

(待分类)

AI × 药物研发 · 2025-2026 趋势分析

发布日期：2026-06-22

Q2

6

深度章节

7

数据图表

0

实战案例

本报告基于公开市场数据、行业研报及官方披露信息编制，力求客观、准确。不构成任何投资建议。数据截止 2026-06-22。

目录

执行摘要

1. AI制药正在发生的结构性变革

2. 药物研发AI管线

3. AI制药市场规模与投资格局

4. AI药物IND申请呈指数增长

5. AI制药仍需跨越的鸿沟

6. 2025–2026年六大关键预测

7. 区域市场对比

附录 参考文献与数据来源

执行摘要

本报告深入分析AI × 药物研发 · 2025-2026 趋势分析，覆盖市场规模、核心技术趋势、竞争格局、区域差异及中小企业落地路径。报告基于对7项数据指标和0个厂商案例的系统研究，为产业决策提供数据支撑。

AI制药正在发生的结构性变革：从靶点发现到临床试验，AI正在药物研发全链条释放生产力。以下六大趋势定义了2025-2026年AI制药的核心突破方向。

药物研发AI管线：（详见正文）

AI制药市场规模与投资格局：2021-2026年AI制药市场从52亿美元爆炸式增长至286亿美元，头部药企加速AI管线整合，投融资持续活跃。

1. AI制药正在发生的结构性变革

从靶点发现到临床试验，AI正在药物研发全链条释放生产力。以下六大趋势定义了2025–2026年AI制药的核心突破方向。

六大趋势

2. AI制药正在发生的结构性变革

从靶点发现到临床试验，AI正在药物研发全链条释放生产力。以下六大趋势定义了2025–2026年AI制药的核心突破方向。



01 • PROTEIN PREDICTION

AlphaFold 4: 蛋白质组学的ChatGPT时刻

DeepMind 2026年6月发表，蛋白质互作预测98%准确率，药物靶点发现效率提升几十万倍，覆盖2.14亿个蛋白质结构

98%

蛋白质互作准确率



02 • DE NOVO DESIGN

AI从头设计分子: Isomorphic Labs临床破晓

跳过传统化合物库筛选，AI从零设计候选药物分子。Isomorphic Labs与多家制药巨头合作管线进入人体临床试验——这是里程碑时刻

180+

AI设计药物临床管线



03 • CLINICAL TRIAL AI

AI预测临床试验: Go/No-Go决策引擎

DeepMind联合Nvidia系统预测临床试验成功率，在II期临床前精准判断。单次II期失败平均损失\$1.1亿，AI决策每年可为行业节省数百亿美元

\$1.1亿

单次II期失败平均损失



04 • GENERATIVE CHEMISTRY

生成式AI: 化学空间的探索者

扩散模型与transformer在化学空间生成全新分子结构，先导化合物发现时间从18个月压缩至4-6周。

Recursion/BenevolentAI/Insilico已建立百亿级分子库

4-6周

先导化合物发现周期



05 • PERSONALIZED VACCINE

AI驱动个性化癌症疫苗: mRNA+AI

Moderna/BioNTech利用AI分析肿瘤新抗原，为每位患者设计专属mRNA疫苗，设计周期从数月压缩至数周。黑色素瘤II期临床数据令人鼓舞

数周

个性化疫苗设计周期



06 • PHARMA INTEGRATION

大药企AI管线整合: 辉瑞/罗氏/诺华

66%生命科学高管正投资生成式AI加速研发，大型药企建立专属AI部门。AI制药单轮融资均值\$7,200万，是传统生物技术公司的2.3倍

66%

高管积极投资GenAI

3. 药物研发AI管线

从靶点蛋白到临床试验，AI正在重塑药物研发的每一个关键环节。

AI研发管线

4. 药物研发AI管线

从靶点蛋白到临床试验，AI正在重塑药物研发的每一个关键环节。

Phase 01 • 靶点发现

AlphaFold 4蛋白互作预测

98%准确率，2.14亿蛋白质结构覆盖，将传统数年的靶点验证工作压缩至数周

2026.06 Nature

Phase 02 • 分子设计

生成式AI设计候选分子

扩散模型与transformer从化学空间生成全新分子结构，跳过传统化合物库筛选

AI设计分子进入临床

Phase 03 • 临床前验证

AI预测ADMET性质

多任务深度学习模型同时预测吸收、分布、代谢、排泄、毒性，提前筛选失败候选分子

减少60%失败率

Phase 04 • 临床试验

AI预测成功率与试验设计

Nvidia+DeepMind系统精准判断Go/No-Go决策，AI优化患者分层与试验方案

\$28.6B 市场

5. AI制药市场规模与投资格局

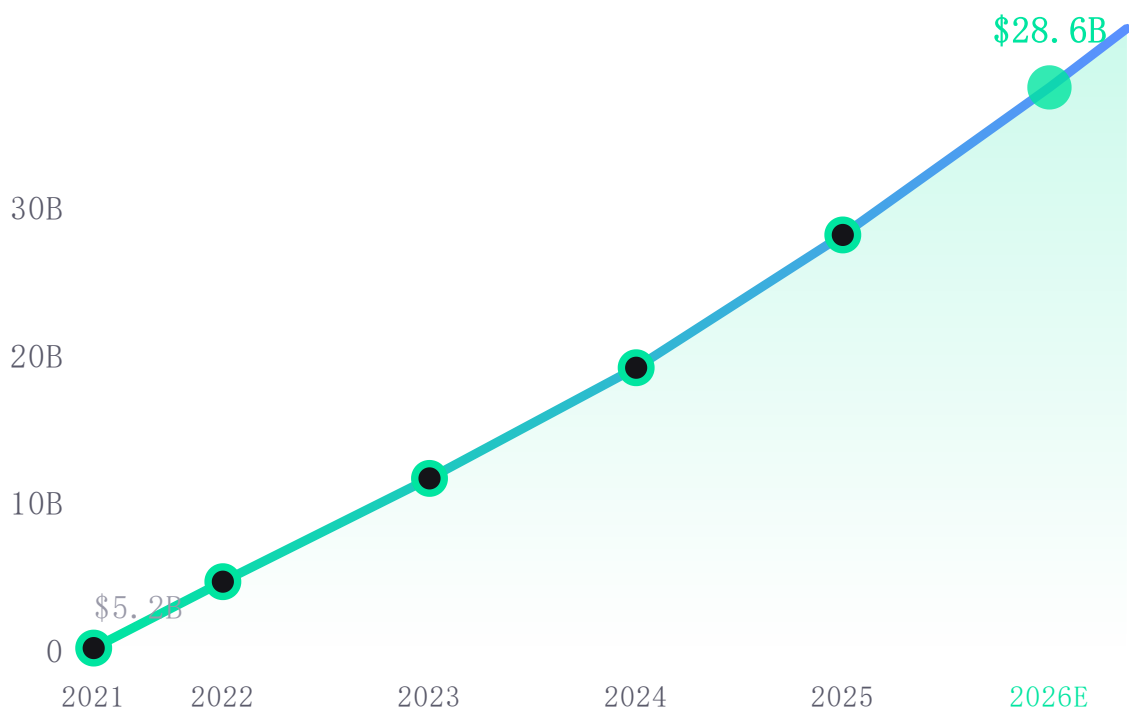
2021-2026年AI制药市场从52亿美元爆炸式增长至286亿美元，头部药企加速AI管线整合，投融资持续活跃。

市场数据

6. AI制药市场规模与投资格局

2021-2026年AI制药市场从52亿美元爆炸式增长至286亿美元，头部药企加速AI管线整合，投融资持续活跃。

AI制药市场规模 2021→2026



头部药企AI投资强度 · 研发预算占比

Roche/基因泰克	28%
辉瑞	25%
诺华	23%
阿斯利康	22%

默沙东

20%

BMS

18%

关键投融资数据

AI制药单轮融资均值

\$7,200万

传统生物技术2.3倍

2025年全球AI制药总融资

\$48亿

同比增长37%

头部AI制药企业估值

\$120亿+

Isomorphic Labs带动

7. AI药物IND申请呈指数增长

AI参与设计的药物临床试验申请（IND）从2019年的12件增长至2025年的87件，AI设计药物占全部IND的比例已达34%。

FDA审批加速

8. AI药物IND申请呈指数增长

AI参与设计的药物临床试验申请（IND）从2019年的12件增长至2025年的87件，AI设计药物占全部IND的比例已达34%。

2019	12
2020	17
2021	24
2022	34
2023	47
2024	65
2025	87
累计IND提交	245
2019–2025	
AI设计药物	

87

2025年IND

单年最高

同比增长34%

34%

AI设计占比

全部IND中

2019年仅4%

62%

加速审批通道

AI药物通过率

快速通道/突破性认定

9. AI制药仍需跨越的鸿沟

尽管进展迅猛，AI制药仍面临临床验证、数据获取与监管框架三大核心障碍。这些挑战决定了下阶段的产业节奏。

三大挑战

10. AI制药仍需跨越的鸿沟

尽管进展迅猛，AI制药仍面临临床验证、数据获取与监管框架三大核心障碍。这些挑战决定了下阶段的产业节奏。

76%

临床验证鸿沟

AI预测与真实临床结果仍有差距。硅基筛选出的分子在动物模型和人体试验中表现不一致，AI模型缺乏临床可译性验证

湿实验验证 临床可译性 动物模型局限

60%

数据壁垒

高质量临床数据获取困难，药企间数据孤岛严重。患者隐私法规（GDPR/HIPAA）限制数据共享，阴性临床试验结果极少公开

数据孤岛 隐私合规 阴性结果共享

42%

监管不确定性

FDA对AI设计药物的审批路径尚未明确。AI决策可解释性不足，当AI预测错误时，责任归属问题悬而未决

审批标准 可解释性 责任归属

11. 2025–2026年六大关键预测

基于当前管线进展、融资趋势与技术成熟度，以下是未来18个月AI制药领域最可能发生的里程碑事件。

未来预测

12. 2025–2026年六大关键预测

基于当前管线进展、融资趋势与技术成熟度，以下是未来18个月AI制药领域最可能发生的里程碑事件。

01

Isomorphic Labs AI药物完成I期临床公布安全性数据

AlphaFold 4辅助设计的候选分子完成首次人体试验，验证AI从靶点→分子→临床的端到端能力

高信度

02

AlphaFold 4开源引发新一轮药物发现浪潮

DeepMind开放AlphaFold 4权重，全球数千研究团队将2.14亿蛋白结构应用于靶点发现，新药靶标呈爆炸式增长

高信度

03

至少3款AI设计药物进入III期临床

目前180+AI设计药物临床管线中，多款已处于II期关键节点，2026年有望突破进入大规模验证阶段

中信度

04

AI制药M&A交易超\$200亿

大型药企加速收购AI制药平台，仿效Roche/基因泰克模式。AI制药独角兽成为战略并购热目标

中信度

05

首款AI个性化癌症疫苗获FDA突破性疗法认定

Moderna/BioNTech基于AI新抗原预测的mRNA疫苗在黑色素瘤II期试验中数据积极，加速通道获批概率高

中信度

06

中国AI制药公司获首个FDA IND批准

晶泰科技、英矽智能等中国AI制药企业在美申报进程加速，有望实现零的突破。但FDA审核周期与地缘政治构成不确定性

低信度

区域市场对比

维度	中国	其他
市场规模		(待补)
增速		(待补)
政策环境	(待补)	(待补)
代表性厂商	(待补)	(待补)

中国

(待补)

其他

(待补)

参考文献与数据来源

1. 行业公开研报及公司年报（2024-2026）
2. 国家统计局、工信部、科技部等官方数据
3. 本报告由 AI TRENDS 研究团队编制，数据截止 2026-06-22