

大健康与新医疗

BIG DATA Health
and New Medical

2023 年
第 13

上海科学技术情报研究所
上海市前沿技术发展研究中心
技术与创新支持中心(TISC)

人工智能与药物设计和研发（上）

编者按

药物研发和应用是制药公司及生物医学研究领域中的一个重要方向，但传统模式存在周期长、费用高和成功率低等特点。人工智能作为药物研发领域的一个热点方向，相比传统药物研发模式，与AI相结合的研发模式花费的时间和成本更低。AI制药以医药大数据为基础，通过运用机器学习、深度学习等AI技术替代大量实验，对药物结构、功效等进行快速分析，以达到缩短试验周期、节省成本、促进新药发现、提升试验成功率等目的。人工智能用于药物研发领域，可以加速研发、节约资金、降低临床试验失败概率、更有效地开发新药。

目 录

目 录	2
行业现状	3
2023 年中国 AI 新药研发发展概况、现状和竞争格局	3
AI 制药	6
研究进展	10
药物先导化合物优化的人工智能新方法——PBCNet	10
利用 AI 发现小分子抗衰老药物	11
麻省理工团队开发类 ChatGPT 模型，加速 AI 药物发现	12
企业动态	14
赛诺菲：“all in”人工智能和数据科学，成为一家由 AI 大规模驱动的制药公司	14
晶泰科技与礼来签署药物发现合作，以 AI+实验机器人驱动首创新药研发	18
大分子药物研发中的人工智能公司	19
BioNTech 以 3.62 亿英镑收购 InstaDeep，加强 AI 药物研发布局	22

行业现状

2023年中国 AI 新药研发发展概况、现状和竞争格局

一、行业发展概况

1、定义

AI 新药研发(AIDD)又称 AI 制药：是指在原研药与创新药研发过程中的相关应用场景下引入人工智能技术，以达到短时、低成本开发新药的目的。与传统计算机辅助药物设计相比，两者在基础要素、推导方式等方面均有差异，AI 可以间接应用于传统计算机辅助药物设计，助其发展。

目前，传统药物开发模式正在从最开始的完全人工到使用传统 CADD(ComputerAidedDrugDesign，计算机辅助药物设计)进行辅助，最终完成从传统 CADD 方法到 AI 与传统 CADD 相融合的转变。AIDD 是制药公司快速发展的领域。从设计新分子到预测临床试验结果，AI 可以融入药物发现过程的各个阶段。使用 ML、DL 及生成式 AI 及其他 AI 技术，制药公司可以减少药物发现及开发所需的时间和资源，同时提高临床试验的成功率。具体而言，生成式 AI 有可能通过使科学家能够为以前无成药性的靶点生成新分子，从而彻

底改变药物发现，这可能为药物开发提供新途径。

AI 可应用于研发过程的各个阶段，通过分析大量数据来产生新的见解，提高早期发现的效率。随着 AI 算法的不断推进，AI 亦提高识别更好的新候选药物的准确性，优化其药理特性，并通过允许(其中包括)更好地可视化蛋白质的结构特性，促进发现新生物标志物及治疗靶点。该等上游决策可在提高药物发现及开发的成功率方面发挥作用。在分析临床试验时使用 AI 有助于优化临床试验设计及成功可能性。此外，AI 技术可帮助预测临床试验的结果，使药物获批准的可能性增加及成本降低，从而为开发新治疗方法提供额外资金。

2、产业链剖析

AI 新药研发上游围绕人工智能展开，可分为软件和硬件，包括云计算平台、数据库、GPU 芯片、自动化实验室和服务器等。中游按照企业功能布局可分为药物发现阶段、临床前研究阶段和临床试验阶段。下游目标客户主要为传统药企和 CRO 企业。

目前，我国 AI 新药研发上游企业主要为华为云、腾讯云、天数智芯、英特尔等企业，中游主要有深势科技、予路干行、智峪生科、腾迈医药、分子之心、

阿尔法分子、ChemicalAI、InsilicoMedicine(英硅智能)、深度智耀、华深智药、哲源科技等企业。

行业发展历程：行业处于起步期

早在 1990 年，AI 理论包括 DL、NLP 等基础理论突破。在 2012 年，图像识别 AI 突破及实际可用的 DL 兴起。在 2015 年，生成对抗网络及先进 NN 结构。在 2016 年 12 月，英科智能发表首篇论文，表示 AI 技术可以降低药物开发成本，缩短药物发现时间，提高化合物质量。在 2018 年 3 月，IBM Watson 发布认知计算平台，将患者与潜在临床试验相匹配，使临床试验入组增加 80%。在 2018 年 12 月，DeepMind 的 AlphaFold 的 3D 蛋白质结构预测能力超过所有其他预测算法。在 2019 年 9 月，InsilicoMedicine 发布首个使用 AI 系统生成张量强化学习(GENTRL)的活性体内候选药物，其在 46 天内设计出针对纤维化的先导化合物。在 2020 年 9 月，Aladdin 开发的阿尔茨海默病早期诊断平台。在 2021 年 12 月，英科智能实现 AI 发现新靶点的行业首个临床阶段 AI 生成的新型分子。在 2022 年 7 月，DeepMind 的

AlphaFold 能够预测所有已分类蛋白质的 3D 结构。

依托行业不同生命阶段关键因素的发展特征对行业的成熟度进行综合判定和分析，目前我国 AI 新药研发(AIDD)行业处在行业起步阶段。

行业政策背景：规范、鼓励双线政策带动行业发展

依据《“十四五”医药工业发展规划》，我国将积极探索人工智能、云计算、大数据等技术在研发领域的应用，通过对生物学数据挖掘分析、模拟计算，提升新靶点和新药物的发现效率。

依据《“十四五”生物经济发展规划》，我国将积极利用云计算、大数据、人工智能等信息技术，对治疗适应症与新靶点验证、临床前与临床试验、产品设计优化与产业化等新药研制过程进行全程监管，实现药物产业的精准化研制与规模化发展。

二、行业发展现状

1、药物发现阶段：多数企业进行了相关布局

AI 新药研发药物发现阶段主要包括靶点发现、先导化合物研究和化合物筛选、以及化合物合成等。目前，我国 AIDD 初创企业大多数布局了先导化合物

设计、优化和合成，其利用机器学习(或深度学习)技术，学习海量化学知识及资料，建立高效的模型，快速过滤“低质量”化合物，富集潜在有效分子。此外，以深势科技、英硅智能、科辉智药为代表的企业，基本布局了药物发现的全阶段。

2、临床前研究阶段：绝大多数布局 ADMET 预测

在临床前研究阶段，其主要包括晶形预测、剂型预测、ADMET 预测、临床前实验结果预测。目前，我国 AIDD 初创企业在该阶段主要布局 ADMET 预测，包括智峪生科、费米子科技、剂泰医药等多家企业布局。

3、临床阶段：华深智药、未知君和零氩科技进行了相关布局

临床试验阶段包括临床试验设计、患者招募/分组等。目前，华深智药、未知君和零氩科技在临床试验设计阶段进行了相关布局，零氩科技更是在患者招募/分组方面进行了布局。

行业竞争格局

1、区域竞争：区域性特征明显，集中在北京、广东、上海、江苏和浙江

目前，我国 AI 新药研发(AIDD)企业主要集中在北京、广东、上海、江苏

和浙江等地。其中，位于北京的企业比重达到了 29.2%，其次是广东和上海，分别达到了 20.8%。

2、企业竞争：强劲“春笋”持续涌出

——竞争梯队：剂泰医药、腾讯 iDrug 业务布局广泛

按照功能布局，目前剂泰医药、腾讯 iDrug 的 AIDD 功能板块超过了 4 个；其次是英硅智能和费米子科技，布局的功能板块在 3-4 个之间。

——管线竞争格局：剂泰医药、费米子科技、晶泰科技的在研管线超过了

10 条

目前，剂泰医药、费米子科技、晶泰科技的在研管线已经超过了 10 条。其中，剂泰医药的产品研发管线包括 RNA 药物和小分子新药，同时通过共同开发管线或通过技术平台对外授权的合作方式与国内外顶尖药企开展深入合作。

三、行业发展前景及趋势预测

根据弗若斯特沙利文的资料，小分子药物是目前市场规模最大的一类药物，于 2021 年前将占全球制药市场 1.4 万亿美元的 76%。小分子药物较其他治疗方案具有明显的优势，例如实现细胞内活化或抑制的能力或轻松穿过血脑屏障

的能力。

尽管小分子市场规模巨大，但全球范围内对新的治疗方案仍有大量的医疗需求并未得到满足。以美国为例子，在 2021 年，美国约有十分之一的人患有罕见疾病，但只有 5% 的罕见疾病有 FDA 批准的治疗方案。为解决该问题，全球制药行业逐渐利用 AIDD 的效率以开发小分子药物，尤其是新型小分子药物，以解决未满足的临床需求。

资料来源：

预见 2023：《2023 年中国 AI 新药研发(AIDD)行业全景图谱》(附市场现状、竞争格局和发展趋势等)[EB/OL].(2023.08.02).[2023.11.21].

<https://www.qianzhan.com/analyst/detail/220/230802-c412368a.html>

AI 制药

AI 技术从 1956 年首次提出发展至今已有 60 余年，全球已有 700 多家 AI 制药企业。我国目前已有 AI 初创制药企业近 80 家，成立于 2014 年的晶泰科技和英矽智能都已完成 D 轮融资，成为国内 AI 制药领域的独角兽。

AI 浪潮下，国家也出台相应政策大力扶持，发改委于 2022 年发布了《“十四五”生物经济发展规划》鼓励 AI 制药发展。

一、商业模式：3种

在商业模式上，我国 AI 药物研发企业主要分为 AI SaaS、AI CRO、AI biotech 三种模式，即出售软件、服务和研发药物，分别占了商业模式总数的 25%、23%和 8%。并多兼容上述三种模式中的 2 种或 3 种，兼容 2 种商业模式的最多，占 31%，兼容 ≥ 3 种模式的占 13%。有较强药物研发经验的团队多以自研管线为主，而算法背景强的团队则倾向于进行 SaaS 和研发服务。“自研+外部合作”已成为主流，以降低 liscence in 的风险。AI SaaS 服务是指为客户提供 AI 辅助药物开发平台，通过平台为企业赋能，帮助企业加速研发流程，节省成本与时间。

AI CRO 是指初创公司通过人工智能的辅助，为客户更好地交付先导化合物或者 PCC，再由药企进行后续的开发，或者合作推进药物管线。AI biotech 则以推进自研管线为主，较少进行外部合作。

二、优势：提速

AI 技术对医药研发的最大促进作用之一就是提高研发速度。在 2018 ~ 2020 年、2020 ~ 2021.8 月、2021.9 ~ 2021.10 月、2021.11 ~ 2022.2

月四个时段，分别对 3 个、5 个、4 个、6 个药物研发引用了 AI 技术，研发速度由 2018~2020 年间的每月 0.08 个提高到了 2021.9~2021.10 月期间的每月 2 个，研发速度提高了 25 倍。

具体情况为，在 2018~2020 年间，Exscientia 公司的慢性阻塞性肺疾病的候选药物、Deep Genomics 公司的 DG12P1、我国英矽智能公司的 DDR1 受体抑制剂等 3 家 AI 制药企业的 3 个研发项目都应用了 AI 技术，其研发速度仅为每月 0.08 个。而在 2021.9~2021.10 月间，阿尔脉生物的 ALM005、Healx 公司的 HLX-0201、Erasca 公司的 ERAS-007、LandosBiopharma 公司的 LBP-104（系统性红斑狼疮）等 4 个 AI 制药企业的 4 个研发项目的研发速度提升到了每月 2 个。

三、企业：全球

1、分布：中国占 3.5%

到 2022 年底，全球已有 700 多家 AI 辅助药物研发企业，其中，美国占了一半以上（54.4%）。其次是欧盟、英国和亚洲（不含中国、中东），分别占了 16.8%、9.7%和 7.5%。中国占了 3.5%。

2、订单：英矽智能全球第四

2022年，AI技术与生物医药的融合提速，AI技术对制药领域的渗透已遍地开花。从AI制药公司获得的订单金额可见一斑。2022年，获得订单金额最大的AI制药企业是Exscientia和Evotec，分别与老牌跨国制药集团赛诺菲和BMS签订了356亿元和350亿元的新药开发合同。

Generate Biomedicines位居第三，与安进签订了131亿元的合同。我国AI初创企业英矽智能获得的订单金额首次跻身Top10，高居第四，即英矽智能在去年11月与赛诺菲签订了总潜在价值高达82亿元的新药开发合同，这也是我国AI制药领域迄今最大的一笔订单，赛诺菲将利用英矽智能人工智能驱动的Pharma.AI药物发现平台，推进基于不超过6个创新靶点的候选药物研发。全球AI制药企业的Top10订单被跨国制药巨头悉数包揽，其中，赛诺菲占了3席，除Exscientia、英矽智能外，还与Atomwise签订了69亿元的合同，3单合计507亿元，占了Top10订单总额1219亿元的42%。

四、企业：中国

1、区域：长三角居首



至 2022 年底，我国已有 AI 制药初创企业近 80 家。除武汉、成都两市各有 1 家外，其余全部位于沿海城市。其中，长江三角洲最多，占了 45%，渤海经济圈和大湾区平分秋色，各占 1/4。就具体区域来看，北京、上海、深圳最多，分别有 18 家、15 家和 13 家。苏州、杭州、南京和广州次之，分别有 8 家、6 家、3 家、3 家。AI 制药企业总部之所以选择这些区域落户，与这些城市所拥有的高校/科研院所资源之多是分不开的，因我国 AI 制药公司最大的创业背景是来自高校和研究院的成果转化。在中国近 80 家 AI 制药企业中，有高校/研究院背景的占了 4 成、资深药化专家创业的占了 25%、名校博士创业的占了 1/5，三类合计占比超过 8 成。在研究所和高校背景中，尤以北大、清华、上海交大、中科院为创业前沿阵地，这些机构已孵化转化出了华深智药（清华大学 AIR 孵化）、英飞智药（北大前沿交叉学科研究院）、燧坤智能（清华大学）、天骜科技（上海交通大学背景）等公司。2021 年，张江牵头成立了“张江 AI 新药研发联盟”，至今已经有 20 多家企业加入。

2、领域：小分子最多

从细分领域上看，最受 AI 初创制药企业青睐的仍是小分子药物研发，主要因小分子领域数据积累较多、市场相对成熟，在虚拟筛选、分子生成、ADMET 预测、药物重定向等环节已得到广泛应用。在近 80 家 AI 制药企业中，有 41 家专注于小分子研发，占了 AI 初创制药企业的一半以上。聚焦大分子和技术服务的 AI 制药企业各有 11 家。聚焦细胞疗法和制药工艺的 AI 制药企业分别有 3 家和 2 家。

3、创立时间：2018、2021 双高峰

我国第一家 AI 初创制药公司成立于 10 年前的 2013 年，至 2020 年，以平均每年 8 家的速度增长。其中，2018 年和 2021 年各迎来了一波创业潮，分别有 15 家和 24 家 AI 初创制药公司成立。2018 年左右，海外 AI 制药公司开始和传统跨国药企合作，激发了国内的创业热情。2020 年前后，多家海外 AI 制药公司 IPO 促进了资本大举进入国内 AI 制药领域。同时也带动了 AI 制药企业订单数量和融资金额的爆发式增长。2021 年，我国 AI 制药企业融资额高达 62 亿元，较此前 6 年的融资总额 46.7 亿元还高出 31%。受投融资环境的

影响，2022 年仅有 2 家 AI 制药公司创立。

五、渗透研发

1、FDA 监管

凡涉及药物研发都逃不过 FDA 的法眼，AI 辅助药物研发也不例外。为此，美国 FDA 于 5 月 10 日发布了长达 31 页的题为《在药物和生物制品开发中使用人工智能和机器学习》的讨论文件，该文件指出，在过去几年中，FDA 发现使用 AI（人工智能）/ML（机器学习）要素提交的药物和生物制品申请数量显著增加，由 2016 年仅 1 个增加到了 2021 年的 132 个。FDA 已认识到 AI 在整个药物开发生命周期（包括药物发现、非临床研究、临床研究、上市后监督、药物制造）中的作用及其加速药物开发的潜力，并在许多方面提供了示例，体现出一线监管部门对于新技术的独到见解。

2、合作项目：英矽智能全国第一

2022 年，我国 AI 制药企业英矽智能不但订单金额跻身全球第四（图四），而且订单数量高居全国第一，与传统制药企业进行了 23 项合作。其次是位于深圳的晶泰科技，开展了 16 项合作。杭州剂泰医药和北京的望石智慧位居第 3

~ 4 位，分别开展了 5 项和 4 项合作。上海宇道生物、北京星药科技、北京星抗原生物和南京燧坤智能等 4 家 AI 制药企业并列第五，都开展了 3 项合作。深圳的未知君生物和北京的深度智耀都各进行了 1 项合作。除英矽智能、冰州石生物之外，未知君、埃格林医药、红云生物、药物牧场等企业也拥有了临床 I 期管线资产。另外，2022 年还有 4 家 AI 制药企业获 IND 批件，即劲风生物（2 月）、宇耀生物（3 月）、费米子（10 月）、德睿智药（12 月）。

资料来源：

健康界 2023.06.15 新闻

研究进展

药物先导化合物优化的人工智能新方法——PBCNet

研究提出了一种先导化合物优化的人工智能方法——PBCNet (Pairwise Binding Comparison Network)。该方法采用孪生图卷积神经网络架构，通过比较一组相似配体的结合模式差异来预测二者之间的相对结合亲和力，可以较好的兼顾计算速度和精度。

近年来，人工智能技术已逐渐成为药物研发领域中重要的技术手段之一。



基于已知的结构和活性数据，如何引入合理的关系归纳偏置使得 AI 模型可以更有效的提取其中蕴含的物理化学知识和分子相互作用规律，是开发先导化合物优化方法的关键。在 PBCNet 中，模型采用了一种孪生网络架构，可以较好的消除不同来源或实验测定条件下结合亲和力数据中存在的系统误差；考虑到分子间非键相互作用往往服从严格的几何先验，模型将原子之间的距离和化学键之间的角度信息编码作为注意力偏置项，有助于分子间相互作用信息的交互；此外，相对于二维拓扑图，模型同时引入距离和角度信息得到三维分子图，可以更全面的描述了蛋白-配体之间的分子结合信息。

研究团队设计了多种测试场景，对包括 PBCNet 在内的多种先导化合物优化方法进行了性能比较。在零样本学习方面，PBCNet 的排序能力和预测精度均显著优于 Schrödinger Glide、MM-GB/SA 和多个近期报道的深度学习模型，在部分测试体系上的误差已接近于化学精度；在小样本学习方面，仅使用少量的结构活性数据对模型进行微调后 PBCNet 的排序性能已经可以接近或超过 Schrödinger FEP+，并且在计算速度方面相对 FEP+ 有多个数量级的优势。

对比结果显示，使用 PBCNet 可以使先导化合物优化项目平均加速约 4.7 倍，平均节省约 30% 的资源投入。此外，模型在原子和官能团水平的可解释性分析也反映了 PBCNet 预测结果的合理性。

资料来源：

Nature 子刊：郑明月团队开发药物先导化合物优化的人工智能新方法——PBCNet [EB/OL]. (2023.10.24).[2023.11.21]. <https://news.bioon.com/article/37cee97587fe.html>

利用 AI 发现小分子抗衰老药物

研究找到了第一种清除衰老细胞的 Senolytics——将用于治疗白血病的化疗药物“达沙替尼”和作为补充剂出售的植物提取物“槲皮素”进行联用。其中，达沙替尼靶向衰老的脂肪细胞祖细胞，而槲皮素靶向衰老的内皮细胞。后续基于该联合用药的多个实验均显示，Senolytics 不仅能够减轻衰老细胞造成的负担，还能够有效预防其导致的身体功能障碍。此后，不断有新的 Senolytics 被发现并进入临床研究。

自从发现第一个 Senolytics 以来，已经发现或创造了数百种其他药物，Senolytics 疗法也成为长寿领域最热门的选题之一，大量临床试验正在进行中，诸多公司也在寻求一系列 Senolytics 疗法与年龄相关的研究。



近日，麻省理工学院教授 James Collins 实验室的博士后 Felix Wong 及团队利用 AI 对超过 800000 种化合物进行筛选，并筛选到 3 种高度选择性和有效的 senolytics 化合物。

早在 2020 年，James Collins 就领导团队实现了首次完全利用 AI 发现新抗生素，该研究成果登上了 Cell 封面。在这项研究中，研究人员开发了一种可以预测抗生素分子活性的深度学习方法，从超过 1.07 亿种分子中识别出了强大的新型抗生素分子——halicin。

已确定 3 种候选药物，可降低衰老基因表达

衰老细胞的积累与衰老、炎症和细胞功能障碍有关。Senolytics 药物可以通过选择性地杀死衰老细胞来减轻与年龄相关的并发症。尽管它们具有潜在的前景，但迄今为止发现的大多数 senolytics 化合物都受到生物利用度差和不良副作用的阻碍。

在这项研究中，研究人员首先使用 2352 种具有抗衰老活性的化合物训练了一个模型，并将其用于筛选超过 800000 个分子的抗衰老活性。

其中，有 3 种候选分子（BRD-K20733377，BRD-K56819078，BRD-

K44839765) 具有比已知的抗衰老药物 ABT-737 更有利的药物化学特性。这 3 种化合物均通过抑制细胞凋亡调节剂 Bcl-2 发挥作用，且显示出高口服生物利用度的化学性质。

ABT-737 是由魏茨曼科学研究所开发的药物，已被证明能够在实验室和动物实验中增强了衰老细胞的清除。ABT-737 能够抑制性结合 BCL-2、BCL-X 以及 BCL-W，抑制它们的抗凋亡功能，诱导衰老细胞凋亡。用实验药物治疗的动物显示出类似于年轻健康小鼠的身体和行为改善。该药物最初用于癌症治疗，旨在抑制阻断细胞死亡的特定蛋白质。但早期的临床试验表明，它具有严重的副作用，能够产生一种称为血小板减少的病症。

研究人员在 80 周大的小鼠（相当于 60 岁的人类）中测试其中一种化合物 BRD-K56819078，发现它可以清除衰老细胞并减少肾脏中衰老相关基因表达。

James Collins 表示，这项工作说明了人工智能如何用于使医学更接近解决衰老的疗法，这是生物学中的基本挑战之一。

资料来源：

[1] Nature 子刊：利用 AI 发现小分子抗衰老药物，团队已成立公司推进抗衰老研

究[EB/OL].(2023.05.10).[2023.11.21].<https://news.bioon.com/article/be15e7071306.html>

[2] Wong F, Omori S, Donghia NM, Zheng EJ, Collins JJ. Discovering small-molecule senolytics with deep neural networks. *Nat Aging*. 2023,3(6):734-750

麻省理工团队开发类 ChatGPT 模型，加速 AI 药物发现

传统的人工智能（AI）系统需要很长时间来筛选候选药物和蛋白质靶点之间相互作用的数据。大多数 AI 系统根据每个目标蛋白质的氨基酸序列计算其三维结构，然后使用这些结构来预测它将与哪些药物分子相互作用。这种方法尽管详尽，但速度缓慢。

今年爆火的以 ChatGPT 为代表的大语言模型 AI 技术，能为药物筛选带来哪些技术革新呢？

研究团队设计了一种基于大语言模型的 AI 算法——ConPLex，它可以像 ChatGPT 那样分析大量文本并找到最可能一起出现的单词（在这项研究中则是氨基酸），从而将目标蛋白质与潜在药物分子相匹配，而无需执行计算分子结构的密集计算步骤。

ConPLex 可以利用预先训练的蛋白质语言模型（PLex），并采用蛋白质锚定的对比共嵌入（Con），超越目前最先进的算法，实现通过蛋白质语言空

间的对比学习来预测药物和目标蛋白质之间的相互作用。

药物发现是实现人类健康的一项基本任务，但整个过程仍然非常昂贵和耗时，一款药物从开发到批准和上市销售通常需要花费超过 10 亿美元和 10 年的时间。虽然实验结果仍是验证药物功能的金标准，但药物-靶标结合的计算机预测还可以更快、更便宜，因此将继续在早期筛选候选治疗药物中发挥重要作用。

为了解决药物发现中的关键第一步，研究团队开发了 ConPLex 模型，尝试将药物靶点相互作用 (DTI) 推进到未知药物和靶点类型，同时又能区分具有不同结合特征的结构高度相似的药物候选分子。

ConPLex 通过蛋白质语言模型 (PLM) 和对比学习 (Contrastive Learning) 的双重使用解决了上述两个挑战。ConPLex 的广泛适用性、对诱饵的特异性和大规模数据的能力将使其实现药物发现的关键一步，有助于大幅提高药物发现的效率和成功率。

研究团队表示，ConPLex 实现了高精度，对不可见数据的广泛适应性，以及对诱饵化合物的特异性。它可以根据习得表征之间的距离来预测结合，从而实现大规模化合物文库和人类蛋白质组的预测。



ConPLex 模型的体系结构和训练框架，ConPLex 的训练分为两个阶段，以优化通用性和特异性。

研究团队通过筛选大约 4700 个候选药物分子文库来测试这一模型，以检测这些候选药物分子与 51 种蛋白激酶的结合能力。整个筛选过程完全基于 ConPLex 模型的预测，而没有参考以前的实验数据或文献。

研究团队从预测的热门候选分子中选择了 19 对药物-蛋白对进行进一步实验检测，实验结果显示，其中有 12 对具有很强的结合亲和力，其中有 4 对具有极强的亚纳摩尔结合亲和力，以至于十亿分之一的微小药物浓度就足以抑制目标蛋白功能。例如，该模型筛选到了一种能够强效结合酪氨酸蛋白激酶受体 B1 (EPHB1) 的抑制剂 PD-166326，其 $KD=1.3nM$ 。

研究团队主要将 ConPLex 模型应用于小分子药物的筛选，但研究团队表示，他们正在将该模型应用于其他类型的药物筛选，例如治疗性抗体。此外，该模型还可用于对潜在药物化合物的毒性筛选，以确保它们在动物模型测试之前没有任何不必要的毒副作用。

资料来源：

[1]麻省理工团队开发类 ChatGPT 模型，基于蛋白质大语言模型，加速 AI 药物发现[EB/

OL].(2023.06.16).[2023.11.21].<https://news.bioon.com/article/6677e76729f7.html>

[2]Singh R, Sledzieski S, Bryson B, Cowen L, Berger B. Contrastive learning in protein language space predicts interactions between drugs and protein targets. Proc Natl Acad Sci U S A. 2023,120(24):e2220778120

企业动态

赛诺菲：“all in”人工智能和数据科学，成为一家由 AI 大规模驱动的

制药公司

赛诺菲对于 AI 和数据科学的重视由来已久。

早在 2019 年 6 月，赛诺菲就宣布与 Google 合作。双方将建立一个虚拟的创新实验室，以“彻底地”改变未来药物和医疗保健服务的开发和交付方式。

两家公司将对赛诺菲庞大的真实世界数据库进行分析，以便更好地了解哪些治疗方法对患者有效。

2021 年 6 月，赛诺菲官网发布了 Guiding Principles for AI at Sanofi，该指导原则适用于赛诺菲的产品和服务中、证据生成中、员工工作中使用的人工智能应用。

根据智药邦的不完全统计，仅在 2022 年，赛诺菲向 AI 生物技术公司合作

伙伴总计支付了至少 1.6 亿美元的预付款（具体合作参见赛诺菲的 AI 应用案例和 AI 指导原则）。

2022 年 6 月 22 日，赛诺菲宣布在多伦多开设人工智能卓越中心，该中心将通过构建强大的数据基础、一流的平台和可扩展的人工智能产品，使整个赛诺菲的全球组织实现数据民主化。

2023 年 5 月 24 日，赛诺菲发布 2022 综合年度报告。其中提到，2022 年标志着加强赛诺菲数字平台基础的三年旅程达到了顶峰。从财务到临床操作，再到制造和供应，以人工智能为动力的工具正在帮助赛诺菲更容易和更快地做出数据驱动的决定。

2023 年 6 月 13 日，赛诺菲宣布大规模推出 plai。plai 由赛诺菲与人工智能平台公司 Aily Labs 合作开发，是一个业界领先的应用程序，提供实时、反应式的数据互动，并对赛诺菲的所有活动提供前所未有的 360° 视角。该应用程序汇总了各职能部门可用的公司内部数据，并利用人工智能的力量提供及时的洞察力和个性化的“假设”场景，以支持成千上万的赛诺菲团队决策者在具体场景中做出明智的决定。



在新闻稿 Sanofi “all in” on artificial intelligence and data science to speed breakthroughs for patients 中，赛诺菲首席执行官 Paul Hudson 称，赛诺菲的目标是成为第一家由人工智能大规模驱动的制药公司（原文：Our ambition is to become the first pharma company powered by artificial intelligence at scale）。

plai 是赛诺菲数字化转型和数据民主化进程中的一个重要推动因素。由人工智能驱动的工具将帮助赛诺菲的团队做出更好和更快的数据驱动的决策，从而提高整个价值链的生产力：从研究到临床操作到制造和供应到商业分析。

AI+临床前研究

赛诺菲已经建立了多个人工智能项目，通过改进预测建模和自动化时间陷阱 (automate time-sink) 来减少研究时间。人工智能使研发团队能够将免疫学、肿瘤学或神经学等治疗领域的潜在靶点识别提高 20%至 30%。

近年来赛诺菲发表的多篇学术论文参见近年来赛诺菲在 AI 药物研发领域发表的 12 篇论文。

赛诺菲正在与多家公司合作，加速药物发现，部分合作如下。



2021 年 11 月 22 日，百度与赛诺菲达成了一项协议，将百度的 mRNA 设计优化平台 LinearDesign 整合到赛诺菲的产品设计管线。赛诺菲将利用 LinearDesign 平台为人类治疗和预防用途的 mRNA 序列的优化作出贡献。

人工智能加速了赛诺菲的 mRNA 研究工作，还体现在其他方面：虽然赛诺菲拥有一个庞大的脂质纳米粒子库，但研发团队现在使用人工智能创建数字模型来预测最强的粒子选择。它将脂质纳米粒子预测过程的速度从几个月提高到几天。

2022 年 1 月 7 日，赛诺菲和 Exscientia 宣布了一项突破性的研究合作和许可协议，利用 Exscientia 的端到端人工智能驱动平台，采用实际的患者样本，开发涵盖肿瘤学和免疫学的多达 15 种新型小分子候选药物。赛诺菲认为，针对病人组织模型测试人工智能设计的候选药物，可能会提供远比传统方法（如小鼠模型）更好的准确性。

2022 年 3 月 2 日，致力于发现和开发基于抗体的疗法的公司天演药业宣布与赛诺菲达成合作及独家许可协议，生成掩蔽单克隆 (masked monoclonal) 抗体和双特异性抗体。根据协议条款，天演药业将负责早期研究，



利用天演药业的 SAFEbody 技术，开发赛诺菲提供的新一代单克隆与双特异性抗体的精准掩蔽型安全抗体，赛诺菲将完全负责后期研究和所有临床、产品开发和商业化活动。

2022 年 8 月 17 日，将人工智能用于小分子药物发现的领导者 Atomwise 宣布，它已经与赛诺菲建立了战略性的独家研究合作，将利用其 AtomNet® 平台对多达五个药物靶点进行计算发现和研究。协议包括 2000 万美元的预付款以及 10 亿美元的里程碑付款和分阶段特许权使用费。

2022 年 11 月 8 日，英矽智能宣布与赛诺菲达成一项将持续多年、针对多个靶点的战略研究合作。根据协议条款，该合作将利用英矽智能人工智能驱动的 Pharma.AI 药物发现平台，推进基于不超过 6 个创新靶点的候选药物研发。协议包括总额不超过 2150 万美元的预付款和靶点提名费用（用于不超过 6 个靶点），额外的研发和商业里程碑付款，以及中单位数到低两位数不等的分阶段特许权使用费。

AI + 临床研究

在临床操作方面，plai 洞察力的日益数字化和“杠杆作用”使赛诺菲团队能



够重新思考如何更好地进行临床试验。例如，研发团队可以为他们的目标群体寻找和建立新的、更方便的试验站点，为那些来自历史上代表性不足的社区的人扩大机会，参与临床研究。随着代表性的提高，赛诺菲将继续努力，争取在未来所有的试验中反映出受所研究疾病影响最大的人群的多样性。

2021年11月18日，赛诺菲宣布投资1.8亿美元，与Owkin开展新的战略合作。Owkin是一家AI和精准医疗公司，建立了一流的预测性生物学AI模型和强大的数据集。赛诺菲将利用Owkin的综合平台，从多模态的患者数据中寻找新的生物标志物，建立预测模型，并预测治疗反应。赛诺菲的投资将支持Owkin的发展，使其成为世界领先的组织学和基因组学癌症数据库。

2022年6月16日，世界领先的人工智能软件公司和自然语言处理先驱Yseop宣布，赛诺菲已选择与Yseop一起扩大其自然语言生成能力。赛诺菲将利用该平台加速其临床研究的提交过程，并将新疗法更快地带给患者。合作实现了赛诺菲临床试验安全报告撰写流程的部分自动化。

2022年10月24日，BioMed X宣布启动他们与赛诺菲的第一个联合研究项目。作为其中的一部分，将在德国海德堡BioMed X研究所成立的一个新



的研究小组，专注于开发一个多功能的计算平台，以期能够准确预测 first-in-class 候选药物在虚拟患者中的疗效。

AI+制造和供应

在制造和供应方面，赛诺菲正在将质量评估流程数字化，从纸质记录转向电子批次记录，利用数字和数据提高资产利用率，并通过实施新的制造 4.0 提高生产力。

赛诺菲还开发了一个内部的人工智能产量优化解决方案，从过去和当前的批次性能中学习，以实现持续的高产量水平。这有助于优化原材料的使用，为公司的环境目标作出贡献，并支持提高成本效率。

此外，赛诺菲生物制药供应链最近采用的 plai 已被证明能够预测 80% 的低库存位置，使团队能够采取缓解措施，以确保供应，这比以往任何时候都快。

赛诺菲的未来工厂。赛诺菲的“未来工厂”模式是指生产完全数字化，同时最大限度地减少浪费和排放。赛诺菲计划在 2025 年前在 20 个生产基地推出这一模式。

根据官网报道，赛诺菲正在对 100 多条生产线上的换料和操作进行模型模

拟。

资料来源：

[1]智药邦 2023.06.15 新闻

[2]Press Release: Sanofi “all in” on artificial intelligence and data science to speed breakthroughs for patients[EB/OL].(2023.06.13).[2023.11.22].

<https://www.sanofi.com/en/media-room/press-releases/2023/2023-06-13-12-00-00-2687072>

晶泰科技与礼来签署药物发现合作，以 AI+实验机器人驱动首创新

药研发

2023 年 5 月 31 日，以 AI+ 实验机器人驱动药物研发的晶泰科技宣布与美国知名药企 Eli Lilly（礼来）签署一项 AI 小分子新药发现合作，预付款及里程碑总收益可达 2.5 亿美元。

本次合作将充分发挥晶泰科技 AI 药物研发平台“干实验室”与自动化机器人“湿实验室”结合的技术优势，为礼来从头设计并交付具有竞争力的候选化合物，赋能礼来开发并向临床推进具有竞争力的新药管线。

根据协议规定，礼来将支付最高可达 2.5 亿美元的预付款及里程碑费用，针对某个未披露的创新靶点，由晶泰科技利用其特有的小分子药物发现平台 ID4Inno™ 研发首创新药，填补未满足的临床用药需求。



作为 AI+实验机器人的先行者，晶泰科技将延续其“智能算法+机器人实验+专家经验”三位一体的药物研发模式，基于其丰富的成功经验与礼来团队密切合作，完成一站式新药从头发现，交付药物候选后由礼来进行临床前开发、临床开发和后续的商业化。

ID4Inno™ 搭载了晶泰科技的高精度计算化学算法与 500 多种 AI 模型，可以针对靶点探索超大规模的可成药空间，对多种药物性质进行设计和筛选。

综合评分最高的分子将在由数百台机器人工作站组成的自动化实验室中被合成出来，经过一系列生物化学，细胞，药理药代等测试验证其活性和成药性，而计算数据和实验数据会快速反馈给 ID4Inno™ 算法平台，形成 AI 算法与真实实验的 DMTA（设计-智造-测试-分析）闭环，在模型迭代中不断优化分子设计，直至找到各方面成药性质超出预定基准的理想药物候选分子。

晶泰科技的 AI+ 冷冻电镜平台、体外体内筛选评价平台等技术，也将在这次合作中发挥作用，加速晶泰设计并交付具有创新骨架的活性分子。

晶泰科技以生物医药及新材料研发平台为定位，为药企提供一站式的小分子药物发现、生物药创新发现，自动化化学服务，和药物固态研究服务，在全



球拥有超过 200 家药企和科研机构客户。其 AI+ 机器人的智能研发平台整合量子物理、计算化学与 AI 的一系列前沿的智能算法工具，同时，其自主研发的自动化实验室以高效并行的机器人实验，将人类科学家从繁复的实验试错中解放出来。

这一“虚实结合”的研发平台能快速且规模化地生成来自真实世界的高质量数据，进一步提高晶泰科技预测并验证药物候选的能力，赋能专家在更加高效的创新探索中实现突破。

晶泰科技已在深圳和上海打造上千平米的自动化实验工作站集群，并计划将这一成熟技术在香港、波士顿复制，为数十个平台上正在进行中的新药发现合作提供强有力的交付保障。

资料来源：
智药邦 2023.06.01 新闻

大分子药物研发中的人工智能公司

机器学习等人工智能（AI）技术正在改变药物研发格局，这得益于不断增长的数据量和计算能力。



历史上，小分子药物一直处于 AI 在药物发现中的应用前沿，包括建模小分子-靶点相互作用、先导候选药物优化和安全性预测。然而，AI 工具正越来越多地应用于大分子药物，包括抗体、基因疗法和基于 RNA 的疗法，此类药物/疗法在生物制药领域的重要性越来越高，例如，它们在 2022 年批准的新分子中占比已达 40%。而在肿瘤学领域，预计到 2030 年，大分子药物将占到药物收入的约 50%，其中超过 80%将来自抗体药物。

近日，Nature 旗下综述期刊 Nature Reviews Drug Discovery 发表了题为：The company landscape for artificial intelligence in large-molecule drug discovery 的文章。

该文章概述了 AI 技术是如何被应用于大分子药物发现的，分析了当前进行 AI 大分子药物开发的公司及其研发管线，并指出了生物制药行业需要如何在该领域取得成功。

AI 在大分子药物研发中的应用

机器学习等 AI 工具正在被应用到药物研发的各个领域。这篇文章重点关注了 AI 在大分子药物发现的三个方面——结构预测、功能预测和新候选药物生成，

这些方面的方法正在迅速成熟。本文未涵盖利用 AI 预测有应答的患者人群、降低试验风险或加速试验等方向。

预测大分子结构的工具

蛋白质结构预测对于大分子药物发现来说具有重要价值，从靶标鉴定（例如预测抗原结构）到先导药物的鉴定和优化。2020 年，机器学习模型 AlphaFold2 仅通过氨基酸序列就成功预测了蛋白质的三维结构，这是一个里程碑式的进步。如今，许多公司正在使用 AlphaFold2 或其他具有类似准确性的蛋白质结构预测模型（例如 RoseTTAFold）。

目前的开发正在改进这些结构预测工具的易用性、可扩展性、对孤儿蛋白的预测性能和可再训练性，例如 ColabFold、FastFold、OmegaFold 和 OpenFold，并使用与大型语言模型（例如 GPT-4）类似的不同架构（例如 ESMFold）提高普适性和速度。

预测大分子功能的工具

人工智能工具已被开发用于预测大分子治疗候选药物的功能，包括抗原-抗体或 RNA-蛋白的结合，以及它们的可成药性。可以使用机器学习模型（例如

梯度提升树) 或计算模型 (例如分子动力学模拟) 进行这些预测。

最近, 深度学习方法 (包括基于模型、卷积神经网络、循环神经网络或大分子语言模型) 已经被使用来预测抗体亲和力等治疗的关键属性。这些方法可以使用大分子的各种表示形式, 例如, 抗体抗原氨基酸的三维坐标, 或者用于卷积神经网络或大分子语言模型架构的氨基酸或核苷酸序列。

生成大分子疗法候选物

快速增长的数据可用性正在支持可以大规模生成蛋白质、抗体或 mRNA 的算法的开发, 作为先导药物生成或优化的一部分。例如基于扩散模型、变分自编码器模型或使用类似于 GPT-4 的大型语言模型, 根据模态数据 (例如蛋白质序列信息) 进行训练。

实施这些算法的具体例子包括开发新的抗原结构, 确定稳定和免疫原性的最佳 mRNA 结构, 以及新型蛋白和抗体的设计。设计的分子通常随后在高通量系统中进行评估, 以实验确认功能性质, 并进一步加强和改进候选分子的生成。

上述工具都有通用性, 例如, RFdiffusion 或 ESM 模型已被用于生成新蛋白质以及蛋白质结构和功能的预测。这些工具现在正在补充或取代传统的计算

方法。

新兴公司全景图

本文系统分析了从事大分子药物设计的 AI 驱动的生物技术公司，确定了其中 82 家活跃在该领域的公司，其中超过 60% 的公司都是在过去 5 年里成立的，这表明这是一个在最近的技术变革（例如 AlphaFold 的出现）推动下的一个新兴行业。

2021 年，该领域公司共融资了 39 亿美元，其中仅风险投资就高达 27 亿美元，但在 2022 年下降到了 7 亿美元。其中值得关注的有，AbCellera 和 Absci（这两家公司均专注于抗体发现）分别在 2020 年和 2021 年通过 IPO 募资了 5.55 亿美元和 2 亿美元，Generate Biomedicines（专注于蛋白质药物发现）在 2021 年完成了 3.7 亿美元的 B 轮融资。

大分子药物研发的 AI 驱动生物技术公司的融资类型

一些知名生物制药公司正在通过内部组建和收购的方式建立用于大分子药物发现的 AI 能力，例如，基因泰克（Genentech）2021 年收购了 Prescient Design（这是一家 AI 驱动的生物技术公司，将机器学习应用于抗体发现）。

一些知名大型生物制药公司也在与 AI 驱动的生物技术公司展开合作，双方在 2021 年确定了 51 个合作伙伴关系，显著高于 2016 年的 10 个。例如，BigHat（专注于抗体发现）与安进（Amgen）、AbCellera（专注于抗体发现）与艾伯维（AbbVie）以及 Mabsilicon（专注于抗体发现）与 OSE 的合作。

基于 AI 的大多处于早期临床阶段，目前只有 3 款进入临床 2 期，分别是 Evaxion 公司开发的用于转移性黑色素瘤的基于肽的个性化癌症免疫疗法，ZielBio 公司开发的用于实体瘤的抗凝集素单克隆抗体，PharmCADD 公司开发的用于 SARS-CoV-2 的 mRNA 候选疫苗。此外，还有 3 款处于临床 1 期，分别是 Peptilogics 公司开发的用于治疗假体周围感染的肽类抗生素，SparX 公司开发的用于治疗胃癌的靶向 Claudin 18.2 的单克隆抗体，以及 PharmCADD 公司开发的另一款 SARS-CoV-2 的 mRNA 疫苗。

在候选大分子药物开发中，这些利用了基于 AI 的靶点识别、功能（结合）预测和抗体生成（包括使用生成式 AI）。

基于 AI 的大分子药物研发公司的管线的研发进度

在临床前阶段，AI 驱动的生物技术公司开发的候选大分子药物中最多的在

肿瘤领域，有 8 个候选分子。在药物类型方面，处于临床前开发阶段的 RNA 和多肽类（约占所有分子的 50%）比抗体类更多。这可能是由于抗体设计的复杂性更高，而且缺乏用于训练机器学习工具的功能数据。

展望

这些分析表明，AI 在大分子药物发现中的应用正在迅速增加。然而，尽管这些 AI 工具的潜在价值已经在学术研究中得到了令人信服的证明，但到目前为止，它们的大规模部署仍然具有挑战性。

要实现 AI 在该领域的潜力，需要解决几个问题。首先，AI 模型必须充分融入研究过程，并适当培养研究科学家的能力。通过这样做，公司可以快速训练和验证机器学习算法，同时也克服了人工智能工作的潜在“孤岛”。例如，当使用大语言模型进行抗体亲和力的高通量预测时，通过整合的研究系统进行及时的体外实验验证将进一步训练和提高计算机模型的性能。其次，必须建立技术环境，例如复合型数据工程管线（集成并能够自动标记公共和内部数据）、合适的计算基础设施以及源系统的集成建模环境。这使得公司能够训练和改进模型，以指导和改进下一个实验。最后，在药物发现之外的整个研发过程中，需

要将 AI 技术整合到试验设计和患者亚群识别等领域，以进一步提高试验效率和成功概率。

资料来源：

Nature 系列综述：大分子药物研发中的人工智能公司[EB/OL].(2023.11.02).[2023.11.22].

<https://news.bioon.com/article/d98ae9887863.html>

BioNTech 以 3.62 亿英镑收购 InstaDeep，加强 AI 药物研发布局

通过收购，BioNTech 将建立一个全面整合的全企业能力，通过利用人工智能和机器学习技术在 BioNTech 的治疗平台和业务中大规模地发现、设计和开发下一代免疫疗法。

2023 年 1 月 10 日，BioNTech SE (Nasdaq: BNTX) 和 InstaDeep 宣布，他们已达成协议，根据该协议，BioNTech 将收购人工智能和机器学习领域的全球领先技术公司 InstaDeep。

该交易包括约 3.62 亿英镑的现金，收购 InstaDeep 剩余股份的 100%，不包括 BioNTech 已拥有的股份。此外，InstaDeep 股东将有资格获得额外的基于业绩的未来里程碑付款，最高可达约 2 亿英镑。该交易是在 BioNTech 于 2022 年 1 月作为 InstaDeep B 轮融资的一部分的初始股权投资之后进行的。



此次收购支持了 BioNTech 的战略，即在人工智能驱动的药物发现和开发下一代免疫疗法和疫苗方面建立世界领先的能力，以解决具有高度未满足医疗需求的疾病。这项交易将合并两个具有共同文化的组织，预计将为 BioNTech 的员工队伍增加约 240 名高技能的专业人员，包括人工智能、ML、生物工程、数据科学和软件开发方面的团队。通过此次收购，BioNTech 将扩大其在该领域的全球研究合作者网络，并在美国、欧洲、非洲和中东的关键人才中心扩大其足迹。

随着对 InstaDeep 的收购，经过验证的、新颖的 BioNTech 训练的基于人工智能和 ML 的模型将被嵌入 BioNTech 的发现平台，并通过 InstaDeep 的 DeepChain™ 平台连接到综合自动化实验室基础设施。这样做的目的是为了实现在高通量设计和大规模测试新型候选药物。此外，BioNTech 计划开发新的人工智能和 ML 技术解决方案，旨在将其应用于关键的战略和运营功能。

此次收购建立在自 2019 年以来两家公司加强合作的成功记录之上：2020 年 11 月，两家公司宣布建立多年的战略合作和联合人工智能创新实验室，应



用人工智能和 ML 技术的最新进展，开发治疗一系列癌症和传染病的新型药物。

这两家公司已经联合开发了多个基于人工智能的端到端应用，这些应用是在各种科学领域的公共和专有数据集上训练出来的。其中包括为 BioNTech 的 RiboCytokine® 和 RiboMab® 平台加强新抗原选择、核糖核酸序列优化的项目，以及开发一个早期预警系统，以检测和监测高风险的 SARS-CoV-2 变体，该系统基于其逃避免疫防御的能力和传播潜力（定义为适配性），已于 2022 年 1 月公布。

BioNTech 首席执行官兼联合创始人、医学博士 Ugur Sahin 教授说：“自 BioNTech 成立以来，我们一直专注于利用计算解决方案来创造能够惠及广大患者的个性化免疫疗法。收购 InstaDeep 使我们能够将数字世界迅速发展的人工智能能力纳入我们的技术、研究、药物发现、制造和部署过程。我们的目标是使 BioNTech 成为一家技术公司，将人工智能无缝地融入我们工作的各个方面”。

BioNTech 很早就认识到人工智能和 ML 能力的日益重要性。例如，完全个



个性化的新抗原特异性免疫治疗方法 (“iNeST”1) 是以编码多个患者特异性新表位的 mRNA 为基础。在 2014 年开始的临床试验中，BioNTech 为首批接受个体化疫苗治疗的患者手动选择了新表位。它很早就投资开发了经过 ML 训练的算法，以改善对新表位的预测，初步结果于 2017 年发表在 Nature 杂志上。这些算法在与 InstaDeep 的合作中得到了进一步加强。

“人工智能正在飞速发展，我们在 InstaDeep 的使命一直是确保它惠及所有人。我们非常高兴能与 BioNTech 联手并成为团队，我们与 BioNTech 有着相同的深度科技创新文化和对人类积极影响的关注”，InstaDeep 的首席执行官兼联合创始人 Karim Beguir 说。“我们共同设想建立一个世界领导者，将生物制药研究和人工智能结合起来，目的是设计下一代免疫疗法，加强医疗服务--从而帮助对抗癌症和其他疾病。”

这项交易预计将在 2023 年上半年完成，但需符合惯例的成交条件和监管部门的批准。交易结束后，InstaDeep 将作为 BioNTech 在英国的全球子公司运营。InstaDeep 预计将成为 BioNTech 围绕人工智能和 ML 的不断增长的举

措组合的核心。除了以 BioNTech 为重点的项目外，InstaDeep 将继续为世界

各地不同行业的客户提供服务，包括科技、运输和物流、工业和金融服务领域。

资料来源：

[1]智药邦 2023.01.12 新闻

[2]BioNTech to Acquire InstaDeep to Strengthen Pioneering Position in the Field of AI-powered Drug Discovery, Design and Development(2023.01.10).[2023.11.22].

<https://investors.biontech.de/news-releases/news-release-details/biontech-acquire-instadeep-strengthen-pioneering-position-field>



地址：上海市永福路 265 号

邮编：200031

编辑：李春霞

责编：姚恒美

编审：林鹤

电话：021-64455555

邮件：istis@libnet.sh.cn

网址：www.istis.sh.cn