

人工智能预测小分子药物药动学参数的研究进展

孟祥宇¹, 翟启瑞¹, 王 泽¹, 周雪林^{3*}, 王晓良^{1,2*}

1. 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

2. 中国医学科学院 北京协和医学院药物研究所, 北京 100005

3. 首都医科大学 基础医学院 药理学系, 北京 100069

摘要: 药动学 (PK) 研究是评价药物成药性、安全性与临床适用性的关键环节, 传统实验方法耗时长、成本高, 人工智能 (AI) 的发展为解决这一困境提供了新的思路。系统梳理 AI 预测小分子药物 PK 参数的最新研究进展。在算法层面, 介绍随机森林、支持向量机、梯度提升树、极端梯度提升等传统机器学习算法, 以及图神经网络、深度神经网络等深度学习算法的优势、局限性及适用场景, 并提出不同数据规模下的算法选择建议; 在应用层面, 归纳上述算法在预测药物吸收、分布、代谢、排泄等环节关键 PK 参数中的应用进展, 以及国内外药企开展 AI 预测 PK 参数产业化研究的现状; 在平台层面, 总结 ADMET Lab 3.0、Deep-PK、admetSAR 3.0、ADMET-AI、SwissADME 等代表性在线预测平台的特点, 并将各平台的半衰期预测结果与临床实测数据进行对比分析。旨在为 AI 预测和 PK 领域的研究工作者提供实践参考, 助力加速药物早期筛选流程, 降低研发成本与风险。

关键词: 药物研发; 药动学参数预测; 人工智能; 机器学习; 深度学习; 药物成药性

中图分类号: R969.1

文献标志码: A

文章编号: 1674-6376(2026)10-3377-11

DOI: 10.7501/j.issn.1674-6376.2026.10.002

Research progress on prediction for pharmacokinetic parameters of small molecule drugs by artificial intelligence

MENG Xiangyu¹, ZHAI Qirui¹, WANG Ze¹, ZHOU Xuelin³, WANG Xiaoliang^{1,2}

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

2. Institute of Materia Medica, Chinese Academy of Medical Sciences & Peking Union Medical College, Beijing 100005, China

3. Department of Pharmacology, School of Basic Medical Sciences, Capital Medical University, Beijing 100069, China

Abstract: Pharmacokinetics (PK) research is a crucial step in evaluating the pharmacological properties, safety, and clinical applicability of drugs. The traditional trial-and-error experimental method is time-consuming and costly. The development of artificial intelligence (AI) provides a new solution to this problem. This paper systematically reviews the latest research progress in AI for predicting the pharmacokinetic parameters of small molecule drugs. At the algorithm level, it introduces traditional machine learning algorithms such as random forest, support vector machine, gradient boosting tree, and extreme gradient boosting, as well as deep learning algorithms such as graph neural networks and deep neural networks, their advantages, limitations, and applicable scenarios, and proposes algorithm selection suggestions for different data scales; At the application level, it summarizes the application progress of these algorithms in predicting key PK parameters such as drug absorption, distribution, metabolism, and excretion, as well as the current situation of industrialized research on AI predicting PK parameters carried out by domestic pharmaceutical companies; At the platform level, it summarizes the characteristics of representative online prediction platforms such as ADMET Lab 3.0, Deep-PK, admetSAR 3.0, ADMET-AI, and SwissADME, and conducts a comparative analysis of the half-life prediction results of each platform with clinical measured data. The aim is to provide practical references for researchers in the fields of AI prediction and

收稿日期: 2026-06-10

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (82607746); 天津市科技计划项目 (24ZXZSS00480)

作者简介: 孟祥宇, 硕士, 研究方向为药物代谢动力学。E-mail: mengxiangyu@tipr.com.cn

*通信作者: 周雪林, 博士, 副教授, 研究方向为药物代谢动力学。E-mail: zhouxuelin1982@163.com

王晓良, 博士, 教授, 研究方向为药物代谢动力学。E-mail: wangxl@imm.ac.cn

pharmacokinetics, and to help accelerate the early drug screening process and reduce research and development costs and risks.

Key words: drug discovery; pharmacokinetics parameter prediction; artificial intelligence; machine learning; deep learning; drug druggability

药动学(PK)是一门依托动力学原理与数学处理方法,研究药物在体内的吸收、分布、代谢和排泄过程(ADME)规律的科学^[1]。药物的体内作用机制十分复杂,其临床疗效并非仅依赖药物自身的理化特性,更与 PK 各环节中的调控因素有关。临床 PK 研究失败是新药研发高投入、低产出的原因之一^[2]。据研究报道,约 33.6%的新药研发失败案例可归因于临床 PK 研究结果不佳;因 PK 失败终止的项目,不仅会造成化学合成、临床前研究等前期 1~5 亿美元经济损失,还会导致研发周期延长 2~5 年,致使药物错失专利保护期内的市场机会^[3]。因此,在新药研发早期预测药物人体 ADME 特性、治疗剂量和暴露量,是药物研发过程中的关键环节^[4]。

通过预测 PK 参数,能够科学评价候选药物生物利用度和生物等效性,为新药的处方优化和工艺改进提供数据支撑;也可以系统解析候选药物的 ADME 特征,探索“药物结构-PK-药效学”的关联,指导新药的定向合成;还可以根据每位患者的生理、病理特征,将精准预测的 PK 参数与个体化治疗策略紧密融合,制定兼具科学性与适配性的给药方案^[5]。然而,由于化合物的结构多样性与理化性质异质性,实现化合物 ADME 特性的高通量、精准表征,仍是当前新药研发与药效评价领域亟待突破的核心技术瓶颈^[6]。

尽管当前 PK 领域的前沿分析技术已在创新药物研发进程中取得关键性突破,但面对愈发复杂的研发需求,仍需注入新的技术。回顾 PK 参数预测的发展历程,可以大致分为 3 个阶段:(1)早期阶段,PK 参数预测主要依赖物理化学性质分析与机制基础建模,通过分子亲脂性、电荷分布等特性判断代谢稳定性,并依据酶促反应动力学构建数学模型,实现代谢速率的初步推演^[7],为后续技术发展奠定了理论与实验框架。(2)中期阶段,随着计算机辅助药物设计(CADD)、基于结构的药物设计(SBDD)以及代谢组学分析技术兴起,通过分子对接、核磁共振和质谱检测等手段,可有效分析药物与代谢酶相互作用机制、药物代谢途径等,形成了定量构效关系(QSAR)方法^[8]。该方法利用统计和物理模型分析药物与靶点构效关系,但受限于数据

规模和算法能力,仍有较多限制与不足。(3)随着药物研发迈向合理化设计阶段,人工智能(AI)技术的发展,计算模拟在数据处理效率、模型泛化性能等关键维度得到了突破。基于决策树、支持向量机(SVM)、随机森林算法等 AI 算法的评价与学习机制,可以更好地处理复杂数据并降低人为因素对模拟结果的影响^[9]。当前 AI 预测模型可以分为回归模型和分类模型 2 类:其中回归模型常用于 PK 参数[如半衰期($t_{1/2}$)]的定量预测;分类模型则常用于药物属性(如药物是否能通过血脑屏障)的定性预测。同时,AI 技术可以自动将模拟结果与海量数据库中的信息进行交叉比对,提高了 PK 模拟结果的准确度。

基于此,将 AI 技术深度融入小分子药物研发的早期阶段,通过构建多维度特征整合的智能预测模型,实现 PK 参数的精准预估,可在药物设计环节定向筛选具备优异 PK 特性的小分子候选化合物。该策略不仅能够显著优化候选药物的体内 ADME 特性、提前规避潜在的 PK 缺陷,更能通过早期成药性评估,有效减少临床前研究的试错成本与资源损耗,为提升创新药物研发效率与成功率提供关键技术支撑^[10]。本文系统梳理当前 PK 的 AI 预测领域的常用的算法、平台,并通过应用实例,总结该领域的前沿成果,旨在为药物研发人员制定研发策略、开展基础研究与临床转化等工作提供参考。

1 AI 预测 PK 参数的常用算法

近年来,随着计算机技术模拟手段的提高,AI 技术也逐渐成熟,二者相结合,使药物研发进入了合理化药物设计新阶段。药物在体内的 ADME 等 PK 特性与其化学结构密切相关^[11]。在 PK 参数预测研究中,核心研究思路为收集化合物化学结构与生物活性参数数据集,再利用机器学习(ML)或者深度学习(DL)等 AI 算法将结构参数和生物活性参数相关联,构建数学模型;在验证模型的可靠性与预测能力后,即可将其应用于候选化合物的 PK 成药性评价,从而减少实验筛选的工作量和研发成本。而构建这些数学模型,离不开各类算法的支撑。不同算法适配场景各有特点,以下将系统梳理药物 PK 参数预测领域的主流建模算法。

1.1 随机森林

随机森林是适用于特征数大于样本数情况的机器学习算法^[12]。其“森林”是由多个决策树模型组成，即每棵决策树都是一个简单的判断模型。“树”以数据集中化合物分子尺寸、电荷数量、化学基团等特征为判断依据，与预测目标形成的标签结合，多棵决策树聚集在一起形成“森林”体系，完成数据分类与判定。因此，随机森林算法适用于特征数量多但关键特征少的建模场景。在模型训练时，每棵决策树均随机选取样本和特征，由此获得多元化的判断视角，再经“森林”集成取平均值，既能有效避免模型过度记忆个别特殊样本而产生过拟合问题，又能更好地捕捉到数据中的非线性关系。但该算法存在缺点：决策树的数量增多会提升计算成本，且整体模型复杂度高，可解释性较差。Xu 等^[13]利用该算法建立了用于识别细胞色素 P450 家族 3A 亚家族 7 多肽 (CYP3A7) 选择性抑制剂或底物的分类预测模型，通过比较新生儿与成人间 CYP3A7 介导的药物代谢群体差异，为新生儿安全有效治疗药物的研发提供技术支撑。

1.2 SVM

SVM^[14]是可同时适配分类与回归任务的通用机器学习算法。在分类预测场景中，SVM 通过学习数据集中的特征与标签，将阳性样本与阴性样本间隔最大化，以此实现模型的稳定性，降低新样本的预测误差；在回归预测场景中，该算法通过拟合最优曲线，最大限度贴合数据集内各“特征-标签”样本点。SVM 可以通过不同的核函数处理各种复杂数据，具有坚实的数学理论支持，预测结果稳定性强。但该算法对数据的标准化程度十分敏感，参数的微小的参数调整可能会造成模型性能大幅波动，需要谨慎选择参数以确保建模效果。Gao 等^[15]针对药物抗胃癌作用预测需求，使用混合核函数 SVM 模型，融合多项式核函数和径向基核函数的互补优势，有效提升了模型的预测稳定性。

1.3 梯度提升树

梯度提升树^[16]与随机森林相似，均由多棵决策树组成，但在该算法中，各决策树模型按顺序构建、相互纠错。首棵决策树只关注化合物的关键特征，并依此完成简单分类；后续每棵决策树均针对前序模型的预测误差进行修正，逐步挖掘数据细节特征，以此进行模型性能迭代。模型最终通过加权集成所有决策树的预测结果，输出最优判定结论，对纠错贡献

度高、预测精度优的决策树赋予更高权重。该算法能够逐步优化整体模型，提高预测性能，但当决策树深度过大或迭代次数过多时，容易出现过拟合问题，对于学习率、树的深度、子采样比例等参数的选择非常敏感，需要精细调整以获得最佳建模性能。Pallenberg 等^[17]使用该算法建立了分类模型，实现临床 CT 造影剂用药剂量过量风险的精准预测。

1.4 极端梯度提升 (XGBoost)

XGBoost^[18]是梯度提升树的强化版，在依次纠错的基础上，该算法可精细记录前序决策树的误差成因，引导后续决策树进行针对性训练与误差修正。同时，在汇总结果时，XGBoost 对于纠正关键错判、判断准确率高的决策树，给予更大的权重，大幅提升复杂数据集的适配能力，尤其适用于处理大规模数据集。此外，XGBoost 使用稀疏优化、直方图分割、正则化等多种优化技术，可以智能处理数据缺失值，通过将数据分区块计算，避免过拟合，有效兼顾了训练速度、预测精度与内存消耗。但该算法需要调优的参数较多，且对参数调整敏感，需要进行细致的参数调优和模型验证，以确保获得最佳预测性能。Kwon 等^[19]利用该算法构建回归模型，精准预测药物人体清除率与稳态分布容积两类核心 PK 参数。

1.5 图神经网络 (GNN)

上述算法均以识别分子特征为基础，完成与标签的匹配训练。而 GNN^[20]最大的特点是直接将分子当“图”处理，以分子中的每个原子作为图节点，化学键作为图的连线，完整保留分子的三维结构以及原子间的连接关系。建模过程中，各节点与周围节点进行特征信息交互，如一个化合物中的羟基节点，会将其可以形成氢键的信息传递给相邻节点，这样每个节点都能了解自身在分子中的功能和位置，最终将整个图特征进行融合完成模型训练与预测。但对于大型或复杂的图结构，GNN 计算时存在计算资源消耗大、训练耗时久的问题。Zeng 等^[21]利用 GNN 算法提取分子中结构特征，并将序列特征与结构特征进行拼接，接入全连接网络，成功构建抗血吸虫活性小分子预测模型。

1.6 深度神经网络 (DNN)

DNN 为多层递进式 DL 模型，可模拟人脑认知逻辑，层层递进的学习分子特征与生物活性标签间的关系，比起传统算法更善于捕捉深度的隐藏规律^[22]。输入化合物信息后，首层网络会先提取原子种类等简单特征，后续层级基于前层结果挖掘官能

团组成等复杂深层特征,通过多层递进解析完成核心特征筛选,最终输出预测结果。DNN 无需人工设计与筛选特征,可自主学习,善于捕捉复杂数据规律,适配大规模、高维度的数据建模场景。但模型容易出现过拟合问题,且决策过程难以解释,具有与其他深度学习模型一致的黑箱问题。Chen 等^[23]为解决传统药物-靶点相互作用(DTI)预测方法耗时费力的问题,助力药物机制理解、药物重定位和新药设计,建立了药物-靶点相互作用预测模型,先利用 XGBoost 算法筛选出重要的特征子集,再使用

DNN 深度学习逐层构建模型,经测试集验证,该模型预测准确率可达 97%以上。

1.7 算法对比与选择

上述算法在药物 PK 参数预测建模中各有优劣,在实际应用中需要根据数据集质量、数据规模和计算资源进行综合考量。本研究结合 Fischer 等^[24]报道方法与建模实践经验,从数据量需求、大小数据集预测精度、模型可解释性、计算成本、抗过拟合、所需特征和依赖特征程度 8 个角度进行横向对比,结果见表 1。

表 1 算法对比

Table 1 Comparison of algorithms

算法	数据量需求	小数据集表现	大数据集表现	可解释性	计算成本	抗过拟合能力	特征需求	特征工程依赖
随机森林	低	很强	中等	高	低	强	分子描述符/指纹	高
SVM	低至中等	很强	有限	中等	中等	中等	分子描述符/指纹	高
梯度提升树	中等	强	高	高	中等	弱	分子描述符/指纹	高
XGBoost	中等至高	强	高	高	中等至高	强	分子描述符、指纹、多模态特征	高
GNN	高	有限(易过拟合)	非常高	有限(部分基于注意力机制的可解释性)	非常高[需图形处理器(GPU)加速]	中等	直接输入分子图结构	低
DNN	高	中等	非常高	有限(全连接层语义不明确)	高(依赖GPU)	中等	描述符及自动学习的嵌入特征	低

当数据量在 300~1 000 时,随机森林算法对特征噪声和异常值容忍度高,且参数调优简单,为 PK 建模的优选算法^[25]。当数据量在 1 000~10 000 时,可以 XGBoost、SVM 和梯度提升树等算法建模性能更优^[26]。此类传统机器学习模型普遍解释性较好,可以配合 SHAP 值分析或特征重要性分析对模型进行解释。其中,SVM 建模需注重核函数选择,不同核函数对模型训练影响显著^[14];梯度提升树对参数设定敏感,需要仔细调整参数以避免过拟合风险^[16]。当数据量大于 10 000 时,推荐使用 DL 模型。若数据集中化合物具有明确的分子指纹特征,可尝试使用 DNN 模型;若数据集中化合物具有明显手性、立体化学结构等拓扑结构特征,且算力充裕,可以优先尝试 GNN 模型。从可解释性维度来看,GNN 模型优于 DNN 模型,但二者均弱于如随机森林、XGBoost 等传统机器学习模型^[20,22]。

2 预测 PK 参数应用

在药物研发的过程中,精准预测 PK 参数对优化药物设计、规避研发风险至关重要。随着多学科

技术融合,多样化预测模型不断涌现。当数据量较小时,可以选择数据驱动的机器学习模型,借助算法挖掘参数关联规律;而当数据量大于 3 000 个时,则可以尝试使用具备深层特征提取能力的 DL 模型,当数据量大于 10 000 个时,DL 模型在提升预测精度上展现独特优势。

2.1 基于 ML 模型预测 PK 参数

当前,临床 PK 参数预测在药物设计和开发中扮演着至关重要的角色。在 PK 和医学预测的前沿研究领域,展现出突出的应用潜力,已成为药物早期研发的核心技术手段之一。相较于传统实验方法,ML 模型能够处理大量的药物代谢规律,在研发早期可快速预测药物 PK 参数,为研究人员提供重要数据支撑。

峰浓度($C_{\max}$)指药物经体内吸收后,血药浓度所能达到的峰值水平,达峰时间($t_{\max}$)为药物给药后血药浓度抵达峰值所需的时间,二者结合可反映药物的体内吸收速度与吸收程度。Pillai 等^[27]构建 ML 模型预测血药浓度的时序变化规律,最终建立的浓度-

时间曲线预测模型决定系数 (R^2) 达 0.65, 为后续相关药物研发和药效评估提供了关键数据支撑。

血浆蛋白结合率 (PPB) [28] 是指药物入血后, 与血浆蛋白结合的药量占血液中药物总量的百分比。在给药剂量一定的情况下, PPB 决定着体内游离药量的占比, 影响药物的 ADME 过程。Kosugi 和 Hosea [29] 以 1 114 种化合物的大鼠 PPB 数据为训练数据集, 构建机器学习 PPB 预测模型, 模型 R^2 为 0.517; 并且建立了大鼠的体内-体外外推清除率预测模型, R^2 为 0.297。该系列模型可支撑药物化学结构优化, 有效降低研发过程对体内实验的依赖, 提升药物筛选效率。

$t_{1/2}$ 是指体内药量或血药浓度下降至初始水平一半所需的时间, 是衡量药物体内消除速率的特征性 PK 参数, 且通常不受药物剂型与给药方式的影响, 具备良好的稳定性 [30]。Fan 等 [31] 依托 3 512 种化合物的 $t_{1/2}$ 数据集, 基于 ML 算法构建 QSAR 预测模型, 并采用均方根误差 (RMSE)、 R^2 和平均绝对误差 (MAE) 指标评价模型性能。最终所得的模型具有较好的准确度 (RMSE=0.176, R^2 =0.845, MAE=0.141), 可精准实现化合物 $t_{1/2}$ 的批量预测。

分布容积 (V_d) [32] 是基于血药浓度推算的虚拟体液容积, 假设药物在体内均匀分布, 可直观反映药物在机体组织与体液中的分布广度。Wang 等 [33] 利用 SVM 算法, 以 1 352 种注射类药物为数据集, 构建药物稳态分布容积预测模型, 模型的 R^2 为 0.87, 具有较好的预测性能, 便于在药物开发的早期阶段筛选掉分布性能差的候选药物, 缩减研发周期与成本。

Wang 等 [34] 整合代谢组学、单细胞和批量 RNA-seq、元基因组学等多种组学数据, 构建骨关节炎随机森林分类诊断模型, 为肠道-关节轴作用机制阐释和骨关节炎精准治提供了新思路。Huang 等 [35] 聚焦临床实际应用, 搭建机器学习模型, 针对 ICU 患者伏立康唑血药浓度展开预测, 该模型 R^2 为 0.73, 可为临床个体化给药方案优化、提升治疗有效性与安全性提供数据支撑。Guan 等 [36] 提出 StackDILI 专属模型, 用于药物性肝损伤风险预测, 可实现化合物毒性的快速评估。

2.2 基于 DL 模型预测 PK 参数

在 PK 参数预测研究中, DL 模型无需人工进行复杂的特征工程, 能够自主挖掘大量已知药物代谢数据, 从中学习潜在规律与关联, 实现对新型药物

PK 参数的高精度预测。不同结构的 DL 模型具备差异化的数据处理优势: 卷积神经网络 (CNN) 可以自动学习图像数据中的特征, 循环神经网络 (RNN) 和长短期记忆网络可以处理时间序列类 PK 数据, 适配动态 PK 参数的分析场景。这种自动特征学习能力让 DL 在 PK 数据建模中展现出显著优势。但 DL 也需要大规模、高质量的训练数据, 同时高性能的图形处理单元、设备内存等硬件资源要求较高。

血药浓度-时间曲线下面积 (AUC) 是药理学核心评价指标之一 [37], 结合给药剂量可精准换算药物血浆清除率、 V_d 等关键参数。Gruber 等 [38] 融合生理药理学 (PBPK) 模型与图卷积网络 DL 算法, 对 2 827 种化合物的 PK 参数开展预测, 结果显示, 所构建的 AUC 与 C_{max} 预测模型中位折变误差稳定在 1.86~1.87, 模型预测性能表现稳定。

生物利用度 (F) [39] 是指药物经血管外途径给药后进入血液循环的药量占给药总量的比例, 是评价药物剂型和给药途径适用性及药物吸收能力的重要指标, 在口服药物研发评价中应用最为广泛。Ng 等 [40] 使用迁移学习方法, 以药物溶解度预测任务完成模型预训练, 在此模型的基础上对 GNN 模型参数进行微调优化, 优化后的模型口服 F 预测平均准确度为 0.797, 具有较好的可靠性。

血浆清除率 (CL) [41] 是指单位时间药物从血浆中被清除的体积, 是衡量药物从体内消除速率的重要参数。Mamada 等 [42] 将传统 ML 算法与 DL 算法相结合, 针对大鼠体内药物清除率开展建模预测, 模型预测准确率可达 94.3%, 为 PK 参数快速、精准预测提供了新型技术方案, 有助于加速新药研发进程。Méndez-Lucio 等 [43] 使用大型数据集的图级监督对 8.42 亿个分子的局部分子特征和相邻原子信息进行预训练后, 以原子标识符为输入标记, 图连接性为位置约束构建图结构学习框架, 得到 MolE 模型。该模型在脂溶性、PPB、CL、 $t_{1/2}$ 等 10 个 PK 参数的预测任务中, 均达到较好的预测水平。

随着 AI 技术的迭代升级, AI 技术已不再局限于单一 PK 参数预测建模, 逐步深度融入药物发现全流程。Kaur 等 [44] 针对阿尔茨海默病的疾病靶点 BACE-1 构建 QSAR 模型, 挖掘针对该靶点具有抑制活性的分子结构特征, 基于该特征设计 255 个新型候选化合物。进一步利用 ADMET lab 3.0 预测平台完成针对候选化合物的血脑屏障渗透性预测, 筛选出 19 个透过性良好的优势分子。随后通过分子

对接、分子动力学模拟以及结合自由能计算开展多维度验证,最终筛选获得 4 个高活性候选化合物。该研究构建了“QSAR 建模-结构特征提取-分子设计-PK 参数预测-分子对接-分子动力学验证”的 AI 辅助设计药物思路,为药物早期发现与精准决策提供了可操作性参考。

近年来国内外各大药企已广泛开展 AI 预测 PK 参数的产业化研究,研究进展如表 2 所示。表 2 中 R^2 反映预测值与实测值之间的线性相关程度,越接近 1 表示相关性越强;平均绝对倍数误差/几何平均倍数误差表示平均而言预测值为实测值的 n 倍以

内,越接近 1 越理想;倍数误差范围(如 2 倍误差范围)表示预测值落在实测值 0.5~2.0 倍范围内的比例,该比例越高说明模型精度越好。在研究过程中,各企业普遍采取传统 ML 与 DL 多种算法并行的对比研究策略。2 类模型在预测精度上差异并不悬殊,当训练数据规模有限时,传统 ML 模型往往更稳定;而在训练数据规模充足的条件下,DL 模型的预测精度往往要优于传统方法。此外,将 ML 与 PBPK 机制模型相融合,已成为企业技术研发的主流方向,该融合模式可兼顾模型预测精度与生理机制可解释性,有效弥补单一模型的应用短板。

表 2 近 2 年药企利用 AI 预测 PK 参数研究进展

Table 2 Progress in AI-based prediction of PK parameters by pharmaceutical companies over past two years

公司	预测参数	预测水平	参考文献
Pfizer	注射药物CL	平均绝对倍数误差为2.5	45
Roche	F 、CL、 $t_{1/2}$	平均绝对倍数误差均小于2.5	46
Novartis	大鼠注射给药后药时曲线	$R^2=0.71$	47
Boehringer Ingelheim	CL、剂量	2倍误差范围内、2~3倍误差范围内	48
Sanofi	CL、 V_d	$R^2=0.65$ 、 $R^2=0.65$	27
Bayer	口服药物AUC	几何倍数误差为1.87	38
	注射药物AUC	几何倍数误差为1.86	
XtalPi	AUC	实测值的65%	49
Takeda Pharmaceutical	大鼠脑-血浆分配系数、猴脑-血浆分配系数	$R^2=0.30$ 、 $R^2=0.52$	50
AstraZeneca	CL、 F	$R^2=0.63$ 、 $R^2=0.55$	51

综合上述企业的研究进展可见,回归预测模型的精度仍存在明显局限,说明当前 ML 模型尚无法完整复刻人和动物体内药物代谢的复杂生理调控机制。因此,各企业开发的预测模型均定位为化合物设计阶段的快速评估工具,旨在缩减动物实验规模、缩短药物研发周期,减少不必要的人力物力消耗。此外,现有相关研究均明确提及训练数据集的体量与数据质量对模型精度的影响,远高于算法本身。

3 现有 ADME 线上预测平台

在药物研发的过程中,准确预测化合物的 ADME 性质对评估成药潜力、降低研发风险至关重要。分子结构的表征方式多种多样,其中最便捷的方式之一是采用简化分子线性输入规范(SMILES)符号。SMILES 符号可以用于定义分子最优描述符,并且转换为分子指纹和分子描述符,进而用于数学建模中。分子描述符可以对分子结构和性质进行定量表征,包含如原子总数、官能团数

量、分配系数的粗略估算值、拓扑指数和经典描述符等参数;分子指纹则更多用于描述分子的结构特征,用于标记分子中含有的某种特定子结构。现有多款 ADME 在线预测平台均采用该技术路线:将 SMILES 符号转换为分子描述符或分子指纹,完成分子结构和物理性质表征,再整合 ADME 实验数据、结合 AI 算法等搭建预测模型,以辅助研究人员进行药物开发。

各平台均基于 ML、DL 等 AI 技术构建预测模型,并且提供在线平台服务,研究人员仅需在网页端输入分子数据,便可快速获取 ADME 预测结果。不同平台各具特色:ADMET Lab 3.0 内置预测模型数量最为丰富,适用于化合物全方位 ADMET 初筛;Deep-PK 具备分子结构优化能力,可自动生成候选衍生物;SwissADME 的可视化分析与多工具联动功能是其突出优势;ADMET-AI 则以预测速度快见长。研究人员可根据自身需求进行选择使用。

3.1 ADMET Lab 3.0

ADMETlab 3.0^[52] (<https://admetlab3.scbdd.com/>) 是目前广泛使用的 ADMET 参数预测平台。用户可通过输入药物的 SMILES 描述符,即可完成化合物的物理化学性质和在人体内 ADME 特性和毒性数据预测。该平台纳入了 ChEMBL (<https://www.ebi.ac.uk/chembl/>)、PubChem (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>) 和 OCHEM (<http://ochem.eu/>) 数据库及文献数据,并选择性地去除有机金属化合物、异构体混合物和化学混合物,完成盐类中和、抗衡离子去除处理,并采用规范的 SMILES 字符串作为模型输入格式。与同类预测平台相比,该平台共覆盖 119 项预测指标,能够更加全面、系统地完成化合物 ADME-毒性 (ADMET) 相关参数评估。

3.2 Deep-PK

Deep-PK^[53] (<https://biosig.lab.uq.edu.au/deeppk/>) 是一款经典开源的 PK 和毒性预测、分析和优化平台。该平台以分子 SMILES 字符串作为输入完成 ADMET 参数建模,整合 ADMETlab 2.0、Interpretable-ADMET、toxCSM 与 pkCSM 多套权威数据集,基于 GNN 构建覆盖 73 个预测终点的定量模型。借助 GNN 可识别分子图级特征的优势,Deep-PK 能够识别影响预测的关键分子区域,从而提供分子优化功能,通过添加、替换或删除子结构生成多达 100 个衍生分子,并评估所有衍生物的 PK 特性。在雄激素受体、雌激素受体 2 类核激素受体预测任务中,该平台预测模型的马修斯相关系数 (MCC) 分别提高了 0.43、0.39,在内分泌干扰物识别、核受体活性筛选场景具备一定优势,相较于其他平台,预测结果与真实值更为接近,可以更好地处理分类任务中数据类别不平衡问题。

3.3 admetSAR 3.0

admetSAR 3.0 平台^[54] (<https://lmmd.ecust.edu.cn/admetSar2/>) 收集了 ChEMBL、DrugBank、CPDB、ECOTOX、OpenFoodTox 等开源数据库和文献的数据,基于对比学习的多任务 GNN,结合无监督预训练与有监督微调建立预测模型。该平台收录了 10 万余种化合物、37 万余条 ADMET 数据,提供 119 个 ADMET 特性预测服务,是覆盖范围最全面的平台之一。3.0 版本新增了化学结构相似性搜索功能,支持跨物质推断分析,通过转化规则或骨架跃迁技术,可以自动优化查询分子的 ADMET 性质。同

时平台全面优化输入输出交互体系,兼容 SMILES 编码、二维化学结构式、批量分子文件等多种输入形式,预测结果支持数值报表、可视化图表、批量文件导出等多元输出方案。同时,引入了用于环境和化妆品风险评估模块,更有利于化合物安全性的评估。

3.4 ADMET-AI

ADMET-AI^[55] (<https://admet.ai.greenstonebio.com/>) 是一款简单、快速、准确且开源的 ADMET 预测平台。平台基于 Chemprop-RDKit 图形神经网络进行 ADMET 预测,是目前在治疗学数据共享库 ADMET 排行榜上平均准确度最高的模型。该平台利用 2 579 种已获得监管部门批准的药物作为数据集,建立了包含 41 个 ADMET 参数的预测模型。ADMET-AI 可以进行批量预测,用户通过输入 SMILES 字符串、上传 CSV 文件或绘制分子结构提交待预测化合物;预测结果以雷达图、表格和散点图的形式展示,提高了预测效率。并且该平台可将每个需要预测的化合物与 DrugBank 数据库种已批准的药物进行对比,根据解剖学治疗学化学分类系统筛选特定药物类别进行横向对比,提升性质评估的实际参考价值。该平台提供在线工具与本地 Python 程序 2 种部署方案,其网页版是当前运行速度最快的公开 ADMET 预测工具。

3.5 SwissADME

SwissADME 平台^[56] (<http://www.swissadme.ch/index.php>) 由瑞士生物信息学研究所开发,旨在预测化合物的理化性质、PK、类药性和药物化学友好性,平台内置 BOILED-Egg 模型、iLOGP 算法、生物利用度雷达图等自研高效分析方法,支持批量分子并行计算,并通过交互式图表展示分析结果,同时配备在线分子绘图工具,可直接绘制结构式并提交预测。平台提供了 5 种筛选模型,可以帮助研究人员在药物发现过程中更高效地筛选和优化候选化合物,系统性降低湿实验的时间与物料成本。此外,该平台可以通过一键联动功能,直接访问 Swiss Drug Design 的系列网络工具,包括 Swiss Similarity (虚拟筛选工具)、Swiss Bioisostere (基于配体的设计工具)、Swiss Target Prediction (生物靶点预测工具) 以及 Swiss Dock (分子对接工具) 等模块,降低跨工具联用的操作门槛,满足不同阶段、不同场景下的研究需求。

3.6 各预测平台预测结果与临床数据对比

各预测平台为研究人员提供了便捷的预测工

具,但各平台均基于不同的数据集和算法建立,针对同一化合物输出的预测结果可能存在差异。为直观量化各平台的表现差异,本研究选取 10 种药品,以规范 SMILES 字符串作为输入方式,分别采用不同平台对药品 $t_{1/2}$ 进行预测,并将计算结果与美国食品药品监督管理局(FDA)橙皮书记载的临床实测数据开展对照分析。其中 SwissADME 不包含 $t_{1/2}$ 预测模型,未参与本次对比实验。对比结果如表 3 所示,各平台预测结果具有较大差异。Deep-PK 对 $t_{1/2}$ 模型以

3 h 为临界值的分类预测模型,且在长半衰期药物中预测准确度较差;ADMET Lab 3.0 平台具有类似情况;admetSAR 3.0 平台相对表现较好,但其预测准确度仍与待测化合物分子结构高度相关。因此在实际使用中,研究人员需根据目标化合物特征与类型,充分考虑各平台的适用范围,选择合适的平台预测。同时单一平台的预测结果可能存在偏差,建议采用多平台联合预测的方案,整合多模型输出数据进行综合评价,以此降低单一算法带来的预测不确定性。

表 3 各预测平台预测结果与临床数据对比

Table 3 Comparison of predicted results from various prediction platforms with clinical data

药物	临床 $t_{1/2}$ /h	预测 $t_{1/2}$ /h			
		ADMET Lab 3.0	admetSAR 3.0	DeepPK	ADMET-AI
对乙酰氨基酚	2.5	1.1	2.09	<3	0.0
阿西维辛	9.9	2.8	5.13	≥3	0.0
阿库氯铵	3.6	0.9	1.91	<3	10.6
金刚烷胺	16.0	1.0	12.30	<3	14.1
氨氯地平	34.0	0.5	3.55	<3	24.5
安吡啶	4.7	0.7	3.98	<3	3.1
贝凡洛尔	1.9	1.1	3.89	<3	3.5
比沙雷米	8.6	1.9	6.76	<3	12.5
溴西洋	21.0	1.9	30.90	<3	45.2
布比卡因	3.1	0.7	3.16	<3	0.1

4 结语和展望

尽管 AI 在药动参数预测领域已取得显著进展,但距离在药物研发中实现稳定、可靠的常规应用仍面临若干核心挑战。目前面临的主要瓶颈包括:(1)数据量不足;(2)数据质量参差不齐;(3)模型参数优化不足,容易引发预测模型过拟合或欠拟合问题,进而影响预测效果;(4)AI 模型普遍存在“黑箱”特性,难以解释其决策过程。

针对数据数量与质量的问题,在数据收集阶段,不同来源的数据在实验方案、测定方法以及数据标准化程度上存在较大差异,因此需要对数据进行严格的预处理和标准化;PK 体内数据获取成本高、周期长,因此可尝试借助迁移学习、预训练或多任务学习等模型训练策略来提高模型精度。针对模型参数优化的问题,在模型训练环节,DL 模型参数众多,在小规模数据集上训练时极易过拟合;而传统 ML 模型虽在小样本下表现稳健,但其预测精度受限于人工特征工程的质量。因此可采取以下策略:小数据集优先以传统 ML 模型为基准,系统性

比较各个算法性能后,结合数据特征筛选最合适的算法,在获得较为稳健的模型后,再逐步尝试引入 DL 模型并通过参数调优实现预测精度的最大化。此外,为了确保预测模型的实用价值,还应增加使用外部数据进行试验验证,确保 AI 预测结果可转化为实际药物开发决策的可靠依据。针对模型的可解释性问题,可以加入 SHAP 值分析等特征重要性分析方法,量化模型训练中起到关键作用的官能团或结构片段;同时可在图神经网络中嵌入注意力机制,直观突出分子中关键的原子或化学键,从而提升研究人员对预测结果的信任度。

综上所述,AI 在药动参数预测领域前景广阔,但实现从学术研究到工业应用的跨越,仍需在数据整合、建模策略和可解释性等方面持续深耕。

利益冲突 所有作者均声明不存在利益冲突

参考文献

- [1] Jones H, Chen Y, Gibson C, et al. Physiologically based pharmacokinetic modeling in drug discovery and development: A pharmaceutical industry perspective [J].

- Clin Pharmacol Ther, 2015, 97(3): 247-262.
- [2] Wu P F, Lin S Y, Cao G D, et al. Absorption, distribution, metabolism, excretion and toxicity of microplastics in the human body and health implications [J]. J Hazard Mater, 2022, 437: 129361.
 - [3] Sun D X, Gao W, Hu H X, et al. Why 90% of clinical drug development fails and how to improve it [J]. Acta Pharm Sin B, 2022, 12(7): 3049-3062.
 - [4] Lucas A J, Sproston J L, Barton P, et al. Estimating human ADME properties, pharmacokinetic parameters and likely clinical dose in drug discovery [J]. Expert Opin Drug Discov, 2019, 14(12): 1313-1327.
 - [5] 张民权, 龚铭城, 陈泽锴, 等. 人工智能与分子模拟在药物设计中的研究进展 [J]. 医药导报, 2024, 43(1): 78-84.
Zhang M Q, Gong M C, Chen Z K, et al. Research progress of artificial intelligence and molecular simulation in drug design [J]. Her Med, 2024, 43(1): 78-84.
 - [6] Tou W I, Chang S S, Lee C C, et al. Drug design for neuropathic pain regulation from traditional Chinese medicine [J]. Sci Rep, 2013, 3: 844.
 - [7] 刘景陶, 柳耀花. 计算机分子模拟技术及人工智能在药物研发中的应用 [J]. 科技创新与应用, 2018, 8(2): 46-47.
Liu J T, Liu Y H. Application of computer molecular simulation technology and artificial intelligence in drug development [J]. Technol Innov A, 2018, 8(2): 46-47.
 - [8] 顾慧. 计算机辅助药物设计在治疗老年痴呆药物虚拟筛选和 HIV 抗药性研究中的应用 [D]. 上海: 上海交通大学, 2009.
Gu H. The application of computer-aided drug design in the virtual screening of Alzheimer's disease drug candidates and HIV drug resistance [D]. Shanghai: Shanghai Jiao Tong University, 2009.
 - [9] 赵媛媛, 刘乐乐, 张永超, 等. 基于机器学习算法的杏仁止咳颗粒脆碎度预测建模研究 [J]. 中草药, 2025, 56(23): 8524-8533.
Zhao Y Y, Liu L L, Zhang Y C, et al. Modeling and prediction of friability for Xingbei Zhike Granules based on machine learning algorithms [J]. Chin Tradit Herb Drugs, 2025, 56(23): 8524-8533.
 - [10] Mohapatra M, Sahu C, Mohapatra S. Trends of artificial intelligence (AI) use in drug targets, discovery and development: Current status and future perspectives [J]. Curr Drug Targets, 2025, 26(4): 221-242.
 - [11] Fouchécourt M O, Béliveau M, Krishnan K. Quantitative structure-pharmacokinetic relationship modelling [J]. Sci Total Environ, 2001, 274(1/2/3): 125-135.
 - [12] 张襄松, 高秀秀. 基于随机森林的逻辑回归预测抗乳腺癌药物的 ADMET 性质 [J]. 内蒙古工业大学学报 (自然科学版), 2023, 42(6): 481-487.
Zhang X S, Gao X X. Prediction of ADMET properties of anti-breast cancer drugs by logistic regression based on random forest [J]. J Inn Mong Univ Technol Nat Sci Ed, 2023, 42(6): 481-487.
 - [13] Xu T, Kabir M, Sakamuru S, et al. Predictive models for human cytochrome P450 3A7 selective inhibitors and substrates [J]. J Chem Inf Model, 2023, 63(3): 846-855.
 - [14] Rodríguez-Pérez R, Bajorath J. Evolution of support vector machine and regression modeling in chemoinformatics and drug discovery [J]. J Comput Aided Mol Des, 2022, 36(5): 355-362.
 - [15] Gao Z, Xia R Z, Zhang P J. Prediction of anti-proliferation effect of [1, 2, 3] triazolo [4, 5-d] pyrimidine derivatives by random forest and mix-kernel function SVM with PSO [J]. Chem Pharm Bull, 2022, 70(10): 684-693.
 - [16] Seto H, Oyama A, Kitora S, et al. Gradient boosting decision tree becomes more reliable than logistic regression in predicting probability for diabetes with big data [J]. Sci Rep, 2022, 12: 15889.
 - [17] Pallenberg R, Fleitmann M, Stroth A M, et al. *Random forest and gradient boosted trees for patient individualized contrast agent dose reduction in CT angiography* [M]// Amsterdam: IOS Press, 2023.
 - [18] Sikander R, Ghulam A, Ali F. XGB-DrugPred: Computational prediction of druggable proteins using extreme gradient boosting and optimized features set [J]. Sci Rep, 2022, 12: 5505.
 - [19] Kwon J H, Han J Y, Kim M, et al. Prediction of human pharmacokinetic parameters incorporating SMILES information [J]. Arch Pharmacol Res, 2024, 47(12): 914-923.
 - [20] Zhang Z H, Chen L F, Zhong F S, et al. Graph neural network approaches for drug-target interactions [J]. Curr Opin Struct Biol, 2022, 73: 102327.
 - [21] Zeng X, Feng P K, Li S J, et al. GNN-DDAS: Drug discovery for identifying anti-schistosome small molecules based on graph neural network [J]. J Comput Chem, 2024, 45(32): 2825-2834.
 - [22] Kriegeskorte N, Golan T. Neural network models and deep learning [J]. Curr Biol, 2019, 29(7): R231-R236.
 - [23] Chen C, Shi H, Jiang Z W, et al. DNN-DTIs: Improved drug-target interactions prediction using XGBoost feature selection and deep neural network [J]. Comput Biol Med, 2021, 136: 104676.
 - [24] Fischer Y, Southirath T, Triki D, et al. Deep learning vs classical methods in potency and ADME prediction:

- Insights from a computational blind challenge [J]. *J Chem Inf Model*, 2025, 65(24): 13115-13131.
- [25] Ahmadi M, Alizadeh B, Ayyoubzadeh S M, et al. Predicting pharmacokinetics of drugs using artificial intelligence tools: A systematic review [J]. *Eur J Drug Metab Pharmacokinet*, 2024, 49(3): 249-262.
- [26] Venkataraman M, Chand Rao G, Madavareddi J K, et al. Leveraging machine learning models in evaluating ADMET properties for drug discovery and development: Review article [J]. *ADMET DMPK*, 2025, 13(3): 2772.
- [27] Pillai N, Abos A, Teutonico D, et al. Machine learning framework to predict pharmacokinetic profile of small molecule drugs based on chemical structure [J]. *Clin Transl Sci*, 2024, 17(5): e13824.
- [28] 田奇峰. 基于图注意力机制与多特征融合的化合物血浆蛋白结合率预测方法研究 [D]. 沈阳: 辽宁大学, 2024.
- Tian Q F. Research on the prediction method of plasma proteinbinding of chemicals based on Graph attention mechanism and multi-feature fusion [D]. Shenyang: Liaoning University, 2024.
- [29] Kosugi Y, Hosea N. Direct comparison of total clearance prediction: Computational machine learning model versus bottom-up approach using *in vitro* assay [J]. *Mol Pharmaceutics*, 2020, 17(7): 2299-2309.
- [30] Smith D A, Beaumont K, Maurer T S, et al. Relevance of half-life in drug design: Miniperspective [J]. *J Med Chem*, 2018, 61(10): 4273-4282.
- [31] Fan J N, Shi S H, Xiang H, et al. Predicting elimination of small-molecule drug half-life in pharmacokinetics using ensemble and consensus machine learning methods [J]. *J Chem Inf Model*, 2024, 64(8): 3080-3092.
- [32] Yates J W T, Arundel P A. On the volume of distribution at steady state and its relationship with two-compartmental models [J]. *J Pharm Sci*, 2008, 97(1): 111-122.
- [33] Wang Y C, Liu H C, Fan Y R, et al. In silico prediction of human intravenous pharmacokinetic parameters with improved accuracy [J]. *J Chem Inf Model*, 2019, 59(9): 3968-3980.
- [34] Wang Y, Zeng T Y, Tang D Q, et al. Integrated multi-omics analyses reveal lipid metabolic signature in osteoarthritis [J]. *J Mol Biol*, 2025, 437(6): 168888.
- [35] Huang Y X, Zhou Y, Liu D D, et al. Comparison of population pharmacokinetic modeling and machine learning approaches for predicting voriconazole trough concentrations in critically ill patients [J]. *Int J Antimicrob Agents*, 2025, 65(2): 107424.
- [36] Guan J H, Dong D H, Xie P L, et al. StackDILI: Enhancing drug-induced liver injury prediction through stacking strategy with effective molecular representations [J]. *J Chem Inf Model*, 2025, 65(2): 1027-1039.
- [37] Lappin G, Rowland M, Garner R C. The use of isotopes in the determination of absolute bioavailability of drugs in humans [J]. *Expert Opin Drug Metab Toxicol*, 2006, 2(3): 419-427.
- [38] Gruber A, Führer F, Menz S, et al. Prediction of human pharmacokinetics from chemical structure: Combining mechanistic modeling with machine learning [J]. *J Pharm Sci*, 2024, 113(1): 55-63.
- [39] Toutain P L, BOUSQUET-MÉLOU A. Bioavailability and its assessment [J]. *J Vet Pharmacol Ther*, 2004, 27(6): 455-466.
- [40] Ng S S S, Lu Y P. Evaluating the use of graph neural networks and transfer learning for oral bioavailability prediction [J]. *J Chem Inf Model*, 2023, 63(16): 5035-5044.
- [41] Toutain P L, Bousquet-Mélou A. Plasma clearance [J]. *J Vet Pharmacol Ther*, 2004, 27(6): 415-425.
- [42] Mamada H, Nomura Y, Uesawa Y. Novel QSAR approach for a regression model of clearance that combines DeepSnap-deep learning and conventional machine learning [J]. *ACS Omega*, 2022, 7(20): 17055-17062.
- [43] Méndez-Lucio O, Nicolaou C A, Earnshaw B. MolE: A foundation model for molecular graphs using disentangled attention [J]. *Nat Commun*, 2024, 15: 9431.
- [44] Kaur N, Gupta S, Pal J, et al. Design of BBB permeable BACE-1 inhibitor as potential drug candidate for Alzheimer disease: 2D-QSAR, molecular docking, ADMET, molecular dynamics, MMGBSA [J]. *Comput Biol Chem*, 2025, 116: 108371.
- [45] Keefer C E, Chang G, Di L, et al. The comparison of machine learning and mechanistic *in vitro-in vivo* extrapolation models for the prediction of human intrinsic clearance [J]. *Mol Pharm*, 2023, 20(11): 5616-5630.
- [46] Komissarov L, Manevski N, Groebke Zbinden K, et al. Actionable predictions of human pharmacokinetics at the drug design stage [J]. *Mol Pharmaceutics*, 2024, 21(9): 4356-4371.
- [47] Beckers M, Yonchev D, Desrayaud S, et al. DeepCt: Predicting pharmacokinetic concentration-time curves and compartmental models from chemical structure using deep learning [J]. *Mol Pharmaceutics*, 2024, 21(12): 6220-6233.
- [48] Grempler R, Ahlberg J, Germovsek E, et al. Human dose and pharmacokinetic predictions for biologics at boehringer ingelheim: A retrospective analysis [J]. *Adv*

- Ther, 2024, 41(1): 364-378.
- [49] Li Y L, Wang Z H, Li Y R, et al. A combination of machine learning and PBPK modeling approach for pharmacokinetics prediction of small molecules in humans [J]. Pharm Res, 2024, 41(7): 1369-1379.
- [50] Liu S Y, Kosugi Y. Human brain penetration prediction using scaling approach from animal machine learning models [J]. AAPS J, 2023, 25(5): 86.
- [51] Gawehn E, Greene N, Miljković F, et al. Perspectives on the use of machine learning for ADME prediction at AstraZeneca [J]. Xenobiotica, 2024, 54(7): 368-378.
- [52] Fu L, Shi S H, Yi J C, et al. ADMETlab 3.0: An updated comprehensive online ADMET prediction platform enhanced with broader coverage, improved performance, API functionality and decision support [J]. Nucleic Acids Res, 2024, 52(W1): W422-W431.
- [53] Myung Y, de Sá A G C, Ascher D B. Deep-PK: Deep learning for small molecule pharmacokinetic and toxicity prediction [J]. Nucleic Acids Res, 2024, 52(W1): W469-W475.
- [54] Gu Y X, Yu Z H, Wang Y M, et al. admetSAR3.0: A comprehensive platform for exploration, prediction and optimization of chemical ADMET properties [J]. Nucleic Acids Res, 2024, 52(W1): W432-W438.
- [55] Swanson K, Walther P, Leitz J, et al. ADMET-AI: A machine learning ADMET platform for evaluation of large-scale chemical libraries [J]. Bioinformatics, 2024, 40(7): btae416.
- [56] Daina A, Michielin O, Zoete V. SwissADME: A free web tool to evaluate pharmacokinetics, drug-likeness and medicinal chemistry friendliness of small molecules [J]. Sci Rep, 2017, 7: 42717.

[责任编辑 孙英杰]