

# 人工智能药物研发 系列研究报告

## 报告导读：

近年来，随着我国技术的不断革新和发展，以及人工智能和医药研发领域利好政策的不断出台，给制药公司的传统商业模式带来了挑战和机遇。目前，人工智能被主要应用在新药研发的靶点发现和化合物筛选环节，能有效提高新药研发的成功率，为生物制药行业节省数十亿美元。在部分发达国家，已有 AI 研发的药物处于临床阶段，而我国在该领域处于发展初期，技术能力存在不足，但市场潜力巨大，属于值得投资者关注的蓝海领域。

## 投资要点：

- 仅以 AI 技术作为药物研发的辅助的公司：由于进入行业的壁垒不高，技术上以迭代为主，市场潜力不大，所以不建议投资；
- 提供 AI+药物研发外包服务的公司：部分公司是刚从第一阶段过渡到第二阶段，模式还不成熟，针对目前处于该阶段且有向第三阶段发展趋势的公司，建议深入了解公司是否有研发成果，作为评估投资价值的依据；
- 利用 AI 进行药物的自主研发的公司：目前无论国内外都没有完全利用人工智能技术研发出的药物上市，建议中长期观望公司和行业的发展状况，看未来是否有药物上市的可能。

保密信息，请勿外传

## 正文目录

<b>1.</b>	<b>人工智能药物研发行业概述</b>	<b>1</b>
1.1.	核心要素简介	1
1.1.1.	人工智能	1
1.1.1.1	人工智能定义	1
1.1.1.2	人工智能的发展和特点	3
1.1.2.	药物研发过程	3
1.1.2.1	发现阶段—药物作用靶点以及生物标记的选择与确认	4
1.1.2.2	发现阶段—先导化合物的确定	4
1.1.2.3	发现阶段—构效关系的研究与活性化合物的筛选	4
1.1.2.4	发现阶段—候选药物的选定	4
1.1.2.5	研发阶段—化学、制造和控制	4
1.1.2.6	研发阶段—评估药物药理	5
1.1.2.7	研发阶段—制剂开发	5
1.2.	人工智能药物研发主要应用场景	5
1.2.1.	靶点药物研发	6
1.2.2.	药物挖掘	6
1.2.3.	化合物合成与筛选	6
1.2.4.	预测 ADMET 性质	7
1.2.5.	药物晶型预测	7
1.2.6.	病理生物学研究	7
1.2.7.	药物重定位	8
1.3.	发展历程和现状	8
1.3.1.	发展历程	8
1.3.2.	发展现状	9
1.4.	相关政策法规	10
<b>2.</b>	<b>行业分析</b>	<b>11</b>
2.1.	行业的产业链分布	11
2.2.	行业主体及业务布局	12
2.2.1.	行业主体与主要业务模式	12
2.2.2.	主要企业和业务布局	13
2.3.	行业特点与痛点	14
2.3.1.	行业特点	14
2.3.2.	行业痛点	15
2.4.	市场规模分析	16
2.4.1.	政府的大力支持	16
2.4.2.	人工智能的研究进展	16
2.4.3.	生物医药的加速创新	17
2.4.4.	生物医药行业发展状况	18
2.4.5.	人工智能医疗行业的发展趋势	19
2.4.6.	市场规模预测	20
2.5.	竞争分析	22
2.5.1.	人工智能药物研发行业竞争态势	22
2.5.1.1	现有竞争者	22
2.5.1.2	潜在进入者	23
2.5.1.3	上下游议价能力	24
2.5.1.4	替代品威胁	26

2.5.1.5 竞争分析总结 .....	27
2.5.2. 市场集中度分析 .....	27
2.5.2.1 中国市场市场集中度 .....	28
2.5.2.2 影响市场集中度的主要因素 .....	28
2.5.3. 人工智能药物研发行业核心竞争力总结 .....	28
<b>3. 主要公司分析 .....</b>	<b>29</b>
<b>3.1. 国外上市公司 .....</b>	<b>29</b>
3.1.1. Lantern Pharma .....	29
3.1.1.1 公司简介 .....	29
3.1.1.2 公司融资历史 .....	29
3.1.1.3 公司股权结构 .....	30
3.1.1.4 公司管理层简介 .....	30
3.1.1.5 公司主要产品及业务 .....	31
3.1.1.6 公司财务分析 .....	33
3.1.1.7 总结 .....	33
3.1.2. Schrodinger .....	34
3.1.2.1 公司简介 .....	34
3.1.2.2 公司融资历史 .....	34
3.1.2.3 公司股权结构 .....	35
3.1.2.4 公司管理层简介 .....	36
3.1.2.5 公司主要产品及业务 .....	38
3.1.2.6 公司财务分析 .....	40
3.1.2.7 总结 .....	41
3.1.3. Relay Therapeutics .....	41
3.1.3.1 公司简介 .....	41
3.1.3.2 公司融资历史 .....	41
3.1.3.3 公司股权结构 .....	42
3.1.3.4 公司管理层简介 .....	42
3.1.3.5 公司主要产品及业务 .....	43
3.1.3.6 公司财务分析 .....	45
3.1.3.7 总结 .....	46
3.1.4. Berkeley Lights .....	46
3.1.4.1 公司简介 .....	46
3.1.4.2 公司融资历史 .....	47
3.1.4.3 公司股权结构 .....	47
3.1.4.4 公司管理层简介 .....	48
3.1.4.5 公司主要产品及业务 .....	49
3.1.4.6 公司财务分析 .....	49
3.1.4.7 总结 .....	50
<b>3.2. 国外代表公司 .....</b>	<b>50</b>
3.2.1. Exscientia .....	50
3.2.1.1 公司简介 .....	50
3.2.1.2 公司融资历史 .....	50
3.2.1.3 公司管理层简介 .....	51
3.2.1.4 公司主要产品及业务 .....	53
3.2.1.5 总结 .....	56
3.2.2. GNS Healthcare .....	56
3.2.2.1 公司简介 .....	56
3.2.2.2 公司融资历史 .....	56
3.2.2.3 公司管理层简介 .....	57
3.2.2.4 公司主要产品及业务 .....	58

3.2.2.5 总结	59
3.2.3. Iktos	59
3.2.3.1 公司简介	59
3.2.3.2 公司融资历史	59
3.2.3.3 公司管理层简介	60
3.2.3.4 公司主要产品及业务	60
3.2.3.5 总结	60
3.2.4. Atomwise	61
3.2.4.1 公司简介	61
3.2.4.2 公司融资历史	61
3.2.4.3 公司管理层简介	62
3.2.4.4 公司主要产品及业务	62
3.2.4.5 总结	64
3.2.5. Numerate (2019 年被 Valo 收购)	64
3.2.5.1 公司简介	64
3.2.5.2 公司融资历史	64
3.2.5.3 公司管理层简介	65
3.2.5.4 公司主要产品及业务	65
3.2.5.5 总结 (Valo Health)	66
3.2.6. InSilico Medicine	66
3.2.6.1 公司简介	66
3.2.6.2 公司融资历程	67
3.2.6.3 公司管理层简介	68
3.2.6.4 公司主要产品及业务	68
3.2.6.5 总结	70
<b>3.3. 国内代表公司</b>	<b>70</b>
3.3.1. 晶泰科技 (估值: 104 亿人民币)	70
3.3.1.1 公司简介	70
3.3.1.2 公司融资历史	71
3.3.1.3 公司管理层简介	72
3.3.1.4 公司主要产品及业务	72
3.3.1.5 总结	73
3.3.2. 太美医疗 (估值: 72 亿人民币)	73
3.3.2.1 公司简介	73
3.3.2.2 公司融资历史	73
3.3.2.3 公司管理层简介	74
3.3.2.4 公司主要产品及业务	75
3.3.2.5 总结	76
3.3.3. 深度智耀 (估值: 4.88 亿人民币)	76
3.3.2.1 公司简介	76
3.3.2.2 公司融资历史	76
3.3.2.3 公司管理层简介	77
3.3.2.4 公司主要产品及业务	78
3.3.2.5 总结	79
3.3.4. AccutarBio (估值: 9.75 亿人民币)	79
3.3.3.1 公司简介	79
3.3.3.2 公司融资历史	79
3.3.3.3 公司管理层简介	80
3.3.3.4 公司主要产品及业务	80
3.3.3.5 总结	81
3.3.5. 云势软件 (估值: 3.25 亿; 2021 年 6 月被腾讯并购)	81
3.3.4.1 公司简介	81

3.3.4.2 公司融资历史	81
3.3.4.3 公司管理层简介	82
3.3.4.4 公司主要产品及业务	83
3.3.4.5 总结	83
<b>3.4. 国内标的公司</b>	<b>84</b>
3.4.1. 智药科技	84
3.4.1.1 公司简介	84
3.4.1.2 公司融资历史	84
3.4.1.3 公司管理层简介	84
3.4.1.4 公司主要产品及业务	85
3.4.1.5 总结	87
3.4.2. 亿药科技	87
3.4.2.1 公司简介	87
3.4.2.2 公司融资历史	87
3.4.2.3 公司管理层简介	88
3.4.2.4 公司主要产品及业务	88
3.4.2.5 总结	89
3.4.3. 宇道生物	89
3.4.3.1 公司简介	89
3.4.3.2 公司融资历史	90
3.4.3.3 公司管理层简介	90
3.4.3.4 公司主要产品及业务	91
3.4.3.5 总结	91
3.4.4. 望石智慧	92
3.4.4.1 公司简介	92
3.4.4.2 公司融资历史	92
3.4.4.3 公司管理层简介	93
3.4.4.4 公司主要产品及业务	93
3.4.4.5 总结	94
3.4.5. 燧坤智能	94
3.4.5.1 公司简介	94
3.4.5.2 公司融资历史	94
3.4.5.3 公司管理层简介	95
3.4.5.4 公司主要产品及业务	95
3.4.5.5 总结	96
3.4.6. 剂泰医药	96
3.4.6.1 公司简介	96
3.4.6.2 公司融资历史	97
3.4.6.3 公司管理层简介	97
3.4.6.4 公司主要产品及业务	98
3.4.6.5 总结	99
3.4.7. 费米子	99
3.4.7.1 公司简介	99
3.4.7.2 公司融资历史	99
3.4.7.3 公司管理层简介	100
3.4.7.4 公司主要产品及业务	100
3.4.7.5 总结	101
3.4.8. 星药科技	101
3.4.8.1 公司简介	101
3.4.8.2 公司融资历史	102
3.4.8.3 公司管理层简介	103
3.4.8.4 公司主要产品及业务	103

3.4.8.5 总结 .....	103
3.4.9. 英飞智药 .....	103
3.4.9.1 公司简介 .....	103
3.4.9.2 公司融资历史 .....	104
3.4.9.3 公司管理层简介 .....	104
3.4.9.4 公司主要产品及业务 .....	104
3.4.9.5 总结 .....	105
4. 投资建议 .....	105

保密信息，请勿外传

## 图表目录

图 1: 核心要素导图.....	1
图 2: 人工智能方法域.....	1
图 3: 架构角度上 RNN 和 ANN 的区别.....	2
图 4: 不同神经网络之间的区别.....	3
图 5: 药品研发的不同阶段.....	4
图 6: 人工智能在医药研发领域具体研究方向.....	5
图 7: 通过训练能够识别抗生素中常见的化合物结构——磺酰基.....	7
图 8: IBM WATSON 鉴定 RBPS.....	7
图 9: 基于机器学习的药物重定位模型.....	8
图 10: 传统药物研发流程 VS 人工智能药物研发流程.....	9
表 1: 2016-2020 年中国人工智能药物研发行业相关政策整理.....	10
图 11: 医药产业链全景图谱.....	12
图 12: 人工智能药物研发企业图谱.....	12
图 13: 中国互联网巨头在 AI 制药领域的布局.....	13
图 14: 行业主体与业务模式.....	13
图 15: 我国主要人工智能药物研发公司业务布局.....	14
图 16: CRO 四种商业模式对比.....	15
图 17: 2000-2019 年经同行评审的 AI 出版物数量.....	16
图 18: 2010-2019 年 ARXIV 深度学习出版文献数量.....	17
图 19: 新靶点开发数量统计 (2005 年-2020 年).....	17
图 20: 中国生物医药行业市场规模及变化趋势 (2016-2024E, 万亿元).....	18
图 21: 2015-2024E 医药行业研发投入.....	19
图 22: 中国人工智能医疗项目融资轮次.....	19
图 23: 中国人工智能医疗市场规模.....	20
表 2: 人工智能药物研发占比增长率预测.....	20
表 3: 中国人工智能药物研发市场规模预测.....	21
表 4: 中国人工智能药物研发市场规模测算 (亿元).....	21
图 24: 2020 年国内人工智能药物研发融资情况.....	22
图 25: 全球人工智能新药发现的应用分类.....	23
图 26: 人工智能药物研发行业产业链.....	24
表 5: 大型药企与人工智能初创公司合作案例 (不完全统计).....	25
表 6: 人工智能药物研发行业总体竞争态势.....	27
图 27: 人工智能药物研发行业总体竞争态势.....	27
图 28: 融资历程.....	29
图 29: 主要股权结构分布.....	30
图 30: 股本结构.....	30
图 31: 公司高管介绍.....	30
图 32: RADR 工作流程.....	32
图 33: 公司研发产线.....	32
图 34: 公司利润表 (币种: 美元).....	33
图 35: 上海科技大学奠基仪式.....	34
图 36: 融资历程.....	34
图 37: 主要股权结构分布.....	35
图 38: 股本结构.....	35
图 39: 公司高管介绍.....	36
图 40: 传统方法 VS 平台辅助.....	38
图 41: 计算平台加速药物发现流程.....	38

图 42: 应用适用的模块.....	39
图 43: 公司合作研发管线.....	39
图 44: 研发项目产线.....	40
图 45: 收入分布情况.....	40
图 46: 融资历程.....	41
图 47: 主要股权结构分布.....	42
图 48: 股本结构.....	42
图 49: 公司高管介绍.....	42
图 50: DYNAMO 平台整合的技术.....	43
图 51: DYNAMO 平台整合的 3 个模块.....	44
图 52: 研发产品线.....	44
图 53: 2018 年和 2019 年利润表.....	45
图 54: 2020 年利润表.....	46
图 55: 融资历程.....	47
图 56: 主要股权结构分布.....	47
图 57: 股本结构.....	48
图 58: 公司高管介绍.....	48
图 59: 公司 2018-2020 年利润表.....	49
图 60: 融资历程.....	50
图 61: 公司高管介绍.....	51
图 62: CENTAURAL.....	53
图 63: CENTAUR BIOLOGIST.....	53
图 64: CENTAUR CHEMIST.....	54
图 65: 总体技术流程.....	54
图 66: 研发产线.....	55
图 67: 融资历程.....	56
图 68: 融资历程.....	61
图 69: 人工智能技术.....	62
图 70: 公司自有研发产线研发领域分布占比.....	63
图 71: 公司合作研发管线.....	63
图 72: VALO HEALTH 的 OPAL 平台.....	66
图 73: 研究时间线.....	67
图 74: 融资历程.....	67
图 75: 人工智能制药管道.....	69
图 76: 研发管线.....	69
图 77: 系统模块.....	69
图 78: 融资历程.....	71
图 79: 融资历程.....	74
图 80: 公司董监高人员名称及职位.....	74
图 81: TRIALOS 药试圈特色.....	75
图 82: 公司发展及融资历程.....	77
图 83: 人工智能早期药物发现全流程解决方案.....	78
图 84: 融资历程.....	79
图 85: 融资历程.....	81
图 86: 公司产品.....	83
图 87: 融资历程.....	84
图 88: 技术平台.....	85
图 89: 公司研发管线.....	86
图 90: 融资历程.....	87
图 91: 研发管线.....	88
图 92: 融资历程.....	90
图 93: 研发管线.....	91
图 94: 融资历程.....	92

机密信息, 请勿外传



图 95: 里程碑项目运作流程.....	93
图 96: 融资历程.....	94
图 97: SILEXON@AI4D™平台.....	95
图 98: 融资历程.....	97
图 99: 平台运作流程.....	98
图 100: 研发管线.....	98
图 101: 融资历程.....	99
图 102: AI 虚拟筛选流程.....	100
图 103: 公司服务流程.....	102
图 104: 融资历程.....	102
图 105: 融资历程.....	104
图 106: 人工智能药物研发公司发展阶段.....	105
图 107: 人工智能药物研发公司发展阶段分布.....	106

保密信息，请勿外传

# 1. 人工智能药物研发行业概述

## 1.1. 核心要素简介

人工智能药物研发指的是在药物研发过程中引入人工智能技术。

图 1: 核心要素导图



资料来源: 华医资本

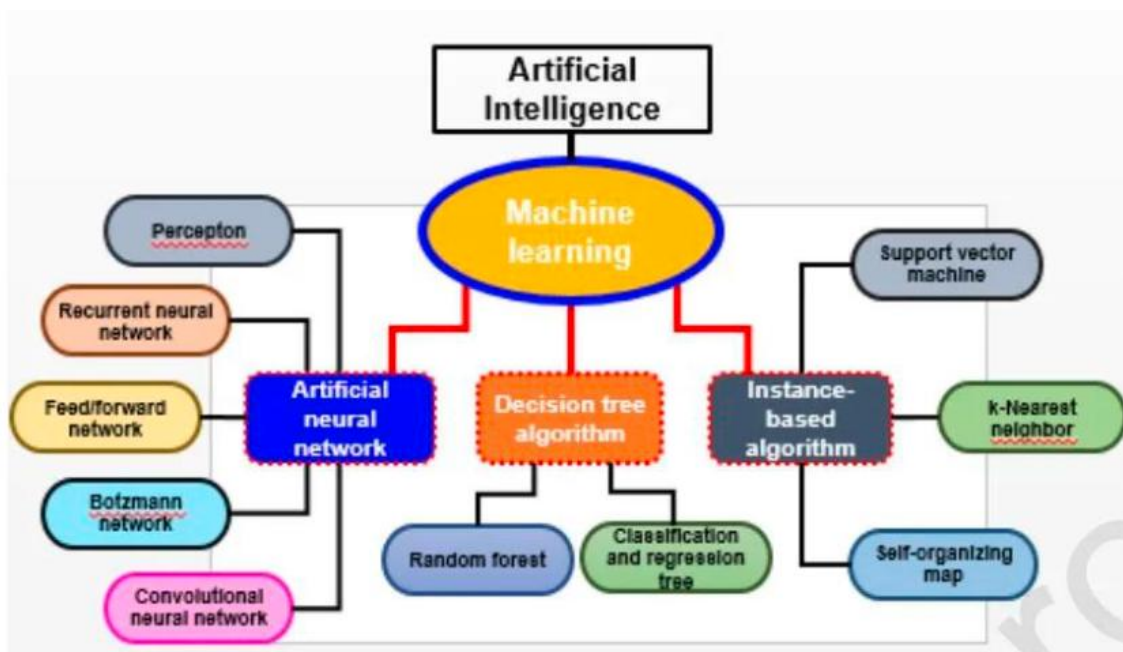
### 1.1.1. 人工智能

#### 1.1.1.1 人工智能定义

人工智能是一个以技术为基础的系统，包括各种先进的工具和网络，可以模仿人类的智能。同时，它不会威胁到完全取代人类的存在。人工智能利用能够解释和学习输入数据的系统和软件，为实现特定的目标做出独立的决定。人工智能在医药领域的应用正在不断扩大。

人工智能涉及多个方法领域，如推理、知识表示、解决方案搜索，其中包括机器学习 (ML) 的基本范式。ML 的一个子领域是深度学习 (DL)，它涉及人工神经网络 (ANN)。它们包括一组相互关联的复杂计算元素，涉及类似于人类生物神经元的“感知”，模拟人类大脑中电脉冲的传输。神经网络涉及各种类型，包括多层感知器 (MLP) 网络、递归神经网络 (RNNs)、和卷积神经网络 (CNNs)。更复杂的形式包括 Kohonen 网络、RBF 网络、LVQ 网络、反向传播网络和 ADALINE 网络。

图 2: 人工智能方法域

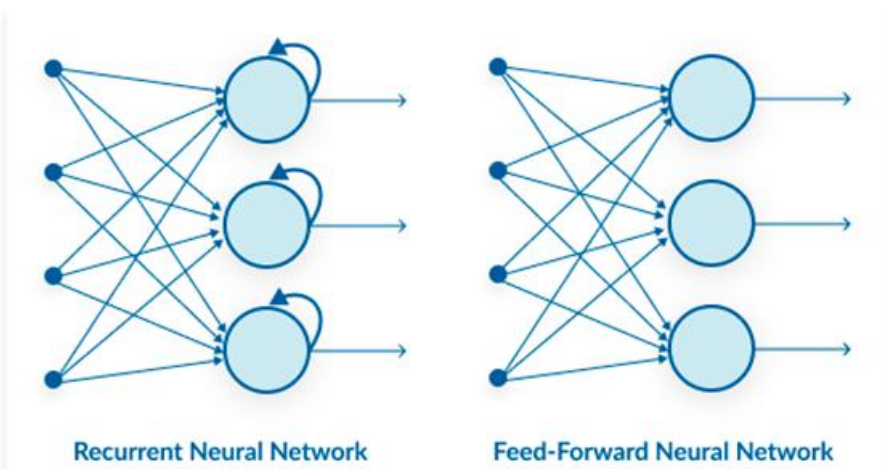


资料来源：公开资料

人工神经网络 (Artificial Neural Network, ANN) ，又称为多层感知器 (Multi-Layer Perceptron, MLP) 是一种旨在模仿人脑结构及其功能的脑式智能信息处理系统。通常以数学和物理的方法以及信息处理的角度对人脑神经网络进行抽象，并建立某种简化模型。简单的讲，它是一种数学模型，可以用电子线路来实现，也可以通过计算机程序来模拟，是人工智能的一种研究方法。ANN 的强大之处在于，它拥有很强的学习能力。在得到一个训练集之后，它能通过学习提取所观察事物的各个部分的特征，将特征之间用不同网络节点连接，通过训练连接的网络权重，改变每一个连接的强度，直到顶层的输出得到正确的答案。ANN 的核心成分是人工神经元。每个神经元接收来自其他几个神经元的输入，将它们乘以分配的权重，将它们相加，然后将总和传递给一个或多个神经元。一些人工神经元可能在将输出传递给下一个变量之前将激活函数应用于输出。

循环神经网络 (Recurrent Neural Network, RNN) 是一类以序列数据为输入，在序列的演进方向进行递归 (recursion) 且所有节点 (循环单元) 按链式连接的递归神经网络，RNN 与 ANN 的区别在于，RNN 在隐藏状态上有一个循环连接，此循环约束能够确保在输入数据中捕捉到顺序信息。

图 3: 架构角度上 RNN 和 ANN 的区别



资料来源：公开资料

卷积神经网络 (Convolutional Neural Network, CNN) 目前在深度学习领域非常热门。这些 CNN 模型被应用于不同的应用和领域，在图像和视频处理项目中尤其普遍。基础的 CNN 由卷积(convolution), 激活(activation), and

池化(pooling)三种结构组成。CNN 输出的结果是每幅图像的特定特征空间。

图 4: 不同神经网络之间的区别

	MLP	RNN	CNN
Data	Tabular data	Sequence data (Time Series, Text, Audio)	Image data
Recurrent connections	No	Yes	No
Parameter sharing	No	Yes	Yes
Spatial relationship	No	No	Yes
Vanishing & Exploding Gradient	Yes	Yes	Yes

资料来源: 公开资料

### 1.1.1.2 人工智能的发展和特点

自从 1956 年人工智能诞生以来, 它经历了从高潮到低潮的各个阶段。最近的低潮发生在 1992 年, 当时日本的第五代计算机并未取得成功, 其后神经网络热潮在 20 世纪 90 年代初退烧, 人工智能领域再次进入低潮期。直到 2006 年, Geoffrey Hinton 提出了深度学习的概念并改进了模型训练方法, 突破了神经网络的长期发展瓶颈, 人工智能的发展迎来新一轮浪潮。此后, 国内外众多知名大学和知名 IT 公司开展了深度学习、强化学习、迁徙学习等一系列新技术的课题研究。同时, 智能医疗、智能交通、智能制造等社会发展的新需求驱动人工智能发展进入了一个新阶段。

人工智能基于先进的机器学习、大数据和云计算, 在感知智能、计算智能和认知智能方面具有强大的处理能力。它以更高水平接近人的智能形态存在, 主要特点包括: ①从人工知识表达到大数据驱动的知识学习技术。②从多媒体数据的子类处理到跨媒体交互。③从追求智能机器到高层人机协作。④从关注个人智能到基于网络的群体智能。⑤从拟人机器人到更广泛的智能自我处理系统。

数据是人工智能的关键, 而药物研发领域数据密集, 这让人工智能有了用武之地。人工智能不仅能够挖掘出不易被发现的隐性关系, 构建药物、疾病和基因之间的深层次关系。同时, 可对候选化合物进行虚拟筛选, 更快地筛选出具有较高活性的化合物, 为后期临床试验做准备。

人工智能已进入深度学习的时代, 驱使着它深度应用到人们生活中的各个领域, 提高人们的生活质量, 其中人工智能在医药领域内得到越来越多的关注, 在未来药物研发的过程中占据的地位也会越来越重要, 本文重点介绍了人工智能在药物研发过程中的应用。

### 1.1.2. 药物研发过程

药品研发包括药物研发及研究、临床前药理学实验、工艺合成、临床实验、商业化生产等 5 个阶段, 其中, 新药开发费用大约三分之一是用于新药发现和临床前阶段, 历时五到六年, 一般来说筛选一万个分子只有十个左右能进入临床试验, 并且进入临床一期试验的成功率略低于 10%, 由此可见提高新药发现成功率对药物开发的重要性, 又由于目前人工智能主要应用于临床前阶段的研究方向, 即药物发现与研发阶段, 所以本节主要介绍药品研发在临床前的流程。

图 5: 药品研发的不同阶段



资料来源: 公开资料

### 1.1.2.1 发现阶段—药物作用靶点以及生物标记的选择与确认

早期人们对药物作用靶标认识有限,往往只知道有效,但不知如何起效。比如,百年来,人们知道阿司匹林(aspirin)具有解热、消炎、止痛、抗血栓,甚至抗癌作用。直到 1971 年,英国人 John R. Vane 在《Nature》期刊发文才阐明了 Aspirin 作用机理为抑制前列腺素合成,并于 1982 荣获 Nobel 生理和医学奖。

现代生物医学的研究进展,以及人类基因图谱的建立,让人类对疾病的机理了解更加准确,为新药开发提供了明确的方向、具体的靶标。

### 1.1.2.2 发现阶段—先导化合物的确定

一旦选定了药物作用的靶标,药物化学家(medicinalchemist)首先要找到一个对该靶标有作用的化合物。这个化合物可以来自天然产物(动物、植物、海洋生物);也可以是根据靶标的空间结构,计算机模拟设计、合成的化合物;还可以根据文献报道或以前其它项目的研究发现。比如,某一类化合物具有作用于该靶标的药理活性或副反应等等。治疗勃起障碍的药物 Viagra 就是由其副作用开发而成。

目前中国常用的方法是跟踪国外研发机构对某一靶标的药物开发,以他们的化合物作为先导,希望设计出更优秀的化合物。

### 1.1.2.3 发现阶段—构效关系的研究与活性化合物的筛选

围绕先导化合物,设计并合成大量新化合物,通过对所合成化合物活性数据与化合物结构的构效关系分析,进一步有效的指导后续的化合物结构优化和修饰,以期得到活性更好的化合物。

### 1.1.2.4 发现阶段—候选药物的选定

致电华医研究院, 解锁完整报告  
联系电话:021-61990532