

AI驱动的研发决策与实验前设计

让下一条研发管线 从您的生意出发

看清产品机会，选准研发方向。

把数据、模型和专业判断，转化为可进入实验验证的设计方案。

商业协同

计算研发

私有交付

聚典合伙人赵思昆博士参与专业评审



01 / 从经营问题出发

先回答三个问题，再启动研发

每一项研究都指向一项可执行的经营决策。

方向

做什么更有机会

从现有产品、销售渠道、疾病领域和竞争格局出发，识别适合企业的产品延伸方向。

协同

为什么适合我们

比较品牌、客户、生产条件和研发资源的复用空间，把方向与企业真实能力连接起来。

投入

下一步值得投多少

先完成可行性评估，再决定是否进入设计；每个阶段有预算、有成果、有继续或停止的依据。

您获得的是：能用于内部立项讨论的方向建议，以及有明确边界的研发执行方案。

02 / 聚典团队

博士专业判断，与AI工程能力共同驱动

制药工程专业背景与AI技术团队协同，聚焦实验验证前的研究与设计。

赵思昆

博士 / 聚典合伙人



中国药科大学
制药工程博士

聚焦研发问题定义与科学证据评审。

AI研发与工程团队

围绕分子数据治理、多模型计算、候选排序与私有部署，构建面向具体靶点的研发 workflow。

专业判断与计算证据相互校验

明确模型适用范围，保留基准对照与计算版本，结合专业评审形成可交接的候选证据包。

北京未来聚典信息技术有限公司成立于2017年，运营药聚汇平台，开展医药市场研究、数据服务与数字化协作。

03 / 数据与知识架构

把分散的信息，组织成研发决策证据

面向项目构建多源数据治理、领域知识图谱与可追溯检索体系。

市场与产品数据

产品批文、公告、招采、竞争项目
授权采购的销售与市场数据



科学与分子数据

文献、专利、靶点、生物活性
结构数据库与可获得化合物



企业私有数据

产品销售、研发记录、失败结果
质量、工艺与业务约束



实体消歧 / 本体映射 / 活性单位标准化 / 时点版本管理 / 数据血缘

Entity Resolution Ontology Mapping Assay Harmonization Provenance



知识图谱 + Graph-RAG + 多维协同评价

输出：方向排序、依据、缺口与待验证假设

数据按项目授权范围接入；数据库与商业数据的使用、衍生和交付权利分别确认。ChEMBL等为候选资源。[5]

04 / 技术实施架构

用多模型协同，完成分层筛选

围绕问题选择模型；把结构、活性、性质与可制造性纳入同一条工作流。

研究任务	候选模型 / 方法	专业处理	形成的证据
结构与相互作用	Boltz-2 / Protenix-v2	受体构象、复合物结构、置信度检查	结构合理性与相互作用线索
小分子筛选	GNINA / 配体模型 / QSAR	对接复评分、骨架分组、适用域判断	相对排序与候选优先级
设计与优化	约束生成 / 骨架变换 / 多目标优化	结合性质、风险警示与合成约束	多样化候选结构系列
蛋白方向	BoltzGen等序列设计工具	界面、序列多样性与可开发性审核	候选序列与结构假设
质量控制	集成评分 / 校准 / 专家复核	基准对照、分布外识别、结果复现	可追溯的推荐与排除理由

以上为按项目配置的候选技术栈，并非第三方合作背书；商业与私有部署许可可在实施前核验。[1-4]

04B / 独立收费研究专项

虚拟细胞：把研发假设放入具体生物情境

将细胞图谱、扰动数据与疾病机制纳入研究，形成更有依据的验证优先级。

01 / CONTEXT

定义细胞情境

匹配组织、细胞类型、疾病状态及数据背景。明确模型的适用边界与基准数据。

02 / RESPONSE

研究扰动响应

分析通路和细胞状态变化；基因扰动和药物处理分别建模、分别验证。

03 / HYPOTHESIS

形成可检验假设

用于靶点和机制研究；具备可比药物扰动数据后，再评估候选排序用途。

细胞状态表征 / 扰动响应建模 / 数据域匹配 / 基准验证 / 证据强度评估

独立专项：评估48万元，完整研究168万元（含评估）。非完整细胞复制；人体单细胞模型不直接推断细菌抑菌效果。

04C / 独立商务方案

虚拟细胞专项：先评估，再进入响应研究

一个疾病情境、最多两类细胞背景、最多三条靶点或通路假设；总周期约12-16周。

阶段A / 约4-6周 / 48万元

细胞情境与适配评估

深度细胞图谱整理与候选靶点证据比较
数据缺口、模型与许可适配判断
后续基准方案及继续 / 停止建议

阶段B / A通过后约8-10周 / 120万元

场景化扰动响应研究

数据治理、基线与候选模型对照
响应分析、稳定性与研究假设排序
可复现结果包及下一轮验证建议

完整专项 168万元 = 48万元评估 + 120万元响应研究

金额不含税。A可独立采购；先购买A再进入B仅追加120万元。A未通过不启动B。与既有研究的重叠工作逐项抵扣。

04D / 虚拟细胞交付与验收

交付计算证据，支持下一轮验证决策

验收依据是研究范围、基准对照、专业复核与档案完整性，不以实验阳性或临床疗效作为承诺。

研究环节	关键要求	客户拿到什么
数据与情境	明确疾病、细胞类型、对照、扰动与批次； 药物处理另需化合物身份、剂量和时间。	细胞情境图谱、数据字典、 质量与缺口说明
基准与模型	设置朴素或线性基线与留出评估； 按任务核验模型、数据及商业服务许可。	模型对照报告、计算版本、 稳定性与适用域说明
机制与研究顺序	比较最多三条靶点 / 通路假设； 区分遗传扰动与药物处理证据。	假设排序、证据矩阵、 证据评级与验证建议
专业交接	配置计算生物学与领域专业评审； 按范围归档和向客户团队解释结果。	可复现研究包、评审记录、 实验合作方可接手的研究档案

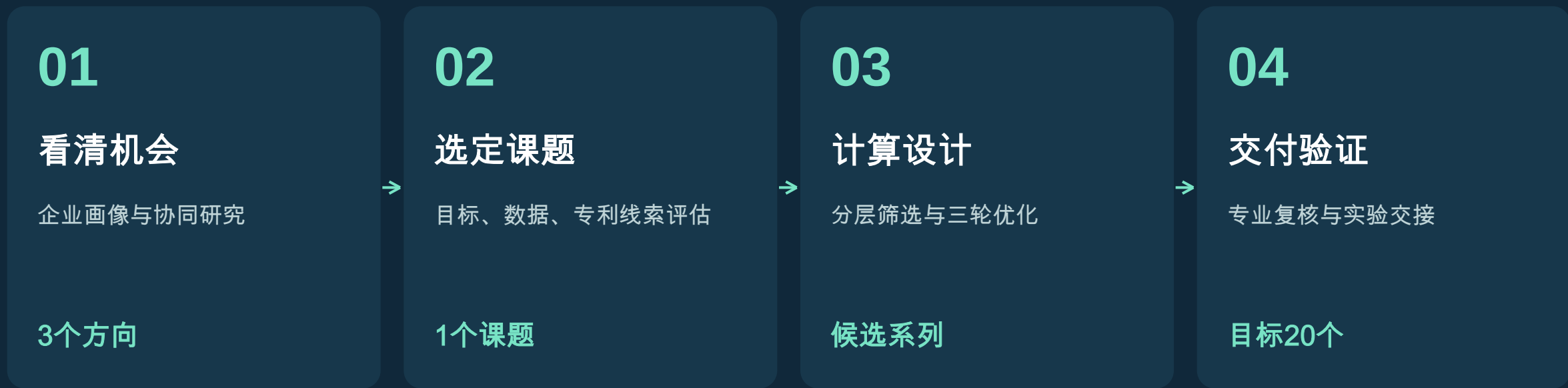
细菌靶点与人体疾病采用对应的研究体系。单细胞技术参考Geneformer官方说明。

不含湿实验、硬件、特别数据或模型许可、超额算力及现场部署。适配时可与298万元分子计划组合为466万元，分别评审。

05 / 研究流程

从三个方向，到一个值得验证的项目

以下以一个成熟靶点的小分子项目为例，阶段结论决定后续投入。



每次阶段评审均可选择：继续、调整或停止。交付数量为项目约定目标，按实际达到计算验收标准的结果计费。

06 / 您实际拿到什么

交付一套能继续推进研发的成果

从管理层讨论，到研发团队与实验合作方接手，交付材料逐层展开。

01 管理层决策摘要

优先方向、协同理由、预算与下一步决策。

02 研发立项建议书

目标产品画像、竞争分析、研发约束与阶段目标。

03 候选分子 / 序列包

唯一标识、结构或序列、系列分组与推荐排序。

04 技术证据与风险档案

模型和数据版本、计算结果、专业复核与证据评级。

05 实验验证交接建议

建议优先级、关键验证问题与可对接的实验任务说明。

计算设计结果需经后续实验验证；项目交付不等同于已验证活性分子、候选药物或可获授权专利。

07 / 旗舰合作方案

为完整的研究，配置明确的投入

适用于成熟靶点小分子；可行性研究6周，完整项目建议18-20周。

含三轮设计、基准校准与专家复核

单靶点旗舰计划

58万元可行性研究

120万元设计阶段固定费

6万元 / 个，按实际合格候选计费

20个足额交付时：合计298万元

含季度评审与境内专属环境支持

年度研发协同计划

两个旗舰项目：596万元

年度研究与专属环境服务：84万元

目标累计40个合格候选

约定范围内：合计680万元

报价不含税、湿实验、硬件、特别数据/软件许可及超额算力。客户现场私有部署另定范围。

08 / 客户参与与私有交付

从一次方向讨论，启动合作

先把问题定义清楚，再决定数据范围、项目人员和部署方式。

开始所需

客户提供三类信息

产品与销售概况

希望进入的疾病领域和投入边界

现有研发记录及可承接的实验资源

项目启动

聚典组织三项工作

形成方向研究与数据需求清单

确定靶点、方法、里程碑和验收方式

配置研究人员、计算资源与交付环境

数据可控，研究可追溯

提供境内专属云与客户环境部署方案；权限隔离、操作留痕和成果归档纳入实施范围。客户数据与背景工具分别保护；项目成果权属在合同中明确。

09 / 资料说明

技术参考与服务说明

版本日期：2026年9月17日。点击下方条目可查看原始资料。

01 Boltz：生物分子相互作用预测模型

官方项目与许可说明；结构预测与亲和力预测。 [点击标题查看原文。](#)

02 Protenix：生物分子结构预测

官方项目；Protenix-v2；代码和参数许可说明。 [点击标题查看原文。](#)

03 BoltzGen：蛋白与多肽结合物设计

官方项目；适用于蛋白方向的候选工具。 [点击标题查看原文。](#)

04 GNINA：结合深度学习评分的分子对接

官方项目；具体分发方式须遵守组件许可。 [点击标题查看原文。](#)

05 ChEMBL：化学结构与生物活性数据库

EMBL-EBI官方资源；使用与交付需遵守数据许可。 [点击标题查看原文。](#)

北京未来聚典信息技术有限公司 · 药聚汇医药服务平台 · www.pharmconverge.com

技术选型、商业许可、算力配置与部署范围，在项目启动时明确。