

【 药物成药性评价与系统转化研究 】

面向成药性评价的自驱动实验室发展现状与思考

刘 翔, 王鹏博, 高振豪, 李 鹤, 王 宁*

天津药物研究院有限公司 药物成药性评价与系统转化全国重点实验室, 天津 300301

摘 要: 自驱动实验室 (SDL) 通过连接自动化实验、结构化数据、预测模型与在线决策, 使科学研究由预设流程执行转向基于实验反馈的迭代发现。梳理 SDL 的通用技术架构与成熟度判据, 重点比较药物发现与开发中的代表性应用及工业实践, 并从理化性质、吸收-分布-代谢-排泄-毒性 (ADMET)、靶点成药性和制剂成药性 4 个子领域总结现有平台、技术路线、应用成熟度及主要瓶颈。证据显示, SDL 成熟度主要取决于实验可标准化程度、反馈周期、读出稳定性和异常的机器可识别性; 制剂、递送材料和限定偶联工艺已出现 L2~L3 级湿实验闭环, 经典药物体外 ADMET 仍以预测平台和人在回路系统为主, 体内药动学距在线闭环更远。面向成药性评价的 SDL 不能照搬材料发现模式, 其核心在于在生物变异、异步多目标实验和质量合规条件下形成可验证反馈。

关键词: 自驱动实验室; 成药性评价; 吸收-分布-代谢-排泄-毒性; 实验室自动化; 主动学习; 多目标优化; 药物发现

中图分类号: R9 **文献标志码:** A **文章编号:** 1674-6376(2026)10-3365-12

DOI: 10.7501/j.issn.1674-6376.2026.10.001

Current progress and perspectives of self-driving laboratories for drug developability assessment

LIU Xiang, WANG Pengbo, GAO Zhenhao, LI He, WANG Ning

State Key Laboratory of Druggability Evaluation and Systematic Translational Medicine, Tianjin Institute of Pharmaceutical Research Co., Ltd., Tianjin 300301, China

Abstract: Self-driving laboratories (SDL) connect automated experimentation, structured data, predictive models, and online decision-making, shifting scientific research from predefined workflow execution to iterative, feedback-driven discovery. This review summarizes the general technical architecture and maturity criteria of SDLs, with emphasis on representative applications and industrial practices in drug discovery and development. It further examines four subdomains of drug developability—physicochemical properties, ADMET assessment, target druggability evaluation, and formulation developability—in terms of available platforms, technical routes, application maturity, and major bottlenecks. Current evidence indicates that SDL maturity is primarily governed by assay standardizability, feedback time, readout stability, and machine-recognizable exceptions. L2—L3 wet-laboratory closed loops have emerged in formulation, delivery materials, and well-defined conjugation processes, whereas classical *in vitro* ADMET remains dominated by predictive platforms and human-in-the-loop systems, and *in vivo* pharmacokinetics remains further from online closed-loop operation. SDLs for drug developability assessment cannot simply replicate materials-discovery workflows; their central challenge is to establish verifiable feedback under biological variability, asynchronous multi-objective experiments, and quality and compliance constraints.

Key words: self-driving laboratory; drug developability assessment; absorption-distribution-metabolism-excretion-toxicity; laboratory automation; active learning; multi-objective optimization; drug discovery

药物研发的高损耗并非由单一因素导致, 候选物的活性、理化性质、体内暴露、代谢转化、安全窗和制剂可行性相互关联, 任何单项指标的失衡都

可能在后续阶段被放大。跨企业候选物折损分析表明, 优化理化性质有助于提高候选物质量, 但仅依赖单一经验规则难以解决复杂的暴露失败和安全

收稿日期: 2026-08-09

作者简介: 刘 翔, 男, 博士, 研究方向为人工智能驱动的药物发现和精准医疗。E-mail: liuxiang@tipr.com.cn

*通信作者: 王 宁, 男, 高级工程师, 研究方向为人工智能和计算机软件。E-mail: owkata@tipr.com.cn

性失败；成药性评价因而需要由孤立终点判断转向多源证据、动态更新和跨阶段协同的综合决策^[1-3]。

过去 20 年，液体处理工作站、微孔板检测和自动化分析显著提高了药物成药性评价实验的通量。然而，高通量自动化通常按照预设脚本运行，实验结果并不必然改变下一轮候选物、实验条件或资源分配。自驱动实验室（SDL）是近年来在自动化实验与人工智能（AI）交叉领域快速发展的一种新型科研范式，其核心理念是将实验设计、执行、数据采集、分析和决策全流程自动化，形成一个闭环系统，从而大幅减少人工干预，加速科学发现与优化过程。SDL 与一般自动化流程的实质差异在于新数据能否经过质量控制后触发模型更新、候选排序、实验选点或停止决策，而不在乎机器人是否替代了人工移液^[4-5]。

SDL 最初在材料合成、反应优化和化学发现中形成较系统的方法体系。相关综述和代表性研究已将其概括为自动化实验、机器学习、实验规划和 workflow 编排组成的反馈系统，并指出其正在向纳米医学、制剂开发和药物递送扩展^[6-12]。但是，成药性评价依赖生物试剂、复杂前处理和多时间尺度终点，且受到质量体系、伦理和可追溯性要求约束，不能简单复制材料发现中的短周期闭环。

现有文献常把高通量实验平台、纯计算预测系统、智能体辅助科研和真实湿实验闭环并列为“自主实验室”，由此容易高估某些应用的成熟度。更重要的是，已有药学相关综述多围绕机器学习预测、实验室自动化或单一制剂任务展开，缺少从通用 SDL 范式向不同成药性子领域逐层收敛的比较。

本文采用框架性叙述综述方法，按照“通用技术架构-药物发现与开发中的代表性应用-成药性子领域”的顺序展开：首先讨论 SDL 的技术架构与通用范式；其次聚焦药物相关合成与工艺优化、药物发现中的设计-制造-测试-分析（DMTA）与实验室在环以及工业界 SDL 实践；最后聚焦理化性质，药物吸收、分布、代谢、排泄和毒性（ADMET），靶点成药性和制剂成药性，分析现有案例、技术路径、成熟度与瓶颈。本文旨在为药学 SDL 研究提供 3 个方面的参考：（1）以统一的概念边界和成熟度判据澄清自动化平台、计算预测系统与真实湿实验闭环之间的混用，避免对应用成熟度的高估；（2）通过药物发现与成药性分领域比较揭示不同任务成熟度差异的实验与工程根源，并引入人工决策介入

率、异常自主处置率和反馈周期等可量化指标；（3）识别各子领域的证据门槛与关键瓶颈，为面向药物评价的 SDL 研究方向和任务选择提供依据。

1 SDL 的技术架构与通用范式

1.1 从自动化工作流到实验反馈闭环

DMTA 构成自主科学发现的基本循环，开环自动化解决的是“如何稳定、快速地执行既定实验”，SDL 进一步解决“依据当前证据，下一步应做什么实验”。只有当实验读出被结构化回流，并实际改变代理模型、候选优先级、实验条件或终止规则时，系统才能形成可验证闭环^[8-9,13]。

一个完整 SDL 通常包含 4 个相互连接的层级。实验执行层负责样品制备、反应、培养、处理和仪器控制；分析与质量控制层负责原始信号解析、样品身份确认、校准和异常识别；模型与决策层负责代理建模、不确定性估计和下一轮选点；编排与治理层维持样品、协议、设备状态、模型版本和人工审批之间的一致关系。4 层中任何 1 层断裂，都可能使“自主”退化为局部自动化。

实验执行层的通用基础包括液体处理工作站、机械臂、移动机器人、流动化学设备和在线表征接口。A-Lab、模块化多机器人固态化学平台、自主流动化学系统、机器人有机合成平台和电解液优化平台等典型系统正是基于这些基础组件构建的，它们的成功运行表明：标准化设备接口、稳定样品物流和快速读出是跨设备闭环能够持续运行的前提^[14-18]。

对药物相关实验而言，质量控制不能被放在闭环之外。细胞、微粒体和肝细胞实验还涉及淬灭、离心、稀释、色谱-串联质谱分析和批次质控；若空白、阳性对照、回收率、基质效应、仪器漂移和样品错配不能被系统识别，自动化只会扩大不可靠数据的产量。ICH M10 所强调的校准、质控和样品分析原则，为药学生物分析接入 SDL 提供了最低质量边界^[19]。

数据层不仅需要保存终点数值，还应记录实验条件、原始曲线、样品批次、对照结果、数据处理步骤、模型版本和失败原因。FAIR 原则为数据可查找、可访问、可互操作和可重用提供了通用方向^[20]，但药学 SDL 还需要比一般材料数据更细粒度的实验上下文和审计信息。

1.2 代理模型、主动学习与多目标决策

代理模型用于近似“候选或实验条件-测量终点”的关系，并为未测试区域提供预测及不确定

性。贝叶斯优化和主动学习通过采集函数在探索未知区域与利用当前最优区域之间分配实验资源。Gryffin 将类别变量和已知实验约束纳入优化，Olympus 则提供面向含噪实验规划的基准框架，说明 SDL 决策模块必须处理离散选择、测量噪声、失败实验和资源限制^[21-22]。

药物研发中的目标通常彼此冲突：溶解度、通透性、代谢稳定性、有效性和安全性很难同时达到单一最优。因此，药学 SDL 不宜仅使用加权总分，而应将不可接受的风险表示为硬约束，将可权衡的目标表示为帕累托（Pareto）前沿或达标概率，并同时考虑实验成本、返回时间和失败概率。机器学习在药物研发中的价值最终取决于数据质量、适用域和外部验证，而非模型复杂度本身^[23-24]。

1.3 workflow编排、智能体与异常恢复

workflow编排是 SDL 由单仪器闭环走向多模块系统的关键。AlabOS、Atlas、ChemOS 2.0 和模块化“科学工厂”从任务依赖、协议抽象、知识管理和可重组实验单元等角度推进了编排层发展；这些系统的核心价值不是简单启动仪器，而是维护样品、协议、设备状态、数据版本和决策记录之间的对应关系，并在设备故障、缺失数据和超限结果出现时执行可审计的恢复策略^[25-29]。

大语言模型（LLM）和多智能体系统正在扩展 SDL 的认知层。Coscientist 展示了文献检索、代码

生成和机器人化学实验的衔接，相关综述、化学机器人研究和 AI 协同科学家工作进一步探索了工具调用、任务分解和多智能体讨论^[30-33]。这类系统更适合承担知识检索、高层规划和异常解释，而不宜直接替代精确定量优化器；在高风险药学决策中，LLM 输出仍需受约束模型、规则引擎和人工审核共同治理。

1.4 通用范式的成熟度判据

SDL 的成熟度不能用“无人化程度”单独衡量。完全无人运行并非必要条件，研究目标、风险边界和关键终止点通常仍由人设定；在模型外推、异常样品和高风险决策处保留人工审核，往往是提高可靠性而非降低先进性^[5,34-35]。

本文沿用 4 个互相独立的评价维度（表 1 和图 1）：闭环完整性考察实验结果是否改变后续实验；决策自主性考察机器承担候选生成、排序、选点、异常处置和终止判断的程度；终点相关性考察优化对象与科学或药学目标之间的直接性；证据成熟度考察同行评议、外部验证、跨批次或跨实验室复现以及数据代码可获得性。为描述系统闭环和集成程度，进一步使用 L0~L4 等级：L0 为开环自动化，L1 为结构化数据回流，L2 为算法建议并经人工确认，L3 为限定任务内自主湿实验闭环，L4 为跨模块、多目标端到端优化。L 级别只回答“闭环做到什么程度”，不能替代终点价值和证据强度的判断。

表 1 SDL 通用技术架构及成熟度评价要点

Table 1 General technological architecture and maturity-assessment criteria of self-driving laboratories

组成/维度	核心功能或问题	通用判定要点	成药性场景的特殊关注
实验执行与分析层	完成样品制备、实验操作、仪器测量和原始信号获取	设备接口标准化、样品身份连续、读出自动解析	生物试剂批次、复杂前处理、质谱与细胞分析质量控制
数据与质量控制层	把实验结果转化为可追踪、机器可读的证据	原始数据、元数据、失败信息和版本记录完整	阴阳性对照、校准、基质效应、仪器漂移与审计轨迹
模型与决策层	更新代理模型并确定下一轮实验	不确定性可校准，约束、成本和失败概率进入决策	多目标冲突、适用域、异步和多保真实验
编排与治理层	连接设备、协议、数据、模型和人工责任	任务状态可恢复，人工介入点和停止规则可追踪	伦理、权限控制、风险分级和质量体系相容性
闭环完整性	实验结果是否真实改变后续实验	数据回流、模型更新、选点和停止规则均可验证	区分高通量自动化与真实药学反馈闭环
决策自主性	机器承担哪些科研决策	候选生成、排序、条件选择、异常处置和终止判断的边界	人在回路并不等于低成熟度，关键是责任与权限清晰
终点相关性	优化对象是否直接支持科学或药学决策	终点与研究目标之间的因果和转化距离	区分制造优化、单一性质改善和整体成药性提高
证据成熟度	平台结论是否可靠且可重复	同行评议、外部验证、跨批次/跨实验室复现及开放性	避免以预印本、平台宣称或单次演示替代成熟证据

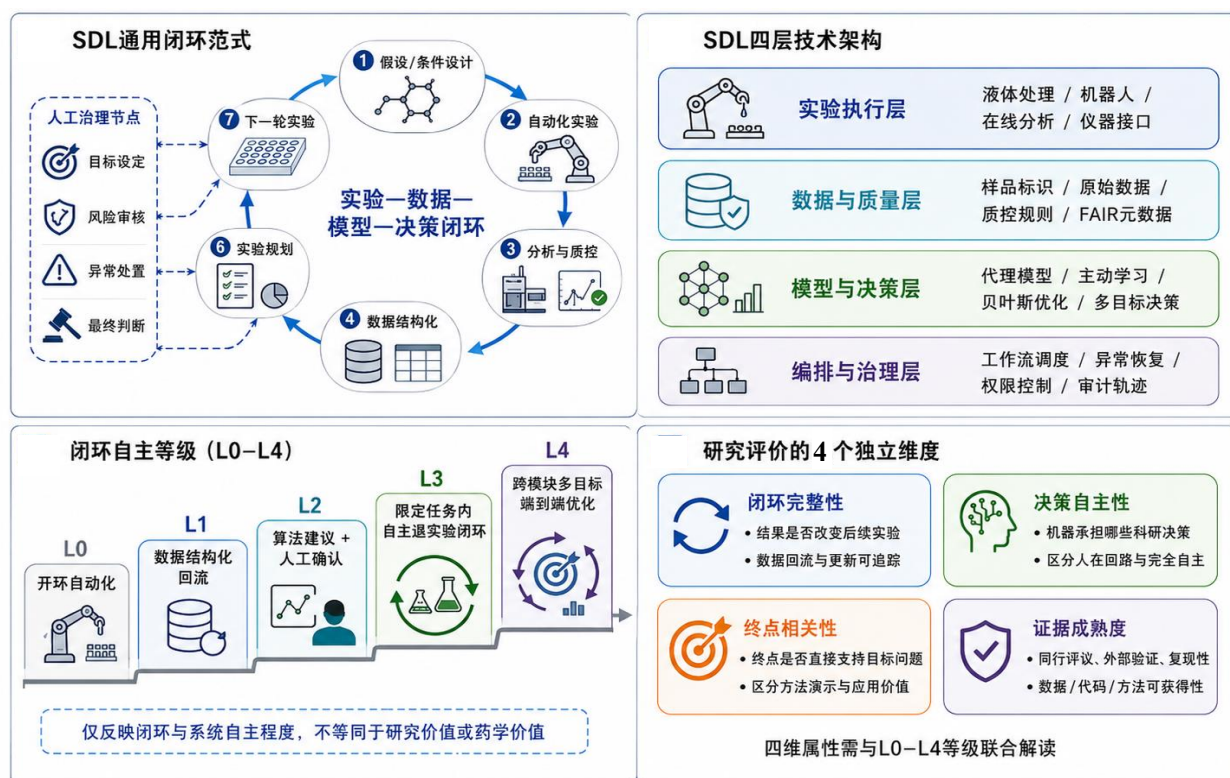


图 1 SDL 的闭环架构、评价维度与闭环自主等级

Fig. 1 Closed-loop architecture, assessment dimensions, and autonomy levels of self-driving laboratories

为减少等级判定的主观性，可用同一类成药性工作流进行具体区分：L0：液体工作站按固定脚本完成溶解度或微粒体稳定性测定，结果仅进入报告，不能改变后续实验；L1：测定结果自动结构化入库并可更新预测模型，但下一轮候选仍由研究者选择；L2：模型依据不确定性或达标概率推荐化合物、浓度或实验条件，经人工确认后执行；L3：在预定义候选空间、实验模块和质量控制规则内，系统可自动选点、执行实验、识别规定类型的异常并启动下一轮；L4：进一步把理化性质、ADMET、制剂等多个模块连接，在多目标约束下自动进行跨模块资源分配、保真度升级与停止决策。按此定义，目前公开的成药性评价证据主要集中于 L1~L3，尚缺乏可独立验证的成熟 L4 案例。

2 SDL 在药物发现与开发中的代表性应用及成熟度

2.1 药物相关合成与工艺优化

在药物发现上游，候选分子的合成、纯化、分析和工艺筛选是最容易率先形成闭环的环节之一。数字化和自动化能够缩短样品周转时间，并把反应条件、分析结果和下一轮实验设计连接到同一 DMTA 数据链中^[36]。与单纯高通量实验相比，SDL 要求本

轮结果能够改变下一轮反应条件或候选选择。

血管紧张素II受体拮抗剂的自主光化学反应优化表明，药物相关分子的制造环节能够在限定反应空间内形成“实验执行-分析-模型选点-下一轮实验”的湿实验闭环^[37]。这类系统在边界清晰的任务中可达到 L2~L3，但优化对象主要是收率、选择性或工艺条件，而不是候选物的暴露、安全性或制剂可行性。因此，系统闭环等级与药学终点相关性应分开评价。近期生物制药工业界也将电化学活性药物成分合成、晶型开发和递送配方列为较适合闭环化的场景^[38]。

2.2 药物发现中的 DMTA 与实验室在环

药物发现中的 SDL 正从“模型给建议、研究者做实验”向可追踪的 DMTA 实验室在环演进。多智能体科研系统 Robin^[39]将文献与数据分析、假设生成、候选优先级和实验结果更新连接起来，并在治疗假设验证中展示了认知-实验迭代。这类系统的认知层可达到 L2，但湿实验执行与关键科学判断仍存在人工参与，因此不能仅凭智能体能够提出假设就判定为 L3。

Tippy(多智能体 DMTA 自动化框架)、Mozi(药

物发现 LLM 智能体框架)和 Artificial(全实验室编排与调度系统)代表了 3 类不同的智能化药物研发框架或系统分别探索多智能体 DMTA、受治理的药物发现代理与全实验室调度^[40-42];国内关于 AI4S 基础设施和药物发现智能体的研究也强调工具调用、数据标准和人在回路的重要性^[43-44]。在更接近实验闭环的任务中,模型驱动的三药组合优化把候选推荐与细胞实验迭代连接起来^[45]。这些案例共同说明,药物发现的成熟度判定需要把“认知自主性”和“湿实验闭环完整性”分开记录。

2.3 工业界 SDL 实践

2026 年,Dvivedi 等^[38]与行业联盟 Enabling Technologies Consortium(ETC)合作,汇总了生物医药工业界在溶解度筛选、固态性质表征、电化学活性药物成分合成和脂质纳米颗粒配方等应用,并把传感器兼容性、数据格式异构和跨仪器集成列为规模化部署的核心障碍。这表明工业 SDL 的评价不仅要模型和机器人,还应关注数据互操作、在线分析和质量体系能否形成稳定反馈。

药明生物(WuXi Biologics)报道的细胞培养实验室框架(ISLFCC)提供了同行评议的工业案例:机械臂自动从生物反应器取样,物联网系统把分析结果传给深度学习模型,模型预测细胞状态并推荐补料或温度调整,再由自动化设备执行。对 3 个细胞克隆的比较研究中,该系统在单批次内实现平均滴度提高 26.8%,同时展示了 3 L 和 15 L 生物反应器的自动化运行^[46]。按本文判据,该限定细胞培养过程具有 L3 的核心特征,但其终点属于生物工艺开发,不能直接外推为成药性多模块闭环。

武田药品工业株式会社(Takeda Pharmaceutical Company Limited)与 Atinary Technologies, Inc.(以下简称 Atinary)的公开合作则展示了小分子工艺开发的工业闭环。Takeda 的高通量实验与自动化团队将机器人、数据管理和 AI 选点连接为自驱动闭环;在 Buchwald-Hartwig 反应案例中,设计空间包含 4 320 种条件组合,公开资料称传统人工外部优化需 1~2 个月,而自驱动流程约 1 周完成^[47]。Atinary 另一份公开资料还报告双方早期项目在 3 轮闭环中将收率由不足 50%提高至 90%以上^[48]。这些结果符合限定任务 L3 的结构特征,但定量结果主要来自企业公开材料,缺少完整方法学披露和独立复现,因此其“闭环等级”与“证据成熟度”应分开标注。

2.4 成熟度判定与定量比较

药物发现 SDL 的成熟度应同时记录闭环完整性、决策自主性、终点相关性和证据成熟度,而不能以“无人运行”作为单一标准。尤其对工业案例,公开信息能够证明某些硬件-软件链路已经形成闭环,并不等于其性能已获得独立验证。表 2 据此仅将 L0~L4 用于描述闭环与集成程度,同时在最后一列单独列出可量化证据及其边界。

为增强 L0~L4 等级判定的可操作性,可进一步引入与闭环自主程度直接相关的定量指标。首先,人在回路(HITL)的人工决策介入率(R_HITL)表示需要人工确认候选、实验条件或下一步操作的轮次比例;其次,异常自主处置率(R_exception)表示预定义异常能够被系统自动识别、处置并恢复工作流的比例。按本文定义,L0 不形成基于实验反馈的自主闭环;L1 主要实现数据回流;L2 通常仍表现为较高的 R_HITL;由 L2 向 L3 演进应表现为 R_HITL 下降,并逐步具备更高的 R_exception,而 L4 还要求上述自主能力跨越多个实验模块。反馈周期(T_cycle)可作为补充效率指标,用于比较相同成熟度等级下不同平台完成一轮“实验-分析-决策-下一轮启动”所需时间,但不作为 L 级划分的硬性阈值^[49]。

3 面向成药性评价的 SDL:技术路径、特殊性与应用

3.1 成药性评价的特殊性与通用技术路径

成药性不是单一性质,而是候选物在效力、选择性、理化性质、暴露、代谢、安全性、制剂和可制造性之间达到可接受平衡的能力。不同终点涉及小分子、蛋白、生物材料、细胞和动物等不同对象,返回时间可由分钟跨越至数周。与材料发现相比,成药性 SDL 面对的不是一个稳定的输入-输出函数,而是多个噪声来源、不同保真度和不同风险等级共同构成的决策系统。

其通用技术路径可概括为 5 个连续环节:首先将药学问题转化为可测终点和明确约束;其次建立标准化实验模块并把质量控制纳入自动流程;再次用结构化数据训练可校准的代理模型;随后依据不确定性、实验成本和目标冲突选择下一轮实验;最后由编排系统记录模型版本、人工介入和停止原因。与一般 SDL 相比,药场景尤其需要把适用域、阴性数据、批次差异、伦理审批和审计轨迹作为系统变量,而不是事后说明。以下 4 个子领域将

表 2 药物发现与开发中代表性 SDL 应用、成熟度及定量证据

Table 2 Representative SDL applications, maturity, and quantitative evidence in drug discovery and development

应用方向	代表平台/案例	闭环特征	成熟度判断	可量化证据与证据边界
药物相关合成与 工艺优化	血管紧张素II受体拮抗剂 自主光化学优化 ^[37]	反应执行→分析→模型选点→ 下一轮反应	限定任务 L2~L3	可报告收率/选择性、迭代轮数和 反馈周期;制造终点不等同于成 药性终点
药物发现实验室 在环	Robin ^[39]	文献/数据→假设与候选排序→ 实验验证→证据更新	认知层 L2;湿 实验 L1~ L2	宜报告 R_HITL; 按 L2 定义, 关 键实验决策仍需人工确认, 不能 仅因模型能够提出建议而判定 为 L3
智能体 DMTA 与 全实验室调度	Tippy、Mozi、 Artificial ^[40-44]	任务规划、工具调用、工作流编 排和人在回路治理	认知层 L2;湿 实验 L0~ L2	宜报告 R_HITL 和 R_exception; 部分证据为预印本, 湿实验自主 程度仍需单独验证
表型实验闭环	模型驱动三药组合优化 ^[45]	模型推荐→细胞实验→结果回 流→下一轮组合	L2; 在充分自 动执行条 件下可接 近 L3	宜报告 R_HITL 及 T_cycle; 若下 一轮仍需人工确认则属于 L2, 只有在限定边界内无需人工确 认即可连续启动下一轮时才接 近 L3
工业界生物工艺 SDL	药明生物 (WuXi Biologics) 工业智能细 胞培养实验室框架 (ISLFCC) ^[46]	机器人取样→IoT 传输→深度 学习决策→自动补料/温度 调整	限定细胞培 养过程 L3	3 个克隆平均滴度+26.8%; 单批次; 3 L/15 L; 同行评议工业证据
工业界小分子工 艺 SDL	武田与 Atinary 小分子工 艺 SDL 合作案例 ^[47-48]	HTE/机器人→数据系统→AI 选点→闭环反应优化	按公开架构 接近限定 任务 L3	4 320 种条件; 1~2 个月→约 1 周 ^[47] ; 另有 3 轮闭环将收 率 <50%→>90%的公开报告 ^[48] ; 主要为企业公开资料
工业界应用图谱	Enabling Consortium 工业行业 联盟 (ETC) 合作 ^[38]	溶解度、固态、活性药物成分 (API) 电化学合成、脂质纳 米颗粒 (LNP) 配方等闭环 场景	不同任务约 L1~L3	提供工业应用与障碍图谱, 但并非 单一平台性能验证; 传感器、数 据格式和仪器集成仍是关键边界

按照现有 SDL 平台、可行技术路线、成熟度判断和关键瓶颈的逻辑讨论。

3.2 理化性质预测与优化

3.2.1 现有平台与案例 理化性质包括溶解度、脂溶性、解离常数、固态性质、化学稳定性以及与膜通透性相关的分子特征。相关机器学习模型已广泛用于候选筛选, 但公开研究中, 直接以小分子内在理化性质为对象、并将测量结果实时回流至下一轮分子选择的 SDL 仍较少。现有较接近的证据主要来自半自动驾驶机器人处方系统和界面性质平台: 前者在大规模潜在组合中用有限实验发现高溶解度配方, 后者通过自动配液、成像和多目标选点优化润湿性^[50-51]。

这些案例证明溶解度和界面读出可以进入闭

环, 但其优化对象同时受到辅料和实验条件影响, 不能完全代表分子的内在理化性质。独立分子性质优化仍主要依赖 QSAR、主动学习和人工实验验证, 其闭环常停留在数据回流或算法建议阶段^[2,21,23]。

3.2.2 技术路线 综合现有研究, 理化性质 SDL 的技术路线可归纳为: 将化学结构、盐型或晶型、介质组成、pH、温度和时间等共同编码为实验上下文; 预测模块不仅输出性质均值, 还区分模型不确定性和测量不确定性; 实验模块通过重复测定、标准品和质量控制识别析出、降解、非平衡溶解和分析干扰; 决策模块则根据适用域边界、目标达标概率以及多个性质之间的 Pareto 改善情况, 确定下一轮实验的候选对象和实验条件。

3.2.3 成熟度与瓶颈 就公开证据而言, 独立理化

性质预测平台多处于 L1, 算法建议并经人工验证的系统可达到 L2; 当优化对象被限定为配方条件、界面性质或标准化终点时, 可接近 L3。主要瓶颈包括测量条件依赖性强、固态形态和非平衡过程难以统一描述、不同实验室协议不一致, 以及溶解度-通透性-稳定性之间的目标冲突。该领域的发展关键不是再增加一个预测模型, 而是建立能够复现实验上下文的标准数据和可校准闭环。

3.3 ADMET 性质评价

3.3.1 现有平台与案例 ADMET 是成药性评价中药学相关性最高、但闭环成熟度最低的领域之一。OpenADMET/avoid-ome 提出围绕 ADMET 相关“反靶点”建设开放机制性数据、主动学习和社区盲测的路线, 更接近数据基础设施和开放科学计划, 而不是已经完成的自主湿实验平台^[52]。ADMETron 整合多项 ADMET 预测和候选排序, 国内图注意力模型也展示了多终点分类能力, 但这些工作仍属于“有预测、无自动实验反馈”的系统^[53-54]。

在更接近生物效应的任务中, 计算推荐与细胞或动物实验结合的 MATCH/COMPASS, 以及模型驱动的药物组合细胞实验, 展示了实验室在环和表型闭环的可能性^[45-55]。但这些终点并不等同于微粒体稳定性、细胞色素 P450 抑制、转运体、人延迟整流钾离子通道基因 (hERG) 或系统毒理等经典 ADMET 测定, 不能据此推断完整 ADMET 闭环已经成熟。

3.3.2 技术路线 从现有探索看, 体外 ADMET 普遍采取的策略是先把单一、高度标准化的测定模块闭环化, 而不是一开始连接全部终点: 将生物试剂批次、阳性对照、浓度-时间设计、样品前处理、质谱校准和异常规则纳入 workflow, 以适用域和不确定性决定重复实验、补充浓度点或转入更高保真度实验; 针对不同终点返回时间不一致的问题, 已有研究采用异步批次优化和多保真模型, 使快速理化或细胞读出能够在较慢终点返回前更新资源分配。

体内药动学更适合“离线闭环”而非高频在线闭环: 体外-体内外推模型可提出动物实验设计, 自动化生物分析完成样品定量, 结果再以批次方式更新下一轮剂量、采样时间或候选选择。动物伦理、个体差异和长反馈周期决定了人在回路将长期存在。

3.3.3 成熟度与瓶颈 当前预测性 ADMET 数据平台大致处于 L1, 具有人工参与的实验室在环系统可

达到 L2; 公开文献中, 覆盖经典体外 ADMET 全链条的 L3 平台仍鲜有报告, 体内药动学通常处于 L0~L1。主要瓶颈包括生物试剂和细胞状态变异、复杂前处理与分析接口、类别不平衡和阴性数据不足、不同终点成本与周期异步, 以及高风险漏判的代价难以由常规准确率指标表达。

3.4 靶点成药性评估

3.4.1 现有平台与案例 靶点成药性评估关注疾病机制与干预靶点是否具有可验证的因果关系、是否存在可利用的结合或调控方式、选择性风险是否可接受, 以及是否能够建立相应生物标志物。与候选化合物性质相比, 这一问题更依赖知识整合和因果实验, 直接以“靶点成药性”为终点的成熟 SDL 公开案例仍很少。

现有证据主要来自 3 个邻近方向: 第一, 多智能体系统可从文献和数据中生成治疗假设、排序候选并分析实验结果^[39-42]; 第二, 抗体实验室在环系统通过序列生成、预测、体外结合实验和数据回流优化候选^[56]; 第三, 计算引导的多特异性分子组成与剂量优化把候选推荐与患者来源细胞和动物验证连接起来^[55]。这些工作证明认知-实验迭代可以运行, 但多数优化的是特定候选或功能读出, 而不是对靶点成药性进行完整、可迁移的判断。

抗体成药性评价还需要同时考虑表达、聚集、黏度、热稳定性和非特异性结合等指标, 单纯结合能力提升不能代表完整可开发性^[57]。因此, 靶点假设、候选活性和分子可开发性需要在评价中分层, 避免把某一层的闭环成功外推为整个靶点的“可成药”。

3.4.2 技术路线 现有研究呈现出的技术路线是把知识驱动和实验驱动分层连接: 由文献、组学、遗传学和结构信息形成靶点假设; 由智能体或规则系统提出可证伪实验; 在细胞、类器官或生物物理平台中验证靶点占有、通路响应、选择性和救援效应; 再将阴性和矛盾结果回流, 更新靶点排序和实验设计。此类模型需要支持因果不确定性和证据冲突的表达, 而非只给出单一置信分数。

3.4.3 成熟度与瓶颈 靶点成药性领域的认知辅助系统可达到 L2, 但真正连接多层生物验证的湿实验闭环多处于 L1~L2。瓶颈包括疾病模型与人体机制之间的可迁移性、终点替代性、因果推断困难、负结果发表不足、跨模型系统不一致, 以及高成本验证导致的长反馈周期。该领域近期更现实的目标

是建立可审计的实验室在环证据更新，而非追求靶点决策的完全自主。

3.5 制剂成药性

3.5.1 现有平台与案例 制剂成药性是目前药学 SDL 证据最集中的领域。机器学习已从配方性质预测逐步进入实验规划和递送材料设计^[11-12,58]。半自动驾驶机器人处方系统从 7 776 种潜在组合中测试 256 种，并获得多种高溶解度配方；数字处方师与压片数据工厂把材料表征、压片、检测和贝叶斯优化连接起来；RAISE 则通过自动配液、液滴成像和多目标优化发现满足润湿性、用量与成本约束的配方^[50-51,59]。

LUMI-lab 进一步整合分子基础模型、可电离脂质合成、脂质纳米颗粒制备、细胞筛选和模型更新，并开展动物验证，显示递送材料可以形成较完整的设计-制备-测试闭环^[60]。抗体-药物偶联物（ADC）平台将自动偶联、纯化、疏水相互作用色谱分析和药物-抗体比计算组成闭环，也证明限定工艺和质量属性可以实现 L3 自主优化^[61]。

3.5.2 技术路线 制剂 SDL 通常以配方组成和工艺参数为输入，以溶出、粒径、分散性、接触角、片剂质量、包封率或细胞递送效率为输出。其优势

在于变量可以参数化、制备流程易于模块化、质量属性能够快速测量。成熟平台进一步把成本、原料上限、稳定性和多项质量属性表示为约束或 Pareto 目标，并通过自动成像、过程分析技术或细胞筛选提供反馈。

3.5.3 成熟度与瓶颈 机器人处方与压片数据工厂通常处于 L2~L3，RAISE、LUMI-lab 和限定 ADC 偶联任务可达到 L3。制剂领域尚未普遍达到 L4，主要因为实验室尺度最优方案不一定能迁移到放大生产，原辅料批次差异、长期稳定性、体内递送和制造质量体系会引入新的目标与约束。动物验证未纳入在线闭环、跨实验室复现有限以及过程放大数据不足是现阶段证据边界。

3.6 分领域成熟度比较与发展思考

4 个子领域的成熟度呈现明显梯度（表 3）。制剂成药性最接近限定任务内的自主湿实验闭环；条件明确的理化性质优化次之，但独立分子性质闭环仍较少；靶点成药性主要表现为认知辅助和实验室在环；经典 ADMET 特别是体内药动学距离在线闭环最远。这一顺序并不代表药学重要性，反而说明越接近复杂生物系统和临床转化的终点，越难形成短周期、自主和可重复的反馈。

表 3 面向成药性评价的 SDL 分领域技术路线、成熟度与主要瓶颈

Table 3 Domain-specific technical routes, maturity, and major bottlenecks of SDLs for drug developability assessment

子领域	现有平台/邻近案例	主要技术路线	成熟度判断	关键瓶颈
理化性质预测与优化	机器人处方系统 ^[50] ；RAISE 界面性质平台 ^[51] ；QSAR 与主动学习方法 ^[2,21,23]	结构/条件编码→标准化性质测量→不确定性校准→多目标选点→条件与模型更新	独立分子性质多为 L1~L2；限定配方或条件优化可接近 L3	实验条件依赖、固态与非平衡过程、协议差异、溶解度-通透性-稳定性冲突
ADMET 性质评价	OpenADMET/avoid-ome ^[52] ；ADME Tron ^[53] ；图注意力 ADMET 模型 ^[54] ；表型实验室在环 ^[45,55]	标准化单终点模块→生物分析质控→适用域/不确定性→异步多保真决策→批次反馈	预测数据平台 L1；实验室在环 L2；经典体外全链条 L3 证据稀少；体内多为 L0~L1	生物和分析变异、复杂前处理、阴性数据不足、异步长周期、伦理与高风险漏判
靶点成药性评估	多智能体假设生成 ^[39-42] ；抗体实验室在环 ^[56] ；多特异性分子计算—实验验证 ^[55]	知识/组学证据→可证伪假设→候选或试剂设计→细胞/生物物理验证→因果证据更新	认知辅助可达 L2；多层湿实验闭环主要为 L1~L2	因果推断、疾病模型迁移、替代终点、负结果不足、验证成本和反馈周期
制剂成药性	机器人处方、压片数据工厂和 RAISE ^[50-51,59] ；LUMI-lab ^[60] ；ADC 偶联 SDL ^[61]	配方/工艺参数化→自动制备→质量属性或细胞读出→受约束多目标优化→迭代验证	多数为 L2~L3，是当前药学 SDL 最成熟方向	放大生产、原辅料批次、长期稳定性、体内转化、动物验证未在线闭环及跨实验室复现

现有研究提示应避免 3 种概念替代。第一, 预测准确并不等于实验闭环; 没有标准化反馈接口的模型仍是决策支持工具。第二, 认知自主不等于实验自主; 智能体能够提出假设, 但不能替代样品质量控制和湿实验责任。第三, 局部终点优化不等于候选成功; 即使某一配方、结合能力或单一 ADMET 终点得到改善, 也不能自动证明整体成药性提高。

跨子领域共同的科学问题是可执行不确定性: 系统不仅要知道预测误差, 还要识别适用域、批次效应和实验失败, 并据此决定重复、升级保真度或停止。共同的工程问题包括异步多目标调度、样品与数据标识、异常恢复、跨设备协议、电子审计轨迹和人在回路权限。公共基准可优先报告与 L 级自主程度直接相关的 R_{HITL} 和 $R_{exception}$, 并以 T_{cycle} 补充同等级平台的效率比较。实验成功率、模型校准和跨实验室复现性仍是重要的运行性能或证据成熟度指标, 但不宜作为划分 L0~L4 的直接阈值^[22,49]。

从发展趋势看, 成药性 SDL 更可能沿“模块化闭环逐步连接”而非“一步实现全实验室无人化”的路径演进。这里的关键并非提出建设阶段, 而是识别不同子领域的证据门槛: 理化性质需要协议可比和条件上下文, ADMET 需要生物分析质量和异步反馈, 靶点评估需要因果证据更新, 制剂需要放大和体内转化验证。只有当这些领域性要求得到满足, 跨模块的端到端优化才具有可解释的药学意义。

4 结语与展望

药物发现相关 SDL 已从自动化合成、高通量实验和计算决策支持, 逐步发展为连接实验、数据、模型和在线决策的反馈系统。其成熟度并不取决于机器人数量或算法复杂度, 而取决于设计空间是否可参数化、实验是否可标准化、读出是否可数字化、异常是否可机器识别, 以及本轮结果能否真实改变下一轮实验。药物相关合成、表型实验、制剂和部分工业生物工艺已显示 L2~L3 级限定任务闭环, 而跨模块端到端 L4 仍缺少可独立验证的公开证据。

在成药性评价的 4 个子领域中, 成熟度呈现清晰梯度: 制剂成药性证据最集中, 处方、压片、界面性质、递送材料和限定偶联工艺已达到 L2~L3; 理化性质在限定配方与条件下可接近 L3, 但独立分子性质闭环仍多为 L1~L2; 靶点成药性以认知辅助和实验室在环为主, 多层生物验证闭环处于 L1~

L2; 经典体外 ADMET 仍以预测平台和数据基础设施为主, 体内药动力学距在线闭环最远。这一梯度与药学重要性几乎相反, 其根源不在算法能力不足, 而在生物与分析变异、复杂前处理、异步长周期反馈和多层因果证据对闭环稳定性的限制。

因此, 判断药学 SDL 的进展不应以“无人化”程度为标准, 而应同时考察闭环是否真实、终点是否直接支持候选开发、不确定性是否能够驱动实验、人工介入是否可追踪以及证据能否跨批次和跨实验室复现。工业案例也应把“系统已形成闭环”和“性能已得到高等级验证”区分开来。

未来研究首先应优先建设“最小可行闭环”, 而不是直接追求全实验室无人化。可从溶解度、微粒体稳定性、CYP 抑制、标准化细胞读出和关键制剂质量属性等边界清晰的单终点入手, 把阳性/阴性对照、样品身份、校准、批次差异和异常分流写入机器可执行规则, 在此基础上验证 L2 向 L3 的增益。对高风险或适用域外样本保留人工审核, 并使人工介入原因成为结构化数据, 而非闭环之外的“黑箱”。

其次, 应发展适配药物研发异步、多目标和多保真特征的决策方法。快速理化或细胞终点可以在较慢的代谢、药代或安全性结果返回前更新候选排序, 但系统需要显式权衡不确定性、实验成本、反馈时间、失败概率和高风险漏判代价, 并预先定义重复实验、升级保真度和停止规则。未来平台应优先报告 R_{HITL} 和 $R_{exception}$, 以量化系统由 L2 向 L3 以及跨模块向 L4 演进时自主程度的变化; 同时报告 T_{cycle} 作为效率补充指标。实验成功率、模型校准和跨批次/跨实验室复现性则用于评价运行可靠性和证据成熟度, 而不直接决定 L 级^[49]。

再次, 数据语义、质量治理与产业可迁移性将决定 SDL 能否从演示走向常规研发。需要建立跨仪器的机器可读协议、样品与模型版本追踪、审计轨迹以及面向自适应模型的变更控制, 并通过外部验证和跨实验室基准检验可复现性。工业界已把传感器兼容性、数据格式异构和仪器集成列为现实障碍^[38]; 因此, 下一阶段的重要方向是把经过验证的单模块闭环逐步连接到多模块 DMTA, 在放大、长期稳定性、体内转化和监管可接受性得到验证后, 再评估 L4 端到端优化的实际价值。

参考文献

- [1] Waring M J, Arrowsmith J, Leach A R, et al. An analysis of the attrition of drug candidates from four major pharmaceutical companies [J]. *Nat Rev Drug Discov*, 2015, 14(7): 475-486.
- [2] Muratov E N, Bajorath J, Sheridan R P, et al. QSAR without borders [J]. *Chem Soc Rev*, 2020, 49(11): 3525-3564.
- [3] 戴青青, 余俊霖, 李国菠. 深度学习辅助药物发现的研究进展 [J]. *药学进展*, 2022, 46(1): 60-70.
Dai Q Q, Yu J L, Li G B. Recent advances in deep learning aided drug discovery [J]. *Prog Pharm Sci*, 2022, 46(1): 60-70.
- [4] Christensen M, Yunker L P E, Shiri P, et al. Automation isn't automatic [J]. *Chem Sci*, 2021, 12(47): 15473-15490.
- [5] Goldman B, Kearnes S, Kramer T, et al. Defining levels of automated chemical design [J]. *J Med Chem*, 2022, 65(10): 7073-7087.
- [6] Tom G, Schmid S P, Baird S G, et al. Self-driving laboratories for chemistry and materials science [J]. *Chem Rev*, 2024, 124(16): 9633-9732.
- [7] Abolhasani M, Kumacheva E. The rise of self-driving labs in chemical and materials sciences [J]. *Nat Synth*, 2023, 2(6): 483-492.
- [8] Coley C W, Eyke N S, Jensen K F. Autonomous discovery in the chemical sciences Part I: Progress [J]. *Angew Chem Int Ed*, 2020, 59(51): 22858-22893.
- [9] Coley C W, Eyke N S, Jensen K F. Autonomous discovery in the chemical sciences Part II: Outlook [J]. *Angew Chem Int Ed*, 2020, 59(52): 23414-23436.
- [10] Wang H C, Fu T F, Du Y Q, et al. Scientific discovery in the age of artificial intelligence [J]. *Nature*, 2023, 620(7972): 47-60.
- [11] Hickman R J, Bannigan P, Bao Z Q, et al. Self-driving laboratories: A paradigm shift in nanomedicine development [J]. *Matter*, 2023, 6(4): 1071-1081.
- [12] Bao Z Q, Bufton J, Hickman R J, et al. Revolutionizing drug formulation development: The increasing impact of machine learning [J]. *Adv Drug Deliv Rev*, 2023, 202: 115108.
- [13] Stein H S, Gregoire J M. Progress and prospects for accelerating materials science with automated and autonomous workflows [J]. *Chem Sci*, 2019, 10(42): 9640-9649.
- [14] Szymanski N J, Rendy B, Fei Y X, et al. An autonomous laboratory for the accelerated synthesis of novel materials [J]. *Nature*, 2023, 624(7990): 86-91.
- [15] Lunt A M, Fakhruddin H, Pizzuto G, et al. Modular, multi-robot integration of laboratories: An autonomous workflow for solid-state chemistry [J]. *Chem Sci*, 2024, 15(7): 2456-2463.
- [16] Jeraal M I, Sung S, Lapkin A A. A machine learning-enabled autonomous flow chemistry platform for process optimization of multiple reaction metrics [J]. *Chemistry-Methods*, 2021, 1(1): 71-77.
- [17] Ha T, Lee D, Kwon Y, et al. AI-driven robotic chemist for autonomous synthesis of organic molecules [J]. *Sci Adv*, 2023, 9(44): ead40461.
- [18] Dave A, Mitchell J, Burke S, et al. Autonomous optimization of non-aqueous Li-ion battery electrolytes via robotic experimentation and machine learning coupling [J]. *Nat Commun*, 2022, 13(1): 5454.
- [19] International Council for Harmonisation. ICH Harmonised Guideline M10: Bioanalytical Method Validation and Study Sample Analysis [EB/OL]. (2022-05-24) [2026-09-10]. https://database.ich.org/sites/default/files/M10_Guideline_Step4_2022_0524.pdf.
- [20] Wilkinson M D, Dumontier M, Aalbersberg I J, et al. The FAIR Guiding Principles for scientific data management and stewardship [J]. *Sci Data*, 2016, 3: 160018.
- [21] Hickman R J, Aldeghi M, Häse F, et al. Bayesian optimization with known experimental and design constraints for chemistry applications [J]. *Digit Discov*, 2022, 1(5): 732-744.
- [22] Häse F, Aldeghi M, Hickman R J, et al. Olympus: A benchmarking framework for noisy optimization and experiment planning [J]. *Mach Learn: Sci Technol*, 2021, 2(3): 035021.
- [23] Vamathevan J, Clark D, Czodrowski P, et al. Applications of machine learning in drug discovery and development [J]. *Nat Rev Drug Discov*, 2019, 18(6): 463-477.
- [24] Ekins S, Puhl A C, Zorn K M, et al. Exploiting machine learning for end-to-end drug discovery and development [J]. *Nat Mater*, 2019, 18(5): 435-441.
- [25] Fei Y X, Rendy B, Kumar R, et al. AlabOS: A Python-based reconfigurable workflow management framework for autonomous laboratories [J]. *Digit Discov*, 2024, 3(11): 2275-2288.
- [26] Hickman R J, Sim M, Pablo-García S, et al. Atlas: A brain for self-driving laboratories [J]. *Digit Discov*, 2025, 4(4): 1006-1029.
- [27] Sim M, Vakili M G, Strieth-Kalthoff F, et al. ChemOS 2.0: An orchestration architecture for chemical self-driving laboratories [J]. *Matter*, 2024, 7(9): 2959-2977.
- [28] Vescovi R, Ginsburg T, Hippe K, et al. Towards a modular architecture for science factories [J]. *Digit Discov*, 2023,

- 2(6): 1980-1998.
- [29] Maffettone P M, Friederich P, Baird S G, et al. What is missing in autonomous discovery: Open challenges for the community [J]. Digit Discov, 2023, 2(6): 1644-1659.
- [30] Boiko D A, MacKnight R, Kline B, et al. Autonomous chemical research with large language models [J]. Nature, 2023, 624(7992): 570-578.
- [31] Wei J Q, Yang Y J, Zhang X, et al. From AI for science to agentic science: A survey on autonomous scientific discovery [EB/OL]. (2025-8-17) [2026-09-10]. <https://arxiv.org/abs/2508.14111>.
- [32] Yoshikawa N, Skreta M, Darvish K, et al. Large language models for chemistry robotics [J]. Auton Rob, 2023, 47(8): 1057-1086.
- [33] Gottweis J, Weng W H, Daryin A. et al. Accelerating scientific discovery with Co-Scientist [J]. Nature, 2026, 655, 487-496.
- [34] Hysmith H, Foadian E, Padhy S P, et al. The future of self-driving laboratories: From human in the loop interactive AI to gamification [J]. Digit Discov, 2024, 3(4): 621-636.
- [35] Scheurer C, Reuter K. Role of the human-in-the-loop in emerging self-driving laboratories for heterogeneous catalysis [J]. Nat Catal, 2025, 8(1): 13-19.
- [36] Nippa D F, Boddy A J, Atz K, et al. Accelerating compound synthesis in drug discovery: The role of digitalisation and automation [J]. RSC Med Chem, 2025, 16(12): 5753-5764.
- [37] Aand D, Rana A, Mottaefgh A, et al. Autonomous closed-loop photochemical reaction optimization for the synthesis of various angiotensin II receptor blocker molecules [J]. React Chem Eng, 2024, 9(9): 2427-2435.
- [38] Dvivedi S, Minocha N, Chen S, et al. Towards self-driving laboratories in the biopharmaceutical industry [J]. Nat Synth, 2026: doi: 10.1038/s44160-026-01131-3.
- [39] Ghareeb A E, Chang B, Mitchener L, et al. A multi-agent system for automating scientific discovery [J]. Nature, 2026, 655(8122): 497-505.
- [40] Fehlis Y, Crain C, Jensen A, et al. Accelerating drug discovery through agentic AI: A multi-agent approach to laboratory automation in the DMTA cycle [EB/OL]. (2026-06-04) [2026-09-10]. <https://arxiv.org/abs/2507.09023>.
- [41] Cao H, Liu S Y, Zhang F, et al. Mozi: Governed autonomy for drug discovery LLM agents [EB/OL]. (2026-03-04) [2026-09-10]. <https://arxiv.org/abs/2603.03655>.
- [42] Fehlis Y, Mandel P, Crain C, et al. Accelerating drug discovery with Artificial: A whole-lab orchestration and scheduling system for self-driving labs [EB/OL]. (2025-04-01) [2026-09-10]. <https://arxiv.org/abs/2504.00986>.
- [43] 赵东海, 谢昌谕. 人工智能代理在药物研发中的应用进展 [J]. 浙江大学学报 (医学版), 2026, 55(1): 4-15.
- Zhao D H, Xie C Y. Application and progress of artificial intelligence agents in drug development [J]. J Zhejiang Univ Med Sci, 2026, 55(1): 4-15.
- [44] 林飞, 王飞跃, 田永林, 等. 平行药物系统: 基于大语言模型和三类人的框架与方法 [J]. 智能科学与技术学报, 2024, 6(1): 88-99.
- Lin F, Wang F Y, Tian Y L, et al. Parallel drug systems: Framework and methods based on large language models and three types of humans [J]. Chin J Intell Sci Technol, 2024, 6(1): 88-99.
- [45] Orhobor O, Abdel-Rehim A, Tate E, et al. Iterative AI-guided optimisation of selective triple-drug combinations for breast cancer [EB/OL]. (2026-06-04) [2026-09-10]. <https://arxiv.org/abs/2606.06562>.
- [46] Xu S T, Huang Y T, Shen X, et al. Innovating cell culture process development with deep learning-powered robotic experimentation using the first Industrial Smart Lab Framework [J]. Biotechnol Prog, 2025, 41(6): e70051.
- [47] Atinary Technologies. DMTA Innovation at Takeda: Self-driving closed-loop synthetic molecule process development [EB/OL]. (2025-10-03) [2026-06-29]. <https://atinary.com/webinars/atinary-webinar-series-e-03-takeda-acdlabs/>.
- [48] Atinary Technologies. Atinary Lab Launch: Self-Driving Labs [EB/OL]. (2024-11-07) [2026-09-10]. <https://atinary.com/news/launch-of-the-atinary-lab/>.
- [49] Adesiji A D, Wang J S, Kuo C S, et al. Benchmarking self-driving labs [J]. Digit Discov, 2026, 5(1): 14-27.
- [50] Ros H, Abdalla Y, Cook M T, et al. Efficient discovery of new medicine formulations using a semi-self-driven robotic formulator [J]. Digit Discov, 2025, 4(8): 2263-2272.
- [51] Nazeri M, Mei S, Watchorn J, et al. RAISE: A self-driving laboratory for interfacial property formulation discovery [J]. Digit Discov, 2026, 5(5): 2254-2270.
- [52] Fraser J S, Edgar S, Handly L N, et al. Mapping the avoid-ome: A systematic open-science approach to predictive ADMET [J]. Nat Commun, 2026, 17(1): 4644.
- [53] Nair D N, Yadav R S, Mate-Jondhale P, et al. ADMETron: an AI-driven SaaS platform for comprehensive ADMET prediction and compound prioritisation [EB/OL]. bioRxiv, (2026-06-13) [2026-09-10]. <https://doi.org/10.64898/2026.06.13.732026>.
- [54] 顾耀文, 张博文, 郑思, 等. 基于图注意力网络的药物 ADMET 分类预测模型构建方法 [J]. 数据分析与知识发现, 2021, 5(8): 76-85.
- Gu Y W, Zhang B W, Zheng S, et al. Predicting drug

- ADMET properties based on graph attention network [J]. *Data Anal Knowl Discov*, 2021, 5(8): 76-85.
- [55] Kendell I, McShinsky R, Modzelewska K, et al. Computer-guided dosing of multi-specific T-cell engagers [J]. *Commun Biol*, 2026, doi: 10.1038/s42003-026-10602-4.
- [56] Frey N C, Hötzel I, Stanton S D, et al. Lab-in-the-loop therapeutic antibody design with deep learning [EB/OL]. (2025-11-08) [2026-09-10]. *bioRxiv*, <https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2025.02.19.639050v3>.
- [57] 姚江宁, 律璿桐, 张迎珺, 等. 抗体成药性筛选流程及评价策略 [J]. *生物工程学报*, 2024, 40(2): 507-516.
- Yao J N, LV Y T, Zhang Y J, et al. Antibody druggability screening process and evaluation strategy [J]. *Chin J Biotechnol*, 2024, 40(2): 507-516.
- [58] Gormley A J. Machine learning in drug delivery [J]. *J Control Release*, 2024, 373: 23-30.
- [59] Abbas F, Salehian M, Hou P, et al. Accelerated drug development using a digital formulator and a self-driving tableting data factory [J]. *Nat Commun*, 2026, 17(1): 4739.
- [60] Xu Y, Cui H T, Pang K, et al. LUMI-lab: A foundation model-driven autonomous platform enabling discovery of ionizable lipid designs for mRNA delivery [J]. *Cell*, 2026, 189(6): 1620-1635.e25.
- [61] Roberts L, Reish M E, Yang J, et al. Automating stochastic antibody-drug conjugation: A self-driving lab approach for enhanced therapeutic development [J]. *Digit Discov*, 2025, 4(4): 979-986.

[责任编辑 刘东博]