

生物医药行业 AI 赋能仿真白皮书

AI 融合多尺度模拟，构建全链条智能引擎

蓝图科技计算技术研究中心

蓝皮书广州智能技术研究有限公司 | 广州市天河区高科路 32, 34 号 B1

目录

一、引言与行业范畴	1
二、政策背景与战略导向	3
三、生物医药行业关键技术难点	4
3.1 药物发现阶段	4
3.2 临床前研究阶段	5
3.3 生产工艺阶段	6
3.4 临床研究阶段	7
四、AI 多尺度模拟技术框架	8
五、AI 赋能解决方案	9
六、系统级融合趋势	14
七、未来展望	15
6.1 技术趋势	15
6.2 产业价值	16
结语	16

一、引言与行业范畴

生物医药行业是以生命科学为基础，涵盖药物研发、生物制品、医疗器械、诊断试剂等领域的战略性高技术产业，直接关系到人民生命健康与国家安全。作为典型的知识密集型、技术密集型产业，生物医药行业是衡量国家科技实力和产业竞争力的重要标志。

根据国家《“十四五”医药工业发展规划》《“十四五”生物经济发展规划》《关于全面加强药品监管能力建设的实施意见》，生物医药

行业涵盖以下核心领域:

领域	细分方向	战略定位
化学药物	小分子药物、多肽药物、核酸药物	传统优势领域
生物制品	抗体药物、细胞治疗、基因治疗、疫苗	战略新兴领域
中药	中药创新药、中药配方颗粒、经典名方	特色优势领域
医疗器械	高端影像设备、体外诊断、植介入器械	技术突破领域

二、政策背景与战略导向

政策文件	发布机构	核心内容	AI 仿真战略导向
《“十四五”医药工业发展规划》	工信部等九部门	推动医药工业高端化、智能化、绿色化发展	鼓励 AI 赋能药物研发、智能制造
《“十四五”生物经济发展规划》	国家发改委	推动生物经济成为高质量发展新引擎	支持 AI 与生物技术深度融合
《关于全面加强药品监管能力建设的实施意见》	国务院	提升药品监管科学化、法治化、国际化水平	推动数字化监管、智慧监管
《药品监管人工智能应用技术指南》	国家药监局	规范 AI 在药品监管领域的应用	明确 AI 辅助审评、风险预警
《关于“人工智能+”行动（2024-2026）》	工信部	打造“人工智能+”标杆场景	明确 AI 与生物医药深度融合

三、生物医药行业关键技术难点

3.1 药物发现阶段

技术难点	具体表现
研发周期长	传统药物研发周期长，平均研发成本超过 26 亿美元
成功率低	化合物库筛选成功率<10%，临床转化率低
靶点发现难	疾病机制复杂，新靶点发现依赖大量基础研究
构效关系复杂	分子结构与活性、选择性、ADMET 关系难以精准预测

3.2 临床前研究阶段

技术难点	具体表现
药效评价种属差异	动物模型与人体差异大，临床转化率<10%
PK/PD 预测不准	吸收、分布、代谢、排泄过程复杂，预测精度低
毒理学风险高	肝毒性、心脏毒性等导致后期失败率高达 30%
制剂开发周期长	处方筛选工作量大，工艺放大效应难预测

3.3 生产工艺阶段

技术难点	具体表现
生物制药工艺复杂	细胞培养、纯化、制剂涉及多物理场耦合，工艺放大难
批次一致性差	生物制品批次间差异大，质量控制难
过程监测手段少	关键质量属性缺乏在线检测手段
成本高	生物制药成本高，产能瓶颈明显

3.4 临床研究阶段

技术难点	具体表现
试验设计复杂	入排标准、样本量、终点指标设计依赖经验
患者招募难	招募周期长，占临床试验总时间 30%—50%
试验失败风险高	临床 II / III 期失败率高达 50%—60%
不良事件监测滞后	安全性信号发现不及时

四、AI 多尺度模拟技术框架

尺度	研究对象	模拟方法	AI 赋能
微观尺度	分子结构、蛋白-配体相互作用、电子结构	量子力学 (QM)、分子动力学 (MD)、分子对接	AI 力场加速、结合自由能预测、分子生成
介观尺度	蛋白质折叠、膜-蛋白相互作用、细胞信号通路	粗粒化模拟、布朗动力学	构象采样加速、通路建模、蛋白设计
宏观尺度	细胞培养、生物反应器、组织工程、药代动力学	计算流体动力学 (CFD)、生理药代动力学 (PBPK)	代理模型加速、过程控制优化、个体化建模
跨尺度贯通	分子→细胞→组织→器官→人体	多尺度建模框架、尺度耦合方法	信息传递机制、参数反演、全链条预测

五、AI 赋能解决方案

技术难点	AI 赋能多尺度模拟解决方案	核心价值
药物发现阶段：靶点发现与验证		
靶点识别	多组学数据（基因组、转录组、蛋白组）融合分析，知识图谱挖掘疾病-基因-靶点关联	靶点筛选效率提升 10 倍，新靶点发现周期缩短 50%
靶点可成药性评估	结合蛋白结构预测（AlphaFold）与分子动力学模拟，评估结合口袋特征	可成药性预测准确率 >85%，降低后续失败风险
靶点-疾病因果关系验证	因果推断模型整合文献、实验、临床数据	靶点验证周期缩短 60%
靶点识别	多组学数据（基因组、转录组、蛋白组）融合分析，知识图谱挖掘疾病-基因-靶点关联	靶点筛选效率提升 10 倍，新靶点发现周期缩短 50%
药物发现阶段：先导化合物发现与优化		
虚拟筛选	基于结构的分子对接+深度学习打分函数，亿级化合物库快速筛选	筛选速度提升 1000 倍，实验验证命中率提升 3-5 倍
分子生成	生成式 AI（GAN、扩散模型）定向生成高活性、高选择性分子	先导化合物发现周期从数年缩短至数月
构效关系优	分子性质预测模型（ADMET、	优化迭代次数减少 8

技术难点	AI 赋能多尺度模拟解决方案	核心价值
化	活性、选择性) 多目标优化	0%，候选分子质量提升
结合自由能预测	AI 增强的分子动力学模拟，精准计算蛋白-配体结合亲和力	预测误差 < 1 kcal/mol，优于传统打分函数
药物发现阶段：蛋白质/抗体药物设计		
抗体发现	免疫组库数据分析+AI 辅助抗体筛选	抗体发现周期缩短 70%
抗体人源化	结构预测+免疫原性预测模型，优化人源化改造	人源化成功率提升，免疫原性风险降低
亲和力成熟	基于分子动力学模拟的亲和力预测与定向进化	亲和力提升 10-100 倍
可开发性评估	聚集倾向、稳定性、粘度等多属性预测	早期筛选可开发性差的候选分子，降低后期失败率
临床前研究阶段：药效评价		
细胞水平药效预测	细胞信号通路建模+化合物-靶点网络分析	体外活性预测准确率 > 85%
组织水平药效模拟	肿瘤球、类器官生长动力学模型	模拟替代部分体外实验，筛选效率提升
动物实验模拟	异种移植模型、疾病动物模型药效响应预测	动物实验需求减少 30%-50%
临床前研究阶段：药代动力学 (PK) 预测		

技术难点	AI 赋能多尺度模拟解决方案	核心价值
ADME 性质预测	吸收、分布、代谢、排泄多参数 AI 预测模型	预测精度>80%，早期筛选 PK 性质差分子
PBPK 建模	生理药代动力学模型+AI 参数优化	人体 PK 预测准确率提升，指导首次人体试验剂量
透膜性预测	分子动力学模拟透膜过程，预测口服吸收	透膜性预测准确率>90%
临床前研究阶段：毒理学预测		
毒性终点预测	肝毒性、心脏毒性、遗传毒性等多终点 AI 模型	早期筛选毒性风险分子，降低后期失败率
器官毒性机制	分子-蛋白相互作用网络+通路分析	毒性机制解析，指导结构优化
体外-体内外推	AI 增强的定量构效关系 (QSAR) 模型	动物实验需求减少 40%-60%
临床前研究阶段：制剂开发		
处方筛选	辅料-药物相互作用预测+溶出行为模拟	处方开发周期缩 50%，实验次数减 70%
固体形态预测	多晶型、盐型、共晶预测与筛选	晶型筛选效率提升，知识产权布局优化
工艺放大模拟	造粒、压片、包衣过程 CFD-DEM 代理模型	工艺放大成功率提升，放大效应预测
生产工艺阶段：生物制药工艺		
细胞培养工	生物反应器流场-温度场-浓	细胞密度提升 20%-5

技术难点	AI 赋能多尺度模拟解决方案	核心价值
艺	度场耦合代理模型，优化搅拌、通气、补料	0%，抗体滴度提升 10% -30%
代谢网络建模	基因组尺度代谢模型+AI 优化，指导培养基设计	代谢副产物减少，细胞活力维持时间延长
纯化工艺	层析过程传质-吸附动力学代理模型	纯化收率提升 5%-10%，缓冲液消耗减少
病毒灭活/去除	病毒过滤、低 pH 孵育过程工艺参数优化	病毒去除率达标，产品回收率提升
细胞治疗工艺	CAR-T 细胞扩增、转导过程建模	批次一致性提升，成本降低
生产工艺阶段：化药生产工艺		
反应过程优化	反应动力学建模+AI 参数优化	收率提升 5%-15%，杂质控制改善
结晶过程控制	结晶过程多尺度模拟（成核-生长-团聚）	晶型一致，粒度分布 CV 值降低 30%
连续制造	连续反应器流场-反应耦合代理模型	工艺稳定性提升，设备利用率提高
生产工艺阶段：质量分析与控制		
光谱分析	拉曼、近红外光谱 AI 解谱，实时监控成分与含量	在线检测取代离线检测，实时放行
质谱数据分析	杂质谱、降解产物 AI 识别	杂质控制精准，质量研究周期缩短
批次一致性	多变量统计过程控制 (MSPC)	异常批次提前预警，

技术难点	AI 赋能多尺度模拟解决方案	核心价值
评价	模型	不合格率降低
临床研究阶段		
临床试验设计	虚拟临床试验模拟, 优化入排标准、样本量、终点指标	试验成功概率提升, 样本量减少 20%-30%
患者招募	电子病历+真实世界数据筛选符合入组标准患者	招募周期缩短 50%, 筛查效率提升
PK/PD 建模	群体 PK/PD 模型+AI 参数优化	剂量选择精准, 试验方案优化
不良事件预测	患者多模态数据(基因、影像、生理) 融合预测	不良事件风险预警, 患者安全性提升

六、系统级融合趋势

融合方向	核心内涵	AI 赋能价值
多尺度贯通	微观（分子）→介观（细胞）→ 宏观（器官/人体）数据与模型 贯通	药物作用机制全链 条解析，预测精度提 升
研发-生产 -临床一体 化	打通药物发现、工艺开发、临床 研究、上市后数据链	全生命周期质量管 理，持续改进
数字孪生 实验室	实验过程实时映射，实验设计- 执行-分析闭环	实验效率提升，知识 沉淀复用
虚拟临床 试验	基于 PBPK+疾病模型模拟人体反 应	替代部分临床试验， 伦理风险降低
真实世界 证据平台	多源真实世界数据整合，AI 辅助 证据生成	支持监管决策，药品 价值评估

七、未来展望

6.1 技术趋势

技术方向	发展趋势	AI 仿真作用
生成式 AI 药物设计	从“筛选”走向“生成”，实现按需设计	全新骨架分子生成，突破专利空间
虚拟临床试验	从“动物实验”走向“虚拟人体”	替代部分动物实验与早期临床试验
连续制造	从“批次生产”走向“连续生产”	工艺实时控制，质量在线预测
细胞与基因治疗	个性化治疗需求增长	工艺个性化适配，质量精准控制
数字孪生工厂	从“自动化”走向“智能化”	全流程实时映射、闭环优化

6.2 产业价值

AI 赋能解决方案正推动生物医药行业从“实验试错”向“理性设计”转型，核心价值体现在：

研发提速：药物发现周期缩短 50%-70%，临床前研究周期缩短 30%-50%

成本降低：研发成本降低 30%-50%，工艺开发成本降低 20%-40%

成功率提升：临床 I 期到上市成功率提升 10%-20%

质量提升：批次一致性提升，产品合格率>99%

安全性提升：不良反应预警准确率>85%，患者用药安全提升

结语

生物医药行业正处于从“经验试错”向“理性设计”转型的关键期。AI 赋能多尺度模拟以微观分子模拟、介观细胞建模、宏观工艺仿真为核心，正在破解长期存在的研发周期长、成功率低、工艺复杂、临床转化难等核心难题。

本白皮书系统梳理了药物发现、临床前研究、生产工艺、临床研究、上市后与真实世界研究五大领域的关键技术难点与 AI 赋能路径，展示了从单点应用到系统级融合的演进方向。随着多尺度贯通、数字孪生、虚拟临床试验等融合趋势深化，AI 将从辅助工具升级为生物医药行业不可或缺的“智能大脑”，为构建高效、精准、安全的现代化医药工业体系提供核心支撑。