Insilico Medicine

公司演示材料

2026年2月

免责申明

Insilico Medicine

目录

概览

成立于2014年的全球领先AI驱动生物科技公司

利用我们自主研发、快速迭代的Pharma.AI平台，加快药物发现和开发

价值观

- 患者优先
- 不懈创新
- 坦诚正直
- 持续精进

蒙特利尔
波士顿
纽约

阿布扎比

宜兴
上海
台北
香港

收入

$30.1M (2022) +70% → $51.2M (2023) +68% → $85.8M (2024)
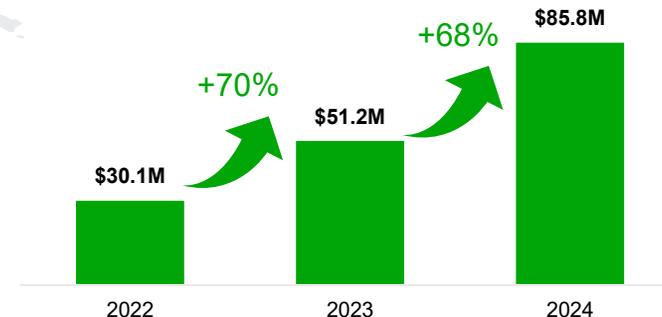
40亿+美元
总签约
金额

9个
自2021年以来的
对外授权/合作资产

>50家
AI平台付费客户
Lilly　novo nordisk®

2个
非医药行业的大型合作
项目
syngenta
一家全球性能源公司

> 20 项临床 / IND
申报阶段资产
主要资产：
全球潜在临床进展最快的
AI发现候选药物

**雄厚的
现金实力**

AI平台

Insilico Medicine

全球领先的生成式AI驱动型端到端药物研发平台

Biology42

PandaOmics
新靶点的发现及优先级安排

Generative Biologics
发现及优化新型生物分子

Life Star 2
自动化实验室操作环境

Large Language of Life Models (LLLMs)

Precious1GPT
多组学年龄预测与靶点识别

Precious2GPT
多模态多组学生物数据集合

Precious3GPT
多组织多物种多模态多组学生命模型

Chemistry42

Generative Chemistry
生成新型分子

Alchemistry
基于物理模拟的相对结合自由能计算引擎

ADMET & Off-target
即时优化

MDFlow
用于生物分子和复合物的端到端模拟工作流程

Retrosynthesis
预测分子结构的合成路径

Model Training
以数据训练先进模型

MolSpace
使用降维技术可视化和分析化学数据

Nach01
多模态自然与化学语言基础模型

Medicine42

inClinico
设计及预测临床试验

Science42

DORA
多智能体生成研究助手

LLM Assistant

Copilot
生成式对话助手

Environmental Sustainability
用于环境可持续性的生成式AI技术

Data Warehouse
经高效整合及标准化的无缝跨应用数据流动

MMAI Science Gym
提升大语言模型在药物发现与开发中的水平

资深AI行业专家顾问委员会

Bud Mishra, 博士
纽约大学科朗数学科学研究所教授
计算机科学家，计算机科学领域ISI高频引用学者

Alán Aspuru-Guzik, 博士
多伦多大学维克多研究院教授、院长
原哈佛大学教授
生成式化学和量子计算专家

Michael Levitt, 博士
斯坦福大学教授 & 魏茨曼大学教授
计算生物学和结构生物学专家
2013年诺贝尔化学奖获得者

Insilico Medicine

生成式AI驱动药物研发: 从代码到治愈

| 疾病假设
与靶点发现 | 靶点至
苗头化合物 | 苗头化合物
至先导化合物 | 先导化合物
优化 | 临床候选
化合物 | IND申请准备 | Ⅰ期 | Ⅱ期 | Ⅲ期 | 提交上市 |

panda`Omics

- Generative Biologics
- Generative Chemistry

panda`Omics

Precious3GPT

- Nach01
- Retrosynthesis
- Model Training
- MDFlow
- MolSpace
- ADMET & Off-target
- Alchemistry
- Life Star 2

Precious3GPT

in Clinico

Biology42
Chemistry42
Medicine42

Pharma.AI
生成式人工智能平台

| DORA | Copilot | Data Warehouse |

Insilico Medicine

由人工智能与科学家协同赋能的差异化生成式AI平台

我们的**Pharma.AI**和生物学团队全面融合，通过实时反馈提升平台能力

AI驱动药物发现

- ✓ 支持针对特定靶点定制生成数百万目标分子
- ✓ 具备超大规模数据处理能力，用于药物属性筛选及优化
- ✗ 无法适应真实世界的复杂性
- ✗ 实验结果难以有效优化模型
- ✗ 需要海量训练数据集支持

AI ＋ 科学家

- ✓ 发现全新靶点并设计创新分子结构
- ✓ 通过实时反馈循环持续提升预测精准度
- ✓ 基于大数据的多维筛选与优化
- ✓ 高效性
- ✓ 节省人力且成本效益显著

传统药物发现

- ✓ 不需要模型训练集
- ✓ 基于真实世界反馈持续优化
- ✓ 更易建立机制驱动论点并避免数据偏好差
- ✗ 基于对现有有限分子库进行实验筛选
- ✗ 通过人工试错法进行测试和优化
- ✗ 速度缓慢且成本高昂

Insilico Medicine

独特的双首席执行官架构，完美结合技术创新和研发执行能力

高性能计算

生成式生物学AI

生成式化学AI

生成式化学AI

其他先进技术

AI引擎
+药物发现
团队

- 新靶点识别
- 新分子
- 合成路径计划
- 临床试验结果

生物学

药物化学

临床前研究

化学、制造和控制（CMC）

- 实验数据
- 专家审核数据

临床运营
和CRO管理
团队

制剂

临床开发
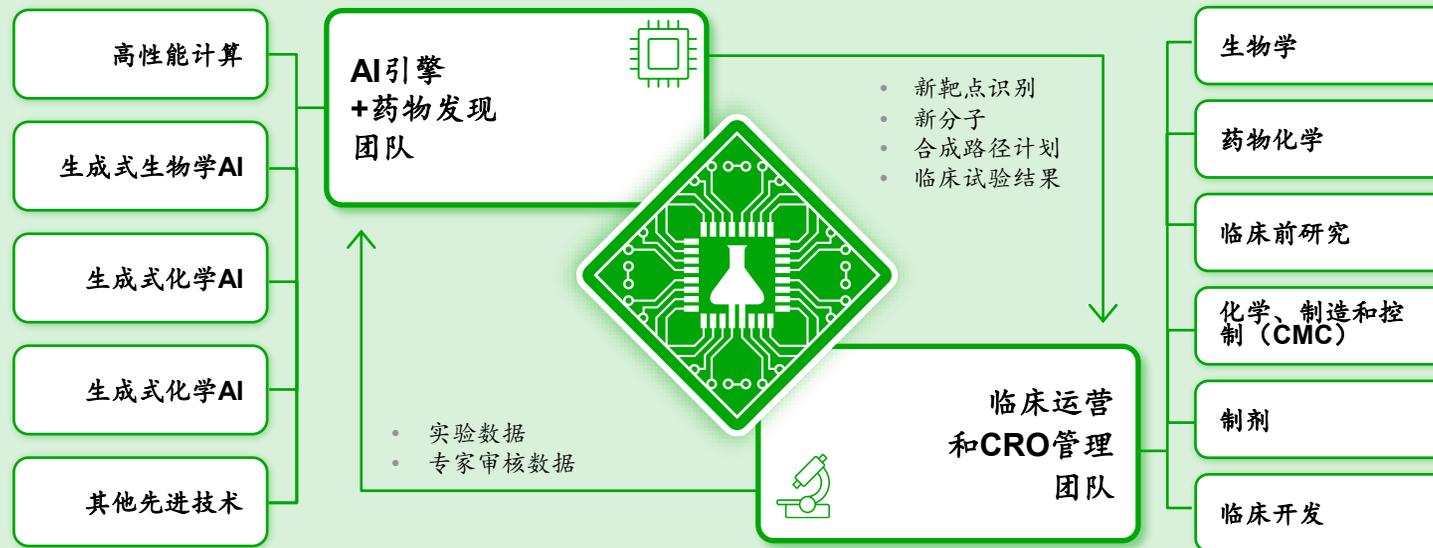
Alex Zhavoronkov

博士

首席执行官，负责人工智能

- 生成式人工智能领域权威专家
- 领导生成式AI平台创新及商业与战略计划实施
- 发表学术论文200余篇，出版学术著作3部

Queen's UNIVERSITY   JOHNS HOPKINS UNIVERSITY

AI驱动药物发现
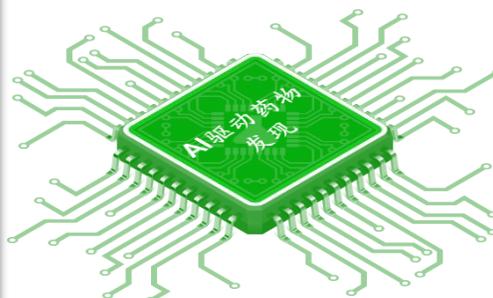
任峰

博士

首席执行官，负责药物发现

- 制药行业资深专家
- 指导研发战略并统筹管理研发体系的运营与执行
- 发表学术论文70余篇，获授权专利100余项

Medicilon   gsk   NUS National University of Singapore

管线

Insilico Medicine

已通过生成式AI平台发现超20项管线资产，主要资产在全球同类公司中进度领先

研发战略

治疗管线

靶点	适应症	靶点识别	从靶点到活性化合物筛选	从活性化合物到先导药物	先导药物优化	IND准备	I期	II期	III期	合作伙伴
				开发阶段						
TNIK	特发性肺纤维化	中国（NMPA）								
	特发性肺纤维化	美国（FDA）							中国IIa期已完成	
	特发性肺纤维化（吸入型）									
PHD1/2	炎症性肠病	中国（NMPA）							澳洲和中国I期已完成	
	慢性肾脏病相关贫血	中国（NMPA）				🤝				TaiGen Biotechnology
USP1	BRCA突变肿瘤	美国（FDA）				🤝				EXELIXIS
QPCTL	肿瘤免疫治疗	中国（NMPA）				🤝				FOSUN PHARMA 复星医药
KAT6	ER+/HER2- 乳腺癌	美国（FDA）				🤝				MENARINI group
MAT2A	MTAP$^{-/-}$ 癌症	美国（FDA）& 中国（NMPA）								
TEAD	实体瘤	美国（FDA）& 中国（NMPA）								
KIF18A	染色体不稳定性实体瘤	美国（FDA）				🤝				MENARINI group
ENPP1	实体瘤	美国（FDA）								
NLRP3	帕金森病	美国（FDA）				🤝				深圳衡泰生物
	炎症性疾病									
Nav1.8	急性和慢性疼痛									
CBLB	肿瘤免疫治疗									
GIPR	肥胖及代谢性疾病									
Pan-KRAS	KRAS突变实体瘤									
Lp(a)	代谢性疾病									
VAV1	炎症性疾病									
APJ	肥胖及代谢性疾病									
CDK4	HR+/HER2- 乳腺癌									
NR3C1	代谢性疾病及肿瘤									

① 发现创新靶点

② 优化现有靶点/药物

图例: 纤维化　肿瘤学　免疫学　其他

注:
1. 除另有说明外，所有项目均设计为口服给药
2. FDA已授予ISM001-055针对IPF适应症的孤儿药
3. 所有研发管线均为公司自主研发成果，拥有全球权益，且未从其他制药公司引进任何靶点或化合物

Insilico Medicine

200余篇学术论文及600余项专利

nature medicine

Article | Open access | Published: 03 June 2025

A generative AI-discovered TNIK inhibitor for idiopathic pulmonary fibrosis: a randomized phase 2a trial

Zuojun Xu ✉, Feng Ren, Ping Wang, Jie Cao, Chunting Tan, Dedong Ma, Li Zhao, Jinghong Dai, Yipeng Ding, Haohui Fang, Huiping Li, Hong Liu, Fengming Luo, Ying Meng, Pinhua Pan, Pingchao Xiang, Zuke Xiao, Sujata Rao, Carol Satler, Sang Liu, Yuan Lv, Heng Zhao, Shan Chen, Hui Cui, ... Alex Zhavoronkov ✉ + Show authors

Nature Medicine (2025) | Cite this article

Metrics

Abstract

Despite substantial progress in artificial intelligence (AI) for generative chemistry, few novel AI-discovered or AI-designed drugs have reached human clinical trials. Here we present the results of the first phase 2a multicenter, double-blind, randomized, placebo-controlled trial testing the safety and efficacy of rentosertib (formerly ISM001-055), a first-in-class AI-generated small-molecule inhibitor of TNIK, a first-in-class target in idiopathic pulmonary fibrosis (IPF) discovered using generative AI. IPF is an age-related progressive lung condition with no current therapies available that reverse the degenerative course of disease. Patients were randomized to 12 weeks of treatment with 30 mg rentosertib once daily (QD, $n = 18$), 30 mg rentosertib twice daily (BID, $n = 18$), 60 mg rentosertib QD ($n = 17$) or placebo ($n = 17$). The primary endpoint was the percentage of patients who have at least one treatment-emergent adverse event, which was similar across all treatment arms (72.2% in patients receiving 30 mg rentosertib QD ($n = 13/18$), 83.3% for 30 mg rentosertib BID ($n = 15/18$), 83.3% for 60 mg rentosertib QD ($n = 15/18$) and 70.6% for placebo ($n = 12/17$)). Treatment-related serious adverse event rates were low and comparable across treatment groups, with the most common events leading to treatment discontinuation related to liver toxicity or diarrhea.

nature biotechnology

Brief Communication | Open access | Published: 11 December 2024

Intestinal mucosal barrier repair and immune regulation with an AI-developed gut-restricted PHD inhibitor

Yanyun Fu, Xiao Ding, Man Zhang, Chunlei Feng, Ziqi Yan, Feng Wang, Jianyu Xu, Xiaoxia Lin, Xiaoyu Ding, Ling Wang, Yaya Fan, Taotao Li, Yushu Yin, Xing Liang, Chenxi Xu, Shan Chen, Fadi E. Pulous, David Gennert, Frank W. Pun, Petrina Kamya, Feng Ren, Alex Aliper & Alex Zhavoronkov ✉

Nature Biotechnology (2024) | Cite this article

6789 Accesses | 134 Altmetric | Metrics

Abstract

Hypoxia-inducible factor prolyl hydroxylase (PHD) inhibitors have been approved for treating renal anemia yet have failed clinical testing for inflammatory bowel disease because of a lack of efficacy. Here we used a multimodel multimodal generative artificial intelligence platform to design an orally gut-restricted selective PHD1 and PHD2 inhibitor that exhibits favorable safety and pharmacokinetic profiles in preclinical studies. ISM012-042 restores intestinal barrier function and alleviates gut inflammation in multiple experimental colitis models.

nature medicine

Review Article | Published: 14 February 2024

Validation of biomarkers of aging

Mahdi Moqri, Chiara Herzog, Jesse R. Poganik, Kejun Ying, Jamie N. Justice, Daniel W. Belsky, Albert T. Higgins-Chen, Brian H. Chen, Alan A. Cohen, Georg Fuellen, Sara Hägg, Riccardo E. Marioni, Martin Widschwendter, Kristen Fortney, Peter O. Fedichev, Alex Zhavoronkov, Nir Barzilai, Jessica Lasky-Su, Douglas P. Kiel, Brian K. Kennedy, Steven Cummings, P. Eline Slagboom, Eric Verdin, Andrea B. Maier, ... Luigi Ferrucci + Show authors

Nature Medicine 30, 360–372 (2024) | Cite this article

27k Accesses | 84 Citations | 175 Altmetric | Metrics

nature biotechnology

Brief Communication | Open access | Published: 22 January 2025

Quantum-computing-enhanced algorithm unveils potential KRAS inhibitors

Mohammad Ghazi Vakili, Christoph Gorgulla ✉, Jamie Snider, AkshatKumar Nigam ✉, Dmitry Bezrukov, Daniel Varoli, Alex Aliper, Daniil Polykovsky, Krishna M. Padmanabha Das, Huel Cox III, Anna Lyakisheva, Ardalan Hosseini Mansob, Zhong Yao, Lela Bitar, Danielle Tahoulas, Dora Čerina, Eugene Radchenko, Xiao Ding, Jinxin Liu, Fanye Meng, Feng Ren, Yudong Cao, Igor Stagljar ✉, Alán Aspuru-Guzik ✉ & Alex Zhavoronkov ✉

nature biotechnology

Article | Open access | Published: 08 March 2024

A small-molecule TNIK inhibitor targets fibrosis in preclinical and clinical models

Feng Ren, Alex Aliper, Jian Chen, Heng Zhao, Sujata Rao, Christoph Kuppe, Ivan V. Ozerov, Man Zhang, Klaus Witte, Chris Kruse, Vladimir Aladinskiy, Yan Ivanenkov, Daniil Polykovskiy, Yanyun Fu, Eugene Babin, Junwen Qiao, Xing Liang, Zhenzhen Mou, Hui Wang, Frank W. Pun, Pedro Torres-Ayuso, Alexander Veviorskiy, Dandan Song, Sang Liu, ... Alex Zhavoronkov + Show authors

Nature Biotechnology (2024) | Cite this article

100k Accesses | 41 Citations | 891 Altmetric | Metrics

ADVANCED SCIENCE

Research Article | 🔓 Open Access | ⓒ ⓘ

Utilizing AI for the Identification and Validation of Novel Therapeutic Targets and Repurposed Drugs for Endometriosis

Bonnie Hei Man Liu, Yuezhen Lin, Xi Long, Sze Wan Hung, Anna Gaponova, Feng Ren, Alex Zhavoronkov, Frank W. Pun ✉, Chi Chiu Wang ✉

First published: 12 December 2024 | https://doi.org/10.1002/advs.202406565 | Citations: 1

nature medicine

WORLD VIEW | 07 February 2023

Caution with AI-generated content in biomedicine

Generative artificial intelligence tools such as chatGPT have many uses in medicine, but a lack of accuracy poses problems.

nature biotechnology

> Nat Biotechnol. 2020 Oct;38(10):1127-1131. doi: 10.1038/s41587-020-0686-x.

Artificial intelligence, drug repurposing and peer review

Jeremy M Levin [1,2], Tudor I Oprea [3,4,5], Sagie Davidovich [7], Thomas Clozel [8], John P Overington [9], Quentin Vanhaelen [10], Charles R Cantor [11], Evelyne Bischof [12,13,14], Alex Zhavoronkov [15]

nature biotechnology

Brief Communication | Published: 02 September 2019

Deep learning enables rapid identification of potent DDR1 kinase inhibitors

Alex Zhavoronkov, Yan A. Ivanenkov, Alex Aliper, Mark S. Veselov, Vladimir A. Aladinskiy, Anastasiya V. Aladinskaya, Victor A. Terentiev, Daniil A. Polykovskiy, Maksim D. Kuznetsov, Arip Asadulaev, Yury Volkov, Artem Zholus, Rim R. Shayakhmetov, Alexander Zhebrak, Lidiya I. Minaeva, Bogdan A. Zagribelnyy, Lennart H. Lee, Richard Soll, David Madge, Li Xing, Tao Guo & Alán Aspuru-Guzik

Nature Biotechnology 37, 1038–1040 (2019) | Cite this article

86k Accesses | 1607 Altmetric | Metrics

生物学家、化学家与药物研发专家顾问委员会

Charles Cantor博士
Sequenom联合创始人、
波士顿大学教授
基因组学权威专家、人类基因
组计划首席科学家

Michael Levitt博士
斯坦福大学教授、
魏茨曼科学研究所教授
计算生物学与结构生物学权威学者、
2013年诺贝尔化学奖得主

Klaus Witte博士
Sequenom联合创始人、
德国药理学与毒理学学会会士
海德堡大学第二伦理委员会成员、基因组学
权威专家、人类基因组计划前首席科学家

Stevan W Djuric博士
堪萨斯大学客座教授、艾伯维前副总裁
药物化学技术权威、免疫炎症疾病研究专家

Donald Small博士
约翰霍普金斯医学研究所儿科
肿瘤学中心主任、教授
药物研究权威、靶点发现专家

Insilico Medicine

传统药物研发耗时超过**10年**，耗资超过**20亿美元***

疾病假说与靶点发现**

通常需要几个月到几十年的时间，在使用政府资金的学术机构中进行

靶标验证与苗头化合物筛选

苗头化合物到先导化合物优化

先导化合物优化

临床前阶段

临床I期

临床II期

临床III期

上市申报至产品上市

产品销售与营销

现实世界证据

18亿美元　　**2010年开发成本（发现目标后）**

1-5 %	80%	75%	85%	69%	54%	34%	70%	91%	ρ（Ts）
1-10	1.0	1.5	2.0	1.0	1.5	2.5	2.5	1.5	周期时间（年）
$0-1000	$94	$166	$414	$150	$273	$319	$314	$48	上市前成本（资本化），百万美元，2010年数据
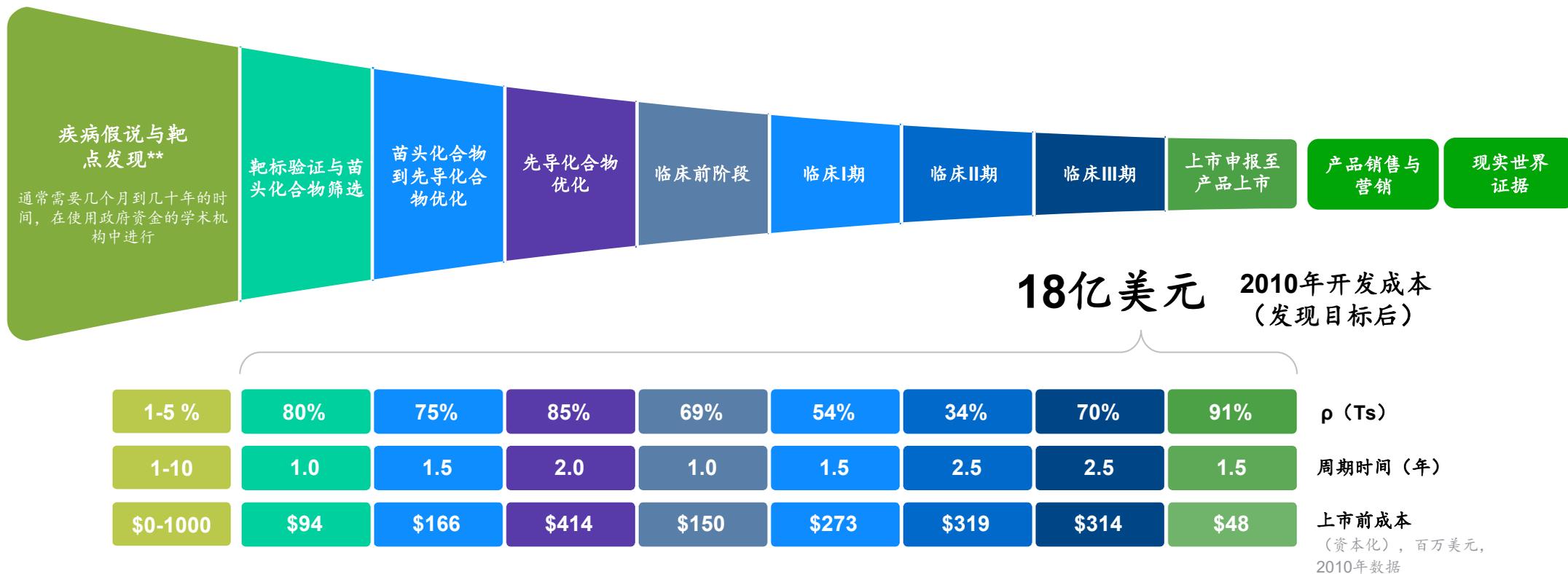
药物发现　　　　**药物研发**　　　　**销售和营销**

*修改自Paul et al, How to improve R&D productivity: the pharmaceutical industry's grand challenge. Nature Reviews Drug Discovery, 2010
**基于对制药行业高管的访谈

Insilico Medicine

基于AI的药物研发较传统研发成本更低、速度更快、成功率更高

| 成本更低 | 速度更快 | 成功率更高 | 药物研发中的AI应用 |

部分临床前候选药物的成本

从靶点发现到临床前候选药物耗时（月）

为识别临床前候选药物合成的分子（个）

成本更低

>4亿美元

300-500万美元

传统方法   Insilico Medicine

速度更快

>54个月

12–18个月

传统方法   Insilico Medicine

成功率更高

~1,000

60–200

传统方法   Insilico Medicine
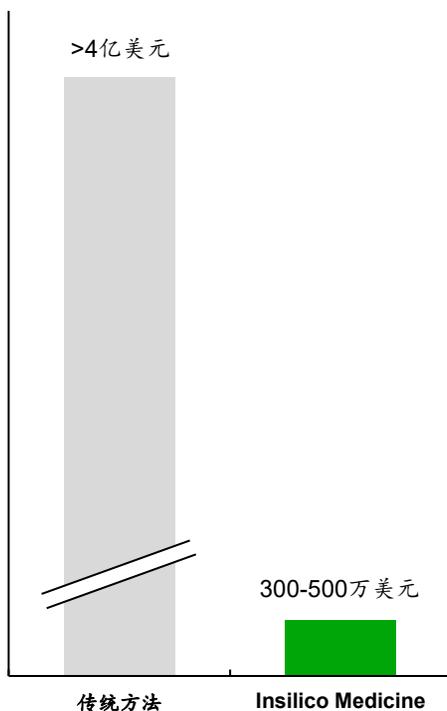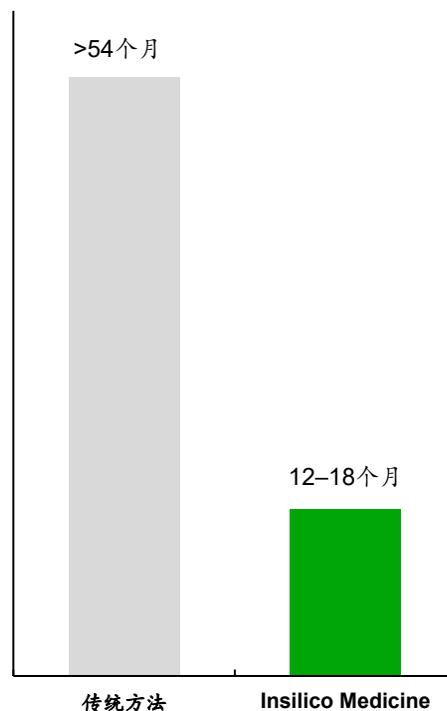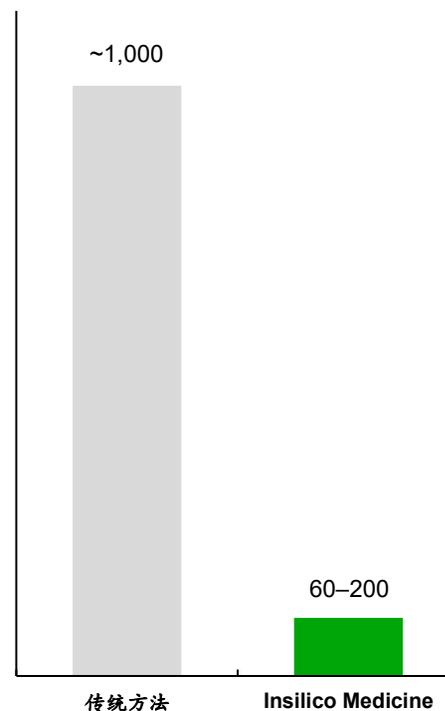
药物研发中的AI应用

84%
AI将蛋白质折叠的预测精度提升至

20%
AI可将化合物筛选精度提升

75%
基于AI的药物毒性预测精度达

92%
AI模型对化合物的分类精度达

2021-2025年Pharma.AI促进药物发现实现的突破

27 个开发候选药物

2021年:	2022年:	2023年:	2024年:	2025年:
2个 开发候选药物	**9个** 开发候选药物	**6个** 开发候选药物	**5个** 开发候选药物	**5个** 开发候选药物

12 个分子获得IND批准

已完成特发性肺纤维化的 **IIa期试验**

已完成炎症肠病的两项 **I期试验**

到达开发候选药物的最短时间： **8个月**

到达开发候选药物的平均时间： **12–15个月**

到达开发候选药物的最长时间： **18个月**

每个项目合成**60~200**个分子

发表**4**篇《自然-生物科学》期刊论文

案例研究：ISM001_055（TNIK抑制剂）为全球临床进展最快的AIDD候选药物

| 疾病假设与靶点识别 | 靶点至苗头化合物 | 苗头化合物至先导化合物 | 先导化合物优化 | 候选药物验证 | 0期与IND启用研究 | I期 | II期 | III期 | 提交上市 |

2019 生物AI
老化与纤维化目标发现
老化标志评估
优先目标

TNIK
主要目标涉及老化及纤维化 Primary

2020 化学AI
医药AI
体外研究

合成 Rentosertib
指示优先顺序

2021 体外研究
LifeStar1 自动化实验室
0期临床试验

2022 I期临床试验
新西兰 中国

2023 IIa期临床试验
在中国启动
已获得FDA的IND批准

2024 IIa期临床试验
完成
FVC + 生物标志

AGING — 2023年3月
Hallmarks of aging-based dual-purpose disease and age-associated targets predicted using PandaOmics AI-powered discovery engine
靶点假设

nature biotechnology — 2024年3月
A small-molecule TNIK inhibitor targets fibrosis in preclinical and clinical models
靶点→分子→I期临床

nature aging — 2024年4月
Drug discovery by AI trained on aging biology
概念阐释

Trends in Pharmacological Sciences — 2024年6月
TNIK's emerging role in cancer, metabolism, and age-related diseases
适应症扩展

Journal of Medicinal Chemistry — 2024年10月
Discovery of Bis-imidazolecarboxamide Derivatives as Novel, Potent, and Selective TNIK Inhibitors for the Treatment of Idiopathic Pulmonary Fibrosis
化学研发历程

Aging and Disease — 2025年2月
AI-Driven Robotics Laboratory Identifies Pharmacological TNIK Inhibition as a Potent Senomorphic Agent
抗衰老功效获证实

nature medicine — 2025年6月
A generative AI-discovered TNIK inhibitor for idiopathic pulmonary fibrosis: a randomized phase 2a trial
IIa期临床数据公布

IPF领域存在巨大未满足需求，目前治疗方式欠佳

市场机遇
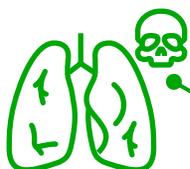
纤维化是诸多慢性炎症疾病的病理特征，即指组织和器官瘢痕和硬化

其中，*特发性肺纤维化（IPF）尤为严重且复杂*

IPF具有渐进性、可用治疗选择有限以及预后不佳的性质，是当前研究与药物开发的主要聚焦领域

全球IPF发病率

千例

复合年增长率：
- 554.4 (2019)
- 612.4 (2023) — 2.5%
- 1,067.7 (2032E) — 6.4%

IPF药物市场规模

十亿美元

复合年增长率：
- 2.3 (2019)
- 4.3 (2023) — 16.8%
- 8.0 (2032E) — 7.1%
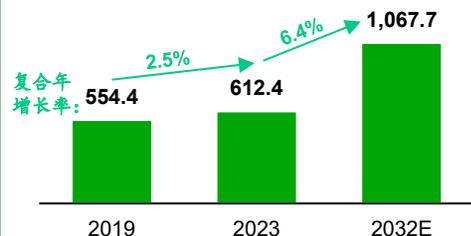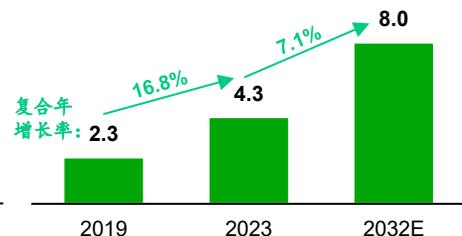
全球IPF药物市场的增长驱动因素

- IPF患者的发病率及患病率不断增加
- 对IPF的认知不断提高
- IPF诊断的改进
- 政府对孤儿病药物的支持

竞争格局

获批原研药

通用名	品牌名称	原研药制造商	FDA批准日期	药物靶点	原研药获批地区
吡非尼酮	Esbriet®	罗氏/Genentech	2014年10月15日	TGF-β、TNF-α及白细胞介素6	FDA、EMA、PMDA
尼达尼布	OFEV®	勃林格殷格翰	2014年10月15日	酪氨酸激酶	FDA、EMA、国家药监局、PMDA
尼兰多米斯特	Jascayd®	勃林格殷格翰	2025年10月8日	PDE4B	FDA,NMPA

ESBRIET vs 安慰剂用于IPF

	ESBRIET	安慰剂
FVC无下降	22.7%	9.7%
FVC下降10%或以下	83.5%	68.2%
严重不良事件	19.8%	24.9%

OFEV vs 安慰剂用于IPF

	OFEV	安慰剂
FVC无下降	30.1%	18.1%
FVC下降10%或以下	70.6%	56.9%
严重不良事件	31.1%	27.0%

资料来源：Clinicaltrials.gov、FDA标签、弗若斯特沙利文分析
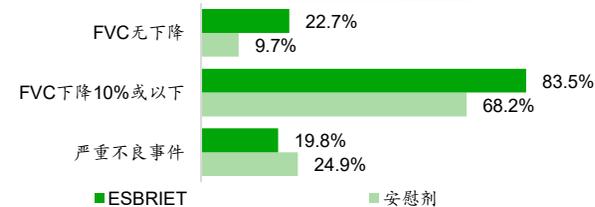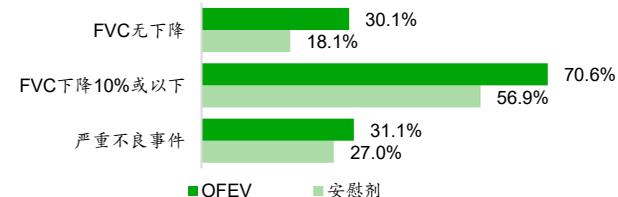
ISM001-055: 靶点发现与分子生成均由公司生成式AI平台完成

INS018_055 (ISM001-055): 生成式AI平台设计的小分子候选药物，通过抑制TRAF2与NCK相互作用激酶(TNIK)，用于治疗纤维化相关适应症

TNIK激酶   ISM001_055

适应症

吸入给药
特发性肺纤维化治疗
临床前候选药物

口服给药
特发性肺纤维化治疗

口服给药
肾脏适应症
临床前候选药物

皮肤纤维化
部分临床前候选药物

肿瘤
部分临床前候选药物

资料来源：Ren, F., Aliper, A., Chen, J., ..., Alex Zhavoronkov. A small-molecule TNIK inhibitor targets fibrosis in preclinical and clinical models. Nat Biotechnol 43, 63–75 (2025). https://doi.org/10.1038/s41587-024-02143-0

Insilico Medicine
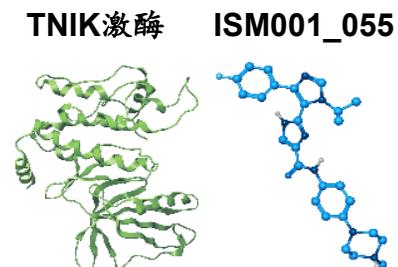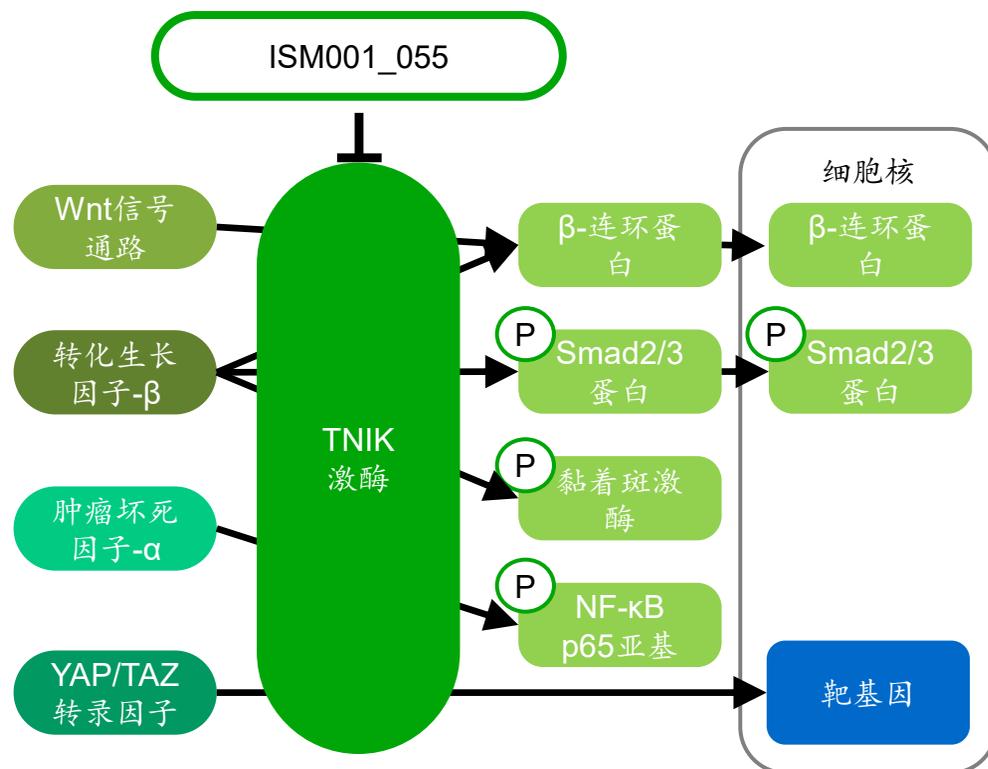
在跨试验数据比较中，ISM001-055的表现优于其他药物

	Insilico Medicine	PLIANT	ENDEAVOR BioMedicines	Boehringer Ingelheim	Roche	Boehringer Ingelheim
与基线相比FVC变化平均值(ml)[1]	**TNIK**	**αvβ6 /αvβ1** *(已终止)*	**Hedgehog抑制剂**	**尼兰多米斯特** *(已获批)*	**吡非尼酮** *(已获批)*	**尼达尼布** *(已获批)*
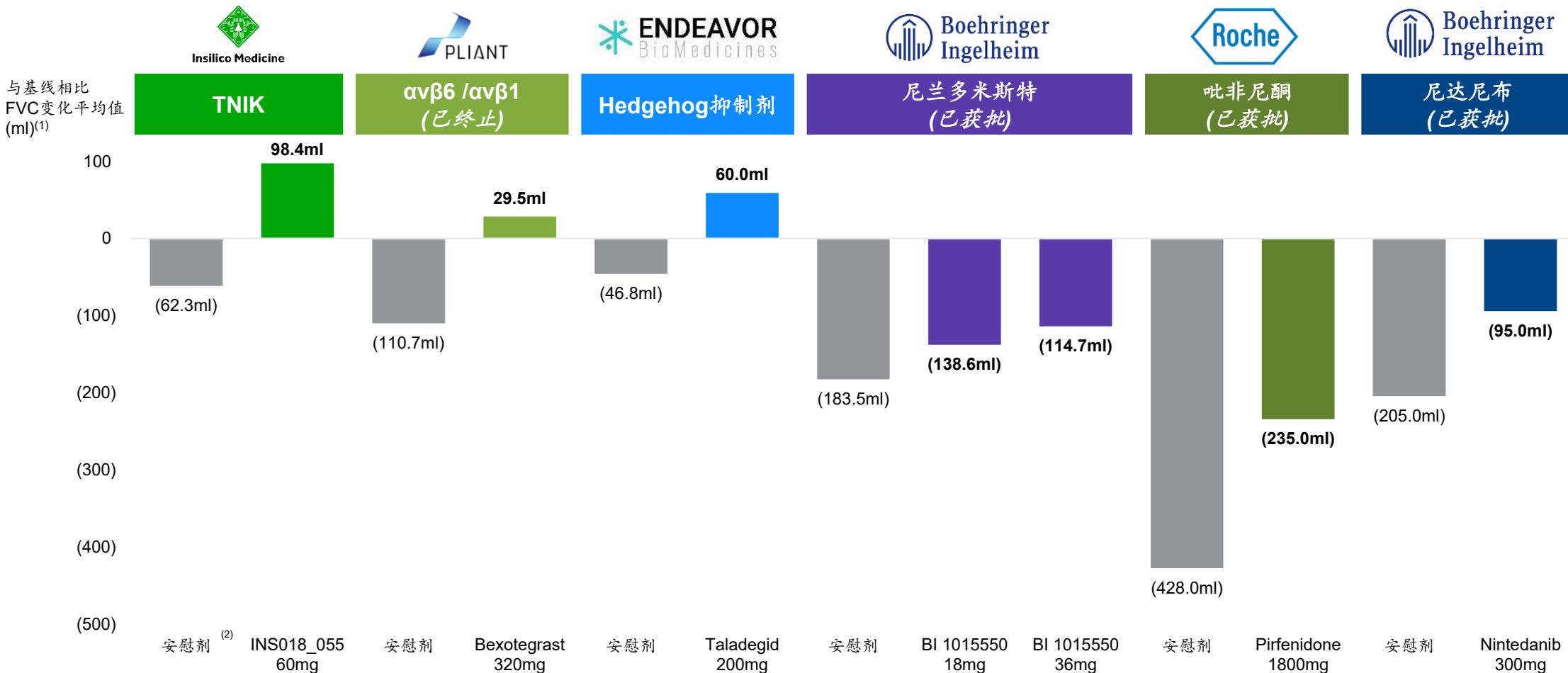
资料来源：Pliant Therapeutics海报、ICLAF 2024演讲、Richeldi, L., Azuma, A., Cottin, V., Hesslinger, C., Stowasser, S., Valenzuela, C., Wijsenbeek, M. S., Zoz, D. F., Voss, F., & Maher, T. M. (2022). Trial of a preferential phosphodiesterase 4B inhibitor for idiopathic pulmonary fibrosis. New England Journal of Medicine, 386(23), 2178–2187. https://doi.org/10.1056/nejmoa2201737、FDA获批药物标签、Boehringer Ingelheim网站

注：
1. 对于临床阶段药物，数据来源于第12周公布的2期研究结果；对于NDA阶段及已获批药物，数据来源于第52周公布的3期研究结果
2. 其中一个异常值被随机分配到安慰剂组，并在分析中剔除

Life Star 2：以人工智能驱动的自动化实验室，高效助力药物发现及管线开发

靶点发现及靶点验证　　药物开发及转化医学　　算法验证

AI模块

panda Omics

Chemistry42
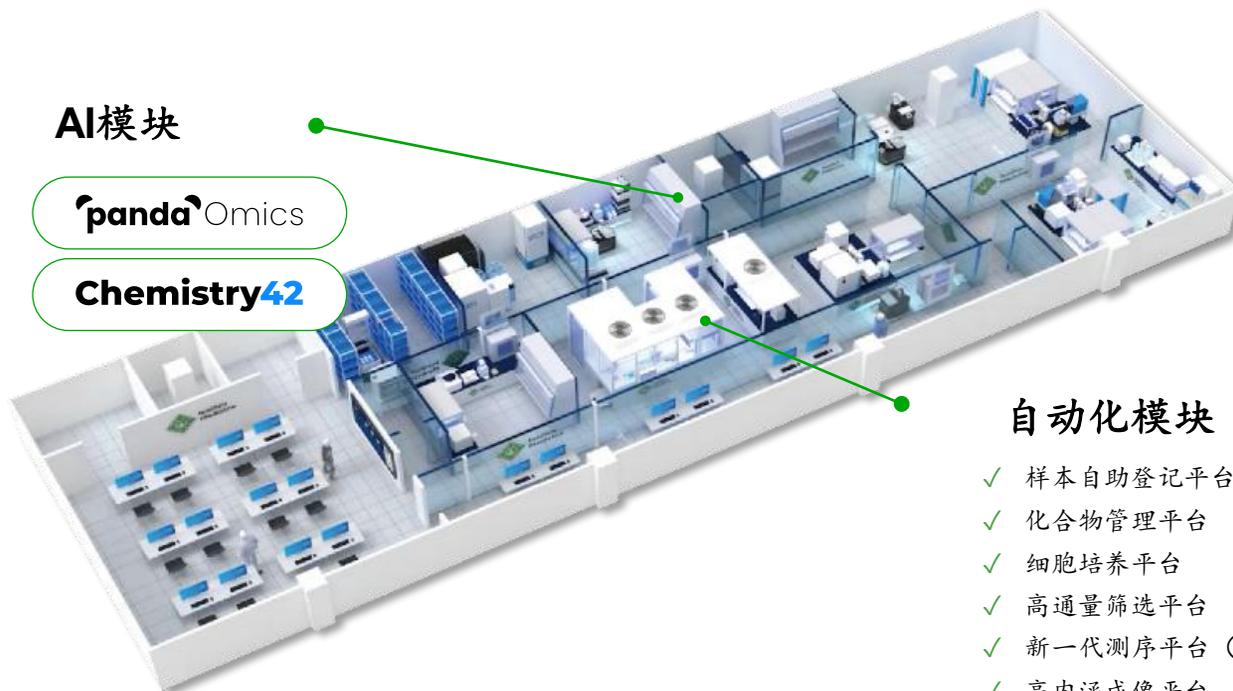
自动化模块

✓ 样本自助登记平台
✓ 化合物管理平台
✓ 细胞培养平台
✓ 高通量筛选平台
✓ 新一代测序平台（NGS）
✓ 高内涵成像平台

Insilico Medicine

迈向化学和生物超级智能：英矽智能的MMAI Gym

经过 **MMAI Gym** 训练后，**LLMs**在关键药物发现基准测试上的表现最高可提升**10倍**，而在训练前，**LLMs**在约**75%–95%**的任务中表现不佳

LLM经过Gym训练的模型在靶点检索方面基准上进步显著

✓ Qwen3-4B 在 MMAI Gym进行一次训练后，在靶点检索方面表现优于所有前沿的大语言模型。
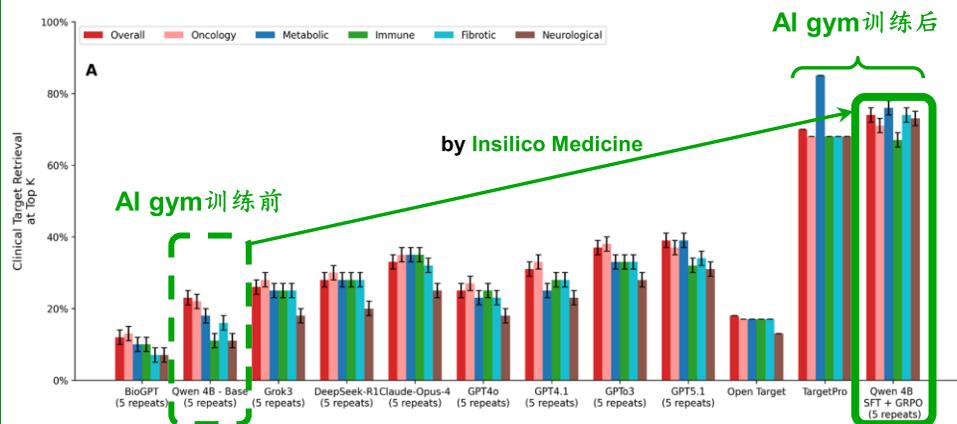
图表1. TargetBench衡量标准的指标[1]

LLM经过Gym训练的模型在临床试验预测基准上进步显著

✓ 基于试验描述和时间划分的临床试验结果预测。Qwen3-4B 基础模型在经过 MMAI Gym 训练后，F1 值从 0.82 提升至 0.94，表现优于 GPT5（0.87）。
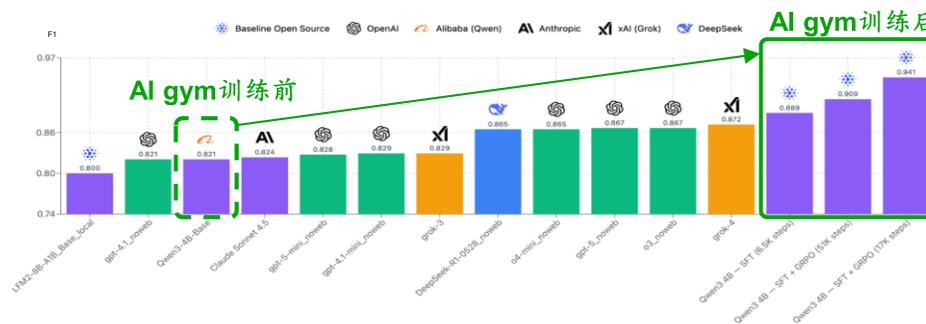
图表2. TrialBenchX衡量标准的指标

商业模式

多支柱商业模式，实现长期增长

药物发现及管线开发

- 已生成**>20**项临床/IND申报阶段资产
- **5**项资产对外授权及大型合作项目，合约总价值 **>33亿美元**
- 2024年，与**59**名客户合作开展药物和其他发现业务

EXELIXIS

MENARINI group

sanofi

FOSUN PHARMA

软件解决方案

Biology42

Chemistry42

Medicine42

Science42

按需模式：软件订阅

本地部署模式：软件安装订阅

非制药领域
使用Pharma.AI于非医药行业发现新分子

加速发现新型、环保的农作物保护产品，在防治病虫害的同时保护生态系统

syngenta

与全球性能源公司合作

开发下一代营养保健食品

S R W

Pharma.AI
独有生成式AI平台

商业模式
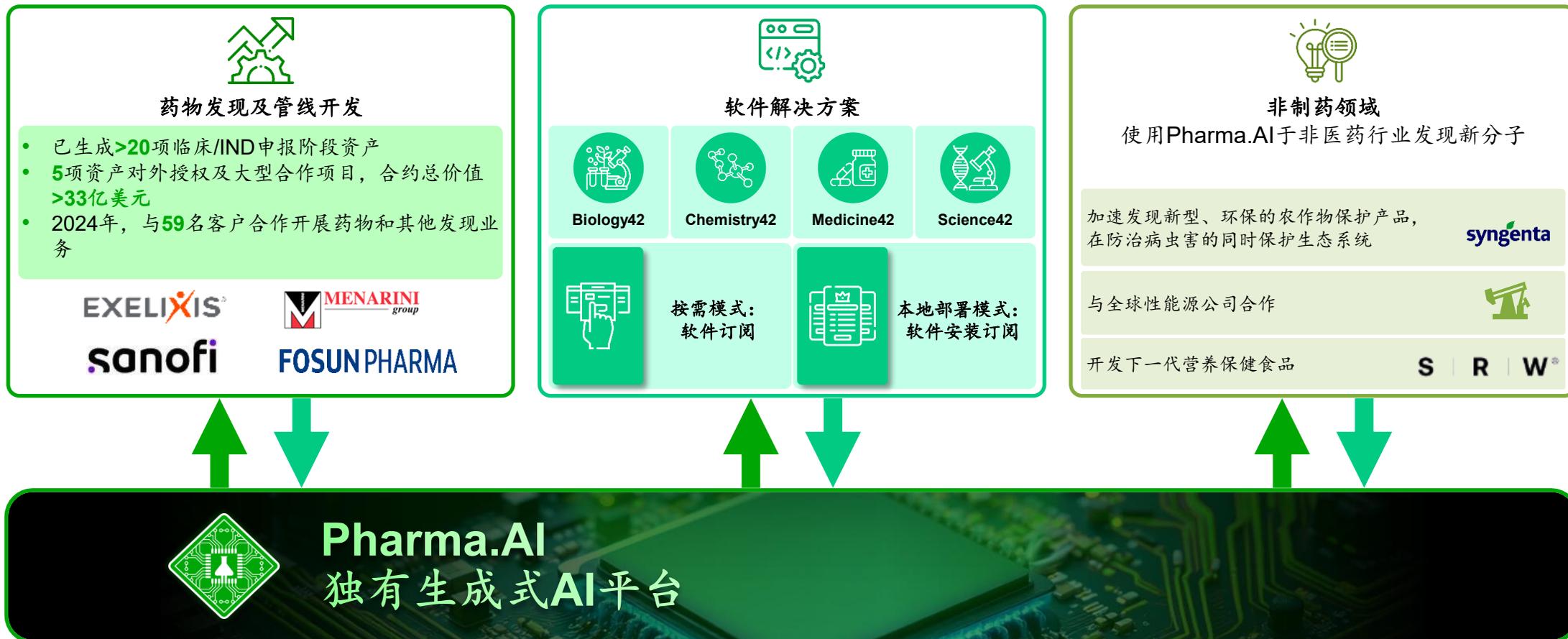
自2021年以来，与顶尖生物和医药公司达成多项合作及对外许可

FOSUN PHARMA

2021
**QPCTL共同开发
& 4个合作靶点**

**1,300万美元首付款 +
1,500万美元股权投资**

总交易价值最高为
8,200万美元

---

sanofi

2022
**最多2+4个
合作靶点**

首付款 +靶点提名费
2,150万美元

总交易价值最高为**12亿美
元**，外加许可权使用费

EXELIXIS®

2023
**USP1
对外授权**

首付款**8,000万美元**
外加里程碑付款

总交易价值接近**10亿美元**，
外加特许权使用费

MENARINI group

2023
**KAT6
对外授权**

首付款**1,200万美元**
外加里程碑付款

总交易价值超过**5亿美元**，
外加特许权使用费

MENARINI group

2024
**KIF18A
对外授权**

首付款**2,000万美元**
外加里程碑付款

总交易价值超**5.5亿美元**，
外加特许权使用费

Lilly

2025
合作研发

总交易金额超过**1亿美元**，
外加许可权使用费

SERVIER

2026
合作研发

首付款及近期研发款项3200
万美元，另加里程碑付款

交易总价值超过**8.88亿美元**，
外加许可权使用费

深圳衡泰生物

2026
**NLRP3
共同开发**

首付款**1,000万美元**
外加里程碑付款

总交易价值超**6,600万美元**，
外加特许权使用费

齐鲁制药 QILU PHARMACEUTICAL

2026
合作研发

总交易金额近**1.2亿美元**，
外加许可权使用费

注：前五大合约（按交易金额计）

财务亮点

Insilico Medicine

财务亮点

收入（百万美元）

- 2022: 30.1（28.6 药物发现及管线开发，1.5 软件解决方案）
- 2023: 51.2（47.8，3.4）
- 2024[1]: 85.8（79.7，4.0，2.1 其他发现）

■ 药物发现及管线开发
■ 软件解决方案
■ 其他发现

- 由于对外授权安排产生的收入增加，从药物发现和管线开发业务产生的收入从2022年到2024年有所增长
- 由于现有软件解决方案客户的订阅量增加以及2024年推出新的软件解决方案，软件解决方案产生的收入从2022年到2024年有所增长
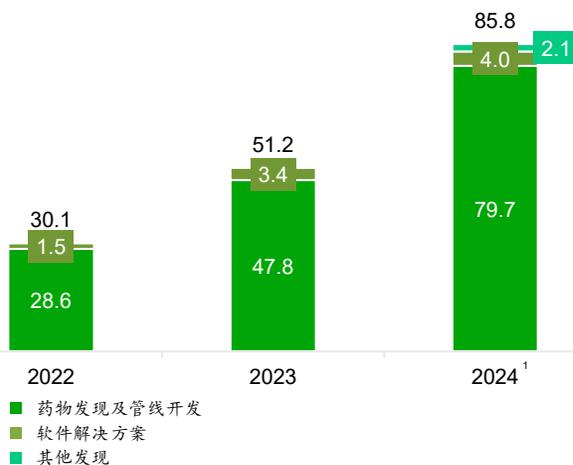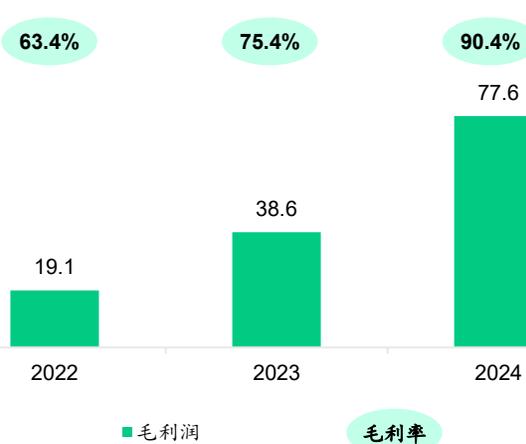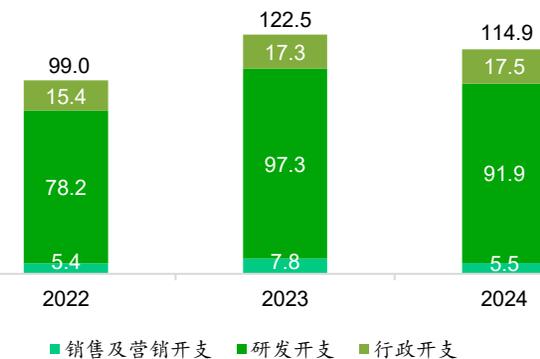
毛利润（百万美元）

- 2022: 19.1（63.4%）
- 2023: 38.6（75.4%）
- 2024: 77.6（90.4%）

■ 毛利润   **毛利率**

- 毛利率从2022年到2024年有所提升，主要得益于药物发现和管线开发业务中对外授权交易带来的较高毛利率。同期软件解决方案的毛利率始终保持在100%
- 计划加强与第三方承包商的合作，使我们能够协商更有利的协议并实现更高的成本效益

销售及营销、研发、及行政开支（百万美元）

- 2022: 99.0（5.4 销售及营销开支，78.2 研发开支，15.4 行政开支）
- 2023: 122.5（7.8，97.3，17.3）
- 2024: 114.9（5.5，91.9，17.5）

■ 销售及营销开支   ■ 研发开支   ■ 行政开支

- 研发开支由2022年的78.2百万美元增加至2023年的97.3百万美元，主要归因于支付予CRO及CDMO的第三方订约成本增加，以及管线扩张令劳工成本增加所致
- 研发开支由2023年的97.3百万美元减少至2024年的91.9百万美元，该减少主要归因于股份薪酬开支及第三方订约成本减少

注：
1. 由于非药品业务板块的收入在之前年度并不显著，因此此前与药物发现合并披露，现于2024年单独披露。

AI药物发现及开发公司的财务状况

公司	收入			趋势	2024A P/S	2025E P/S[2]	截至2026年1月15日总市值
	2022年	2023年	2024年				
Insilico Medicine	30.1百万美元	51.2百万美元	85.8百万美元		45.8x[1]	NA	3,932.9百万美元[3]
XtalPi 晶泰科技	19.3百万美元	24.6百万美元	36.5百万美元		190.4x	74.9x	6,951.3百万美元
Schrödinger	181.0百万美元	216.7百万美元	207.5百万美元		6.5x	5.4x	1,349.8百万美元
RECURSION	39.8百万美元	44.6百万美元	58.8百万美元		42.9x	41.0x	2,523.3百万美元
RELAY THERAPEUTICS	1.4百万美元	25.5百万美元	10.0百万美元		139.8x	109.6x	1,398.2百万美元
AbCellera	485.4百万美元	38.0百万美元	28.8百万美元		44.6x	35.6x	1,283.7百万美元

注：1. 通过E轮投后估值除以2024年收入计算；2. 根据Capital IQ一致预测；3. E轮融资投后估值，截至2025年5月；NA表示不适用

产品管线最丰富、最具创新性的**AI**药物发现及开发公司
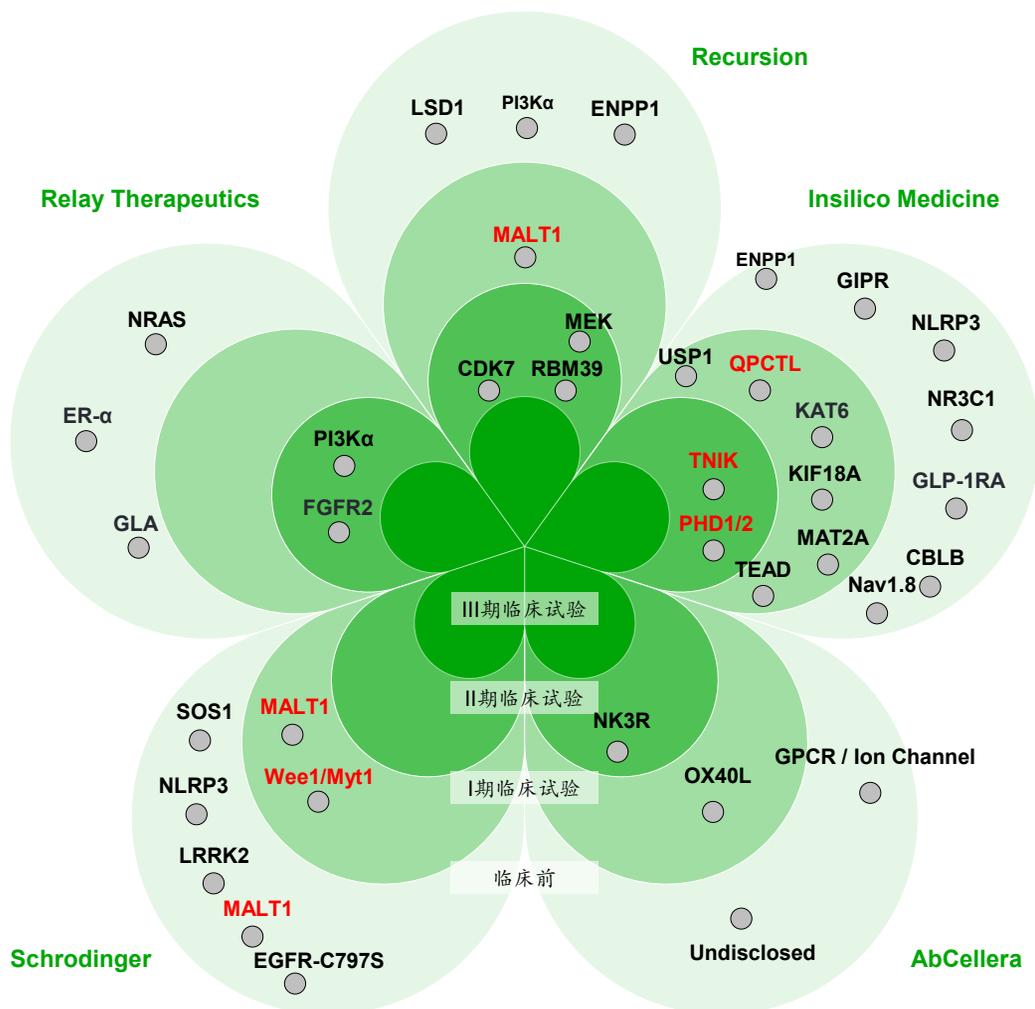
公司	专有产品管线中AI发现的靶点数量	创新型：非创新型靶点数量
Insilico Medicine	27	3:24
Relay Therapeutics	5	0:5
Schrödinger	7	3:7
Recursion	7	1:6
AbCellera	4	0:4

图例

靶段（背景花瓣）

靶点创新性[1]

临床前

高创新型靶点

I期临床试验

非创新型靶点

II期临床试验

III期临床试验

资料来源：弗若斯特沙利文分析

注：高创新型靶点指通过AI发现识别、此前尚未进行临床开发的靶点