风险和潜在价值空间存在明显差异。
- **相关公司：**AI制药行业长期成长空间广阔，产业链相关公司包括：1）湿实验服务商：金斯瑞生物、Twist Bioscience、药明生物、义翘神州、百普赛斯、近岸蛋白等；2）海外巨头：Anthropic、Isomorphic Labs、Chai Discovery；3）AI制药标的：英矽智能、剂泰科技、晶泰科技。
- **风险提示：**投融资不及预期风险，行业政策风险，研发不及预期风险，审批不及预期风险，销售不及预期风险，市场竞争加剧风险

下载日志已记录，仅供内部参考

目录

1 解决传统药物研发痛点，AI制药的技术演进与应用边界

2 AI制药潜力释放，产业链有望持续受益

3 AI制药临床验证推进，合作与商业化路径逐步清晰

4 重点公司深度剖析

5 风险提示

下载日志已记录，仅供内部参考



PART 1

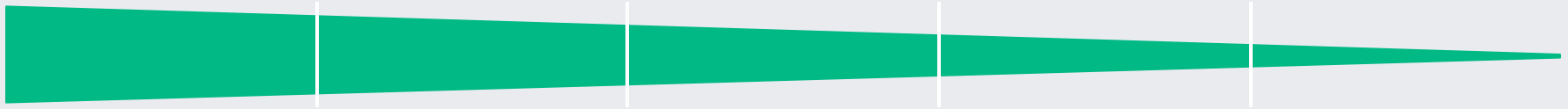
解决传统药物研发痛点，AI制药的技术演进与应用边界

下载日志已记录，仅供内部参考

传统药物开发过程成本较高且难度逐渐增加

- 传统药物研发具有“高淘汰率、高投入”的典型特征：早期通常需筛选5,000–10,000个化合物，约250个进入临床前，最终仅约1个药物获批上市。随着研发阶段推进，单个项目成本持续上升，III期至上市阶段可达约1.9亿美元。若将失败项目成本计入，一款新药成功上市的现金支出约8.7亿美元，资本化成本可接近18亿美元。传统药物研发方式的投资回报率（ROI）仅1%～3%，我们认为如果有更好、更高效的研发工具出现，有望带动多个环节的新增需求，市场增量潜力巨大。

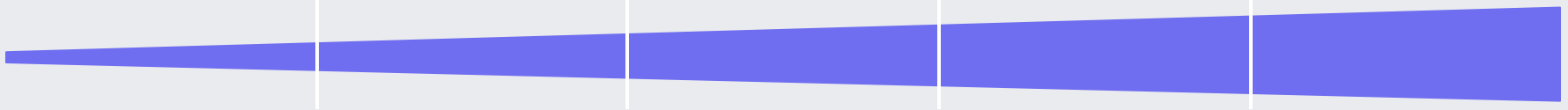
传统药物研发各阶段的存续分子数量



发现与筛选	临床前	I期临床	II期临床	III期临床与获批
5,000–10,000	约250	约5	约2	1
个化合物进入筛选	个进入临床前研究	个进入首次人体试验	个进入III期临床	款药物获批

各研发阶段的成本

将失败项目成本计入后，单个获批药物的现金支出约8.73亿美元，资本化成本约17.78亿美元



发现与筛选	临床前	I期临床	II期临床	III期临床与获批
约350万美元	约1,500万美元	约1,500万美元	约4,000万美元	约1.90亿美元
每个分子	每个分子	每个分子	每个分子	每个分子
靶点到Hit、Hit到Lead	先导优化、临床前研究			III期、申报至上市

中信建投证券 CHINA SECURITIES

数据来源：Twist Bioscience 2026 Investor Day，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

AI在制药领域具备全流程渗透潜力

- 近年来，AI技术飞速发展，在药物研发与市场化的全流程中广泛渗透，于药物发现和临床前阶段的应用成效尤为突出。药物发现及临床前研发阶段，是AI辅助药物发现的关键优化板块，也是AI制药企业发力研发与推进商业化的核心方向。
- 依托AI技术，企业在药物发现和临床前研发进程中，能够有效降低湿实验成本和时间成本，同时实现高通量筛选，为新靶点的探寻以及“老药新用”的适应症拓展提供有力支持，有机会更快地将更多的潜力分子推进到后续环节，从而提升新药研发整体ROI、为整个产业链带来更多的需求。

图：AI在产业链中的应用潜力

药物研发流程	靶点识别	药物发现	临床前研究（动物）	临床试验（人体）	获批与上市	上市后监测
主要任务	新靶点	活性化合物发现（Hit / Lead） 候选药物先导优化 CMC	生物标志物发现 DMPK评价 安全性评价 药效学评价 给药方案		新药	疗效或安全性监测： • 治疗效果 • 不良反应 • 药物稳定性 • 用药方案 失败原因分析 假药分析
AI赋能应用	• 多组学数据分析 • 生物网络构建与分析 • 文献与真实世界数据挖掘 • 知识图谱构建 • 靶点验证	• 虚拟筛选 • 配体-受体相互作用预测 • 分子生成 • ADMET预测 • 先导化合物优化 • 合成路线规划 • 自动化合成	• 诊断、预测和预后生物标志物 • 药代动力学性质预测 • 临床试验成功率预测 • 药物不良反应预测 • 数字孪生辅助临床试验设计 • 老药新用 • 监管审批支持		• 个体化疗效评估 • 个体化患者照护 • 安全性信息预警 • 不良事件自动报告 • 持续安全监测 • 药物获益-风险评估 • 提高药物警戒合规性	

目前AI应用较多的部分

数据来源：Nature Reviews Drug Discovery，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

AI制药迎来快速发展阶段

AI制药行业经历了多个发展阶段，包括基础研究期、初步拓展期、技术提升期和快速扩张期。

- 基础研究期（1990年-2012年）：在这一阶段，AI制药行业从理论探索到初步应用，取得了显著进展。深度学习、自然语言处理等AI技术的发展为药物研发提供了新的思路。
- 初步拓展期（2013年-2017年）：AI制药行业开始展现出更广泛的应用潜力。生成对抗网络等新型神经网络结构的出现，为药物分子生成与靶点预测提供了新的工具。Insilico Medicine等企业的研究证实了AI在优化药物研发流程、提升化合物质量方面的可行性。这一阶段，AI制药逐渐引起了制药企业和研究机构的关注，为行业的进一步发展积累了经验和数据。
- 技术提升期（2018年-2019年）：IBM Watson和DeepMind的AlphaFold分别在临床试验匹配和蛋白质结构预测上取得重大突破，引发了一轮投资热潮。大量资本的涌入推动了相关技术的快速发展，AI制药在药物设计品质和效率上得到了显著提升。这一时期，AI制药技术得到进一步完善，为行业的快速扩张奠定了基础。
- 快速扩张期（2020年至今）：自2020年起，得益于AI技术已广泛应用于药物研发全流程和疾病诊断等领域，且MNC对AI制药的重视和参与程度持续提高，AI制药行业进入快速发展阶段。

图：AI制药行业历史进程



数据来源：公司公告，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

技术演变（1/4）：CADD提高筛选效率，但预测精度和应用范围仍受限制

计算机辅助药物发现（CADD）是传统计算药物设计的基础框架，方法主要分为两类：**基于结构的药物设计方法（structure-based methods，SBDD）和基于配体的药物设计方法（ligand-based methods，LBDD）**，所使用的CADD方法取决于目标结构信息的可用性。

- **SBDD：**已知靶点三维结构后，进行分子对接、虚拟筛选和结合模式分析。主要方法包括：结构预测、分子对接、分子动力学、自由能计算等。
- **LBDD：**在靶点结构未知时，根据已知活性分子的共同特征寻找候选物。主要方法包括：QSAR（定量构效关系）、药效团建模、相似性搜索。

两条路线最终都会形成苗头化合物（Hit），再经过先导化合物生成、ADMET评估、体外验证，最后形成候选药物。传统CADD虽然能辅助分子筛选和设计，但受限于计算能力、算法精度和可用数据，能够解决的问题相对有限，过去主要用于药物发现的部分环节。

图：计算机辅助药物发现（CADD）流程示意图



数据来源：Beilstein J. Org. Chem，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

技术演变（2/4）：ML/DL拓展CADD能力，药物发现走向干湿实验闭环

- **ML/DL可以嵌入CADD的多个环节，推动计算药物发现由规则驱动转向数据驱动。**CADD作为计算药物发现的总体框架，既包括分子对接、分子动力学、自由能计算等物理与知识驱动方法，也包括ML/DL等数据驱动方法。过去，CADD主要依赖已知靶点结构、物理规则、人工设计的分子特征和评分函数，用于分子对接、虚拟筛选及精细计算，其能提高已有候选物的筛选和排序效率，但预测效果仍受靶点结构质量、人工特征、评分函数及可探索化学空间限制。机器学习（Machine Learning，ML）利用分子描述符和实验数据学习构效关系，用于预测活性、ADMET、毒性及可合成性；深度学习（Deep Learning，DL）可以直接处理分子图、SMILES、蛋白序列和三维结构，进一步拓展结构与相互作用预测以及新分子、新蛋白序列生成能力。
- **计算药物发现由“筛选已有候选物”扩展至“候选生成、预测与迭代优化”。**在小分子领域，AI主要用于虚拟筛选、分子生成和多参数优化，并形成DMTA（Design–Make–Test–Analyze，即“设计-制备/合成-测试-分析”）循环；在大分子领域，AI从结构预测进一步延伸至蛋白和抗体序列设计，并通过DBTL（Design–Build–Test–Learn，即“设计-构建-测试-学习”）闭环持续迭代。

图：CADD技术能力演进的三个阶段

第一阶段	第二阶段	第三阶段
物理与知识驱动的计算筛选	**数据驱动的预测与优选**	**生成式设计与实验闭环**
依托靶点结构、物理规则和评分函数	ML/DL学习分子结构与实验结果之间的关系	生成候选分子或蛋白，并开展多参数联合优化
主要用于分子对接、虚拟筛选和精细计算	用于活性、ADMET、毒性及可合成性预测	经合成和实验验证后回流模型，形成DMTA/DBTL闭环

数据来源：Nature Reviews Drug Discovery，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

技术演变（3/4）：AlphaFold迭代，IsoDDE等推动相互作用预测升级

- AlphaFold是Google DeepMind开发的生物分子结构预测模型系列，其在药物研发中的主要价值是更快生成结构假设，辅助靶点研究、结合口袋识别及分子设计，缩小后续实验的搜索范围。核心开发者Demis Hassabis和John Jumper因蛋白质结构预测研究获得2024年诺贝尔化学奖。AlphaFold的技术发展主线从“预测单个蛋白质的结构”走向“预测多种生物分子的结构及相互作用”，显著降低了药物获得结构假设的时间和成本。
- **AlphaFold 1（2018）**预测氨基酸残基间的距离和角度，再重建蛋白质结构。**AlphaFold 2（2020）**通过Evoformer联合处理序列进化与残基对信息，显著提高结构预测精度。**AlphaFold 3（2024）**由Google DeepMind与Isomorphic Labs共同开发，引入Pairformer和扩散模型，由蛋白质结构预测拓展至多种生物分子复合物及其相互作用预测，包括蛋白质与小分子药物、蛋白质与DNA/RNA、抗体与抗原等。**IsoDDE（2026年2月）**由Isomorphic团队开发，又被称为AlphaFold 4，在多个维度上超越AF3，包括蛋白质-配体结构预测，结合亲和力预测，隐藏结合位点识别及抗体建模方面。

表：AlphaFold技术迭代

对比维度	AlphaFold 1 (AF1)	AlphaFold 2 (AF2)	AlphaFold 3 (AF3)
发布时间	2018年	2020年 (CASP14)，2021年开源	2024年5月
核心使命	**预测蛋白质的残基间距离，生成距离图谱**	**单链蛋白结构预测精度大幅提高，并扩展至多聚体研究**	**关注更复杂的生物分子复合物结构**
模型架构	深度神经网络 (DNNs) 进行距离预测	Evoformer（信息处理核心） + 结构模块 (Structure Module)	Pairformer（处理分子内部及分子之间的关系） + 扩散模型 (Diffusion Module)
核心创新	利用深度学习预测残基间的距离和角度	从序列走向三维结构，引入注意力机制捕捉长程相互作用，形成了更完整的端到端结构预测系统	从“蛋白质结构预测工具”进一步走向“生物分子相互作用预测工具”
预测范围	**主要是单链蛋白质**	**单链蛋白及多链蛋白复合物（多聚体）**	**蛋白质、核酸(DNA/RNA)、小分子配体、离子及复合物**
代表性精度	CASP13冠军，GDT得分77.4	CASP14冠军，GDT得分92.4	在蛋白-配体、抗体-抗原等互作上准确率提升高达50%
最大预测长度	约1000个氨基酸残基	单体2500 / 多聚体4000个残基	预计进一步提升
开源与许可证	未开源	Apache 2.0 许可证，免费用于学术和商业	仅限非商业用途，使用条款受限

数据来源：Google DeepMind、Isomorphic Labs、CASP、Nature，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

技术演变（3/4）：深度学习拓展De novo设计实现结构生成与多目标优化

- **De novo是根据靶点结构、结合口袋或目标性质从头生成候选分子或蛋白结构的方法，并对活性、选择性、成药性和可制造性等指标进行计算过滤和优化，最终进入合成和实验验证。**De novo不同于虚拟筛选，虚拟筛选从已有或可枚举分子库中寻找候选物，核心是排序和筛选；De novo设计是直接生成新的候选结构，核心是生成和多目标优化。
- **深度学习推动De novo由有限结构搜索，走向面向目标的结构生成与多目标优化。**De novo的核心价值是同时满足活性、选择性、成药性和可合成性要求的候选比例，而非单纯生成更多分子。小分子主要设计原子、化学键和分子骨架；大分子需要联合设计氨基酸序列、三维结构和功能界面。

图：深度学习拓宽De novo能力边界

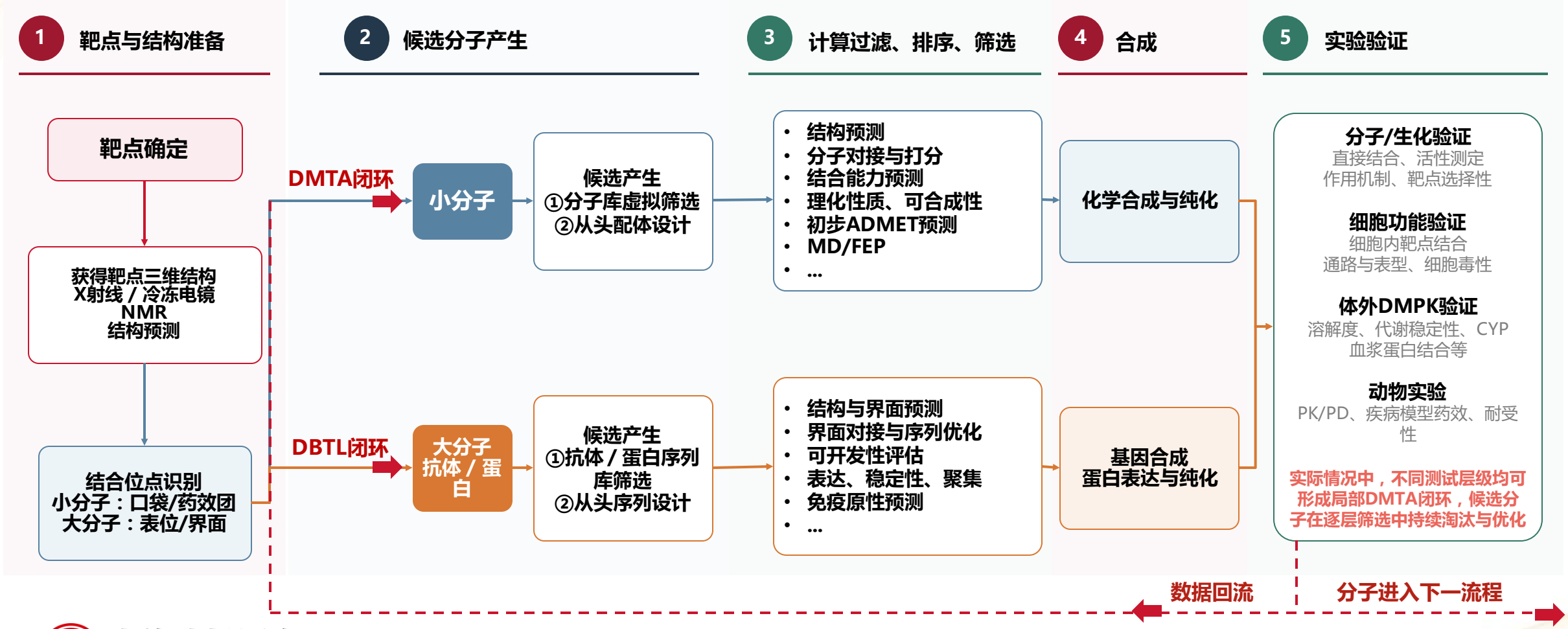
传统De novo		深度学习驱动的De novo
依赖人工设定的化学和结构规则	→	从大规模分子、序列和结构数据中学习设计规律
通过片段放置、连接和生长构建结构	→	可直接生成分子、序列及三维结构
以枚举、组合搜索和打分为主	→	生成与性质预测、条件控制相结合
生成空间受到人工规则、片段库和搜索策略约束	→	可探索更广泛的化学与蛋白空间
通常逐项优化结合能力或局部性质	→	可将活性、选择性、ADMET及可合成性纳入联合生成与筛选目标

数据来源：Nature，Journal of Chemical，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

从靶点发现到候选分子（大分子/小分子）产生的干湿实验闭环

图：从靶点发现到候选分子产生的DMTA/DBTL闭环



数据来源：NIH Assay Guidance Manual、FDA，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

实验验证环节的四类子闭环

➢ 实验验证（Test）环节通常包括分子与生化验证、细胞功能验证、体外DMPK验证和动物体内验证，依次评估候选分子的靶点活性与选择性、细胞水平效应、代谢及暴露特征，以及体内药效与初步安全性。测试并非单向推进，每一层实验结果均可反馈至分析、设计和合成环节，形成局部DMTA闭环，推动候选分子在多轮迭代中持续收敛。随着验证由体外向体内推进，实验周期、成本及复杂度逐步提高，项目通过阶段门持续淘汰未达标分子，进入下一层验证的候选数量相应减少。

图：实验验证（Test）环节的四类子闭环

01 分子与生化验证

主要测试

结合能力、活性、选择性
作用机制与脱靶风险

是否真正作用于目标靶点

优化骨架、结合位点与取代基

02 细胞功能验证

主要测试

细胞通透性、靶点结合
细胞活性与细胞毒性

在细胞环境中是否有效

优化通透性、效力与脱靶风险

03 体外DMPK验证

主要测试

溶解度、代谢稳定性、CYP
血浆蛋白结合等

能否获得合适的体内暴露

优化理化性质与代谢稳定性

04 动物体内验证

主要测试

PK与组织暴露
药效、耐受性及初步安全性

是否具备体内药效与安全窗口

优化剂量暴露、分布与安全边界

数据来源：NIH Assay Guidance Manual、FDA，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

AI在抗体发现前端渗透较快，功能验证与CMC仍依赖实验

➢ **AI在大分子药物发现中的应用，当前主要集中在研发前端。**尤其在抗体发现中，AI可以从庞大的序列空间中优先筛选更可能具备良好亲和力、特异性和可开发性的候选分子，从而提高命中率，并减少无效的实验筛选工作。不过，AI目前更擅长解决“序列/结构层面的预测与设计”，对真实生物学功能的预测仍存在明显限制。这是由于抗体的药效不仅取决于结合能力，还受到表位位置、构象变化、糖基化、受体聚集、内化效率以及复杂细胞环境等因素影响，因此，结合性表征和功能性实验等步骤仍是不可替代的验证环节。CMC、药代动力学、毒理和IND前临床研究涉及复杂的细胞、工艺和动物系统，并且加上监管及伦理的要求，AI更多能够用于预测和优化，但难以直接取代真实实验。

图：抗体药物发现流程AI覆盖度

抗体药物发现 / Antibody Drug Discovery	设计–构建–测试–学习 / D-B-T-L	当前AI应用水平	剩余被颠覆风险	CMC前成本占比 / %	药物发现总成本占比 / %
1）靶点识别	L	高	有限	11.0%	5.8%
2）靶点验证	T	中等	低	9.0%	4.7%
2.5）抗原设计与制备	D-B	中等	有限	1.4%	0.7%
3）候选抗体发现、抗体设计及初步筛选	D-B-T-L	中等-高	有限	13.8%	7.3%
4）克隆与表达	B	分化	低	2.1%	1.1%
5）结合性表征	T	低	低	6.9%	3.6%
6）功能性试验	T	低	低	28.3%	14.9%
7）成药性评估	T	中等	有限	4.1%	2.2%
8）抗体工程与优化	D-B-T-L	分化	中等	23.4%	12.4%
9）工艺开发与生产（CMC）	B-T	低	低	-	**35.6%**
10）支持IND申报的临床前研究	B-T	低	低	-	11.6%
				CMC前总成本约200万–500万美元	临床前总成本约400万–1000万美元

数据来源：William Blair ，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

AI抗体药物发现应用举例（1/2）：靶点识别与验证

➢ 靶点验证旨在判断调节某个基因或蛋白能否改变疾病进程，并确认作用方向、适用人群和潜在安全风险。AI参与靶点发现与验证通常包括四个环节：首先整合遗传学、多组学、患者数据和文献证据，识别并排序候选靶点；随后结合共定位、孟德尔随机化等方法判断疾病关联是否具有因果性，并明确干预方向；进一步利用单细胞和扰动数据预测靶点调节后的细胞反应；最终通过CRISPR、药理学实验、细胞、类器官和动物模型验证靶点的有效性与安全性。

➢ **目前，AI在证据整合、疾病关联识别和候选靶点排序方面的工具及流程相对成熟。**AI可整合患者数据、人类遗传学、多组学及文献证据，完成候选靶点排序、作用方向判断、患者分层和风险预警，减少低价值实验。结构与分子相互作用预测已成为重要辅助工具，预测对象从单体蛋白拓展至蛋白复合物、抗原抗体界面和结合关系；知识图谱、多组学和人类遗传学已广泛用于靶点筛选。相比之下，单细胞分析、扰动效应预测和机制推演仍处于快速迭代阶段，对新细胞类型和未见基因扰动的泛化能力有限。

图：AI参与靶点发现与验证的主要环节

	多源数据寻找候选靶点	判断相关性是否因果关系	预测扰动靶点后的细胞反应	实验完成真正的靶点验证
流程阶段	• 基因组：GWAS、罕见变异、患者测序； • 转录组、蛋白组、代谢组； • 单细胞和空间组学； • 病理图像、电子病历、论文和专利； • 蛋白互作、信号通路及药物—靶点关系。	• 疾病关联信号 • → 定位可能的致病基因 • → eQTL / pQTL共定位 • → 孟德尔随机化 • → 判断提高或抑制靶点是否可能改善疾病	• 敲除、敲低或过表达靶点后的转录组变化； • 细胞形态、信号通路及功能表型； • 不同细胞类型和患者背景中的差异； • 单靶点及靶点组合的协同、拮抗关系。	• 细胞、类器官、动物模型 • CRISPR与单细胞测序 • 生物标志物和安全窗口评估
对传统实验环节的影响	**AI成熟度：较成熟** 减少人工检索和证据整理工作，同时提高对高质量数据库的需求	**AI成熟度：**较成熟 减少大范围无差别基因筛选，增加测序、基因分型、组织表达和功能基因组验证需求	**AI成熟度：**中等，快速迭代 增加单细胞测序、空间组学、高内涵成像、CRISPR、Perturb-seq和自动化细胞实验需求	**AI成熟度：**实验主导，AI辅助 增加SPR/BLI、CETSA、NanoBRET、蛋白质组学、类器官、动物模型、安全药理和患者样本验证需求

数据来源：Nature Reviews Drug Discovery，Nature Medicine，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

AI抗体药物发现应用举例（2/2）：抗体工程与优化

AI在大分子的分子发现中主要沿两条路径切入：

- 抗体工程：以抗体、VHH等成熟分子形式为基础进行序列和多参数优化，临床转化路径相对清晰；
- De novo（从头生成）：从目标表位出发，从头设计全新的蛋白骨架与序列，有望覆盖传统抗体较难触达的表位和蛋白互作界面。

现阶段，抗体优化路线的开发成熟度更高；De novo蛋白设计主要用于拓展分子空间和验证设计闭环，生成结果仍需经过表达、折叠、结合、功能及成药性实验的系统验证。

图：抗体优化与De novo两条路径对比

	路线一 抗体工程	路线二 De novo
设计起点	成熟抗体框架、CDR或VHH等分子形式	靶点结构、目标表位和预设结合模式
AI主要作用	**优化：**序列优化、亲和力/特异性提升、可开发性优化	**生成：**全新蛋白骨架、结合界面和氨基酸序列
代表形式	完整抗体、双抗、VHH、Fab、scFv	Mini protein、Mini binder、小型支架蛋白
当前进展	已进入临床验证	湿实验结合验证阶段

从结构到实体分子的设计验证流程



数据来源：Nature，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

PART 2

AI制药潜力释放，产业链有望持续受益

下载日志已记录，仅供内部参考

AI药物发现有望驱动产业链持续受益

开源模型

AlphaFold 3　ESM3
RoseTTAFold　Evo 2
BoltzGen　RFdiffusion3
EVOLVEpro　ProteinGym
ProGen　ProtGPT2

前沿生命科学实验室

ANTHROP\C
Isomorphic Labs
Anew Labs
Chai Discovery
Profluent
EvolutionaryScale
Arc Institute
OWKIN

AI制药公司

absci
Recursion
insitro
xaira
deep genomics
Helixon
Insilico Medicine
Schrödinger

大型药企（已公布AI布局）

Roche
Lilly
gsk
AstraZeneca
NOVARTIS
Pfizer
Johnson&Johnson
sanofi
novo nordis
Bristol Myers Squibb

自动化实验设备

opentrons
HighRes biosolutions
TECAN
HAMILTON
sptlabtech
Automata
DANAHER
Haier Biomedical
Intelligent Protection of Life Science

算力

Microsoft Azure
Google Cloud
NVIDIA
aws

软件

tetrascience
Benchling
Dotmatics
LABWARE
sapio sciences

分析工具

DANAHER
NANOPORE
illumina
Waters
Agilent
PacBio
10X GENOMICS
华大智造 MGI

试剂及耗块

revvity
ThermoFisher SCIENTIFIC
QIAGEN
bio-techne
CORNING
Promega
Cell Signaling TECHNOLOGY
义翘神州 Sino Biological
Acro BIOSYSTEMS
BIOFIL

服务

charles river
昭衍 JOINN
ADIMAB
TWIST BIOSCIENCE
WuXi AppTec
GenScript
SAMSUNG BIOLOGICS
WuXi Biologics
Global Solution Provider

- AI正在推动药物研发由传统湿实验主导，转向“计算设计-自动化实验-数据反馈”的闭环模式。
- **生态上层（支付方）由开源模型、前沿生命科学实验室、AI biotech及MNC企业**构成，相关主体需要通过模型迭代、靶点发现、分子设计和管线开发，持续验证AI制药技术的研发价值及商业模式的可持续性。
- **底层（服务提供方）则由算力、实验室自动化、研发软件、分析仪器、试剂耗材及CRO/CDMO服务**提供支撑。随着AI大模型在药物研发中的逐渐深入，相关产业链有望长期受益。

数据来源：William Blair，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

AIDD验证现状：早期环节应用较多，临床及后续成果转化仍待验证

- 目前，AI制药的“技术路径”已经部分打通，但“商业闭环”还没有完全打通。在现有阶段，AI已经能提高靶点筛选、分子生成、DMTA/DBTL循环和部分临床开发效率，但尚未证明其能否在行业层面稳定提高“最终获批率”和“单药全生命周期回报率”。
- **代表性案例之一为Insilico的Rentosertib。**AI辅助识别TNIK靶点价值并参与了小分子设计，2025年公布的Phase IIa随机试验结果显示初步肺功能改善信号，60mg组12周FVC平均增加98.4mL，安慰剂组平均下降20.3mL；2026年9月，其III期临床试验完成首例患者给药，是目前观察“端到端AI制药模式”能否实现临床转化的关键样本之一。

01	02	03	04
模型能力验证	**研发转化验证**	**临床价值验证**	**商业价值验证**
AI能否提出可验证的新靶点或新分子？	计算结果能否转化为可开发的候选药物？	候选药物能否在人体中体现安全性和疗效？	AI能否提高获批概率和单药全生命周期回报？
已初步验证	**已经验证**	**个别项目出现积极信号**	**尚未完成行业级验证**

靶点发现 Target → **分子生成** 小分子/大分子 → **先导化合物** Hit-to-Lead → **临床前候选药物** PCC → **新药临床试验申请** IND → **临床实验** Phase I / II / III → **获批上市** → **商业表现**

DBTL/DMTA ↓　　向产业链不同部分传导订单 ↓

发现 / 临床前CRO	CDMO	CMO / 商业化生产
湿实验贯穿DBTL/DMTA，筛选、药效、DMPK及毒理评价	分子制备、工艺及分析方法开发	候选物确定后的放大、生产与供应

数据来源：Nature Biotechnology，英矽智能公告，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

AI模型对制药各环节的需求拉动有所分化，整体增量明确

➢ AI带来的订单增量先在前端实验环节兑现，再向临床与生产环节传导。短期增量集中于基因合成、表达纯化和功能验证；临床与生产需求取决于后续管线转化。

表：AI制药产业链各环节的需求增量与兑现节奏

在研发端的位置	受益方向	核心增量	预计兑现节奏	当前判断
靶点发现与验证阶段	结构分化	组学、单细胞、CRISPR、高内涵成像、组织与细胞模型	当期体现	增量较明确，但以研发服务订单为主
小分子药物发现阶段	结构分化	定制合成、活性测试、SAR、DMPK和临床前研究	当期体现	标准化筛选承压，高难度合成与验证受益
大分子药物发现阶段	需求放大	基因合成、表达纯化、结合功能及可开发性评价	当期兑现	当前最明确的增量方向
临床前开发阶段	需求放大 服务溢价	/	约1–5年	受益确定性较高，但取决于PCC和IND数量
临床开发阶段	需求放大 效率提升	/	约2–5年	取决于进入临床的管线数量和成功率
临床前后期至临床及商业化生产	需求放大 单项目价值提升	/	约3–10年以上	兑现较晚，且需经过候选物收敛和临床验证
临床执行阶段	降本增效为主 价格可能承压	/	当期开始体现	人效改善较明确，收入端未必同步受益

数据来源：中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

AI制药模型训练需要高质量实验数据

➢ **AI模型可以提高候选序列生成与筛选效率，但候选分子进入下一阶段仍需经过实验验证。**随着客户从少量序列验证扩展至多序列并行测试和多轮模型迭代，实验服务需求有望从单次小规模订单，逐步转向多批次、重复性订单。进入候选药物优化阶段后，序列数量有所收敛，但数据质量、实验深度和单项目价值可能继续提高。**目前订单放量主要来自序列数量增加、实验轮次增加和服务深度提升。**

➢ **CXO并非普遍受益，高通量、自动化、数据标准化和快速交付能力较强的服务商更容易承接增量。**客户需求逐步由单点、标准化服务转向高质量、自动化实验和跨环节闭环服务，具备综合药物发现及非临床能力的平台有望受益。例如礼来TuneLab向生态圈生物科技公司开放模型，2026年9月，**金斯瑞宣布加入TuneLab生态圈，为TuneLab成员企业提供Gene-to-Protein湿实验数据生成服务**，通过表达、纯化和表征，将AI优选序列转化为实验数据和生物学证据。

图：不同研发阶段的数据规模、质量门槛与决策价值

数据规模呈现“扩展后收敛”，数据质量与单条数据的决策价值持续提升

01 模型 / 平台验证

少量标准数据
主要用于判断平台是否可用

准确性、重复性
批次一致性、实验兼容性

02 单任务模型训练

模型学会某个具体任务
数据开始影响模型表现

标签准确、正负样本合理
数据规模与覆盖范围扩大

03 多任务平台模型构建

让模型具备跨任务泛化能力
数据质量决定模型能力上限

多样性、覆盖度、标准化
来源和实验条件可追溯

04 候选药物开发

研究对象缩小到少数分子
数据能否支持筛选与继续开发

功能与机制验证
成药性及可开发性数据



前端实验确定性较高，后续单项目价值更大，但需要候选物持续跨越PCC、IND和临床门槛

数据来源：Lilly TuneLab、金斯瑞公告及官网，中信建投证券

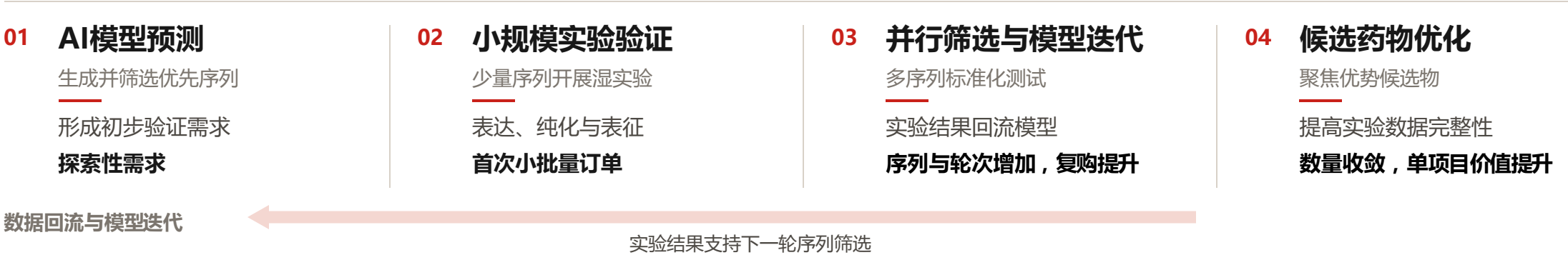
下载日志已记录，仅供内部参考

AI制药模型训练需要高质量实验数据

➢ **AI制药模型所需的功能性标签难以通过公开渠道直接获得，湿实验是高质量训练数据的重要来源。** UniProt、PDB等公共数据库可为序列模型和结构模型提供基础训练数据，但主要反映蛋白序列与三维结构特征。亲和力、表达稳定性、细胞响应等与药物研发决策密切相关的指标，仍需通过实验测定，建立序列、结构与功能之间的对应关系，为模型训练、评估及迭代提供依据。

➢ **随着AI应用由结构预测向功能预测和生成设计延伸，模型对高质量标注数据的需求进一步增加，大分子药物领域尤为明显。** 以蛋白适应度模型为例，通常需要经过基因合成、蛋白表达与展示、突变文库筛选及NGS测序等环节，建立序列变化与功能变化的映射关系。模型预测目标越接近真实药效，对实验数据的维度、样本规模、批次一致性及可重复性要求越高。AI在药物研发中的应用深化，有望推动湿实验体系向高通量、自动化和标准化方向发展。

图：AI预测向湿实验订单传导路径



数据来源：UniProt、RCSB PDB、NIH Assay Guidance Manual、中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

AI扩大候选分子数量，实验验证服务需求有望同步增长

➢ AI生成或筛选的序列经过DNA/基因合成、蛋白或抗体表达、亲和力检测及功能与成药性评估，形成从序列到实验结果的收费链条。各环节计价方式有所不同：基因合成多按bp、序列或文库收费；表达服务多按序列、批次或体积计价；SPR、BLI亲和力检测按机时、样本或分子对计价；功能实验通常根据assay组合、候选数量和交付标准报价。随着候选规模扩大及DBTL迭代轮次增加，实验订单量有望同步增长。表中价格仅作为公开参考锚点，商业CRO项目通常采用定制报价，实际价格受序列复杂度、表达体系、检测深度、交付周期及质量标准影响。

表：不同服务可收费项目

可收费项目	公开参考价格	计价单位	备注
DNA / 基因合成	Twist基因片段从0.07美元/bp起；300–500 bp为35美元/条	bp、序列或文库	公开目录价；复杂序列、载体与批量折扣另计
蛋白 / 抗体表达	科研平台参考：大肠杆菌1,700元/项目；哺乳细胞蛋白3,700元/项目；CHO抗体1,300元/项目	序列、批次或体积	成本补偿性收费；商业CRO价格受表达系统和交付条件影响
亲和力检测	国内SPR仪器参考550元/小时；Scripps全服务BL约460美元起 + 160美元/新增样本	机时、样本或分子对	耗材、优化和重复测定可能额外计费
功能 / 成药性组合	通常询价；按ELISA、FACS、SEC、DSF、细胞功能等组合	assay、样本或项目包	具体价格由候选数、检测深度和交付标准决定

数据来源：Twist，UniProt、RCSB PDB、NIH Assay Guidance Manual、金斯瑞官网，中信建投证券

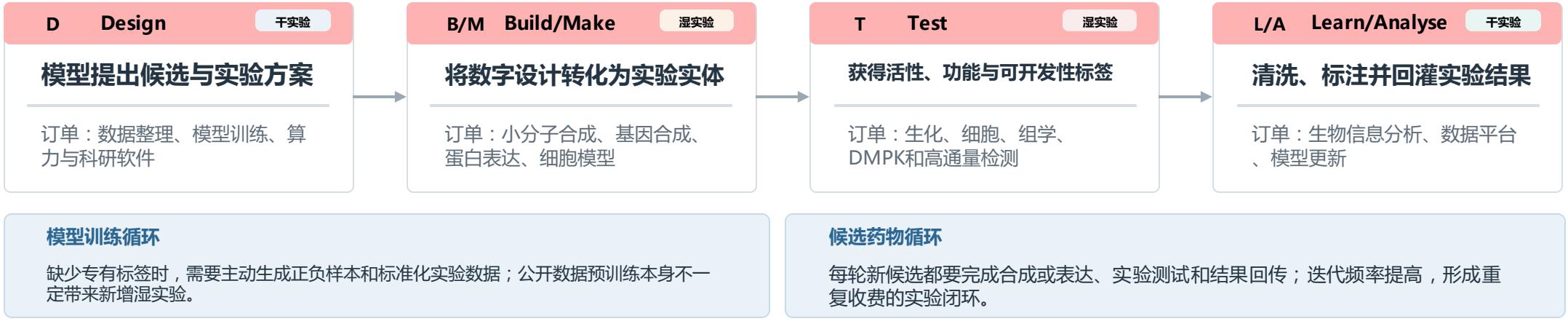
下载日志已记录，仅供内部参考

湿实验订单同时来自模型训练需求和候选药物推进

模型迭代与候选药物验证共享Build和Test环节，同一批湿实验结果既验证候选分子的性能，也生成下一轮训练数据：

- **1. 数据-模型迭代。**模型优化需要覆盖正负样本、不同性质区间及统一实验条件的高质量标签数据，以识别有效分子并校准失败风险，由此可能产生面向模型训练的数据生成订单，包括CRISPR筛选、组学与单细胞、高内涵成像，以及结合、功能和成药性实验。其中，大分子AI设计与湿实验的衔接更为紧密，模型生成新序列后，需要通过基因合成、蛋白表达与纯化、结合及功能检测获得实验标签，再用于筛选候选分子和优化模型；小分子端的实验需求则由传统大规模盲筛转向定制合成、多参数验证和高质量DMPK测试。围绕具体靶点开展主动学习和专有模型训练，将持续推动“模型设计-实验验证-数据反馈”的迭代循环。
- **2. 候选药物验证。**模型不断提出新分子或新序列，每轮DBTL/DMTA均通过活性、选择性、功能和成药性实验对候选分子进行收敛，决定其淘汰、优化或推进。随着模型迭代提升候选分子的命中率和质量，候选分子向体内药效、安全性评价及工艺开发等后续环节推进的比例提升，带动订单从药物发现端向临床前开发端传导。

图：AI模型训练及候选药物推进对湿实验订单的传导路径



数据来源：中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

客户侧：AI预筛选减少无效实验，降低单个合格Hit的获取成本

➢ 在初始候选数量和最终获得的合格Hit保持一致、AI预筛选将进入实验的候选分子由1,000个减少至100个的假设下，根据情景测算，项目总成本可由330万元降至55万元，单个合格Hit成本由110万元降至18.2万元，降幅约83%，说明AI可以减少低潜力候选进入后续实验，将研发资源集中于更可能成功的分子。

表：情景测算（AI预筛选情景下的实验漏斗与成本情况）

项目	无AI场景	有AI预筛选场景（假设）	项目收费单价
初始构建候选数	1,000个	1,000个	-
AI初筛后候选分子数	1,000个（不初筛）	100个	AI筛选约10万元/项目*
DNA合成及载体构建数	1,000个	100个	约1,800元/个
成功表达候选数	300个	60个	表达纯化约1,000元/个；按进入表达的候选数收费
进入亲和力表征候选数	300个	60个	约1200元/个
亲和力阳性候选数	30个	15个	-
进入功能验证候选数	30个	15个	约3,000元/个*
合格功能Hit数	3个	3个	-
基础设计及项目管理费	5万元	5万元	约5万元/项目*
项目总成本	**330.0万元**	**54.7万元**	**-**
单个合格Hit成本	**110.0万元/个**	**降至18.2万元/个**	**项目总成本÷3个Hit**
相对成本	**1.0×**	**0.17×**	**AI预筛相对成本下降约83%**

注：以上为示意测算，实际成本取决于候选通过率、实验单价及项目设计。

数据来源：中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

服务商侧：AI候选分子规模扩大带来订单增量

➢ **候选分子数量扩大是最直接的需求增量。**传统药物发现通常围绕少量候选开展实验，生成式模型可快速提出数百至数千条序列，送测分子数量、检测维度和DBTL迭代轮次随之增加，带动DNA合成、蛋白表达及功能检测需求。同时，客户结构同步拓展。通用模型公司需要更大规模的训练和评测数据，前沿生命科学实验室/AI制药客户需要验证具体靶点和管线，大型药企建设内部AI研发平台，这些都为湿实验平台带来订单增量。

➢ 此外，传统业务通常按基因、蛋白或样品收费，前沿生命科学实验室/AI制药客户更可能按批次、检测维度或数据点收费。这可能会导致：1）单条序列价值提高：不仅提供蛋白合成，还同时提供结合、稳定性、表达量、纯度、聚集性等多维数据检测服务；2）数字交付成本较低：部分项目不需要样品包装和国际运输；3）订单连续性提高：由一次性候选筛选变成多轮模型训练，由此有望带动订单量价齐升。

表：情景测算（可收费实验事件随候选规模和迭代轮次快速放大）

	低通量	基准	高通量	实验环节	主要受益方向
靶点数/项目*每靶点设计分子数	1个靶点*100–500分子	(1–2个靶点)*(1,000–5,000分子)	4个靶点*9,000个分子	AI生成设计，计算筛选	AI模型、算力
DNA合成序列数	100–500	1,000–10,000	约36,000	DNA合成	基因合成/试剂
构建形式	单体构建	池化文库	池化酵母展示文库	文库构建	文库构建、载体与克隆试剂
初筛方式	单体表达 + SPR/BLI	展示筛选	酵母展示筛选	酵母展示、FACS	流式细胞术服务、重组靶蛋白
筛选及测序	可选	2–4轮/文库	2–4轮/文库	富集测序	测序服务/试剂
进入单体表达数量	100–500	200–1000	500–2000	蛋白表达与纯化	蛋白表达与纯化/试剂/耗材
进入定量亲和力表征数量	80-400	40–200	36–180	SPR/BLI检测	生物分析仪器、芯片耗材、检测服务
进入功能验证数量	5-25	5–50	10–100	细胞及功能实验	细胞实验、药效评价CRO
DBTL/DMTA轮次	2	3	5	/	/
理论可收费实验事件数（区间中值）	**约1,700**	**约18,700**	**约187,000**	**/**	/
相对指数	**1.0×**	**11.0×**	**109.4×**	**/**	/

数据来源：Twist投资日、Baker Lab论文，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

国内实验服务企业有望受益于AI制药浪潮

➢ **高通量、标准化与数据交付能力决定实验服务商的受益顺序。**AI提高候选分子生成通量后，短期瓶颈由“能否设计”转向“能否快速、标准化地完成表达与验证”。金斯瑞作为全球基因合成领域领导者，市占率领先，已形成覆盖基因合成、蛋白表达、抗体开发及实验数据交付的Gene-to-Protein一体化平台，在复杂基因和长片段基因合成方面具备较强竞争力。2026上半年公司生命科学业务实现收入3.19亿美元，同比增长28.8%；其中Gene-to-Protein业务约占生命科学板块收入的66%，随着AI生成候选序列数量增加，金斯瑞有望凭借自动化生产、快速蛋白表达和标准化实验数据交付能力，持续承接AI制药带来的湿实验验证需求。

➢ 国内其他公司如百英生物、百普赛斯、义翘神州、近岸蛋白同样具有较强的蛋白表达能力，百英生物更侧重于定制CRO服务，百普赛斯、义翘神州、近岸蛋白此前更侧重标准化重组蛋白服务，目前积极布局定制CRO服务机会中。

表：国内AI制药实验服务企业

	金斯瑞生命科学（LSG）	百英生物	义翘神州	百普赛斯
公司业务定位	**全链条定制 Gene-to-Protein 平台**，覆盖基因合成→蛋白/抗体表达→检测	**定制抗体/蛋白 CRO**，聚焦高通量表达及抗体发现	**货架产品+CRO双轮驱动**，优势为蛋白/抗体产品库	**高端货架重组蛋白平台**，标准化产品销售为核心
2025财务数据	**收入5.22亿美元（+14.8%）**；调整后经营利润0.95亿美元；调整后毛利率51.2%	**收入6.08亿元（+51.2%）**；归母净利润2.16亿元；毛利率69.7%	**收入7.00亿元（+14.0%）**；归母净利润1.48亿元	**收入8.38亿元（+29.9%）**；归母净利润1.66亿元
收入结构	以**基因合成、蛋白/抗体表达等定制服务**为核心，同时有生命科学产品	**定制属性强**：抗体/蛋白表达81.2%，抗体发现15.0%；货架产品2.5%	重组蛋白44.1%、抗体15.2%、CRO 31.1%	重组蛋白81.0%；技术服务约2.0%
产能	TurboCHO™平台：每年交付超过30万条抗体；预计26年底，AI驱动的智造中心将承接60%的生产	每年交付超10万条抗体 江苏生产基地在建，预计大幅提升产能	研发：每月交付超1万条抗体 生产：80+ 2L-1500L生物反应器，ug-kg级生产规模	苏州工厂一期可承接10-500L原液，二期预计2026年完成，将进一步提升公司GMP级产品的生产能力
基因合成	★★★★★	★★★ （不对外开放服务，用于高通量蛋白表达）	★ （不对外开放服务，用于高通量蛋白表达）	★ （不对外开放服务，用于高通量蛋白表达）
突变库/文库构建	★★★★★	★★	★★	★★
高通量蛋白/抗体表达	★★★★★	★★★★	★★★	★★★

数据来源：公司公告，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

PART 3

AI制药临床验证推进，合作与商业化路径逐步清晰

下载日志已记录，仅供内部参考

行业从技术验证走向临床验证，头部管线正在跨越Phase II/III

➢ 截至2026年9月，部分AI辅助发现或设计的候选药物已进入临床中后期。Insilico的Rentosertib已完成III期首例给药，Generate的GB-0895正在开展全球III期研究，为AI制药管线中进展较快的两个项目，但现阶段整体相关管线数量仍较为有限，AI能否系统性提高研发成功率和商业回报仍有待持续验证。

表：代表性小分子AI管线进展

药物名称	药物类型	靶点	适应症	公司	研发开始时间	目前进展	备注
Rentosertib（ISM001-055）	口服激酶抑制剂	TNIK	特发性肺纤维化（IPF）	Insilico Medicine	2020年	Phase III	最接近“AI模型→AI设计药→临床验证”完整闭环
REC-4881	口服激酶抑制剂	MEK1/2	家族性腺瘤性息肉病（FAP）	Recursion	2020年启动FAP再定位；原化合物更早由Takeda开发	Phase Ib/II	AI表型组学实现老分子适应症重定位
Garutadustat（ISM5411）	肠道限制性PHD抑制剂	PHD1/2	炎症性肠病，重点为溃疡性结肠炎	Insilico Medicine	约2021年	Phase IIa	AI设计肠道限制性分子，降低全身暴露
SGR-1505	口服变构抑制剂	MALT1	复发或难治性B细胞恶性肿瘤	Schrödinger	2022年首次公开候选物	Phase I	物理建模驱动设计，已见早期临床活性
SGR-3515	双靶点激酶抑制剂	WEE1/MYT1	晚期实体瘤	Schrödinger	2022年首次公开候选物	Phase I	计算设计双靶点抑制剂，早期数据积极
IAM1363	脑渗透HER2 TKI	HER2野生型及致癌突变体	HER2扩增、过表达或突变的晚期实体瘤，包括脑转移	Iambic Therapeutics	约2022年	Phase I/Ib	AI优化选择性与脑渗透性，已见疗效信号
REC-1245	分子胶降解剂	RBM39	生物标志物富集的实体瘤及淋巴瘤	Recursion	2023年；从靶点识别到IND支持约18个月	Phase I/II	AI发现新靶点并设计分子胶降解剂
ISM3091	口服抑制剂	USP1	BRCA突变或同源重组修复缺陷实体瘤	Insilico Medicine / Exelixis	2023年获IND并完成授权	Phase I	AI设计分子，授权Exelixis开发
ISM6331	口服泛TEAD抑制剂	TEAD1–4	间皮瘤及其他Hippo通路异常晚期实体瘤	Insilico Medicine	2024年进入临床	Phase I/II	AI设计泛TEAD抑制剂，处于早期临床
PEP08（PE-0260）	脑渗透型MTA协同抑制剂	PRMT5–MTA复合物	MTAP缺失晚期实体瘤，包括潜在脑肿瘤适应症	智擎生技 / 晶泰科技	2025年进入临床	Phase I	AI与自动化实验优化选择性及脑渗透

数据来源：公司公告，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

行业从技术验证走向临床验证，头部管线正在跨越Phase II/III

➢ 截至2026年9月，部分AI辅助发现或设计的候选药物已进入临床中后期。Insilico的Rentosertib已完成III期首例给药，Generate的GB-0895正在开展全球III期研究，为AI制药管线中进展较快的两个项目，但现阶段整体相关管线数量仍较为有限，AI能否系统性提高研发成功率和商业回报仍有待持续验证。

表：代表性大分子管线进展

药物名称	药物类型	靶点	适应症	公司	研发开始时间	目前进展	备注
GB-0895	长效单克隆抗体	TSLP	重症哮喘；COPD	Generate:Biomedicines	内部立项未披露；2023年首次进入临床	重症哮喘全球Phase III；COPD Phase I/Ib	AI优化亲和力与半衰期，拟半年给药
Imneskibart（AU-007）	人源单克隆抗体	IL-2的CD25结合表位	晚期黑色素瘤、NSCLC等实体瘤	Aulos Bioscience / Biolojic Design	2020年；2022年首次患者给药	Phase I/II	AI设计功能表位，重定向IL-2信号
ABS-201	长效单克隆抗体	PRLR	雄激素性脱发；子宫内膜异位症	Absci	2024年首次公开；2025年进入临床	脱发Phase I/IIa；拟开展子宫内膜异位症Phase II	生成式AI优化长效抗体，新机制待验证
IBIO-600	长效单克隆抗体	Myostatin/GDF8、GDF11	肥胖减重过程中的瘦体重保护；肌少症等	iBio / AstralBio	2024年4月	Phase I	AI多参数优化，约两年推进至临床
BHB810	VHH-Fc抗体偶联药物（ADC）	CDH17	胃癌、胃食管结合部癌及其他晚期胃肠道肿瘤	BigHat Biosciences	内部立项未披露；2026年首次进入临床	Phase I	AI优化ADC活性、安全性及可制造性
PQ203	肽偶联药物（PDC）	SORT1	晚期实体瘤，包括三阴性乳腺癌	ProteinQure	2022年	Phase I	AI设计SORT1靶向肽并偶联MMAE
CBI-1214	双特异性T细胞连接器	LY6G6D×CD3	MSS/MSI-L结直肠癌	Cartography Biosciences	内部立项未披露；2025年公开候选物	Phase I	AI发现肿瘤靶点，非明确从头设计抗体
ABS-101	单克隆抗体	TL1A	炎症性肠病	Absci	2023年首次公开；2025年进入临床	Phase I	AI从头设计抗体，后续转向授权合作
GB-0669	长效病毒中和单克隆抗体	SARS-CoV-2 S2茎螺旋	新冠病毒及其他Sarbecovirus感染	Generate:Biomedicines	约2022年；从计算设计到临床约17个月	Phase I	完成人体平台验证，已降低开发优先级

数据来源：公司公告，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

MNC与科技巨头通过收并购及合作加速布局

➢ 近年来，MNC通过各种方式加速AI方面布局，包括直接参与AI公司早期融资，购买AI制药公司管线权益以及收并购不同类型企业等。其中以利用AI技术平台合作开发新药为主，目前合作涵盖了小分子、大分子、分子胶、疫苗、环肽等多种药物类型。

表：全球药企与科技公司AI制药合作及并购案例

MNC	合作方	时间	合作金额	技术方向	合作内容
礼来 Eli Lilly	Superluminal Medicines	2025/8/14	最高13亿美元；包含股权投资、里程碑及销售提成，首付款未单独披露	AI小分子发现；GPCR及MC4R等肥胖、心血管代谢靶点	礼来获得使用Superluminal AI驱动药物发现平台发现和开发肥胖及其他心血管代谢疾病候选药物的权利，并可开发及商业化相关项目。
施维雅 Servier	英矽智能 Insilico Medicine	2026/1/4	总额最高8.88亿美元；首付款及近期研发付款最高3,200万美元	Pharma.AI；生成式小分子设计；肿瘤药物发现	英矽智能针对具有挑战性的肿瘤靶点开展AI驱动的候选药物发现，施维雅分担研发成本并负责后续临床验证、监管及全球商业化。
勃林格殷格翰 BI	Variant Bio	2026/1/6	首付款未披露；首付款、许可费及里程碑合计可能超过1.2亿美元	人类遗传学；多组学；Inference智能体AI平台	双方利用全球人群遗传、深度表型及多组学数据，发现和验证心肾及肾脏疾病的新型药物靶点。
拜耳 Bayer	Cradle	2026/1/7	未披露	生成式蛋白质设计；抗体发现与优化	三年期战略合作，拜耳使用Cradle科学AI平台设计和优化抗体；双方同时开展机器学习研究，提升蛋白工程能力。
礼来 Eli Lilly	Chai Discovery	2026/1/9	未披露	生成式生物大分子及抗体设计；Chai-2；礼来专有数据训练模型	Chai Discovery将其AI平台与礼来数据结合，为多个靶点设计新型生物治疗候选物并为礼来开发定制AI模型及相关工作流。
赛诺菲 Sanofi	CytoReason	2026/1/9	最高1,600万美元；多年期协议	AI计算疾病模型；分子及临床数据整合；机制推理	第三次扩大合作，赛诺菲使用CytoReason计算疾病模型，分析基因、通路、细胞及患者亚群数据，为药物发现和开发决策提供支持。
礼来 Eli Lilly	NVIDIA	2026/1/12	双方五年共同投资最高10亿美元	AI超算；BioNeMo；Vera Rubin；药物发现模型；实验室自动化	建设AI联合创新实验室，将礼来药物研发及生产经验与NVIDIA算力、基础模型、机器人及物理AI结合。
阿斯利康 AstraZeneca	Modella AI	2026/1/13	收购金额未披露	病理AI；生物标志物；AI智能体；肿瘤研发	阿斯利康收购Modella AI，将其病理图像分析、生物标志物发现及智能体技术整合进肿瘤研发体系。
百时美施贵宝 BMS	Microsoft	2026/1/20	未披露	放射影像AI；肺癌早筛；Precision Imaging Network	通过微软Precision Imaging Network在美国医疗机构部署经FDA批准的影像AI算法辅助识别肺结节、提高肺癌早期发现率并完善患者随访。
武田 Takeda	Iambic Therapeutics	2026/2/9	包括首付款、研发经费及技术使用费；成功里程碑付款可能超过17亿美元；另有销售提成	Enchant；NeuralPLexer；AI结构建模；小分子设计；自动化湿实验	使用Iambic AI平台和高通量自动化实验能力推进高优先级小分子项目，初期聚焦肿瘤及胃肠道和炎症疾病。

数据来源：公司公告，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

MNC与科技巨头通过收并购及合作加速布局

表：全球药企与科技公司AI制药合作及并购案例（续表）

MNC	合作方	时间	合作金额	技术方向	合作内容
礼来 Eli Lilly	英矽智能 Insilico Medicine	2026/3/30	总额最高27.5亿美元；首付款1.15亿美元；另有里程碑及分级销售提成	AI靶点发现；生成式化学；小分子设计；口服候选药物	礼来获得若干临床前口服候选药物的全球独家开发、生产和商业化权利，并利用英矽智能AI平台开展进一步药物发现。
默沙东 Merck/MSD	Google Cloud	2026/4/22	多年投资最高10亿美元；属于AI基础设施及能力投资	Gemini Enterprise；智能体平台；云计算；企业AI	在研发、制造、商业及企业职能中部署智能体AI平台，由Google Cloud工程师与默沙东团队共同开发和落地AI工作流。
阿斯利康 AstraZeneca	Immunai	2026/5/11	2026-2027年最高3,750万美元	单细胞组学；免疫系统AI模型；生物标志物；患者分层	第三次扩展合作，阿斯利康继续使用AMICA-OS分析肿瘤临床数据，支持机制分析、生物标志物发现、患者分层及剂量优化。
勃林格殷格翰 BI	Brainomix	2026/5/12	未披露	e-Lung；HRCT影像生物标志物；肺纤维化AI	扩大肺纤维化合作，推进PROGRESS-PPF多中心前瞻性研究，在美国多家中心部署e-Lung，评估其对进行性肺纤维化早期诊断和临床管理的价值。
百时美施贵宝 BMS	Anthropic	2026/5/20	未披露	Claude Enterprise；AI智能体；研发及临床文档自动化	在3万余名员工中部署Claude，将智能体能力用于科学数据分析、靶点发现、临床开发、监管文件、生产质量及企业知识调用。
灵北 Lundbeck	Cradle	2026/6/3	未披露	生成式蛋白设计；抗体设计与优化；闭环DMTA	使用Cradle AI平台发现和优化生物治疗药物，首批聚焦两个中枢神经系统疾病抗体项目。
Alnylam	Inceptive	2026/6/3	总额最高20亿美元；前期对价3,000万美元，包括现金及股权投资	RNA/RNAi序列基础模型；生成式寡核苷酸设计	将Alnylam二十余年的RNAi数据与Inceptive基础模型结合，联合开展多个研究项目，提升siRNA设计和候选分子优选效率。
辉瑞 Pfizer	Chai Discovery	2026/6/4	未披露	Chai-3；生成式大分子及抗体设计；定制模型	辉瑞获得Chai AI平台许可，使用Chai-3、分子折叠及设计模型和定制软件开展治疗性生物大分子发现。
礼来 Eli Lilly	Chai Discovery / TuneLab	2026/6/18	未披露	小型蛋白设计；外部模型接入；平台生态	Chai将部分前沿AI能力接入TuneLab，供符合条件的早期生物药发现企业评估小型蛋白设计套件；这是Chai与礼来的第二项合作，也是TuneLab首次引入外部AI模型。
拜耳 Bayer	Iambic Therapeutics	2026/6/22	首付款、里程碑及销售提成均未披露具体金额	Enchant；NeuralPLexer；难成药靶点；小分子发现	拜耳使用Iambic AI平台识别新型药物切入点及差异化小分子，重点解决传统方法难以成药的靶点。
SK Biopharmaceuticals	英矽智能 Insilico Medicine	2026/6/22	总额超过25亿美元；首付款及近期里程碑最高1,800万美元；另有销售提成	Pharma.AI；神经免疫；CNS；靶点发现及生成式化学	双方针对神经炎症、神经退行性及罕见神经系统疾病开展多项目AI药物发现；SK负责后期开发和全球商业化。

数据来源：公司公告，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

MNC与科技巨头通过收并购及合作加速布局

表：全球药企与科技公司AI制药合作及并购案例（续表）

MNC	合作方	时间	合作金额	技术方向	合作内容
武田 Takeda	英矽智能 Insilico Medicine	2026/7/2	总额约6亿美元；项目启动费、近期付款及近期里程碑约6,000万美元；另有分级销售提成	Pharma.AI；生成式小分子设计；多治疗领域	英矽智能负责AI药物发现和满足预设标准的候选分子筛选，武田获得相关项目全球独家权利并负责临床验证、生产及商业化。
诺华 Novartis	Chai Discovery	2026/7/13	未披露	生成式抗体设计；分子结构及相互作用建模	诺华获得Chai AI设计模型和平台使用权，针对多个治疗靶点开展抗体发现。
argenx	Chai Discovery	2026/7/15	未披露	从头抗体设计；免疫疾病	argenx获得Chai平台的早期使用权，利用AI针对免疫疾病靶点设计新型抗体。
百时美施贵宝 BMS	NVIDIA	2026/7/20	未披露	DGX Vera Rubin；专有基础模型；BioNeMo；AI智能体	扩大双方既有合作，建设由BMS单独拥有的先进生命科学AI基础设施，支持肿瘤、血液、心血管、免疫和神经科学领域的大模型训练及药物发现工作流。
诺和诺德 Novo Nordisk	AWS	2026/8/10	未披露	智能体AI；云计算；AI联合创新中心	AWS成为诺和诺德首选云服务及战略AI合作伙伴；双方在伦敦建设AI联合创新中心，目标是缩短从药物靶点发现到首次人体试验的周期。
百时美施贵宝 BMS	Chai Discovery	2026/8/20	未披露	分子折叠；生成式抗体设计；持续学习发现系统	BMS使用Chai的分子折叠和设计模型，在多个研发项目中发现治疗性抗体候选物，并推进生成式设计进入日常研发流程。
小野制药 Ono Pharma	Aitia	2026/9/2	未披露	REFS因果AI；Gemini Digital Twin；患者多组学	Aitia构建神经疾病数字孪生患者模型，识别疾病机制、治疗靶点及生物标志物；小野拥有相关候选项目的全球独家开发和商业化选择权。
诺和诺德 Novo Nordisk	Anthropic	2026/9/16	未披露	Claude Science；科学推理；研发智能体	使用Anthropic模型和Claude Science提升生物学推理及软件工程能力，双方围绕具体药物发现难题和科研工作流共同开发解决方案。
诺和诺德 Novo Nordisk	Orbis Medicines	2026/9/17	总额最高14亿美元，包含首付款及潜在里程碑；另有分级销售提成及战略投资	生成式AI；口服大环分子；自动化合成；实验数据闭环	使用Orbis的nGen平台设计可口服大环分子，聚焦心血管代谢疾病靶点，探索以口服药物替代部分注射生物药。
艾伯维 AbbVie	Iambic Therapeutics	2026/9/21	包括首付款、成功里程碑及分级销售提成，具体金额未披露	Enchant v3；NeuralPLexer；多参数小分子优化	开展多年期小分子发现合作，覆盖免疫、神经科学和肿瘤领域，同时优化候选物的多项成药属性，推进同类首创或同类最佳项目。

数据来源：公司公告，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

AI制药形成平台订阅（SaaS）、研发服务与药物资产三类商业模式

➢ **随着AI制药由技术验证走向商业化，企业逐步形成AI研发平台订阅、AI研发服务和AI药物资产三类商业模式。**目前AI制药公司已不再完全依赖自研药物上市，AI药物研发平台订阅（SaaS）模式主要交付模型和研发工具，AI研发服务（AI CRO）模式进一步交付靶点、Hit、Lead或PCC等阶段成果，药物资产模式则持有管线权益并承担后续开发。

➢ **多数AI制药公司采用组合模式。**AI制药商业化建立在数据与知识原料、算力与数字底座、AI模型与研发系统、湿实验与数据回流，以及开发、临床与商业化等能力之上，三类商业模式并不互斥，本质上是对能力链的不同组合。随着能力链覆盖加深，投入、周期和风险相应增加，价值兑现方式由软件订阅和项目回款，逐步延伸至授权、里程碑、销售分成及产品销售。

表：AI制药公司商业模式和产品形态

商业模式	产品形态	核心护城河	现金流出现时间	典型/代表公司	当前验证程度
SaaS 软件许可或云端订阅；按席位、功能模块或使用量收费，可叠加建模与咨询服务	AI模型/平台	• 模型精度和工具链完整性； • 嵌入客户研发流程形成使用黏性； • 数据反馈和切换成本	合同签署后即可回款，收入在合同期内确认；出现最早、相对稳定	Schrödinger	已形成规模化、可续费的软件收入
AI CRO：通过AI驱动的定制化技术服务和云平台，提供高效、灵活的AI药物研发外包解决方案	AI研发服务	• 专有数据、模型和自动化实验闭环； • 候选物交付能力； • 药企合作经验和项目执行记录	签约和研究阶段开始回款；后续收入取决于项目进展，金额较大但波动明显	AbCellera Biologics、Insilico、Evotec、XtalPi	交易模式已经成立，部分项目已实现多轮里程碑；持续交付能力仍需逐项目验证
自研管线及资产授权：自主或共同开发药物；在临床前或临床阶段对外授权，也可保留权益推进上市	AI药物资产	• 药物资产及知识产权； • 候选物差异化； • 临床开发、CMC和注册能力	研发阶段持续投入；授权可以提前变现；产品销售收入最晚出现	Insilico、Generate 等	已有项目进入Ⅲ期临床，临床价值开始验证；最终商业闭环尚未完成

数据来源：中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

AI制药领域主要商业模式（1/3）- 平台及软件授权模式（SaaS）

- AI驱动的药物发现（AIDD）SaaS（软件及服务）模式是近年来兴起的一种商业模式，旨在通过提供基于云端的AI工具和平台，帮助制药公司、研究机构以及生物技术公司加速药物研发过程。SaaS平台将复杂的AI技术和数据分析能力转化为易于使用的应用程序，用户通过订阅服务的方式访问平台，获取用于药物发现的各类工具和资源。
- AIDD SaaS商业模式通过提供强大计算资源、智能化工具和便捷的云平台，极大地降低了药物研发门槛，推动了新药的发现。像Schrödinger、Insilico Medicine、Exscientia和Atomwise等公司代表了这一模式的成功应用，它们通过AI技术帮助制药公司提升研发效率，降低成本，加速药物进入市场的时间。

表：目前AIDD SaaS公司及其相关的产品

公司名称	主要产品
Schrödinger	MS Maestro、LiveDesign、Desmond、Jaguar：多种平台提供虚拟筛选、分子对接、定量构效关系（QSAR）建模等功能，帮助制药公司实现药物筛选和优化
Insilico Medicine	PandaOmics：通过AI分析基因组、蛋白质组数据，找到潜在的药物靶点 Chemistry42：使用AI生成新分子，并进行结构优化，提供药物筛选和设计服务
Exscientia	Centaur Chemist：基于人工智能的化学分子设计平台，能够根据给定的药物靶点快速设计并优化小分子
Atomwise	AtomNet：使用卷积神经网络（CNN）对分子进行预测，帮助科研人员发现潜在的药物候选分子
华为	盘古辅助药物设计平台：提供靶点发现，苗头化合物发现，先导化合物优化全流程药研所需功能。基于云原生的软硬件一体化加速，大大提升虚拟筛选和分子动力学模拟计算效率

数据来源：Schrödinger、Insilico Medicine、Atomwise、华为云官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

AI制药领域主要商业模式（2/3）- AI CRO模式

- CRO商业模式是另一种重要的发展路径，主要集中于为制药公司、学术机构以及生物技术公司提供外包的研发服务。AIDD CRO利用AI技术进行药物研发的外包服务，涵盖从药物筛选、靶点识别到临床前研究和试验设计等各个环节。
- AIDD CRO通过AI驱动的定制化技术服务和云平台，提供高效、灵活的药物研发外包解决方案，帮助客户加速研发进程并降低成本。AbCellera、Insilico Medicine、Evotec和Labcorp等企业是CRO模式的代表，利用AI技术加速药物研发，并与全球制药公司展开广泛合作。

表：目前AIDD CRO公司及其相关的产品

公司名称	服务
AbCellera Biologics	AI平台：结合了单细胞分析技术和大数据分析，能够从免疫反应中快速筛选出最佳抗体 商业模式：与制药公司签署合作协议，提供定制化的抗体发现服务。这些合作通常基于里程碑付款和基于成果的费用结构
Insilico Medicine 英矽智能	AI平台：使用深度学习和生成对抗网络（GAN）进行药物分子生成和优化 商业模式：与制药公司和生物技术公司签署合同，提供AI驱动的药物研发外包服务。合作方式包括按项目收费，或基于共同开发的成果进行分成
Evotec	利用AI和机器学习技术对药物发现过程进行自动化，涵盖靶点验证、药物筛选、分子优化等环节。该公司还建立了一个开放式的生物技术平台，结合AI技术帮助客户寻找新的药物靶点 商业模式：基于外包合作，包括按里程碑付款和基于成果的付款方式。公司还通过股权投资等方式与制药公司共享研发成果
XtalPi 晶泰科技	AI平台：小分子药物发现平台ID4Inno，包括AI模型ID4Idea和物理模型ID4Gibbs；大分子药物发现端以XupremAb抗体发现平台为核心，相关技术平台包括Xtra-Doma杂交瘤平台、XpeedPlay噬菌体展示平台、XploreSeq NGS抗体发现平台和XuperNovo从头设计平台

数据来源：AbCellera、Insilico Medicine、Evotec、Labcorp公司公告，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

AI制药领域主要商业模式（3/3）- 自研管线及资产授权模式

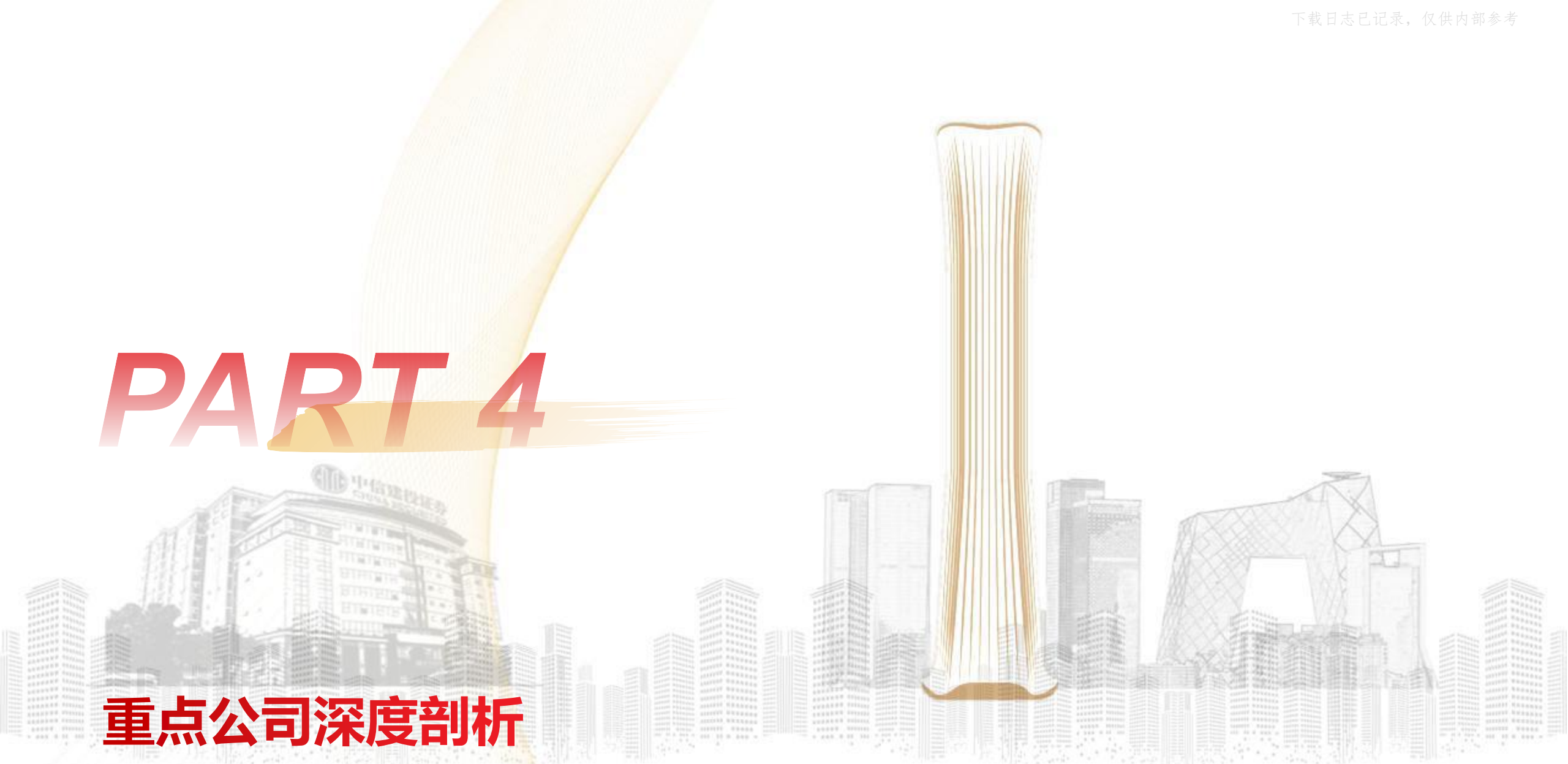
➢ AI biotech类企业通过AI平台驱动进行药物发现并积极推动管线进程，代表性企业国内如英矽智能、剂泰医药等。海外代表性企业包括Recursion、Isomorphic Labs等。

图：目前自研管线及资产授权模式公司及其相关的产品

公司	主营业务	代表平台/管线
Isomorphic Labs	平台+自研/合作管线	IsoDDE；与礼来、诺华推进多靶点管线
Anew Labs / 新生实验室	平台+自研管线	AnewDDE；内部管线具体资产尚未披露
Chai Discovery	模型为主+合作项目	Chai-1/2/3；完成从头抗体实验验证
Recursion	平台+自研/合作管线	Recursion OS；REC-4881等进入临床
Schrödinger	平台+合作研发+早期资产授权	FEP+/LiveDesign；SGR-1505、SGR-2921、SGR-3515等自研项目，也与药企开展合作研发
Generate:Biomedicines	平台+自研/合作管线	Generate平台；GB-0895进入全球Ⅲ期
Absci	平台+自研/合作管线	生成式AI抗体平台；ABS-201处于Ⅰ期
英矽智能	平台+自研/合作管线	Pharma.AI；Rentosertib进入Ⅲ期
剂泰科技 METiS	递送模型平台+自研/合作管线	AiTEM/AiLNP/AiRNA，分别聚焦制剂/递送优化、LNP设计和RNA序列优化；已有临床项目
晶泰科技 XtalPi	平台服务+自研/合作管线	ID4Inno；多条自研及合作管线进入临床
分子之心 MoleculeMind	平台+联合研发+早期自研管线	MoleculeOS/NewOrigin；布局早期自研资产
华深智药	平台+自研/合作管线	AI抗体设计平台；与赛诺菲开展管线合作

数据来源：Generate Biomedicines、Absci、Insilico Medicine、Isomorphic Labs公司公告，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考



PART 4

重点公司深度剖析

下载日志已记录，仅供内部参考

AI制药参与者持续扩容

➢ AI制药的参与玩家正由传统药企和Biotech，扩展至通用大模型公司、生命科学垂直模型企业、跨国药企内部平台及实验服务商。不同类型企业从各自优势环节切入：通用大模型公司提供模型、算力和科研智能体；垂直模型公司与AI Biotech聚焦结构预测、分子设计及管线开发；跨国药企依托内部数据建设AI研发平台；供应链企业则承接基因合成、蛋白表达、筛选检测及非临床评价。产业分工由单点工具和服务供给，逐步转向“模型-设计-实验-管线”的协同闭环。

表：AI制药相关公司分类

参与者类型	代表公司	主要布局方式
1）海外头部通用大模型公司建立的前沿生命科学实验室或者孵化的公司	• Anthropic（AI4S、Claude for Life Sciences） • Isomorphic Labs（Alphabet）	将通用大模型、算力和基础研究能力向生命科学延伸，开发科研智能体、科学基础模型及药物设计引擎；通过内部实验室、独立孵化公司和大型药企合作推动成果转化
2）中国头部通用大模型公司建立的前沿生命科学实验室或孵化的公司	• Anew Labs（字节跳动）	依托母公司的大模型、算法、算力和工程化能力，组建AI与药物研发交叉团队；围绕结构预测、分子生成和科学推理构建模型，并结合实验平台及自研管线验证能力
3）海外垂直类模型公司	• Chai Discovery • Latent Labs	聚焦生物分子结构预测、蛋白质及抗体设计等专业场景，训练生命科学垂直基础模型；主要通过模型平台、软件工具、技术授权及与药企联合研发实现商业化
4）MNC建立的AI平台	• 礼来（Lilly TuneLab）	依托长期积累的研发数据训练内部模型，并通过平台开放、联合研发和外部合作扩大模型应用；最终服务于提升内部研发效率和药物管线产出能力
5）中国AI CXO/biotech	• 英矽智能 晶泰科技 剂泰科技 • 华深智药	围绕特定药物类型或研发环节建设AI平台，通过对外合作、自研管线或研发服务实现商业化部分公司进一步结合物理计算、自动化实验和干湿闭环
6）AI制药供应链	• 金斯瑞 • Twist Bioscience	承接AI设计后的实验验证和研发交付，覆盖基因与DNA合成、蛋白及抗体表达、筛选检测、药物发现、非临床评价和毒理等环节

数据来源：中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

Anthropic AI for Science：Claude从科研助手向科学研发操作层延伸

➢ Anthropic成立于2021年，总部位于美国旧金山，是一家以AI安全研究和基础模型开发为核心的公司，其主要产品为Claude系列大模型。Anthropic于2025年5月正式推出 AI for Science项目，最初通过支持高影响力科研项目，重点聚焦生物学与生命科学。目前Anthropic正沿“模型能力-工具连接-科学工作台-自主智能体”路线推进AI for Science。Claude已由早期的文献、代码和数据分析助手，逐步扩展至蛋白设计、科学假设生成、临床方案及监管文件处理。该项目的核心定位并非自建药物管线，而是成为连接科研数据、专业模型、算力及企业知识的智能操作层；目前在流程提效和早期科学发现中应用效果较为突出。

表：Anthropic AI for Science推进节点

时间	里程碑	主要布局与进展
2025年5月	推出 AI for Science Program	向高影响力科研项目提供免费Claude API额度，初期重点支持生物学和生命科学研究。
2025年10月	发布 Claude for Life Sciences	将Claude从文献总结、统计代码等单点工具，拓展至研究假设、实验方案、生信分析及监管文件；接入Benchling、PubMed、10x Genomics、BioRender等平台，并推出生命科学Agent Skills。
2026年1月	向临床开发和监管环节延伸	新增Medidata、ClinicalTrials.gov、Open Targets、ChEMBL、Owkin及ToolUniverse等连接器；ToolUniverse包含600余项科研工具，并增加临床试验方案起草、试验运营和监管申报Skills。
2026年1月	披露首批科研应用案例	Stanford的Biomni利用Claude编排数百项工具和数据库，可进行假设生成、实验方案设计和跨25个以上生物学领域的数据分析；Anthropic同时披露Claude在基因分析等科研任务中的应用。
2026年5月	与盖茨基金会建立 2亿美元合作	未来四年提供资金、Claude额度和技术支持，重点覆盖全球健康、生命科学等领域；计划用于疫苗与药物候选筛选、疾病传播模型以及脊灰、HPV、先兆子痫等疾病研究。
2026年6月9日	Fable 5 / Mythos 5展示更强科研自主性	Anthropic称Mythos 5使部分内部蛋白设计流程提速约10倍；14个蛋白靶点中9个得到正在进一步研究的候选设计。盲法比较中，研究人员约80%的情况下更偏好Mythos提出的分子生物学假设；模型还完成了持续一周以上的自主基因组学研究。
2026年6月	推出 Claude Science 科学工作台	将文献、代码、数据库、专业模型和算力整合至统一研究环境；预装60余项科学Skills和连接器，覆盖基因组学、单细胞、蛋白质组、结构生物学和化学信息学；支持HPC、SSH和按需GPU，并由Reviewer Agent检查引用、计算及图表。
2026年7月	推出罕见病专项科研计划	面向基础科研机构和早期Biotech设置两个通道，每个入选项目最多获得5万美元Claude额度，用于罕见遗传病机制研究及临床开发提速。

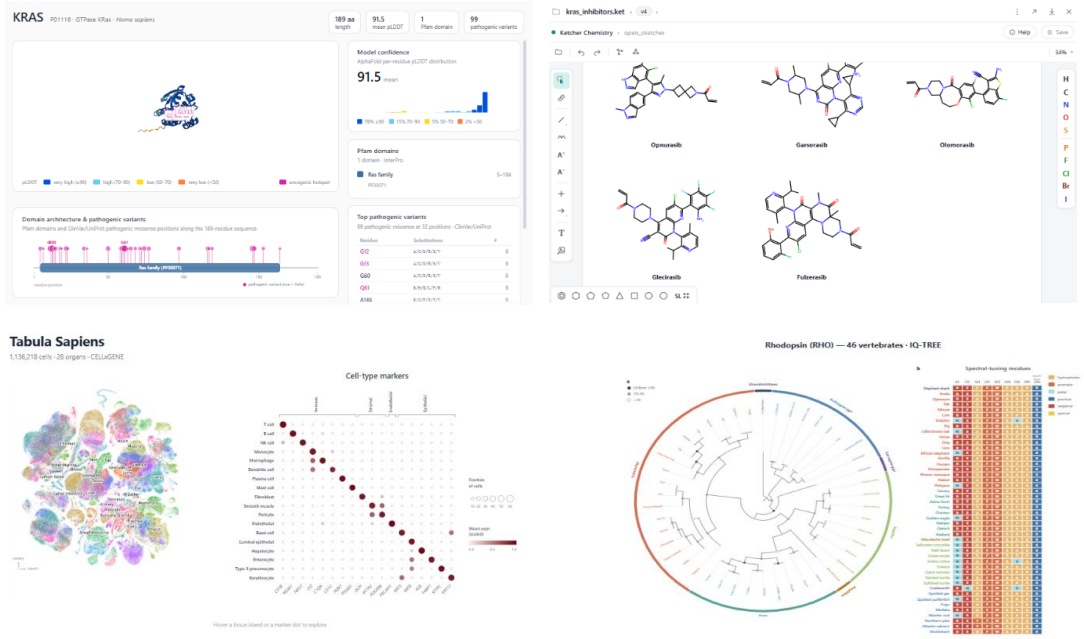
数据来源：Anthropic官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

Anthropic AI for Science：Claude Science连接数据库与专业模型

- **Claude Science（beta）于2026年6月发布，为Anthropic研发的面向科学家的AI工作台。**该工作台配置了基因组学、单细胞生物学、蛋白质组学、结构生物学和化学信息学等生命科学主要领域的分析能力，可查询超过60个科学数据库，所有分析流程均可保存为可复用的Skill。目前，平台已支持单细胞RNA测序分析、系统发育与进化分析、蛋白质结构与语言模型工作、化学信息学与分子设计等典型场景。此外，平台已与NVIDIA BioNeMo Agent Toolkit集成，可调用Evo 2、Boltz-2、OpenFold3等专业模型。Anthropic同步启动了内部药物发现项目，重点聚焦罕见病和被忽视疾病，并于2026年9月在旧金山湾区建立湿实验室，标志着其生物学研究从计算模拟进入物理实验阶段。

图：Claude Science覆盖的四个生命科学核心场景



Claude Science预配置了生命科学主要领域的分析能力，图中四个方向分别为：

- **单细胞RNA测序**用于解析细胞异质性与转录组状态，平台可完成数据质控、聚类、注释及可视化；
- **进化分析**用于比较基因组、构建系统发育树和推断选择压力，平台可调用相关数据库与工具链；
- **蛋白质结构**用于预测、比对和可视化蛋白质三维结构，平台集成结构渲染器与专业模型；
- **化学信息学**用于小分子属性预测、分子设计和化学结构处理，支持在实时2D草图中编辑分子。

当研究项目跨越多个学科时，Claude Science能够在单一工作台内串联多领域能力，帮助研究者解决复杂问题。

数据来源：公司公告，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

Anthropic AI for Science：药企合作加速生命科学落地

- **Anthropic在AI for Science领域的商业拓展速度较快，已与多家全球顶级药企建立合作。**2026年5月，百时美施贵宝（BMS）与Anthropic达成战略协议，将Claude Enterprise部署至其全球超过30,000名员工。2026年9月16日，诺和诺德（Novo Nordisk）宣布与Anthropic合作，将Claude Science引入其新药发现与开发流程，重点解决生物学机制中最具挑战性的科学痛点。诺和诺德CEO Mike Doustdar表示，合作旨在“压缩从研究到产品的路径”。
- 此外，Anthropic于2026年以约4亿美元股票收购了Coefficient Labs，并任命诺华CEO Vas Narasimhan加入董事会，进一步强化其在生命科学领域的战略布局。前DeepMind AlphaFold核心研究员John Jumper（2024年诺贝尔化学奖共同得主）于2026年6月宣布离开DeepMind加入Anthropic，这一人才流动被业界视为Anthropic在AI4S领域挑战DeepMind/Isomorphic Labs的标志性事件。
- 在安全与合规方面，Anthropic于2026年9月推出生命科学验证计划（LSVP），为通过验证的生命科学团队提供更宽松的生物学保障措施，允许其使用Mythos、Opus和Sonnet模型进行药物发现、研究生物学、临床开发等任务。计划分为“标准使用”和“高风险使用”两类授权，前者覆盖大多数生命科学研究工作流，后者针对可能被滥用的特定项目，需每六个月重新审核。Anthropic同时表示，正在与美国政府合作制定访问计划，以扩大Mythos级模型在生命科学领域的可用范围。

表：Anthropic AI for Science商业合作与生态版图

合作伙伴	时间	合作内容
百时美施贵宝（BMS）	2026.05	Claude Enterprise部署至全球30,000+员工
盖茨基金会	2026.05	2亿美元合作，覆盖全球健康、生命科学、教育等领域
Coefficient Labs	2026	以约4亿美元股票收购，强化生命科学能力
诺华CEO Vas Narasimhan	2026	加入Anthropic董事会
诺和诺德（Novo Nordisk）	2026.09	引入Claude Science赋能新药发现与开发流程

数据来源：公司公告，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

Isomorphic Labs：承接AlphaFold技术积累，向药物设计平台延伸

- **Isomorphic Labs背靠Alphabet与Google DeepMind，致力于以AI重构药物发现全流程。**公司成立于2021年，由Google DeepMind CEO Demis Hassabis兼任CEO，旨在构建覆盖靶点理解、结构预测、分子设计及候选药物优化的端到端平台。由于AlphaFold、Google DeepMind 和 Alphabet 生态高度绑定，Isomorphic Labs被视为全球技术积累最深厚的AI制药公司之一。
- **Isomorphic Labs的核心优势来自DeepMind在蛋白结构预测、多模态建模和基础模型方面的积累。**公司将AlphaFold相关能力扩展到更复杂的药物发现场景，包括蛋白-配体、蛋白-核酸、蛋白-蛋白相互作用等分子体系建模，并结合生成式模型、物理约束计算和实验反馈来提升分子设计效率。2026年2月发布IsoDDE (Drug Design Engine) 平台，在蛋白质-配体结构预测的泛化基准测试中，准确率比 AlphaFold 3 提高了一倍以上，预测小分子结合亲和力的准确率超过了基于物理的黄金标准方法，且耗时和成本仅为后者的一小部分。
- **连续获得大型药企合作验证，Isomorphic Labs的平台应用已由小分子发现向跨模态药物研发拓展。**目前，Isomorphic Labs 已与多家跨国药企达成大额合作，包括礼来、诺华以及强生等。早期与礼来和诺华的合作总潜在金额接近 30 亿美元，主要围绕小分子药物发现；随后公司又与诺华扩展合作，并与强生达成跨模态药物发现合作。

Isomorphic Labs

数据来源：公司公告，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

Isomorphic Labs：IsoDDE能力延伸至结合构象和亲和力预测

➢ **IsoDDE由结构预测延伸至口袋识别、结合构象和亲和力预测。**IsoDDE由Isomorphic团队开发，是一个全新的、专为药物设计而生的统一计算系统。AlphaFold 3主要解决了预测蛋白质静态结构的问题，同时具备初步的蛋白-配体以及抗原-抗体相互作用的预测能力。而IsoDDE不仅能够预测高精度蛋白结构，还因在蛋白-配体以及抗原-抗体方面的预测能力大幅提升而有望广泛用于药物设计。

图：IsoDDE平台与Alphafold3对比

对比维度	IsoDDE (Isomorphic Labs)	AlphaFold 3 (Google DeepMind)
核心定位	专用药物设计引擎（Drug Design Engine）	通用生物分子结构预测工具
发布时间	2026年2月发布技术报告，未公开代码/模型	2024年5月发布，2024年11月开源 (v3.0.3起采用Apache 2.0许可证)
核心任务	药物-靶点结合预测、隐藏口袋发现、亲和力排序	蛋白质、核酸、小分子、离子及复合物的结构预测
数据策略	公共数据 + 合成数据 + 制药合作专有数据	主要基于公共数据集（PDB、UniProt等）
对全新分子的泛化能力	显著优于AF3，对训练集外（OOD）的蛋白-配体结构预测准确率达AF3的2倍以上	对新颖结构泛化能力较弱
抗体-抗原预测准确率 (FoldBench)	约 76%	约 48%
隐藏结合口袋发现	支持，仅凭序列即可在数秒内发现“隐秘口袋”	不支持
计算效率	可在数秒内发现隐藏口袋，亲和力预测超越FEP但计算成本远低于FEP	单次预测需要数分钟至数十分钟（视分子大小而定）
商业化模式	通过与强生、礼来、诺华等药企合作 + 自研管线实现商业化	非商业用途免费，商业用途受限（但v3.0.3起Apache 2.0许可证允许商业使用）
主要用户	Isomorphic Labs内部团队及合作伙伴药企	全球学术界、生物医药研究人员

数据来源：Isomorphic Labs官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

Isomorphic Labs：融资与药企合作验证平台稀缺性

- **Isomorphic Labs在AI制药领域展现出较强的融资能力。**2025年4月完成首轮外部融资6亿美元，由Thrive Capital领投，GV与Alphabet参与，估值19.5亿美元。2026年5月12日完成21亿美元B轮融资，由Thrive Capital再次领投，Alphabet、GV等现有投资者继续参与，新增MGX（阿布扎比主权基金）、淡马锡、CapitalG和英国主权AI基金。两轮累计外部融资约27亿美元，B轮创下全球AI制药领域单轮融资纪录。
- **Isomorphic Labs已与礼来、诺华和强生等跨国药企建立合作，其AI药物设计平台正由技术验证走向多模态、规模化的产业合作。**合作范围由小分子药物发现逐步拓展至生物制剂、肽类和分子胶等多种药物模态，其中，与礼来、诺华合作的潜在交易金额分别高达17亿美元和12亿美元。

表：Isomorphic Labs融资历程

轮次	时间	金额	投后估值	领投方	参与方
首轮外部融资	2025.04	6亿美元	19.5亿美元	Thrive Capital	GV、Alphabet
B轮	2026.05	21亿美元	未披露	Thrive Capital	Alphabet、GV、MGX、淡马锡、CapitalG、英国主权AI基金

表：Isomorphic Labs商业合作版图

合作伙伴	合作启动时间	覆盖模态	预付款	里程碑潜力
礼来（Eli Lilly）	2024年初	小分子	4500万美元	高达17亿美元
诺华（Novartis）	2024年1月	小分子（3个未公开靶点）	3750万美元	高达12亿美元
强生（J&J/Janssen）	2026年1月	小分子、生物制剂、肽、分子胶	未披露	未披露

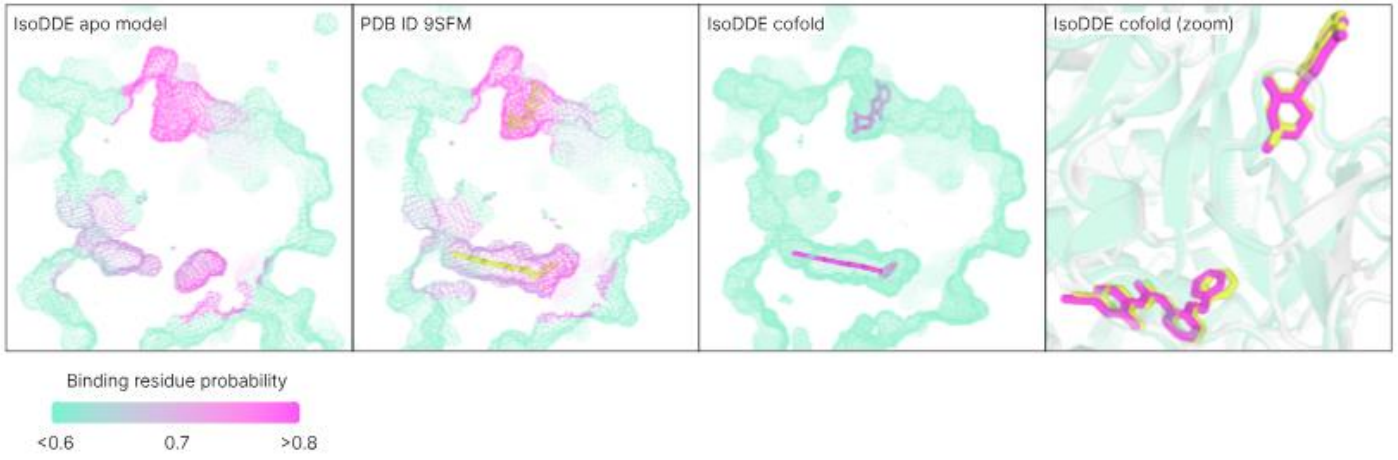
数据来源：Lilly TuneLab，公司官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

Isomorphic Labs：对外合作与自研管线双轨推进

- **Isomorphic Labs采取药企合作与内部管线并行推进的模式。**内部管线聚焦肿瘤学和免疫介导疾病，多个项目已进入IND-enabling阶段，公司CEO于2026年1月表示预计在2026年底前启动首项临床试验。
- **从结构预测至药物设计、目标分子产出的路径拓展。**从技术路径看，Isomorphic Labs依托AlphaFold积累的结构生物学能力，将研发重点由结构预测进一步拓展至药物设计，目标直接产出药物候选分子。公司尝试**以统一模型**覆盖小分子、抗体、肽和分子胶等多种药物形式，增强模型对新靶点及新化学空间的适用性，同时结合AI模型与物理计算，提高结合构象和亲和力预测的效率。
- **目前，公司平台仍处于由技术验证向药物研发验证过渡的阶段。**AlphaFold 3发布以来，多个研究团队发现模型性能随口袋新颖性增加而下滑，IsoDDE 披露的性能提升仍需更多独立研究和真实项目验证。

表：IsoDDE蛋白-配体复合物结构预测结果



数据来源：公司官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

Anew Labs：全链路自研型AI制药公司

- **Anew Labs源自字节跳动内部的AI for Science药物发现团队。**起始团队于2021年在字节内部组建，约50人，成员兼具AI算法与药物研发背景，覆盖基础模型研究、药物发现平台开发及产业化落地。2026年6月，该业务从字节跳动分拆独立，字节跳动持股56%，继续保持控股地位。公司总部位于上海，并在旧金山和新加坡设有办公室。

- **公司定位为全链路自研型AI制药企业，业务覆盖底层模型、药物研发平台、湿实验闭环及自研管线。**与单纯输出软件或技术平台的企业相比，Anew Labs进一步向药物资产开发延伸，潜在价值空间更大，但资金投入、临床开发风险及价值兑现周期也相应增加。目前，公司管线整体仍处于临床前阶段，管线推进持续进行。

- **2026年9月，Anew Labs完成2.9亿美元天使轮融资，投后估值约15亿美元。**投资方包括HSG、IDG资本、高瓴投资、五源资本等，并引入中国生物制药和上海未来产业基金等战略投资者。中国生物制药有望为公司提供临床开发及商业化资源，上海未来产业基金则有助于加强产业资源协同。本轮资金将主要用于扩充计算基础设施与研发团队，并加快自动化湿实验平台建设，推动计算设计与实验验证形成闭环。

Anew Labs

数据来源：Anew Labs官网，中信建投证券

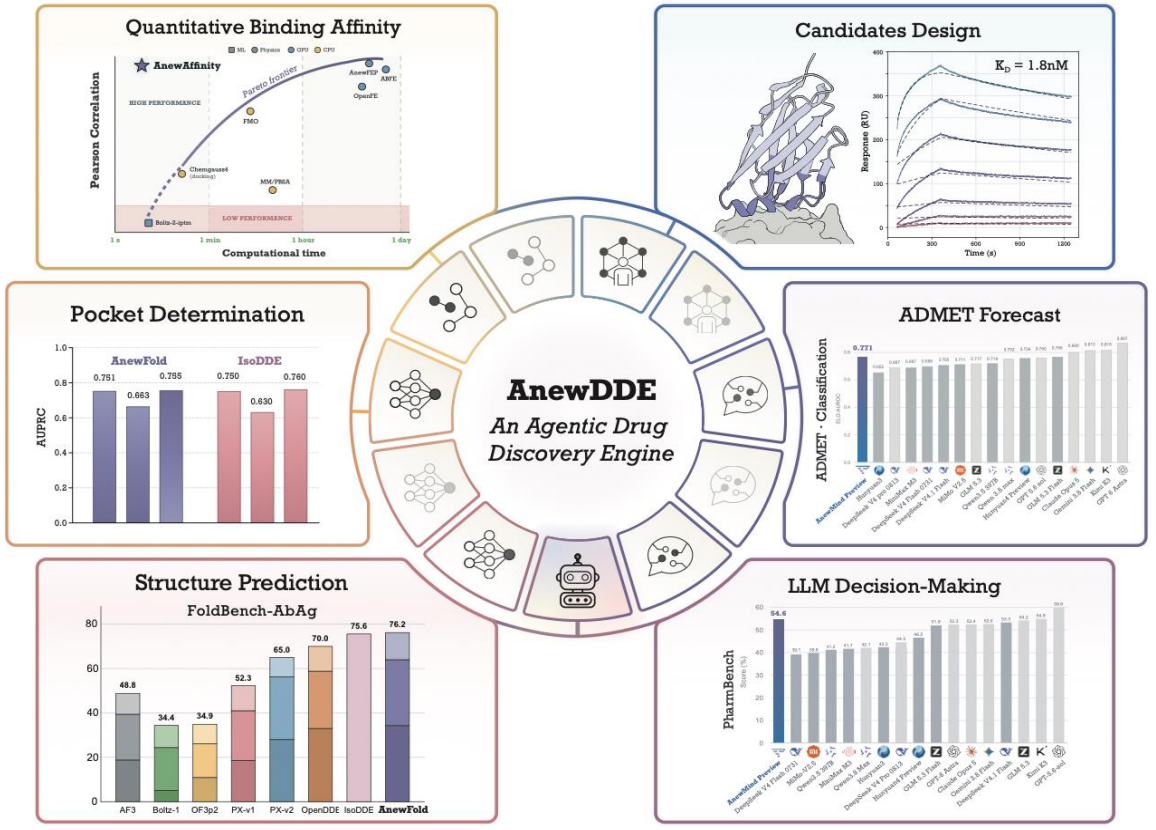
下载日志已记录，仅供内部参考

Anew Labs：AnewDDE以智能体串联计算设计与湿实验反馈

AnewDDE是Anew Labs于2026年9月发布的智能体药物发现引擎，平台整合AnewFold、AnewAffinity、AnewDesign和AnewMind四大模块，核心价值在于打通药物发现不同环节中分散的计算工具与实验决策，提升早期药物发现效率。具体包括：

- **1）AnewFold（**生物分子结构预测）：是通用型生物分子结构预测模型，覆盖抗体-抗原复合物、蛋白-配体相互作用、盲口袋识别以及分子胶三元复合物。
- **2）AnewAffinity（**结合亲和力预测）：将自由能微扰（FEP）的物理严谨性与分布预测 AI 框架结合，在单 GPU 上约 1.5 秒/配体对完成预测，同时提供每个预测的可靠性估计。
- **3）AnewDesign（**生物药设计）：智能体驱动的 lab-in-the-loop 工作流，整合生成式 AI 与湿实验反馈。
- **4）AnewMind（**科学推理大语言模型）：千亿参数级科学推理 LLM，经全参数后训练增强制药知识。

图：AnewDDE架构



数据来源：Anew Labs 官网，中信建投证券

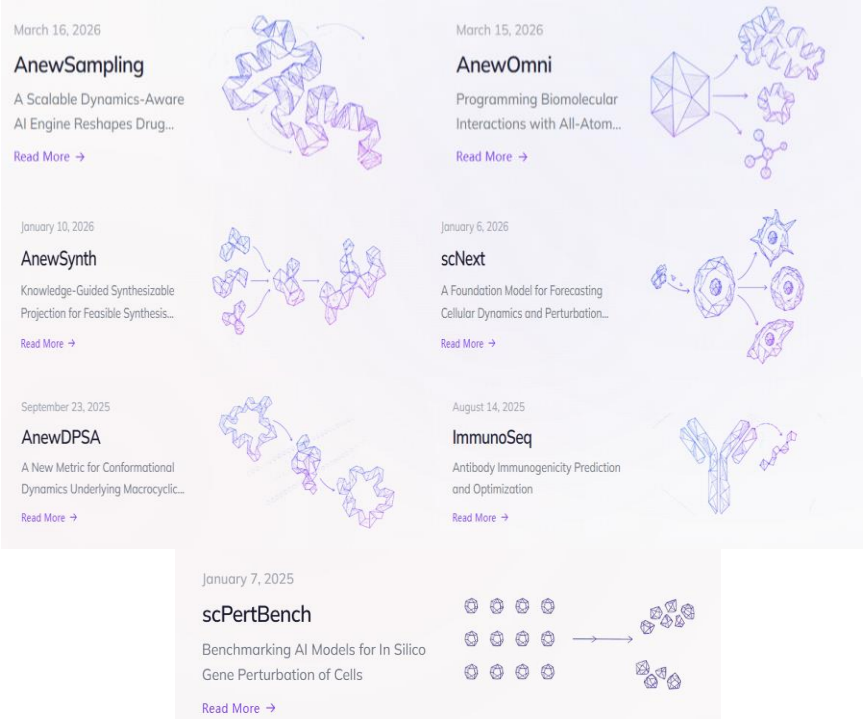
下载日志已记录，仅供内部参考

Anew Labs：多模态模型覆盖分子动态、生成设计与可合成性评估

Anew Labs围绕分子动态模拟、跨模态分子生成、可合成性评估、细胞扰动预测及生物大分子成药性评价为AnewDDE建立多层次技术储备，AnewDDE的底层能力可以概括为：

- **AnewSampling（2026年3月16日）**：可扩展的动力学感知AI引擎，用于全原子分子动态构象采样，可用于捕捉蛋白动态变化和水化状态，而非仅计算静态晶体结构。
- **AnewOmni（2026年3月15日）**：基于全原子生成模型设计生物分子相互作用，通过全原子架构编程生物分子相互作用，基于超过500万个生物分子复合物训练，是全球首个在同一框架内实现小分子、多肽和抗体统一设计的生成模型。
- **AnewSynth（2026年1月10日）**：知识引导的可合成性预测，针对AI生成分子“能设计但难合成”的痛点，将合成可行性纳入生成过程，确保设计分子具备可实际合成的化学路径。
- **scNext（2026年1月6日）**：预测细胞动力学和扰动响应的基础模型，用于预测细胞状态变化和基因扰动响应，属于单细胞组学层面的底层能力。
- **AnewDPSA（2025年9月23日）**：评估大环肽渗透性构象动力学的新指标，用于评估大环肽和环肽的构象动态特征，支撑大环类药物设计的物理合理性判断。
- **ImmunoSeq（2025年8月14日）**：抗体免疫原性优化工具，用于评估AI设计抗体的免疫原性风险，支撑临床前开发阶段的候选分子筛选。
- **scPertBench（2025年1月7日）**：细胞基因扰动AI模型基准测试，用于评估AI模型在基因扰动预测任务上的表现，为行业提供标准化评测框架。

图：Anew Labs支撑药物发现的底层技术能力



数据来源：Anew Labs官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

Anew Labs：管线仍处临床前阶段

➢ **Anew Labs目前拥有四条临床前管线，覆盖小分子、抗体和环肽。**核心管线为全球首个可同时抑制IL-17家族全部三种二聚体类型（AA/AF/FF）的口服小分子泛IL-17抑制剂，该管线于2026年4月在美国免疫学家协会（AAI）年会上首次公开披露，目前处于先导化合物优化阶段。AAI会议摘要显示，候选分子对IL-17A的细胞功能Ki低于0.1 nM、对IL-17F的Ki低于10 nM，对IL-17A的活性较领先的IL-17A特异性小分子高10倍以上；在IL-17F驱动的体内药效学模型中，其最大抑制幅度与比美吉珠单抗相近。此外，公司另一靶向IL-4受体的管线目前处于Hit to Lead阶段，剩余两个处于Hit发现阶段的项目暂未披露靶点。

图：Anew Labs自研管线布局及研发进度



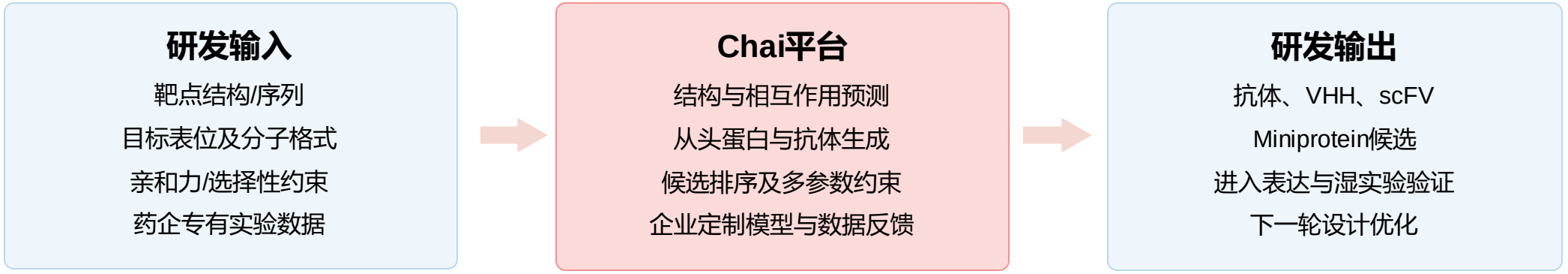
数据来源：Anew Labs官网，AAI，FOCIS 2026，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

Chai Discovery：以基础模型连接结构预测与分子设计

- **Chai Discovery是一家成立于2024年的AI驱动药物发现公司，总部位于美国旧金山，创始团队背景来自OpenAI、Meta FAIR、Stripe等科技公司，并具有计算生物学等背景，主要聚焦于开发面向药企的分子计算设计平台。**平台以生物分子结构和相互作用为基础，输入靶点结构、序列、目标表位及亲和力、选择性等设计要求后，即可输出抗体、VHH、scFv和Miniprotein等候选分子，并通过湿实验结果继续反馈优化。公司目标为将依赖大规模筛选的分子发现流程转变为“明确设计约束、生成少量候选、直接开展实验验证”的计算优先模式。
- **自2024年3月成立以来，Chai在约两年时间内完成四轮融资，累计融资额达6.3亿美元，估值从种子轮的1.5亿美元跃升至C轮的38亿美元，18个月内增长约25倍。**种子轮（2024年9月）融资3000万美元，由Thrive Capital、OpenAI等参与；A轮（2025年8月）融资7000万美元；B轮（2025年12月）融资1.3亿美元，估值13亿美元；C轮（2026年7月）融资4亿美元，核心驱动力为Chai-3的技术突破及其带来的商业进展，由现有投资者Thrive Capital、OpenAI等持续追加，以及Index Ventures、Kleiner Perkins、Sequoia Capital、Dimension领投，贝恩资本、Baillie Gifford等新投资者参与。

图：Chai在研发流程中的位置



数据来源：Chai官网及公告，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

Chai Discovery：企业授权与定制模型推动商业化

- **Chai的产品化路径由浅入深。**Chai-1通过免费Web端和开放模型扩大用户基础；随后以Chai-2、Chai-3的企业许可进入药企研发流程，满足数据隐私、合规及工作流接入需求；更深层次则是利用药企专有数据训练定制模型。
- **2026年以来，公司先后与礼来、辉瑞、诺华、BMS、GSK开展合作。**目前，礼来已签署第二项合作，公司将加入礼来TuneLab，基于礼来专有数据开发专属模型；诺华的合作建立在约一年的技术接触基础上，商业化已由模型试用逐步走向企业部署；GSK同样在前期技术评估基础上扩大合作，后续将获得Chai平台及蛋白折叠、分子设计模型的使用权限，用于支持其管线中的药物发现。

表：Chai Discovery 三层商业逻辑

层级	模式	核心功能	目标
第一层	Web平台免费使用	开放云端入口，降低使用门槛	积累用户与数据，构建生态基础
第二层	企业授权部署	私有化或专属云部署，保障数据隐私与合规	适配企业级定制化研发流程
第三层	定制模型训练	基于药企专有数据微调，打造专属AI引擎	深度嵌入客户研发，实现效能提升

表：Chai合作MNC及推进节点

合作伙伴	合作内容	时间
礼来（Eli Lilly）	采用 Chai 平台，多靶点生物药设计；加入礼来TuneLab，基于礼来专有数据开发专属模型	2026年1月/2026年6月
辉瑞（Pfizer）	许可协议，获得 Chai-3 早期访问权及定制模型训练	2026年6月
诺华（Novartis）	针对多个治疗靶点，使用Chai-3开展抗体发现	2026年7月
百时美施贵宝（BMS）	利用 Chai 的 AI 模型加速治疗性抗体发现	2026年8月
GSK	支持GSK管线的药物发现	2026年10月

数据来源：Chai官网及公告，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

Chai Discovery：Chai-1至Chai-3，模型迭代至候选分子生成

- **Chai平台主要聚焦于AI驱动的生物分子结构预测与从头蛋白、抗体设计。**经过三代模型迭代，其模型能力已由“预测分子结构及相互作用”逐步扩展至“按照靶点和表位要求生成候选分子”。Chai-1建立了蛋白质、配体、DNA和RNA等生物分子的统一结构预测能力；Chai-2在此基础上引入全原子生成模型，能够从指定靶点和表位出发，设计抗体、VHH、scFv及Miniprotein等新型结合物；Chai-3进一步提升抗体设计成功率，并增强复杂靶点、多特异性分子、治疗性亲和力及跨任务泛化能力。随着模型升级，Chai也由公开结构预测工具逐步转向可在药企内部部署、接入专有数据并适配研发流程的企业级分子设计平台。

表：Chai三代模型性能对比

对比维度	Chai-1	Chai-2	Chai-3
发布时间	2024年9月	2025年6月	2026年（C轮融资前后）
核心能力	生物分子结构预测	零样本（Zero-Shot）从头抗体设计	预测并重编程分子间相互作用
主要性能	1. 性能与AlphaFold 3相当：PoseBusters成功率77%（vs AF3的76%） 2. 多聚体预测准确率69.8%（超越AF-Multimer的67.7%） 3. 无需多序列比对（MSA）即可完成任务	1. 首个达两位数实验成功率的零样本抗体设计平台 2. 对52个靶点，50%找到至少一个成功结合物，结合率16% 3. 相较传统方法，命中率提升约100倍（从0.1%提升至16%） 4. 可将发现周期从数月/年压缩至两周	1. 成功率约为Chai-2的两倍，命中率约35%-40% 2. 抗体结合亲和力提升100倍 3. 约50%的案例能产生具有治疗级亲和力的抗体 4. 能攻克传统方法无法处理的"不可成药"靶点
可用性	完全开源（Apache 2.0许可证），免费用于商业和学术	早期访问，仅限合作方	企业许可，仅限大型药企合作方
目标用户	全球科研与药物发现社区	学术与产业合作伙伴	制药巨头（如礼来、辉瑞、诺华、BMS）

数据来源：Chai官网及公告，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

Latent Labs：AlphaFold 核心成员打造的AI 蛋白质设计平台提供商

- **Latent Labs成立于2023年，由前DeepMind科学家Simon Kohl博士创立并担任CEO，核心定位为“AI 蛋白质设计平台提供商”。**Simon Kohl曾参与AlphaFold2核心算法的开发，并参与提出pLDDT置信度指标，此后，Kohl发起并共同领导DeepMind的蛋白质设计团队在伦敦Francis Crick研究所参与建设湿实验能力。
- **Latent Labs主要提供生命科学领域的AI软件与模型基础设施，核心产品为“Latent-X”系列生成式 AI 模型与“Latent-Y”智能体。**公司主要提供AI软件与模型，采取按量付费＋企业授权/API/私有化部署的商业模式。技术平台的覆盖模态包含抗体、大环肽和微型蛋白等多种分子形式，其中，Latent-X1/X2属于底层蛋白生成模型，负责生成抗体、纳米抗体、环肽及其他蛋白结合分子；Latent-Y则是建立在模型之上的科学智能体，可完成文献检索、靶点与表位选择、分子生成、计算验证等功能。

表：Latent Labs 三代产品核心对比

维度	Latent-X（2025.07）	Latent-X2（2025.12）	Latent-Y（2026.03）
定位	全原子蛋白结合物生成模型	零样本抗体设计模型	自主抗体设计 Agent
覆盖模态	大环肽、微型结合蛋白	抗体、纳米抗体、抗体片段、环肽	基于 Latent-X2 的完整设计流程
核心突破	全原子共生成、91–100% 大环肽命中率	零样本成药性、低免疫原性	从自然语言到可送实验候选的全自主执行
湿实验验证	7 个靶点，30–100 设计/靶点	18 个靶点，4–24 设计/靶点	6 个靶点，67% 成功率
交付方式	无代码平台	平台＋GenScript 湿实验合作	平台全球开放，每日免费额度

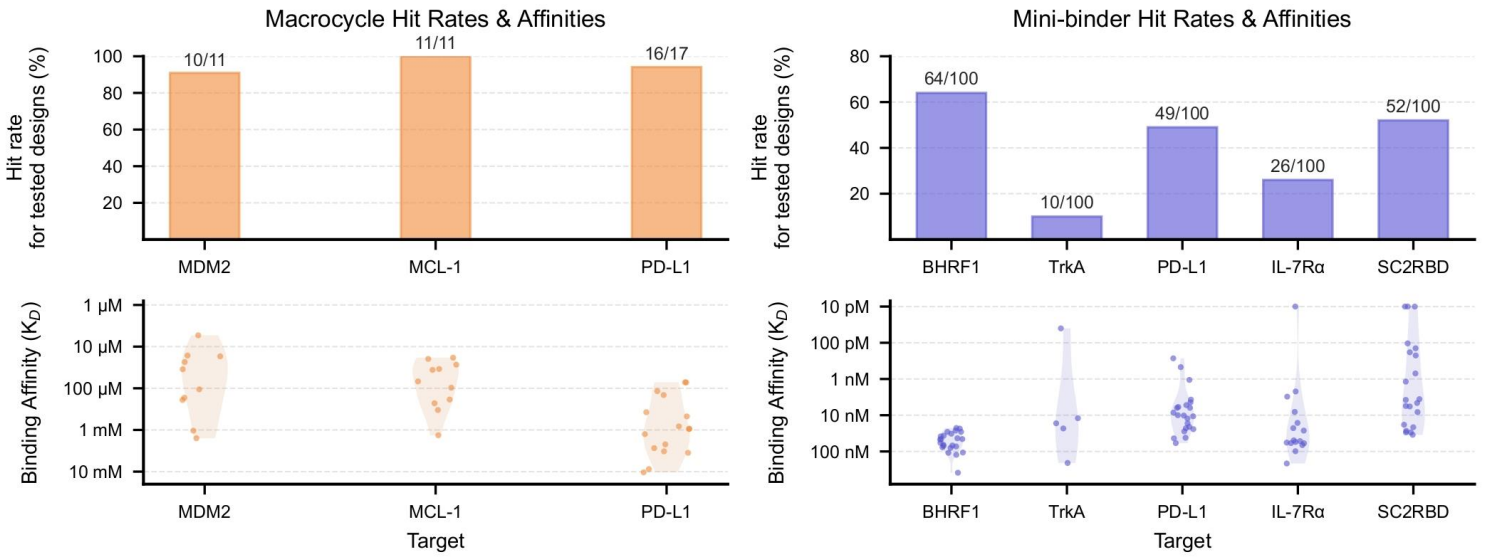
数据来源：Latent Labs 官网及公告，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

Latent Labs：Latent-X联合生成序列与结构

- Latent-X的核心技术创新在于全原子共生成（all-atom joint generation），指模型在同一次生成过程中联合设计氨基酸序列及蛋白质全原子三维结构，而非分步完成序列设计和结构预测。**这与传统的“先生成序列、再预测结构”的多步流程有本质区别，意味着在生成过程中，模型将结合界面上的氢键网络、疏水相互作用和静电互补性直接生成和编码序列，而非事后评估。**
- 模型支持两种分子模态的生成：**1）大环肽（Macrocycles）**：指12-18个氨基酸的环状肽，环化增强其抗降解能力，同时保持特异性，具备口服生物利用度和组织渗透性的潜力。在评估的所有基准靶点上，实验命中率超过90%，部分靶点达到91-100%。对MDM2、MCL-1、PD-L1、BHRF1、TrkA等靶点，最佳结合物的解离常数（KD）达到微摩尔（μM）至纳摩尔（nM）级别。**2）微型结合蛋白（Mini-binders）**：指80-120个氨基酸的小型蛋白质，具有高亲和力和特异性，代表靶向递送、诊断和治疗性抑制剂的新治疗类别。命中率为10-64%，结合亲和力达到皮摩尔（pM）级别，与已批准治疗药物的亲和力水平相当。
- 在架构层面，Latent-X将全原子结构预测与序列生成整合于单次推理，端到端流程比现有多步计算管线快一个数量级。生成的结合物在结构上具有高度多样性，包括复杂的β-折叠结构。验证策略采用两层筛选：第一层使用高通量生物层干涉（HT-BLI）快速筛选结合信号，第二层对阳性候选使用多浓度BLI精确测定亲和力。同时使用哺乳动物展示（mDisplay）系统进行正交验证，通过HEK293T细胞表达设计分子，以更好地模拟天然蛋白折叠、二硫键形成和翻译后修饰。

图：Latent-X生成大环肽与微型结合蛋白的实验命中率及亲和力



数据来源：公司官网，中信建投证券

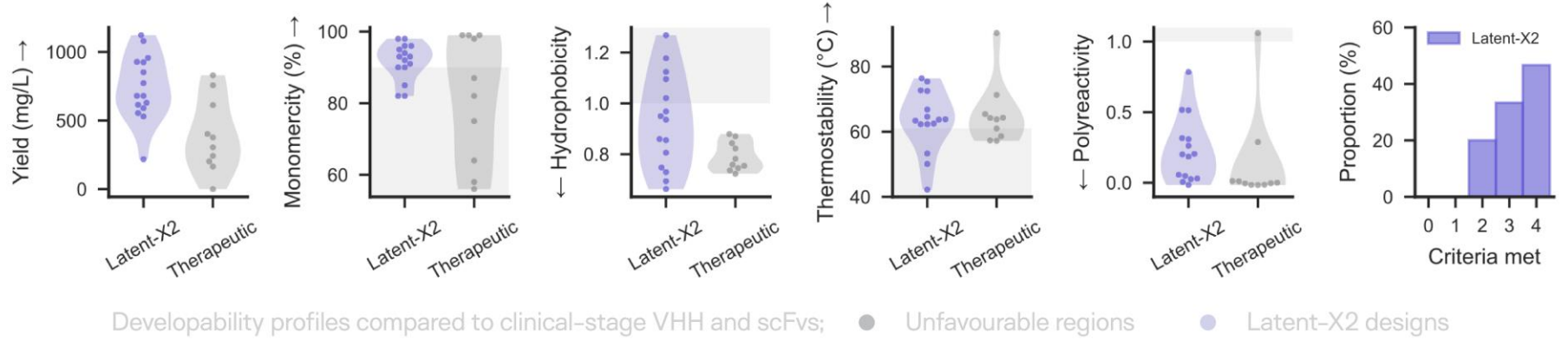
下载日志已记录，仅供内部参考

Latent Labs：Latent-X2首轮抗体设计兼顾结合能力与早期可开发性

Latent-X2于2025年12月发布，同样为面向抗体及大环肽设计的全原子生成模型。相比于Latent-X1，Latent-X2可以将稳定性、疏水性等早期成药性因素提前纳入设计和评价过程，根据靶点结构和目标表位直接设计候选分子，并同步预测其与靶点结合的三维结构。

- **模型能够以较小实验量获得高亲和力命中。**团队针对18个具有多样性和设计难度的可溶性蛋白靶点，每个靶点、每种抗体形式仅选取4～24个设计进入实验，最终在9个靶点上获得有效结合的VHH或scFv抗体。部分命中抗体还同时表现出较好的早期可开发性：在已经获得的结合抗体中，47%同时达到单体性、疏水性、热稳定性和多反应性四项治疗性抗体参考标准，80%达到至少三项。模型设计的4个VHH在10名健康供者的离体试验中均未观察到可检测的T细胞增殖或细胞因子释放，初步提示其免疫原性风险较低。这说明Latent-X2生成的部分抗体不仅能够结合靶点，还具备进一步开展先导分子筛选的基础。
- **模型可缩小早期筛选空间。**大环肽实验中，针对K-Ras（G12D），Latent-X2设计并合成10个大环肽，其中8个确认结合，最佳分子的KD为5.43 μM，与相同条件下复测的mRNA展示文献分子5.53 μM相当；针对PHD2，10个设计中有9个确认结合，最佳KD达到1.54 nM。传统mRNA展示需要从超过10^{12}条序列中筛选，Latent-X2仅测试每个靶点10个设计便获得较高命中率，实验搜索空间缩小超过11个数量级。

图：Latent-X2设计分子与临床阶段蛋白药物的成药性对比



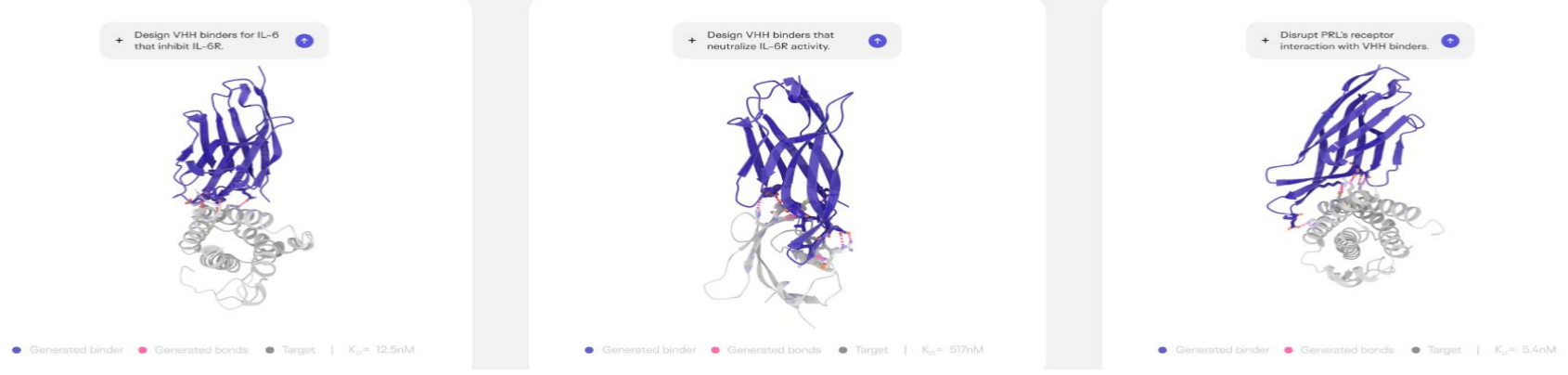
数据来源：公司官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

Latent Labs：Latent-Y自主执行抗体计算设计流程并获得实验命中

- **Latent-Y于2026年3月23日推出，是一种可自主执行的多步蛋白设计计算工作的Agent。**研究人员可输入自然语言研究目标、结构化研究计划或科学论文，Agent自主完成文献与数据库检索、靶点和表位分析、调用Latent-X2生成抗体、计算筛选及质量检查，最终输出可进入合成和实验验证的候选序列。
- **实验验证表明，Latent-Y能够在不同设计场景中获得VHH结合分子。** 团队开展了三类设计任务，包括根据治疗目标选择表位、设计同时结合人和食蟹猴同源蛋白的跨物种抗体，以及根据论文描述的作用机制开展抗体设计。Latent-Y在9个测试靶点中的6个靶点上获得实验确认的VHH，靶点层面成功率为67%，不同靶点的序列命中率约为1%～28%，最佳分子的亲和力达到个位数纳摩尔水平。
- **Latent-Y的主要效率提升来自进入湿实验前的研究与计算设计环节。**Latent-Y可以同时运行多个设计活动，单个研究者即可并行运行大量设计活动。Latent-Y可以完全自主端到端运行，也可以在每一阶段暂停，展示进度摘要和建议的下一步行动供审核。在模态覆盖方面，同一Agent架构支持VHH、大环肽和微型结合物设计。

图：Latent-Y自主设计VHH与靶点的结合结构及实验亲和力



数据来源：公司官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

Latent Labs：Latent-Y Research Tier从技术验证走向科研开放

- **Latent-Y Research Tier是Latent-Y面向科研用户的开放版本。**2026年7月，Latent Labs将Latent-Y通过网页平台向全球研究人员开放，标志着Latent-Y由内部技术验证进一步走向标准化产品交付。经审核的用户可获得每日250个设计的免费额度，超出部分按需购买；企业级项目则通过独立的商业合作模式开展。
- **Research Tier降低了蛋白质设计对专业计算团队的依赖。**研究人员可以直接输入自然语言描述、研究目标或科学论文，由Latent-Y完成资料检索、靶点与表位分析、候选分子生成、计算筛选及迭代优化，最终输出可供实验测试的序列。平台支持VHH、Fv抗体片段、大环肽及微型结合蛋白设计。
- 早期应用显示，Research Tier能够将AI设计能力嵌入不同研究场景。外部团队已将其用于离子通道抑制剂、实体瘤CAR-T、抗疟疾结合分子及糖基转移酶抑制剂等方向，部分候选已获得体外功能或结合实验验证。

图：Latent-Y Research Tier早期科研应用案例

研究团队	应用方向	设计任务	初步验证结果
UC Davis	离子通道与疼痛	从头设计纳米抗体和大环肽抑制剂	5个纳米抗体中4个实现功能阻断，最佳IC50为30 nM；30个大环肽中4个可阻断离子通道电流
慕尼黑大学医院	实体瘤CAR-T	设计肿瘤靶点结合分子并构建CAR	CAR-T细胞在体外杀伤肿瘤细胞，已进入动物实验
TGen与悉尼大学	疟疾	针对寄生虫保守表位设计结合分子	生成数千个候选，近50个候选呈现较强结合信号
Broad Institute	糖基转移酶抑制剂	通过自然语言生成候选分子	在没有专门计算团队的情况下获得实验候选清单，目前仍在测试

数据来源：公司官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

Latent Labs：模型与湿实验一体化

- **在 AI 蛋白设计赛道中，Latent Labs的差异化在于将生成模型与内部实验能力及CRO合作同时纳入研发体系。**公司以全原子生成模型为基础，联合设计候选分子的序列、结构及其与靶点的结合构象，并通过自建湿实验能力开展表达、结合和早期可开发性验证。2026年1月，Latent Labs 与金斯瑞达成战略合作，定位为其 “湿实验合作伙伴” 。
- **公司由大环肽和微型结合蛋白起步，逐步拓展至VHH、scFv等抗体形式。**与 Chai Discovery 聚焦抗体设计、Isomorphic Labs 覆盖小分子和抗体多模态的路径不同，Latent Labs 以大环肽为起点，逐步扩展至抗体和纳米抗体。大环肽的结合界面介于小分子和抗体之间，既可利用生成模型探索传统小分子难以触及的化学空间，又能在部分场景中提供不同于抗体的药代动力学和递送优势。同时，大环肽的合成和测试周期更短，更适合建立DBTL/DMTA快速闭环。
- **Latent Labs已完成多轮融资，主要用于模型研发、实验平台建设及候选分子验证。**2025年2月，公司累计融资5,000万美元，其中4,000万美元A轮融资由Radical Ventures和Sofinnova Partners联合领投，Flying Fish、Isomer Capital等参与；截至2026年3月，累计融资额增至8,050万美元。

表：三家 AI 蛋白设计公司路径对比

维度	Latent Labs	Chai Discovery	Isomorphic Labs
核心模态	大环肽 → 抗体/纳米抗体	抗体（VHH/scFv/IgG）	小分子、抗体、肽、分子胶
技术路线	全原子共生成模型 + 自主 Agent	扩散模型 + 条件生成	AlphaFold 3 → IsoDDE
实验策略	自建湿实验室+CRO合作	与 CRO 合作	合作药企提供数据+CRO合作
商业模式	平台 + 合作 + 自研管线	平台授权 + 定制模型	自研管线 + 药企合作
累计融资	8050 万美元	6.3 亿美元	约 27 亿美元

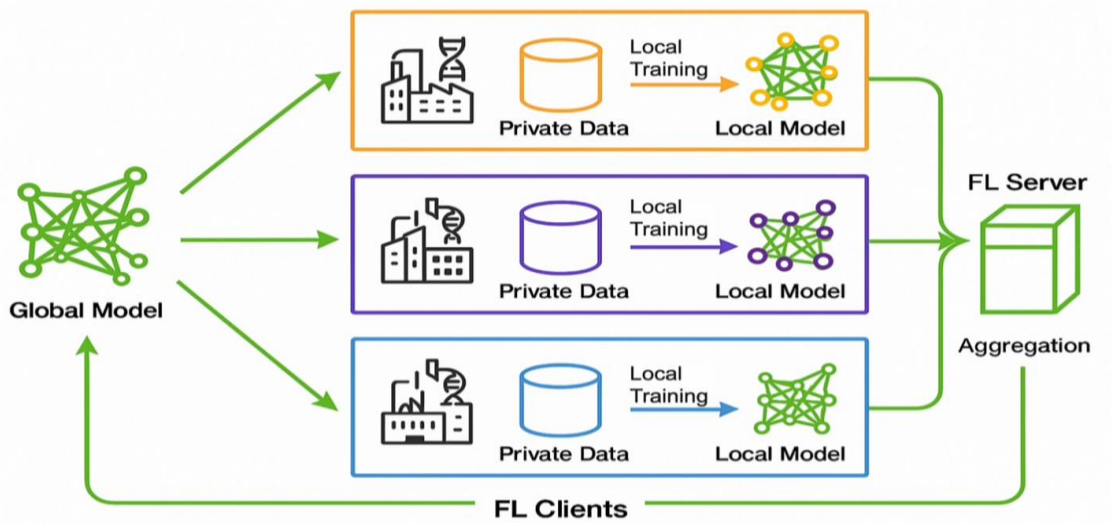
数据来源：公司官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

礼来TuneLab：协作式AI/ML药物发现平台

- **礼来于2025年9月9日推出TuneLab，为面向生物技术公司的协作式联邦AI/ML药物发现平台。**礼来将基于20余年、超过50万组分子实验数据训练的部分预测模型向成员开放，首批包括用于抗体可开发性预测的AbLab和用于小分子ADME/Tox预测的ChemLab。平台采用联邦学习机制，合作方数据保留在本地，仅共享模型更新；**截至2026年9月，已有超过125家企业加入。**
- **TuneLab数据安全性高，参与方共享数据、共同迭代模型、共享模型升级红利。**TuneLab的技术核心是联邦学习（Federated Learning），允许多方训练共享机器学习模型，同时将数据保持在私有环境中：全局模型被分配至每个本地节点并以本地数据进行训练，仅模型更新被共享回中央服务器，服务器汇总更新以改进全局模型。该能力由 Rhino Federated Computing 托管，其联邦学习平台基于 NVIDIA NV FLARE 框架构建，符合全球最高标准，同时满足礼来严格的内部信息和网络安全要求。礼来正持续扩展 TuneLab，合作整合最先进的外部模型，并持续利用最新内部数据和所有成员的集体贡献更新现有模型，随着参与者人数增加，TuneLab模型的性能将持续提升。

图：TuneLab联邦学习机制示意图



数据来源：Lilly TuneLab，公司官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

礼来TuneLab：与生态圈互惠，共同迭代模型共享成果

- **礼来推出TuneLab，主要是为了解决早期生物技术公司在AI药物发现中面临的数据短板。**TuneLab的创建是为了让规模较小的公司也能使用礼来科学家日常使用的部分AI功能，并借助开放权限加快新药开发。对多数小型生物技术公司来说，AI/ML在药物发现中的价值一直难以落地，原因在于缺乏足够规模和高质量的数据来训练有效模型。TuneLab通过联邦学习，使合作伙伴在不暴露自身专有数据的前提下，获得基于礼来大规模研发数据训练的预测能力。
- **参与企业贡献训练数据持续改进全局模型使生态内所有成员受益。**生物技术公司获得大药企级 AI 预测能力，礼来则在不直接获取合作方原始数据的情况下扩充模型训练信号，形成互惠关系。礼来将内部科学家使用的模型开放给外部合作伙伴，这在制药行业尚无先例，也意味着礼来正从制药公司向行业基础设施提供者延伸。参与企业越多，模型越强，生态吸引力也越大。
- **TuneLab对于礼来为“数据换模型、模型换生态、生态换管线”的三级杠杆。**通过联邦学习，礼来虽看不到合作方的原始数据，但能够观察到哪些靶点和项目方向被频繁使用，从而更早地识别有潜力的外部项目、构建联合开发交易。

表：TuneLab战略逻辑与行业背景

维度	核心内容
行业痛点	约90%临床试验失败率十年未改善；小型生物技术公司缺乏训练有效AI模型所需的大规模数据
礼来动因	科学长定位为“均衡器”，开放内部AI能力；将模型定位为行业标准，构建协作生态
战略回报	联邦学习下观察外部项目方向，早期识别潜力管线；数据贡献持续改进全局模型
竞争格局	辉瑞、诺华使用Chai Discovery工具；礼来以自有数据开放为差异化抓手，已签约超125家合作伙伴

数据来源：Lilly TuneLab，公司官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

礼来TuneLab：已建立广泛的生态合作伙伴网络

➢ **礼来正通过连接软件平台、实验服务和外部AI能力，逐步扩大TuneLab的应用生态。**2026年1月，Schrödinger宣布将TuneLab接入LiveDesign企业信息学平台，Revvity则通过Signals Xynthetica提供模型访问，并与礼来共同资助部分入选企业使用相关服务。Benchling于同月开始向其1,300余家生物技术公司客户推广TuneLab，并于8月完成平台集成。随后，Charles River和Axcelead DDP于6月加入，分别提供标准化非临床测试服务和用于模型升级的药物研发数据；Chai Discovery同期向TuneLab参与企业开放迷你蛋白设计工具试用，使研究人员能够在数小时内生成候选分子。目前，公开加入该生态的生物技术公司包括Circle Pharma、insitro、Pharos iBio、Sprint Bioscience、1STBIO、AriBio、BigHat Biosciences和Vasa Therapeutics等。

表：TuneLab合作伙伴（截至2026年9月）

类型	代表机构	角色
平台方	礼来（Eli Lilly）	提供模型与数据资产
联邦学习基础设施	Rhino Federated Computing（NVIDIA NV FLARE）	隐私保护联邦学习托管
软件平台	Schrödinger LiveDesign、Revvity Signals、Benchling、CDD Vault	将TuneLab模型嵌入研发工作流
非临床测试	Charles River	提供非临床测试服务，包含毒理、药代湿实验
药物发现服务	Axcelead DDP	贡献药物发现数据，并在客户项目中应用模型
基因到蛋白一体化湿实验数据生成	金斯瑞生物科技	提供抗体表达、蛋白生产与纯化、亲和力检测等表征服务，将优先序列转化为实验数据
药物可开发性数据生成	Ginkgo Datapoint	小分子及可开发性评价
抗体表征	Twist Biosciences	抗体表征数据
AI能力扩展	Chai Discovery	向TuneLab用户提供迷你蛋白设计套件
生物技术公司	Circle Pharma、insitro、Pharosibio、Sprint Bioscience、1STBIO、AriBio、BigHat Biosciences、Vasa Therapeutics等	使用模型进行早期药物发现

数据来源：Lilly TuneLab，公司官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

礼来TuneLab：早期项目进入实际应用

➢ **TuneLab尚处早期应用阶段，目前以药物发现为主。**目前已有多家合作伙伴披露了具体应用方向，涵盖心血管疾病、神经退行性疾病、癌症及成药性评估等领域，标志着TuneLab从生态构建进入实际项目应用阶段。部分合作伙伴案例包括：

1. Vasa Therapeutics是一家临床阶段生物制药公司，致力于开发心血管、神经肌肉及年龄相关疾病疗法，并于2026年4月加入TuneLab。公司将TuneLab的AI/ML预测模型用于CAMKIIδ抑制剂项目的候选物筛选，作为其结构生物学平台的补充，以加快候选分子的优选与管线推进。
2. 1STBIO是一家韩国生物技术公司，已开发面向小分子研究的AI-ready ADMET数据集，于2026年5月与TuneLab达成合作。该公司将TuneLab用于神经退行性疾病和癌症领域的早期项目，具体应用包括寻找起始化合物、优化分子以及预测潜在的安全性或吸收问题。1STBIO明确表示，其研究数据、结果和知识产权将保留在公司内部，不会通过系统与礼来或其他TuneLab用户共享。该合作使1STBIO能够在无需暴露专有数据的前提下，利用礼来基于大规模数据训练的预测模型加速早期小分子筛选。
3. Pharosibio是韩国AI新药研发企业， 2026年6月签署参与TuneLab的协议，计划通过自主AI平台Chemiverse，将其积累的候选物质发掘及临床开发经验与礼来的AI/ML新药研发环境相结合，审视主要管线的理化性质、成药性及开发可能性，以降低获取大规模数据和AI基础设施的成本负担。

VASA THERAPEUTICS　1STBIO Turning Breakthrough Discoveries into Medicines　Pharos iBio　Lilly TuneLab™

数据来源：Lilly TuneLab，公司官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

礼来TuneLab：CRO服务商接入保障数据生成一致性

Charles River

- Charles River于2026年6月18日正式加入礼来TuneLab生态，成为该平台首个非临床测试服务提供商。这一合作中，TuneLab提供基于礼来数据的AI预测模型（如AbLab、ChemLab），帮助生物技术公司快速筛选候选分子；Charles River则将其数十年的非临床测试专业能力开放给TuneLab生态内的公司，用标准化的实验数据验证AI的预测结果。
- **Charles River在合作中扮演“实验数据生成者”和“标准化推动者”的双重角色，推动平台采用一致的测试标准。**一方面，参与TuneLab的生物技术公司可以直接对接Charles River的**毒理、药代动力学**等非临床测试服务，在提交物理实验前先用AI预测缩小候选范围，再用标准化实验数据确认关键候选分子，从而做出更可靠的研发决策。另一方面，**合作的重要目标之一是在TuneLab生态内标准化非临床测试协议，当所有参与公司采用一致的测试标准时，产生的数据可比性更强，能够更高效地反哺TuneLab的AI模型，持续提升模型的准确性和平台整体效率。**Charles River丰富的实验室经验叠加到TuneLab的AI模型上，有望为参与者提供稳定可信的数据验证，支持相关企业药物发现决策。
- 这一合作实现了三方共赢：对TuneLab平台而言，获得高质量、标准化的实验数据反哺，使AI模型迭代更快、更准；对Charles River而言，将其服务嵌入前沿的AI药物发现工作流，深化与生物技术客户的联系，并参与塑造AI时代的研发新范式；对生物技术公司而言，降低了使用高质量非临床测试服务的门槛，能更便捷地获得“AI预测+实验验证”的一站式支持，从而加速早期药物研发。Charles River在TuneLab生态中，实质上成为连接“计算预测”与“实验验证”的关键桥梁。

charles river | Lilly TuneLab™

数据来源：Lilly TuneLab，公司官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

礼来TuneLab：CRO服务商接入保障数据生成一致性

金斯瑞

- **金斯瑞生物科技于2026年9月正式加入礼来TuneLab生态，成为该平台又一家非临床测试服务提供商。**与Charles River侧重毒理、药代动力学等非临床测试服务不同，金斯瑞侧重高通量抗体表达、蛋白生产及亲和力检测等生物学验证环节。

- **金斯瑞高质量、标准化交付能力全面领先，定制蛋白产能持续扩产，部分项目从序列接收到完成数据测试仅需约4天，并通过自动化平台控制实验批间差异，规模化与稳定性优势明显。**生态圈合作伙伴在TuneLab平台上借助AI可快速生成海量候选分子，但传统实验验证流程无法匹配其速度，验证环节成为AI药物发现规模化的核心瓶颈。金斯瑞聚焦高价值全长基因及定制化交付，在交付质量与定制化能力上处于行业领先地位。近年来，公司已将服务延伸至蛋白/抗体表达、纯化、结合与功能测试，并构建“设计—构建—测试—学习（DBTL）闭环”，其中Gene-to-Protein平台能够将AI生成序列到模型可用数据的交付周期压缩至最快约4天，显著优于传统数周的验证周期。这一能力与TuneLab的计算预测环节高度契合，构成公司区别于单一环节服务商的差异化优势。随着AI模型竞争从算法进一步向高质量实验数据和快速DBTL迭代迁移，金斯瑞在下游湿实验能力以及端到端服务体系上的领先性有望进一步体现。**与TuneLab合作，说明金斯瑞Gene-to-Protein平台交付质量和标准化程度得到高度认可。**

GenScript Scripting Possibilities | Lilly TuneLab™

数据来源：Lilly TuneLab，公司官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

其他跨国药企：AI 药物研发平台与开放模式

➢ 跨国药企的AI制药布局正由单点预测工具，逐步延伸至专有数据、基础模型、自动化实验与迭代学习相结合的研发闭环，但不同公司的开放模式差异较大，多数能力仍主要服务内部研发或特定合作。罗氏将Lab-in-the-Loop贯穿靶点发现、先导化合物识别与优化等环节，2026年Pharma Day披露，2025Q4至2026Q2共有40%的管线决策记录了AI或计算方法的贡献。默克集团则通过AIDDISON将生成式设计、虚拟筛选、ADMET预测与合成规划整合为商业化SaaS，代表面向外部用户的平台产品化路径。

表：其他跨国药企的 AI 药物研发平台

药企	代表平台或项目	开放/合作模式	AI能力重点	定位
默克集团 Merck KGaA	AIDDISON	商业化SaaS	生成式设计、虚拟筛选、ADMET预测及合成规划	面向外部用户的软件产品
赛诺菲	Search & Design；Plai	内部使用及特定合作	分子设计、反应模拟、研发组合与临床运营决策	公司内部AI研发体系
罗氏/基因泰克	Genentech–NVIDIA合作	特定合作	基础模型与实验验证闭环	专有数据驱动的联合研发
阿斯利康	Molecular AI；iLab	内部使用	分子设计与自动化实验结合	AI与机器人实验室协同
诺华	AI Innovation Lab；Generative Chemistry	内部使用	分子优化、配方研发及研发数据整合	服务内部科学家的AI能力

数据来源：公司官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

英矽智能：行业领先的生成式AI药物研发企业

- 英矽智能创立于2014年，总部位于上海，并在波士顿、香港、阿布扎比设有办公室。**公司定位为生成式AI驱动的临床阶段生物医药公司，主要自研产品Pharma.AI平台覆盖靶点发现、分子设计及临床开发等环节，既用于推进内部管线，也通过研发合作和资产授权向外部药企提供服务。**
- **随着核心管线进入临床中后期、对外合作数量增加，公司的发展重点已由模型性能验证逐步转向候选药物的临床转化、合作项目交付及商业收入兑现。**目前，公司已提名超过30个临床前候选化合物（PCC），并将部分技术能力拓展至先进材料、农业和营养产品等领域。核心管线Rentosertib的Ⅱ期临床结果于2025年6月发表于《自然·医学》，为评价AI参与靶点发现和分子设计后的临床转化提供了较早的同行评议证据。此后，公司陆续与礼来、施维雅、武田及SK生物制药等药企达成合作，自2021年以来，公司重大对外授权、联合开发及研发合作的累计合同潜在总额约110亿美元。
- **英矽智能于上市前完成五轮主要融资，并于2025年12月30日在港交所主板挂牌，IPO募资22.77亿港元，公开发售部分获约1,427倍认购。**公司引入15家基石投资者，合计认购1.15亿美元，投资方包括礼来、腾讯、淡马锡、施罗德、瑞银、橡树资本、易方达和泰康人寿等。启明创投自2019年领投B轮后持续参与，IPO前持股约7%；E轮投资方包括惠理集团旗下私募股权基金、浦东创投、浦发集团、锡创投及宜兴国控等。

表：英矽智能融资情况

轮次	时间	主要投资方
B轮	2019	启明创投领投
C轮/D轮	-	启明创投、礼来亚洲基金、创新工场、BV百度风投、斯道资本、华平投资、红杉中国、高瓴等
E轮	2025年初	惠理集团旗下私募股权基金、浦东创投、浦发集团、锡创投、宜兴国控联合领投
IPO	2025.12	礼来、腾讯、淡马锡、施罗德、瑞银、橡树资本、易方达、泰康人寿等15家基石投资者

数据来源：英矽智能公司官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

英矽智能：Pharma.AI覆盖靶点发现、分子设计与临床开发

Pharma.AI是英矽智能的核心技术平台，由Biology42、Chemistry42、Medicine42和Science42四大模块组成，将多组学分析、生成式分子设计、物理计算、临床试验预测及科研智能体纳入统一工作流，覆盖从靶点发现到临床开发的主要环节。

- **Biology42：**Biology42通过PandaOmics整合多组学数据、疾病信息与生物医学文献，支持靶点发现和优先级排序，并通过Generative Biologics拓展至生物大分子设计。
- **Chemistry42：**Chemistry42结合生成模型与物理计算，支持小分子生成、性质优化、逆合成、ADMET与脱靶分析以及分子动力学模拟，推动靶点假设向候选分子转化。
- **Medicine42：**Medicine42以inClinico支持临床试验设计、成功概率预测和风险评估。
- **Science42：**通过DORA、Copilot、Data Warehouse及MMAI Gym等工具，承担文献研究、知识生成、跨应用数据流和模型训练功能。

表：英矽智能Pharma.AI技术平台



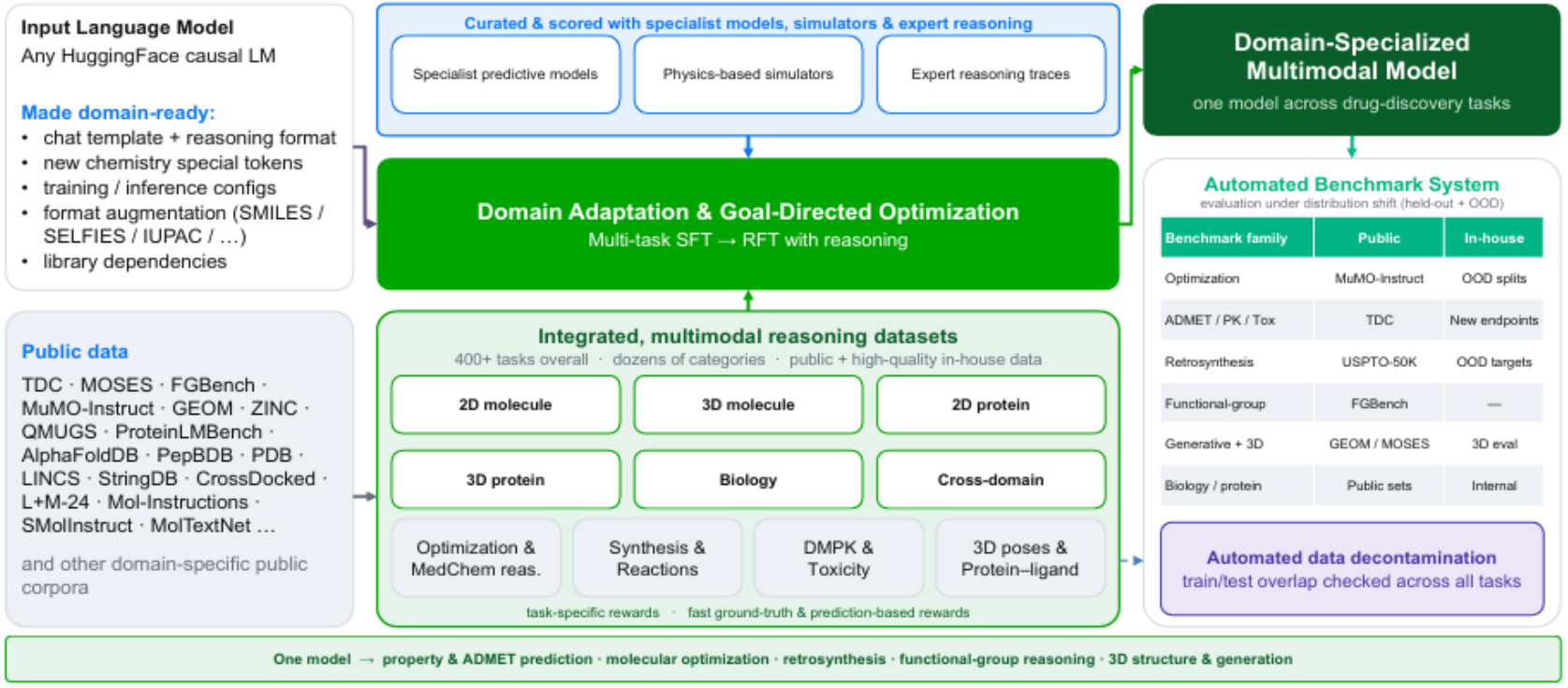
数据来源：公司官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

英矽智能：MMAI Gym轻量化部署拓展商业边界

➢ Science MMAI Gym是英矽智能于2026年1月发布的科学基础模型训练与基准评测平台，为Pharma.AI体系中Science42板块的重要基础设施。平台主要面向通用基础模型在专业药物研发任务中表现不足的问题，通过领域数据训练、科学推理任务设计、多任务监督微调与强化学习，将通用模型训练为可以执行真实药物发现与开发任务的专业模型。内部测试显示，经训练的基础模型在关键药物发现基准上的性能提升高达10倍，远超通用基础模型的表现。2026年3月，英矽智能与Liquid AI达成MMAI Gym首个对外合作，推出26亿参数的轻量级科研基础模型LFM2-2.6B-MMAI，该模型参数规模较小且支持本地部署，但在多个精选关键任务中实现了业界领先表现，相关研究已作为ICLR 2026 Workshop论文发表。

图：MMAI Gym面向药物发现的模型训练与评测一体化框架



数据来源：arXiv，公司官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

英矽智能：管线持续扩容，Rentosertib进入Ⅲ期临床验证

截至2026年6月30日，英矽智能的管线包含31款已提名的临床前候选化合物，覆盖肿瘤、免疫、代谢和中枢神经系统疾病，其中13款已获得IND批准。2026年前9个月内，公司提名了9个临床前候选化合物（PCC），研发速度行业领先，同时在其自研与合作管线中顺利达成了8个临床里程碑。

- **Rentosertib（ISM001-055）**：全球进展最快的AI药物，是一款AI辅助发现和设计的、用于特发性肺纤维化的“全球首创”口服TNIK抑制剂。2026年9月，Rentosertib的III期临床试验（GENESIS-IPF-3）已完成首例患者给药，该研究预计入组320名IPF患者，评估每日一次口服Rentosertib持续给药52周的疗效与安全性。2026年4月，Rentosertib吸入制剂获得临床试验批件，成为英矽智能AI驱动管线中第13个获得IND批准的项目，也是全球首个进入直接肺部给药临床研究的AI驱动候选药物。

- **ISM8969**是一款潜在同类最佳的NLRP3抑制剂，用于帕金森病治疗，具有血脑屏障穿透优势，2026年1月获得FDA IND批准，I期临床试验将评估其安全性、耐受性及药代动力学特征。英矽智能已与衡泰生物达成共同开发合作协议，双方各持有该项目50%的全球权益，英矽智能有权获得最高逾5亿港元的预付款和里程碑付款。

- **ISM5411**是一款用于炎症性肠病治疗的PHD抑制剂，已进入II期临床。ISM6331是一款泛TEAD抑制剂，用于间皮瘤和实体瘤治疗，2026年7月获得FDA快速通道资格认定。

图：英矽智能管线进展



数据来源：公司官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

英矽智能：授权合作与业绩同步增长，商业模式进入兑现阶段

- 2026年上半年，英矽智能实现营业收入1.063亿美元，同比增长287.2%；毛利率由上年同期的84.0%提升至90.3%；净利润为3,554万美元，经调整净利润为5,123万美元，首次实现半年度盈利。收入增长主要受合作项目首付款及阶段性付款确认推动。
- **截至2026年8月14日，公司年内新签约合作合同潜在总额约73亿美元，累计对外授权交易总值达110亿美元。**2026年以来，公司先后与施维雅、衡泰生物、齐鲁制药、康哲药业、元羿生物、礼来、SK生物制药及武田制药等达成合作，涵盖管线授权、指定靶点研发及平台合作等形式。部分合作已由单一项目授权拓展至多靶点研发和持续合作。
- **英矽智能正由技术验证阶段进入临床和商业化同步验证阶段。**Rentosertib的发现、设计及Ⅱ期临床结果已分别发表于《自然·生物技术》和《自然·医学》，为Pharma.AI平台贯穿靶点发现、分子设计和临床开发提供了代表性案例。根据公司披露，部分项目由靶点确定推进至临床前候选化合物的周期约为9-18个月，相较于传统药物发现平均周期约4.5年，效率提升3到6倍。目前公司收入主要来自合作首付款和研发服务，后续增长的持续性将取决于合作项目交付、里程碑兑现及自研管线进展。

表：2026年以来英矽智能部分管线授权及研发合作

合作方	时间	合同潜在总额	已披露首付款及近期付款
施维雅	2026年1月	最高8.88亿美元	首付款及近期里程碑付款合计3,200万美元
礼来	2026年3月	约27.5亿美元	首付款1.15亿美元
SK生物制药	2026年6月	超过25亿美元	首付款及近期里程碑付款最高1,800万美元
武田制药	2026年7月	约6亿美元	项目启动费、近期付款及近期里程碑合计约6,000万美元

数据来源：公司官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

剂泰科技：AI纳米递送的差异化卡位者

- **剂泰科技成立于2020年，公司定位为AI驱动的纳米材料与药物递送技术平台，重点解决有效载荷的稳定性、组织分布和靶向递送问题。**公司由美国国家工程院院士陈红敏博士、MIT化学工程博士赖才达、MIT科学家王文首联合创立，总部位于北京。陈红敏师承药物递送之父Robert Langer院士，拥有超过20年药物研发和产业化经验.

- **公司采用平台合作与产品合作并行的商业模式，主要切入分子设计完成后的制剂与体内递送环节。**随着双抗、核酸药物等大分子生物制药成为主流，大分子极易在人体内被降解、难以跨越复杂的生物屏障，递送系统由此迎来价值重估。剂泰科技以NanoForge为核心，打造了AiLNP（AI纳米递送系统设计）、AiRNA（AI mRNA序列设计）、AiProtein（AI蛋白和抗体设计）和AiTEM（AI小分子制剂设计）四大技术解决方案，覆盖从有效载荷设计到精准递送再到验证的闭环。目前公司进展最快的项目MTS-004已达到Ⅲ期临床研究主要终点，是国内首款完成Ⅲ期临床的AI辅助制剂新药，也是目前国内唯一完成Ⅲ期临床研究的假性延髓情绪失控（PBA）治疗候选药物。从项目立项至完成Ⅲ期临床研究用时约38个月。

- **上市前，剂泰科技完成从天使轮至D轮的多轮融资，累计融资超过3亿美元。**红杉中国自2019年天使+轮起连续参与五轮融资，上市前持股约6.89%，为公司第二大机构股东；峰瑞资本、源码资本、中金资本、光速中国、五源资本及国寿股权等机构亦参与投资。晶泰科技是剂泰科技的早期投资方之一，双方通过股权及技术合作保持联系。2026年5月13日，剂泰科技在港交所上市，IPO募资超过21亿港元。公司引入18家基石投资者，合计认购约1.48亿美元，包括贝莱德、瑞银集团、韩国未来资产及高瓴等机构。

剂泰科技
METiS TechBio

中信建投证券 CHINA SECURITIES

数据来源：公司官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

剂泰科技：NanoForge构建覆盖脂质递送和蛋白设计的AI平台

剂泰科技以NanoForge为核心，构建了覆盖纳米递送、mRNA序列设计、小分子制剂和蛋白抗体设计的四大AI平台。

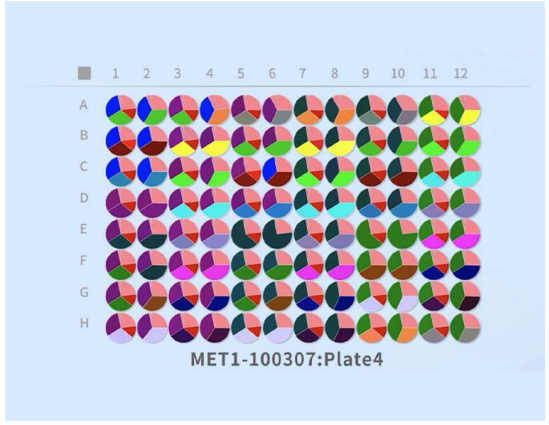
- AiLNP平台通过专有脂质库、脂质语言模型和生成算法筛选候选脂质，结合预测性AI与分子动力学模拟，解析脂质、蛋白质和核酸的纳米级相互作用，可预测20余种脂质特性，并对可电离阳离子脂质、辅助脂质、胆固醇及PEG脂质进行设计与比例优化。依托DATALOTS高通量平台，AiLNP实现脂质与LNP的体内数据采集和快速合成，支撑定制化制剂开发。

- AiLNP与AiRNA联合平台支持AI驱动的全长mRNA序列设计，优化表达效率、蛋白折叠、稳定性及生产工艺，并通过生成式AI设计器官靶向UTR，利用高通量细胞数据集验证。平台还能模拟纳米颗粒与mRNA的体内行为，包括生物分布、细胞摄取、内体逃逸及生物学响应，实现LNP、制剂与mRNA序列的协同优化。

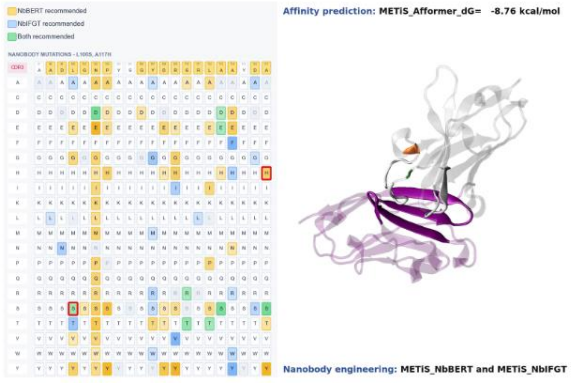
- AiTEM平台聚焦小分子制剂设计，利用AI、高通量迭代、分子动力学和量子化学技术，预测药物-辅料相互作用并筛选最佳辅料。平台可优化共溶剂溶剂化、胶束、固体分散体、环糊精包合及微球等纳米级制剂，提升溶解度和生物利用度，并通过自动化高通量平台测试样品，由AI迭代分析溶解度、稳定性和渗透性数据，推荐高性能制剂。

- AiProtein平台采用“干实验+湿实验+智能体”范式，聚焦蛋白和抗体设计。平台自主研发从头生成模型、语言/预测模型、亲和力预测模型、成药性预测模型及主动学习驱动的干湿迭代算法，并在纳米抗体工程上完成技术整合。新一代抗体设计智能体AARON可调度各AI模型，为科学家提供可视化界面，实现抗体生成、性质预测、亲和力优化及干湿闭环的一体化操作。

图：AiLNP高通量脂质配方筛选与实验验证



图：AiProtein纳米抗体序列优化与结合结构预测



数据来源：公司官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

剂泰科技：NanoForge推动管线进入临床及资产交易阶段

目前，剂泰科技已建立超过10项研发管线，覆盖小分子制剂、mRNA药物和蛋白类药物，适应症涉及肿瘤、免疫、中枢神经及代谢疾病。代表性管线包括：

- **MTS-004进入上市申报准备阶段，率先验证AiTEM的制剂优化能力。**MTS-004是一款由右美沙芬和奎尼丁组成的口腔崩解片，用于治疗假性延髓情绪失控（PBA），已达到中国Ⅲ期临床研究主要终点。公司已将其中国内地权益授权浙江引安医药，并于2025年12月收到1亿元首付款。截至2026年10月，项目已完成Pre-NDA沟通，正在推进验证性生产。
- **MTS-128完成海外授权，验证临床前资产的交易能力。**2026年6月，公司将处于临床前阶段的三特异性T细胞衔接器MTS-128的全球开发、生产和商业化权益授予Boulevard Bio，已收到2,000万美元首付款，并有资格获得最高16亿美元开发、注册及商业化里程碑付款和分级销售提成。
- **临床管线逐步由制剂扩展至mRNA编码生物药：**代谢管线MTS-201已完成Ⅰ期临床Part B并启动Part C；肝癌项目MTS-105正在北京大学肿瘤医院开展研究者发起的临床研究，已进入剂量递增阶段，并获得美国FDA孤儿药资格；自免及血液肿瘤项目MTS-109正在上海长征医院开展IIT，公司披露已观察到早期积极数据，正在同步推进中美IND申报。

图：剂泰科技管线项目

管线

治疗领域	管线	药物类型	适应症	PCC	IIT/IND	临床I期	临床II期	临床III期	NDA
中枢神经	MTS-004	小分子	假性延髓情绪						
	MTS-004	小分子	吞咽困难						
代谢类疾病	MTS-201	小分子	肥胖						
	MTS-201	小分子	2型糖尿病						
	MTS-201	小分子	短肠综合征						
	MTS-201	小分子	代谢相关脂肪性肝炎						
肿瘤	MTS-105	大分子	肝细胞癌						
	MTS-107	大分子	宫颈癌/头颈癌						
	MTS-108	大分子	小细胞肺癌						
	MTS-110	大分子	前列腺癌						
	MTS-111	大分子	卵巢癌						
自免疾病	MTS-109	大分子	自身免疫疾病						
	MTS-112	大分子	过敏性疾病						
	MTS-118	大分子	自身免疫疾病						
	MTS-128	大分子	自身免疫疾病						

疾病领域	管线	药物类型	适应症	进度
动物健康	PTS-201	大分子	动物严重肢体缺血与组织坏死	开发中
	PTS-101	小分子	宠物的肥胖、超重和代谢功能障碍	开发中

数据来源：公司官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

剂泰科技：资产授权推动收入放量

➢ **MTS-128授权推动收入显著增长，亏损幅度有所收窄。**2025年公司实现收入1.05亿元，主要来自MTS-004授权首付款；2026年上半年收入进一步增至1.54亿元，同比增长133.99倍，较2025年全年收入高出47%，主要来自MTS-128授权首付款确认。同期归母净亏损为1.53亿元，同比收窄20.0%；经调整净亏损为5,110万元，同比收窄56.4%；研发费用为1.72亿元，同比增长48.1%。截至2026年6月底，公司现金及现金等价物为25.27亿元；若加上定期存款、公允价值计量金融资产及受限资金，资金储备合计为30.25亿元。

➢ **商业化模式已由单一产品授权拓展至平台部署、联合研发和产业化服务。**除MTS-004和MTS-128授权外，OpenCGT平台相关合作的最高潜在交易金额已超过60亿元，BioThunder项目已进入授权开发阶段并收到1,500万元独家许可费，AiTEM平台已在恒瑞医药开展本地化部署。2026年下半年，公司进一步与绿叶制药建立AI药物递送战略合作，并与昭衍生物设立合资公司，建设覆盖mRNA设计、LNP开发、中试生产和注册申报的CDMO平台。

表：剂泰科技主要管线授权及研发合作

项目/合作内容	合作方	时间	合同潜在总额	已披露首付款及近期付款
MTS-128全球独家授权：自主研发三特异性TCE，授予全球开发、生产及商业化权益	Boulevard Bio	2026年6月	2,000万美元首付款+最高16亿美元里程碑付款+销售提成	已收到2,000万美元首付款
MTS-004中国内地独家授权：PBA适应症开发、生产及商业化；后续扩展吞咽困难适应症	浙江引安医药	2025年9月；10月补充协议	最高20.45亿元+销售提成	已收到1亿元首付款
OpenCGT多项目合作：组织/细胞靶向LNP、mRNA与基因编辑药物、体内免疫治疗	锐正基因、菁童生命、沙砾生物、大悦城控股产业平台、BioThunder AG、Aicogen Therapeutics等	2025年启动；2026年持续扩展	多项目累计潜在交易规模超过60亿元	除BioThunder的1,500万元外，其余付款未逐项披露
体内免疫细胞治疗LNP授权	BioThunder AG（拾得生物）	2026年上半年	单项总额未披露	已收到1,500万元排他性许可费
组织特异性LNP递送战略合作：利用AiLNP平台发现和优化新型可电离脂质及LNP架构	礼来	2026年10月19日	千万美元首付款，总额11亿美元+个位数销售分成	/

数据来源：公司官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

晶泰科技：AI+机器人驱动的AI4S平台型企业

- **晶泰科技成立于2015年，定位为以AI和机器人驱动的AI for Science平台型企业。**公司由三位物理学背景的科学家共同创立，总部位于深圳，并在上海、北京及美国设有研发中心。公司目标是将专业模型、科研多智能体和机器人实验能力标准化、平台化，使同一套研发基础设施能够跨项目、跨机构和跨行业复用。

- **公司早期从药物晶型预测和固态化学计算切入，主要解决药物研发中的微观结构与物性预测问题，随后将技术能力延伸至分子设计、药理毒理及安全性评价，并进一步拓展至新材料、化工和农业等领域。**晶泰科技侧重研发基础设施和技术服务，通过计算与实验服务、机器人实验室建设以及联合研发项目形成收入。公司希望以科研智能体调度专业模型和实验设备，连接计算预测、实验执行与数据反馈，从而提高研发流程的自动化程度。

- **晶泰科技在上市前完成多轮融资，累计融资约7.32亿美元。**腾讯自A轮起持续参与投资，截至2025年2月持股约10.94%，是公司主要机构股东之一。公司于2024年6月在港交所上市，成为香港《上市规则》第18C章实施后首家上市的特专科技公司；2025年9月，公司按每股9.28港元配售2.86亿股新股；2026年初又通过发行可转换债券募集约25.4亿元人民币，截至2026年6月底，公司现金储备为86.71亿元，充足的在手现金有望支撑公司长期发展。



数据来源：公司官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

晶泰科技：XtalPi Science智能体连接数字预测与机器人实验

- **XtalPi Science**是晶泰科技于2026年7月发布的科学智能平台。平台以Genius Agents科学智能体为调度中枢，连接人类科学家、科学AI模型、具身智能机器人实验室及外部模型，将原本分散的计算预测、实验执行和数据分析能力整合到统一研发流程中。

- **计算结果与实验数据可在XtalPi Science中形成迭代闭环。**人类科学家首先提出研究目标，并通过Science Token调用平台能力；Genius Agents理解科研意图，将复杂目标拆解为可执行任务，并根据需要调度内部科学模型或通过API调用外部模型。在“干实验”环节，Scientific AI完成分子生成、结构预测、性质评估和实验方案设计，提出候选方案后，由机器人实验室进行验证；在“湿实验”环节，Physical AI调度机器人完成样品制备、实验测试与数据采集。实验结果再返回智能体和模型，用于调整判断、筛选候选并安排下一轮实验，直至获得满足目标的分子或材料。科学家可以在关键节点进行监督和决策。

图：XtalPi Science工作流程



数据来源：公司官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

晶泰科技：小分子管线进入临床，多肽与siRNA项目接续推进

➢ **在管线方面，晶泰自身管线聚焦自免领域，核心项目已进入临床阶段。**与希格生科合作开发的FAK/SRC双靶点抑制剂SIGX1094正在北京大学肿瘤医院开展Ⅰ期临床研究，已获得美国FDA孤儿药资格和快速通道认定；SIGX1094联合氟泽雷塞治疗KRAS-G12C突变非小细胞肺癌的Ⅱ/Ⅲ期临床试验申请已获CDE受理。泛TEAD抑制剂SIGX2649已获FDA IND批件，已获得中美IND许可，有望成为全球首个靶向Hippo通路的泛TEAD上市药物。在小核酸领域，Kodexia™ 平台已形成6条siRNA项目管线，研发效率提升2倍以上，其中IgA肾病项目仅用7个月即获得优异NHP药效数据，活性与长效性均优于同靶点临床阶段参照分子。多肽板块的食品级口服功能肽Tensotide™已获美国Self-Affirmed GRAS认证，可合法用于食品及膳食补充剂，脑递送及口服环肽管线计划于2027年确定PCC。

表：晶泰科技核心管线及合作项目进展

管线/项目	模态	靶点/机制	适应症/方向	截至2026年10月阶段
SIGX1094	小分子	FAK/SRC双靶点抑制剂	弥漫型胃癌、晚期实体瘤	Ⅰ期临床招募中；联合氟泽雷塞的Ⅱ/Ⅲ期临床申请获CDE受理
SIGX2649	小分子	泛TEAD1-4抑制剂	实体瘤	已获中美IND许可，Ⅰ期启动准备阶段
Kodexia™ IgA肾病项目	siRNA	未披露	IgA肾病	已于立项9个月内确认PCC
Tensotide™	功能肽	未披露	食品及膳食补充剂原料	完成美国Self-Affirmed GRAS评估
脑递送/口服环肽项目	多肽	未披露	脑部递送、口服给药等	临床前发现阶段
DoveTree首个肿瘤项目	未披露	未披露	肿瘤	PCC已进入IND-enabling研究

数据来源：公司官网，中信建投证券

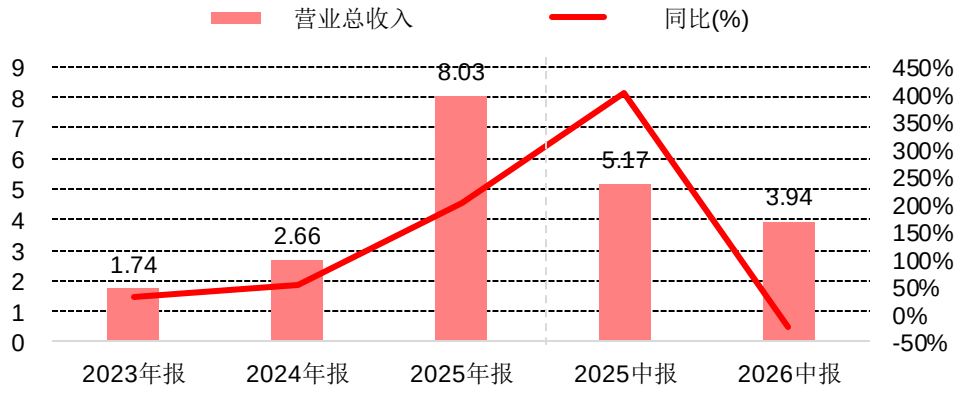
下载日志已记录，仅供内部参考

晶泰科技：平台收入快速增长，管线转化决定长期价值

- **商业化合作持续落地，收入仍具有较强的项目制特征。**2025年，晶泰科技实现收入8.03亿元，同比增长201.2%；净利润1.35亿元，首次实现全年盈利，成为港股AI for Science领域首家盈利的企业。2026年上半年收入3.94亿元，同比下降约23.9%，主要由于去年同期确认了DoveTree合作项目5100万美元首付款形成较高基数；剔除该因素后，收入同比增长73.8%。其中，AI4S智慧解决方案收入1.94亿元，同比增长136.4%。2026年上半年，晶泰科技完成礼来化合物管理系统、JW Pharmaceutical智能合成平台等项目交付，半标准化智能合成工作站已推广至13家客户。公司已与全球前20大药企中的17家开展合作，创收客户数量同比增长62%。

- **平台服务提供当期收入，管线权益决定中长期价值。**公司与DoveTree的合作总价值达59.9亿美元，晶泰已收到5,100万美元首付款和1,900万美元第二笔付款，首个肿瘤项目已进入IND-enabling阶段。与礼来的合作已由2023年的小分子药物发现扩展至双特异性抗体设计及平台授权，两项协议最高潜在金额分别为2.5亿美元和3.45亿美元。公司还于2018年与辉瑞签订十年战略合作协议，并参与Paxlovid核心成分奈玛特韦的晶型研究。

表：晶泰控股营业收入（亿元）



数据来源：公司官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

华深智药：AI抗体设计与实验验证一体化的生物药研发企业

- **华深智药（Earendil Labs）成立于2021年，是一家专注于人工智能驱动抗体及创新生物药研发的生物科技企业。**聚焦自身免疫、炎症和肿瘤领域，目标是开发同类首创（first-in-class）和同类最佳（best-in-class）疗法。公司由彭健博士创立，并与联合创始人、联席首席执行官朱祯平博士共同领导。彭健曾任美国伊利诺伊大学厄巴纳-香槟分校教授，长期从事人工智能、机器学习及结构生物学研究，带领团队开发了OmegaFold蛋白质结构预测算法；朱祯平曾任诺华制药蛋白质科学与设计全球负责人，并参与西妥昔单抗、雷莫芦单抗等治疗性药物的研发，拥有丰富的创新生物药开发经验。两位创始人分别具备AI算法与药物研发背景，形成从基础模型开发到临床研发的跨学科管理团队。

- **华深智药选择了自研管线驱动的模式，即以内部管线为资产核心，以平台能力为效率工具，通过对外授权实现商业化验证。**公司重点开发单克隆抗体、双特异性抗体、抗体偶联药物及其他新型蛋白质疗法，主要覆盖自身免疫、炎症及肿瘤等疾病领域。不同于单纯向药企提供AI软件的企业，华深智药更强调通过自主研发管线及全球药企合作，将AI技术直接转化为具有临床和商业价值的药物资产。

- **华深智药自2021年成立以来持续获得国内外风险投资及产业资本支持。**2021年10月，公司完成千万美元级天使轮融资，投资方包括襄禾资本、高瓴创投及清智资本；2022年6月完成近5亿元人民币A轮融资，由五源资本领投，高榕资本等机构参与。2026年3月，华深智药相关海外主体Earendil Labs宣布完成多轮融资，累计融资额达7.87亿美元，投资方包括Dimension Capital、DST Global、湀策资本、Luminous Ventures、赛诺菲，以及高瓴与辉瑞共同设立的Biotech Development Fund等。新资金将主要用于扩充AI研发团队、完善技术平台及推进创新抗体药物管线。

Earendil Labs

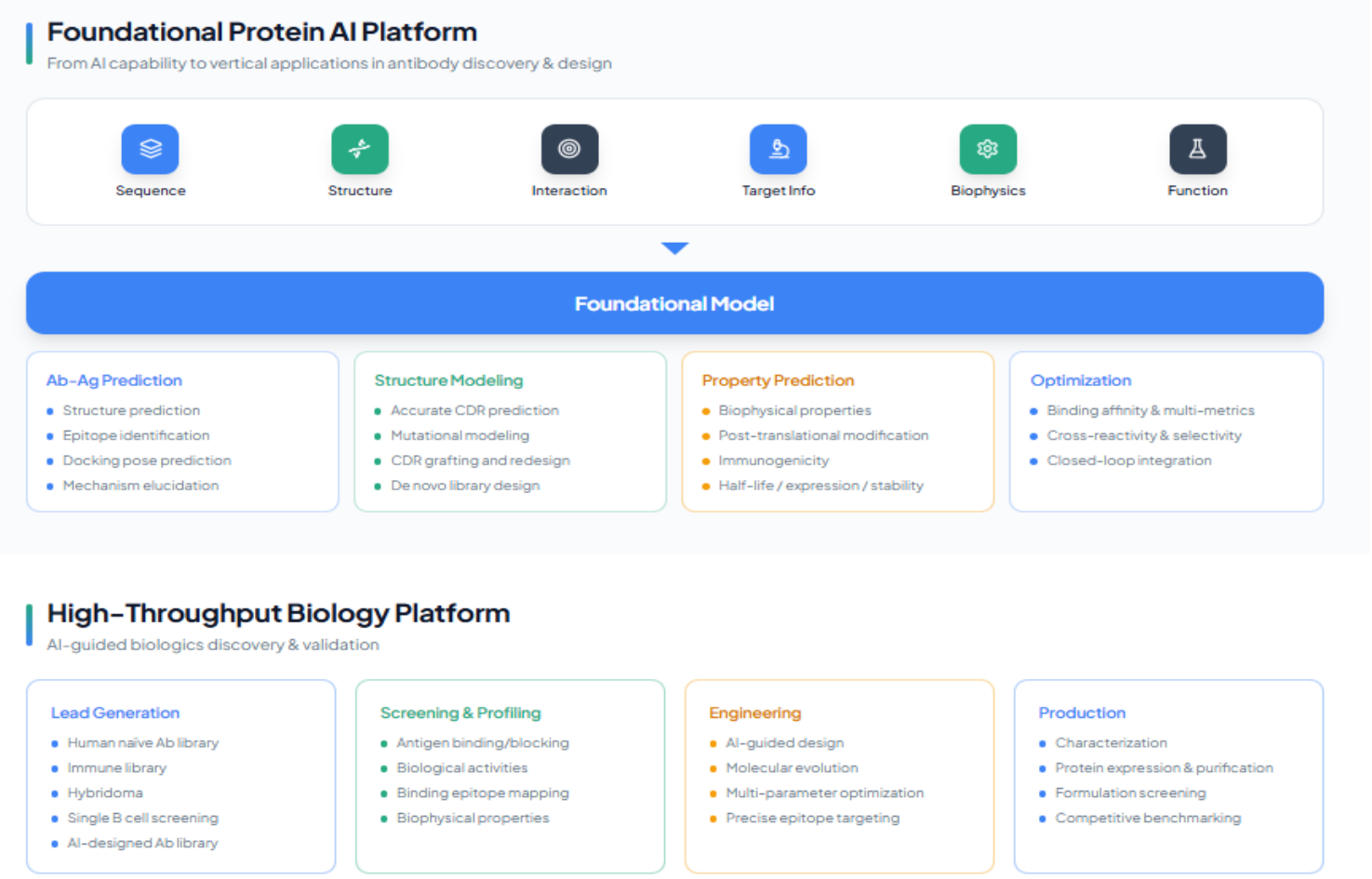
数据来源：华深智药，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

华深智药：蛋白质基础模型与高通量生物学平台

- Earendil Labs的技术平台由两个层级构成：上游为蛋白质基础模型，下游为高通量生物学平台，形成从计算设计到实验验证的一体化闭环。
- 上游基础模型系统整合序列、结构、分子相互作用、靶点信息、生物物理属性与功能数据，支持抗体-抗原相互作用预测、精准CDR建模与突变模拟、表位识别、分子对接姿态预测及作用机制解析。同时对亲和力、选择性、交叉反应性、免疫原性、稳定性、表达量与半衰期等关键可开发性指标进行多参数联合预测与优化，并通过闭环优化实现多目标协同提升。
- 下游高通量生物学平台覆盖从先导分子生成（人源初始库、免疫库、杂交瘤、单B细胞筛选及AI设计抗体库）到筛选与功能表征、分子工程与进化、表达纯化与制剂筛选的完整实验链条。

图：Earendil Labs蛋白质AI与高通量生物学平台架构



数据来源：华深智药，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

华深智药：多款管线有望陆续进入临床

➢ **公司AI平台已推动超过40个项目的启动和开发，计划于2026年和2027年提交多项IND申请。**核心管线HXN-1001是一款经过半衰期延长设计的抗TL1A抗体，已准备进入II期临床开发。HXN-1001在I期临床中，单剂量至1200毫克和多次剂量450毫克下均表现出良好的耐受性和安全性。管线布局以TL1A、TSLP、OX40L等已被临床验证的免疫靶点为核心，通过双抗/多抗形式进行功能叠加与差异化设计。其中HXN-1002（α4β7 × TL1A）和HXN-1003（TL1A × IL-23）已授权赛诺菲开发；呼吸系统疾病方向布局了HXN-1011（TSLP双表位抗体）、HXN-1012（TSLP × IL-13双抗）和HXN-1013（TSLP × IL-33双抗）。

➢ 2025年4月，赛诺菲以1.25亿美元首付款获得HXN-1002和HXN-1003的全球独家许可，里程碑付款总额达18.45亿美元。2026年1月，双方进一步扩大战略合作，将其平台应用于多个自身免疫性疾病及炎症性疾病研发项目，赛诺菲将支付最高1.6亿美元首付款及近期里程碑付款，交易总潜在金额最高达25.6亿美元。累计超44亿美元的授权和合作协议，使华深智药成为中国AI制药领域商业化验证最充分的公司之一。

图：Earendil Labs核心管线及研发进展

管线	靶点/机制	适应症	阶段
HXN-1001	抗TL1A单抗（半衰期延长）	溃疡性结肠炎、克罗恩病	II期临床
HXN-1002	α4β7 × TL1A双抗	炎症性肠病	授权赛诺菲
HXN-1003	TL1A × IL-23双抗	结肠炎、皮肤炎症	授权赛诺菲
HXN-1011	TSLP双表位抗体	哮喘、COPD	发现至IND-enabling
HXN-1012	TSLP × IL-13双抗	哮喘、COPD	发现至IND-enabling
HXN-1013	TSLP × IL-33双抗	哮喘、COPD	发现至IND-enabling
HXN-1021	OX40L单抗	特应性皮炎	发现至IND-enabling
HXN-1022	OX40L × IL-31双抗	特应性皮炎	发现至IND-enabling
HXN-1031	CD19 × BCMA × CD3三特异抗体	B细胞相关疾病	发现至IND-enabling

数据来源：华深智药，赛诺菲，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

金斯瑞：以生命科学服务为核心的全球生物技术平台

- 金斯瑞生物科技成立于2002年，2015年在港交所上市，业务主要包括生命科学服务、蓬勃生物CRDMO和百斯杰工业合成生物学三大板块，并持有传奇生物的重要股权。公司从基因合成起家，目前已经将服务范围延伸至蛋白表达、抗体开发、多肽及核酸合成、实验室仪器，以及生物药工艺开发和生产。
- **生命科学集团是金斯瑞当前最核心的经营利润贡献板块，也是AIDD直接贡献收入和利润的板块。**2026年上半年，该板块实现收入3.19亿美元，同比增长28.8%，占集团收入约78%；调整后毛利率达到57.8%，调整后经营利润为9,402万美元。Gene-to-Protein业务约占生命科学集团收入的66%。
- 金斯瑞的特点是具备同时覆盖基因合成、蛋白表达、实验检测和后续药物开发的一体化服务能力。AI制药兴起后，公司原有业务由单项科研服务进一步转向从序列到实验数据的一体化服务，生命科学板块也从传统科研工具供应商逐渐成为AI药物发现的基础设施提供者。

表：金斯瑞业务

业务板块	主要业务	AI制药中的作用	2025年收入	2026H1收入
生命科学集团	基因、蛋白、抗体、多肽及仪器	生成实验样品和AI训练数据	5.22亿美元	3.19亿美元
蓬勃生物	抗体、质粒、病毒载体、mRNA CRDMO	承接候选分子的CMC和临床开发	3.89亿美元	0.61亿美元
百斯杰	工业酶及合成生物学	AI辅助酶工程和产业化	0.58亿美元	0.30亿美元
传奇生物	细胞治疗	重要权益资产，不属于集团并表业务	/	/

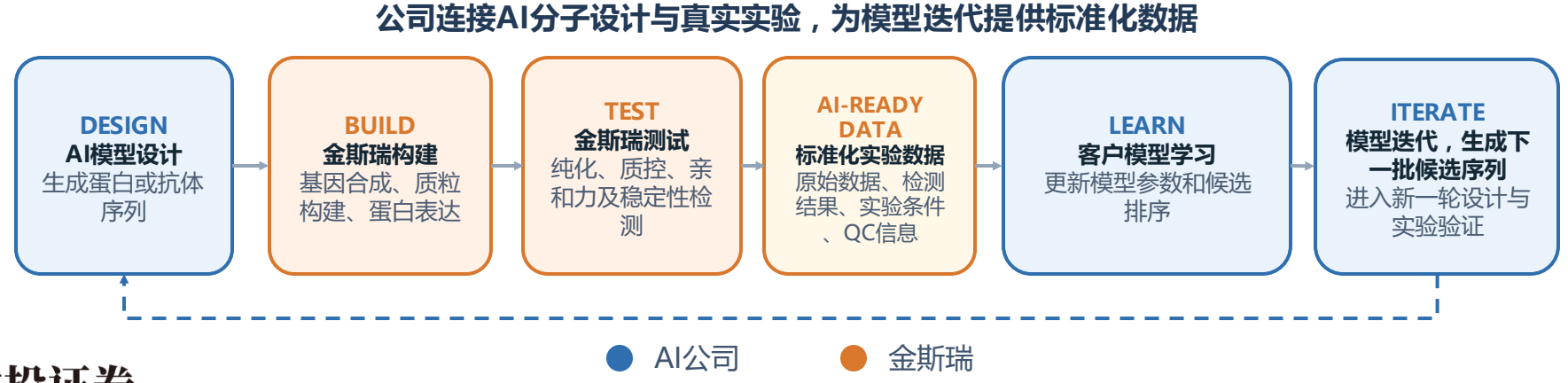
数据来源：公司官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

金斯瑞：连接数字设计与真实实验

- **Sequence-to-Data：金斯瑞将AI序列转化为可训练的实验数据。**AI模型可以快速生成大量蛋白、抗体和小型结合蛋白序列，但这些序列本质上仍是计算机提出的假设。研究人员需要通过基因合成、蛋白表达和功能检测，判断候选分子能否正确表达、是否与靶点结合、稳定性和成药性是否满足要求。随着AI生成能力提高，药物发现的部分瓶颈开始由“设计不出分子”转向“无法快速验证大量分子”。金斯瑞主要处于DBTL闭环中的构建和测试环节。AI客户提供候选序列，金斯瑞完成基因构建、蛋白表达、纯化和检测，再把亲和力、表达量、稳定性及实验条件等信息整理为标准化数据，返回客户模型进行下一轮训练。
- **对AI客户而言，交付速度和数据一致性比单个样品的最低价格更重要。**部分模型约两周迭代一次，如果湿实验需要数周甚至数月，实验环节就会拖慢模型训练。金斯瑞公开的快速筛选方案可以针对VHH、miniprotein等特定类型，在最快4个自然日内完成Sequence-to-Data；更完整的可开发性检测通常需要7-10天，复杂IgG项目的周期相对更长。金斯瑞由此将传统按单个样品收费的科研服务，逐步升级为按批次、检测项目及数据点收费的数据生成服务。根据公司披露，2026年上半年AIDD业务同比翻倍，并连续第三个半年度保持快速增长。

图：金斯瑞连接AI分子设计与实验验证的Sequence-to-Data闭环



数据来源：公司官网，中信建投证券

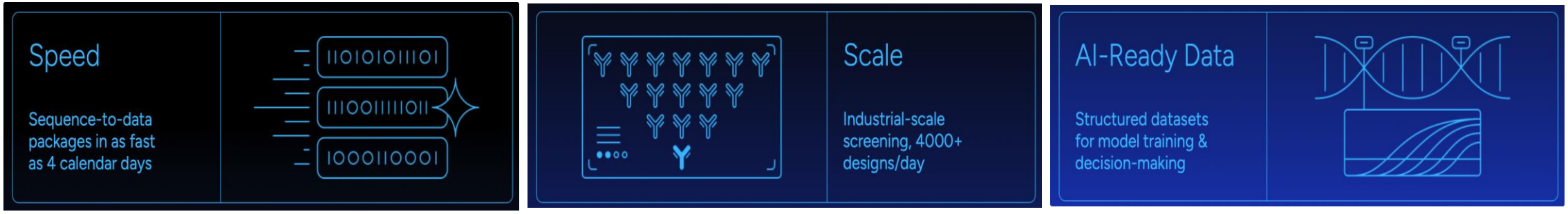
下载日志已记录，仅供内部参考

金斯瑞：一体化、自动化、标准化，构筑护城河

金斯瑞具备成为AI制药核心湿实验基础设施供应商的潜力。公司已经拥有成熟的基因和蛋白业务、较大的全球客户基础，以及可复制的自动化生产单元。当订单增加时，产能利用率提升和数字化交付有望带来经营杠杆。公司保持相对中立的服务商定位，不直接与AI制药客户争夺药物资产，有利于同时服务多家模型公司和药企。具体护城河可拆分如下：

- **公司护城河1：一体化工艺。**目前公司已建立基因合成、蛋白表达、检测和数据交付稳定连接的生产体系，并积累了密码子优化、表达路线选择、培养和转染条件、试剂配方、自动化控制及质量管理等工艺经验。
- **公司护城河2：自动化生产和规模效应。**AI客户一次可能提交数百至数千条序列，传统依赖人工操作的实验室难以同时满足速度、成本和批次一致性要求。金斯瑞将标准化SOP嵌入自动化产线，并通过96孔、384孔板和数字订单系统提高处理能力。
- **公司护城河3：客户切换成本。**模型对实验数据分布十分敏感，中途更换供应商可能引入试剂、仪器和操作流程差异。因此，完成初始测试并进入客户训练流程后，金斯瑞有机会获得持续订单。

图：金斯瑞AIDD解决方案



金斯瑞官网标准化方案：VHH、miniprotein等适合无细胞表达的快速筛选项目，最快4个自然日形成Sequence-to-Data；无细胞表达平台披露通量约2,000个样品/日；更完整的developability方案通常需要7-10天；500个IgG表达并完成定制检测的案例用时约15个工作日。

数据来源：公司官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

金斯瑞：加入礼来TuneLab生态

- 金斯瑞生物科技于2026年9月正式加入礼来TuneLab生态，成为该平台非临床测试服务又一提供商。金斯瑞角色定位为以高通量湿实验为核心的验证与数据闭环伙伴，这与Charles River侧重于非临床测试（如毒理、药代）的角色形成互补。金斯瑞生物科技作为“湿实验验证服务”的提供商，为TuneLab的参与公司提供抗体表达、蛋白生产、亲和力检测等高通量、标准化的生物学验证服务。
- 生态圈的合作伙伴在TuneLab平台上，借助AI能快速生成海量候选分子，但传统的实验验证流程无法匹配其速度。金斯瑞恰好定位为解决这一瓶颈的“卖铲人”。金斯瑞已构建了“设计-构建-测试-学习（DBTL）”闭环平台，其核心能力与TuneLab的需求高度契合。其Gene-to-Protein平台能将AI生成序列到模型可用数据的交付周期压缩至最快4天，远超传统数周的验证周期，这对于TuneLab加速早期药物发现至关重要。

GenScript Scripting Possibilities | Lilly TuneLab™

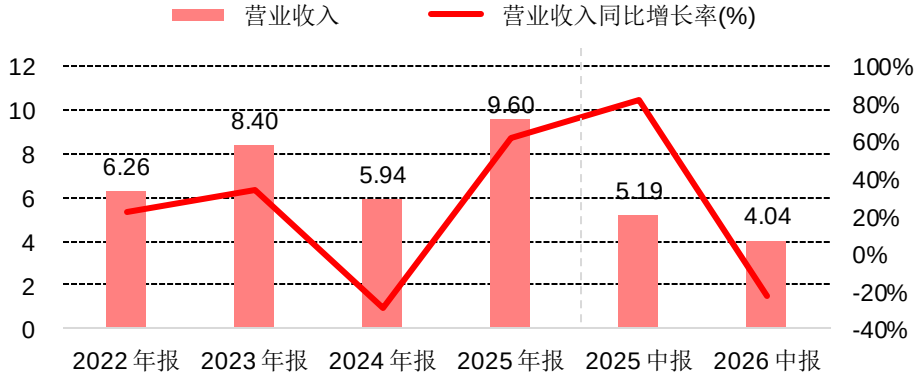
数据来源：Lilly TuneLab，公司官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

金斯瑞：AIDD需求带动核心业务增长，配售募资加快湿实验产能建设

- 目前，AIDD需求已开始体现为收入增长和利润率改善。2026年上半年，金斯瑞核心业务实现收入4.04亿美元，同比增长27.3%；经调整净利润6,252万美元，同比增长203.3%。其中，生命科学事业群收入3.19亿美元，同比增长28.8%；经调整经营利润9,402万美元，同比增长102.8%，经营利润率由18.7%提升至29.5%。Gene-to-Protein业务约占该事业群收入的66%，AIDD相关业务收入同比翻倍，成为生命科学业务增长的重要来源。
- 配售资金主要投向AIDD湿实验能力，扩产方向与当前需求增长一致。2026年9月，金斯瑞完成7,712.6万股新股配售，配售价为每股30.50港元，净募资约23.27亿港元。其中约70%用于建设自动化高通量湿实验室、购置设备及升级实验室，约20%用于AIDD相关研发、数字化流程整合及全球业务拓展，其余10%用于一般公司用途及营运资金。
- 我们认为，金斯瑞正由传统生命科学服务商向AIDD实验基础设施提供商延伸。TuneLab等平台合作扩大客户入口，基因至蛋白业务承接实验验证需求，本次募资则进一步补充高通量实验产能。

表：金斯瑞营业收入（亿美元）



注：1H25收入含USD214mn 礼新BD收入

表：金斯瑞配售募资用途

募集资金用途	占比	对应金额
AIDD产能及基础设施	70%	约16.29亿港元
研发、数字化及全球业务拓展	20%	约4.65亿港元
一般公司用途及营运资金	10%	约2.33亿港元

数据来源：Lilly TuneLab，公司官网，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

Twist：以DNA合成为底座的高通量生物研发平台

- **Twist Bioscience是一家以硅基DNA合成技术为底座的合成生物学工具与服务公司。**目前，公司业务已经由寡核苷酸、基因和基因片段，延伸至蛋白表达、抗体文库、抗体发现与表征，并同时提供NGS样本制备工具，形成覆盖DNA、蛋白和生物药发现的产品与服务体系。
- **在AI制药产业链中，Twist主要承接DBTL闭环中的“构建”和部分“测试”环节。**AI模型生成蛋白或抗体序列后，Twist利用高通量DNA合成能力将数字序列转化为实体DNA，并进一步提供蛋白及抗体表达、亲和力和稳定性等实验表征。实验结果可以作为标签数据反馈给客户，用于模型训练、候选分子排序和下一轮设计优化。
- 与覆盖基因合成、蛋白表达、检测及后续生物药开发的综合型服务平台相比，Twist的核心优势更集中于DNA的大规模制造和构建能力。随着AI模型单轮生成的候选序列由数百条增加至数千乃至数万条，DNA合成、蛋白表达和高通量表征逐渐成为研发效率的重要约束，**Twist有望由DNA供应商进一步向AI药物发现实验基础设施和数据生成平台延伸。**

表：Twist业务

业务板块	主要产品与服务	AI制药中的作用	3QFY26收入
DNA Synthesis and Protein Solutions	寡核苷酸、基因、基因片段、蛋白表达、抗体发现与表征	将AI序列转化为DNA及蛋白，生成实验标签数据	5,660万美元，同比增长39%
NGS Applications	靶向富集、文库制备及相关工作流工具	支持基因组数据生成，属于AI制药外围数据工具	6,180万美元，同比增长12%
公司整体	两大业务共享硅基DNA合成及规模化生产平台	覆盖“数据输入-实体构建-实验反馈”多个环节	1.184亿美元，同比增长23%

数据来源：Twist公司官网，2026年投资者日材料，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

Twist：公司已形成较为标准化的AI客户合作路径

Twist公司已形成较为标准化的AI客户合作路径，覆盖从小规模实验验证、模型训练与迭代、通用模型构建，到候选药物发现与优化的多个阶段。随着客户模型和研发项目逐步成熟，单个项目的实验规模可由百级逐步放大至数万乃至数十万条序列。

- **a. Pilot验证阶段**：AI客户在首次与Twist合作时，通常首先通过小规模项目验证Twist实验平台的数据质量、重复性以及与自身模型和既有数据体系的兼容性，而不一定已经完成成熟的基础模型开发。该阶段通常选择数十至数百条具有已知性质或已有内部数据的序列进行合成、表达及表征，并将Twist产生的数据与客户既有实验结果进行benchmark，以验证实验平台的准确性和稳定性。项目整体规模较小、周期通常为数周，投入约1万–10万美元，核心目的并非训练模型本身，而是完成数据和实验平台的“资格验证”，为后续扩大数据生成规模奠定基础。
- **b. 模型训练与迭代阶段**：Pilot验证通过后，客户开始利用Twist生成的实验数据开展针对特定蛋白、靶点或性质的模型训练与优化，单轮项目规模通常由数千条扩展至数万条序列。Twist按照客户设计完成DNA合成、蛋白表达及相关生物物理或功能表征，将结构化实验结果反馈给客户，用于训练模型并评价模型预测能力。单轮项目周期通常仍可控制在数周，项目投入一般低于100万美元。由于模型预测能力往往需要通过连续的“设计-实验-再训练”循环提升，客户通常会进行2～5轮迭代，根据上一轮实验结果重新设计下一批序列。
- **c. 文库构建与基础模型训练阶段**：在完成针对单一靶点或单一任务的模型训练和验证后，部分客户会进一步扩大训练数据的规模和多样性，由针对特定蛋白的任务模型向具有更强泛化能力的模型扩展。此时实验不再围绕单一蛋白或单一性质，而是覆盖多个蛋白家族、多个靶点及更广泛的序列空间，单个项目可包含数万至数十万条序列。
- **d. 疗法开发阶段**：当客户模型已经具备较好的生成和预测能力后，研发重点由“用实验数据训练模型”逐渐转向“利用模型生成候选药物并进行实验验证”。客户通常可针对一个或多个治疗靶点生成数百至数千条候选序列，Twist负责将计算设计转化为实体分子，并完成表达、纯化以及亲和力、稳定性、聚集性、可开发性和特定功能等体外表征，以快速筛选和排序AI生成的候选分子。这一阶段单轮实验仍可在数周内完成，项目投入通常低于100万美元；实验结果随后重新反馈给AI模型进行候选优化，经过多轮设计-测试后逐步收敛至少量高质量候选物，支持客户完成lead identification / lead optimization，并进一步进入其自身的候选药物提名及后续临床前开发流程。

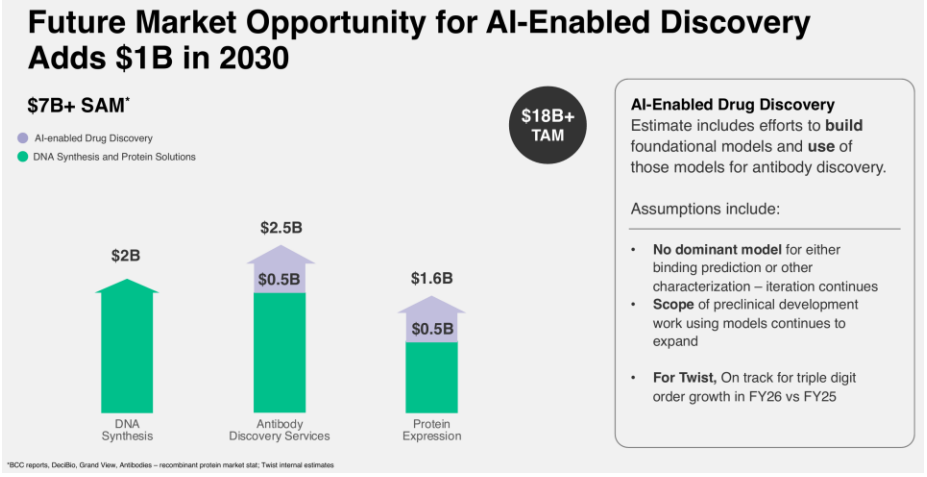
数据来源：Twist，2026年投资者日材料，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

Twist：AI相关订单高速增长，有望持续转化为收入增量

- **AI不会简单替代湿实验，而是显著扩大“设计-构建-测试-迭代”的实验量。**随着蛋白语言模型、生成式抗体模型的发展，客户可以一次产生远多于传统研发模式的候选序列，但这些序列仍需要被真正合成为DNA、表达成蛋白/抗体，并通过结合、功能和可开发性实验产生标签，再反馈给模型进行下一轮优化。因此，AI模型应用有望直接拉动Twist的DNA合成、抗体发现及蛋白表达业务。公司预计，到2030年，AI-enabled discovery可在现有市场基础上额外增加约10亿美元SAM，其中抗体发现服务和蛋白表达分别增加约5亿美元市场机会。
- **最新公开交流显示，AI相关订单增长的可见度进一步提升。**2025年，公司来自AI及科技类客户的订单增量约2,500万美元，占公司约6,600万美元订单增量的38%。在2026年9月Baird会议上，基于客户由小规模试点逐步转向大规模模型建设，并进一步形成常态化AI药物发现需求，公司预计2026年AI相关订单有望实现三位数同比增长，2027年有望再次实现三位数增长。投资者日指引显示FY2027-31年收入复合增速约15%

图：AI药物发现为Twist带来约10亿美元增量市场空间



数据来源：Twist，Baird Global Healthcare Conference，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

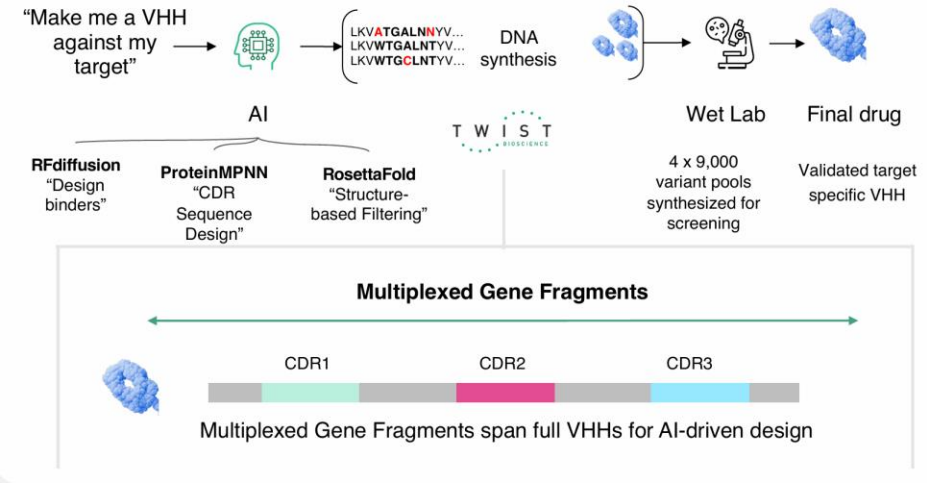
Twist与Baker Lab，高通量DNA合成打通VHH的实验验证闭环

- **Baker Lab与Twist合作，Baker Lab负责AI设计，Twist承接规模化“构建”环节。**Baker Lab基于RFdiffusion模型，从给定抗原结构和目标表位出发，直接生成VHH的CDR三维构象、结合姿态和对应氨基酸序列，并结合ProteinMPNN完成序列设计，再利用结构预测模型进行计算筛选。Twist则将模型生成的大量数字序列批量合成为可供实验筛选的DNA材料，推动候选分子从计算设计进入湿实验验证。

- **Twist将约3.6万条AI设计序列转化为可筛选的VHH文库。**Baker Lab围绕4个靶点分别设计约9,000条VHH，Twist提供覆盖完整VHH编码序列、长度约400 bp的多重化基因片段，支持后续酵母展示和高通量筛选。其硅基DNA合成平台解决了数万条不同序列并行构建的效率和成本问题。

- **合作验证了Twist在AI制药中的关键价值。**该项目针对RSV、流感HA、SARS-CoV-2 RBD及TcdB等靶点获得了经实验验证的候选VHH，部分分子经定向进化和亲和力成熟后达到nM至亚nM级亲和力。案例表明，AI扩大候选序列供给后，DNA合成和实验筛选需求同步增加，Twist成为连接AI设计与湿实验验证的重要基础设施。

图：Twist的VHH设计与高通量湿实验验证流程



数据来源：Nature，Twist，中信建投证券

下载日志已记录，仅供内部参考

PART 5

风险提示

下载日志已记录，仅供内部参考

风险提示

- **投融资不及预期风险：**医药行业研发周期较长、资金投入较大，若资本市场环境变化、投资机构风险偏好下降或企业融资进度不及预期，可能影响企业研发投入、管线推进及商业化进程。
- **行业政策风险：**因为行业政策调整带来的研究设计要求变化、价格变化、带量采购政策变化、医保报销范围及比例变化的风险。尤其是集采、医保支付政策的变化，对行业发展预期影响较大。
- **研发不及预期风险：**新药和器械在研发过程中，存在临床入组进度不确定、疗效结果及安全性结果数据不确定的风险。
- **审批不及预期风险：**审批过程中存在资料补充、审批流程变化因素导致的审批周期延长的风险。
- **销售不及预期风险：**药品上市后的销售表现受临床价值、市场准入、医保覆盖、定价、医生及患者认可度等因素影响，可能存在市场推广进度或销售收入不及预期的风险。
- **市场竞争加剧风险：**随着更多企业进入相关领域，同类靶点、技术路线及产品管线可能趋于集中，若竞品研发进度、临床数据、定价或商业化能力领先，可能导致企业市场份额、产品价格及盈利能力承压。

下载日志已记录，仅供内部参考

分析师声明

本报告署名分析师在此声明：（i）以勤勉的职业态度、专业审慎的研究方法，使用合法合规的信息，独立、客观地出具本报告，结论不受任何第三方的授意或影响。（ii）本人不曾因，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收到任何形式的补偿。

法律主体说明

本报告由中信建投证券股份有限公司及/或其附属机构（以下合称“中信建投”）制作，由中信建投证券股份有限公司在中华人民共和国（仅为本报告目的，不包括香港、澳门、台湾）提供。中信建投证券股份有限公司具有中国证监会许可的投资咨询业务资格，本报告署名分析师所持中国证券业协会授予的证券投资咨询执业资格证书编号已披露在报告首页。

在遵守适用的法律法规情况下，本报告亦可能由中信建投（国际）证券有限公司在香港提供。本报告作者所持香港证监会牌照的中央编号已披露在报告首页。

一般性声明

本报告由中信建投制作。发送本报告不构成任何合同或承诺的基础，不因接收者收到本报告而视其为中信建投客户。

本报告的信息均来源于中信建投认为可靠的公开资料，但中信建投对这些信息的准确性及完整性不作任何保证。本报告所载观点、评估和预测仅反映本报告出具日该分析师的判断，该等观点、评估和预测可能在不发出通知的情况下有所变更，亦有可能因使用不同假设和标准或者采用不同分析方法而与中信建投其他部门、人员口头或书面表达的意见不同或相反。本报告所引证券或其他金融工具的过往业绩不代表其未来表现。报告中所含任何具有预测性质的内容皆基于相应的假设条件，而任何假设条件都可能随时发生变化并影响实际投资收益。中信建投不承诺、不保证本报告所含具有预测性质的内容必然得以实现。

本报告内容的全部或部分均不构成投资建议。本报告所包含的观点、建议并未考虑报告接收人在财务状况、投资目的、风险偏好等方面的具体情况，报告接收者应当独立评估本报告所含信息，基于自身投资目标、需求、市场机会、风险及其他因素自主做出决策并自行承担投资风险。中信建投建议所有投资者应就任何潜在投资向其税务、会计或法律顾问咨询。不论报告接收者是否根据本报告做出投资决策，中信建投都不对该等投资决策提供任何形式的担保，亦不以任何形式分享投资收益或者分担投资损失。中信建投不对使用本报告所产生的任何直接或间接损失承担责任。

在法律法规及监管规定允许的范围内，中信建投可能持有并交易本报告中所提公司的股份或其他财产权益，也可能在过去12个月、目前或者将来为本报告中所提公司提供或者争取为其提供投资银行、做市交易、财务顾问或其他金融服务。本报告内容真实、准确、完整地反映了署名分析师的观点，分析师的薪酬无论过去、现在或未来都不会直接或间接与其所撰写报告中的具体观点相联系，分析师亦不会因撰写本报告而获取不当利益。

本报告为中信建投所有。未经中信建投事先书面许可，任何机构和/或个人不得以任何形式转发、翻版、复制、发布或引用本报告全部或部分内容，亦不得从未经中信建投书面授权的任何机构、个人或其运营的媒体平台接收、翻版、复制或引用本报告全部或部分内容。版权所有，违者必究。

中信建投证券研究发展部

北京
朝阳区景辉街16号院1号楼18层
电话：（8610）8513-0588
联系人：李祉瑶
邮箱：lizhiyao@csc.com.cn

上海
浦东新区浦东南路528号南塔2103室
电话：（8621）6882-1600
联系人：翁起帆
邮箱：wengqifan@csc.com.cn

深圳
福田区福中三路与鹏程一路交汇处广电金融中心35楼
电话：（86755）8252-1369
联系人：曹莹
邮箱：caoying@csc.com.cn

中信建投（国际）

香港
中环交易广场2期18楼
电话：（852）3465-5600
联系人：刘泓麟
邮箱：charleneliu@csci.hk

中信建投证券 CHINA SECURITIES

下载日志已记录，仅供内部参考

分析师介绍

袁清慧：中信建投研究发展部医药及大健康组长，医药行业首席分析师。中山大学理学本科，佐治亚州立大学理学硕士，北卡大学教堂山分校医学院研究学者。2018年加入中信建投证券研究发展部。2020年-2023年新财富最佳分析师医药行业入围、第5名、第4名、第3名团队核心成员，2024-2025年证券时报医药行业最佳分析师第2名团队核心成员。2024年-2025年新浪金麒麟创新药行业最佳分析师第1名、第2名。

成雨佳 chengyujia@csc.com.cn

王云鹏 wangyunpeng@csc.com.cn

评级说明

投资评级标准		评级	说明
报告中投资建议涉及的评级标准为报告发布日后6个月内的相对市场表现，也即报告发布日后的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。A股市场以沪深300指数作为基准；新三板市场以三板成指为基准；香港市场以恒生指数作为基准；美国市场以标普 500 指数为基准。	股票评级	买入	相对涨幅15%以上
		增持	相对涨幅5%—15%
		中性	相对涨幅-5%—5%之间
		减持	相对跌幅5%—15%
		卖出	相对跌幅15%以上
	行业评级	强于大市	相对涨幅10%以上
		中性	相对涨幅-10-10%之间
		弱于大市	相对跌幅10%以上