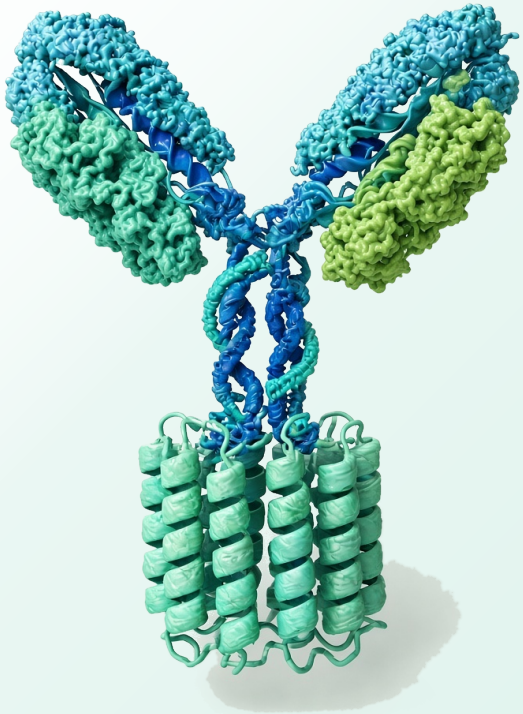
✓验证期

TheraMab：AI 驱动的治疗性抗体成药性设计与评估平台

AI-Driven Therapeutic Antibody Developability Platform



适用于人源化抗体与全人源抗体的成药性评估、优化与开发

TheraMab　人源化 · 成药性 · CMC 配方

2026 年 11 月 22 日 · @Jing

本白皮书描述的是产品当前的设计与已经验证的能力。内容仅供科学研究与早期研发参考，不构成临床决策、诊断、治疗或监管申报依据。

目录

01 摘要 3

02 产品演示视频 3

03 背景与挑战 3

04 产品概览 4

05 工作流程 4

06 核心能力 5

07 隐私与信息安全 7

08 输入、输出与使用方式 8

09 适用范围与局限 9

10 路线图与声明 9

11 试用与联系 9

产品演示视频（约 4 分 41 秒）收在第 2 节。受文件格式所限，本 PDF 只收录封面截图；完整视频请打开 https://inlightbio.cn/theramab/ 观看。试用请写信至 contact@therasik.com。

01 摘要

TheraMab 把抗体从非人源序列推进到可开发候选所需的三件事放在同一个平台里：人源化设计、成药性与可开发性评估、CMC 配方优化与建议。客户输入一对重链和轻链，得到多种人源化方案、每个方案的风险位置、可落地的优化序列，以及皮下和静脉两类给药层级的配方建议。

要点

- **一条流程，不换工具：人源化、评估、优化、配方建议在同一处完成，优化后的序列可以直接回到评估表重新评估。**
- **专注隐私与信息安全：每个客户的序列和结果只属于自己的账号，页面和接口不暴露算法与数据库的内部细节。**
- **结果有位置感：每个参数放在基于我们的临床观察与测算得到的参考范围里，用清楚的位置标签表示，不是孤立的数字。**

已经是全人源或人源化的抗体（包括其他软件设计的序列）也可以直接做可开发性评估。本产品用于科学研究与早期研发参考，不构成临床决策、诊断、治疗或监管申报依据。

02 产品演示视频

以下为 TheraMab 网络版操作演示（约 4 分 41 秒）。演示使用公开示例抗体，在独立测试环境中录制，不含客户数据。完整视频请在网页观看：https://inlightbio.cn/theramab/



▲ 产品演示视频（网络版操作演示，约 4 分 41 秒）。完整视频请访问 https://inlightbio.cn/theramab/

03 背景与挑战

抗体早期研发里，序列设计和可开发性判断通常分散在多个工具和多个人手里，信息很难串起来，三类问题反复出现。

1. 人源化与可开发性是脱节的：人源化方案在一个工具里做，成药性在另一个工具里评，改一个序列就要重新导出导入，回复突变的取舍和可开发性的影响看不到同一张图。
2. 风险只有数字，没有位置感：单个理化参数缺少参照，团队不清楚一个值算高还是低，也说不清该往哪个方向优化。
3. 配方和序列分开考虑：序列确定以后才想到配方，等到出现黏度或聚集问题已经晚了；风险位点和对应的配方杠杆之间缺少直接的联系。

对外使用还有一层顾虑：序列是客户最核心的资产，工具如果让多个用户的数据混在一起，或者把内部算法与数据库细节暴露在页面上，就很难被接受。TheraMab 的设计目标是把上面三件事做成同一条流程，同时把隐私与信息安全作为产品的前提而不是附加项。

04 产品概览

TheraMab 提供网络版和桌面版，面向两类使用场景，共享同一套评估思路和结果解读方式。

版本	适合的场景	数据形态	状态
网络版	团队协作、多人试用、无需安装即用	序列和结果保存在账号名下，账号之间互相隔离；试用示例序列共用只读	已上线，以账号邀请方式开通
桌面版	对数据外传更敏感的场景、在本机运行	数据在本机处理	可按需提供，欢迎洽谈

客户能拿到什么：多种人源化方案；每个方案的人源性与成药性评估；风险位点和替换建议；优化后的序列及其重新评估；皮下和静脉的配方建议；可导出的报告、评分表和序列文件。

适用的两类输入：一类是非人源抗体（先人源化再评估），另一类是已经是全人源或已由其他软件人源化的序列（直接做可开发性评估）。

05 工作流程

从输入序列到拿到配方建议，客户在一条连贯的流程里完成，每一步的结果都结转到下一步。

1. 输入：粘贴或上传重链和轻链（CSV、FASTA、Excel，提供模板和格式说明）。非人源抗体走人源化；已是全人源或人源化的序列可直接进入可开发性评估。



▲ 图1：序列输入页（演示已载入公开示例抗体 HFP002 的重链与轻链）

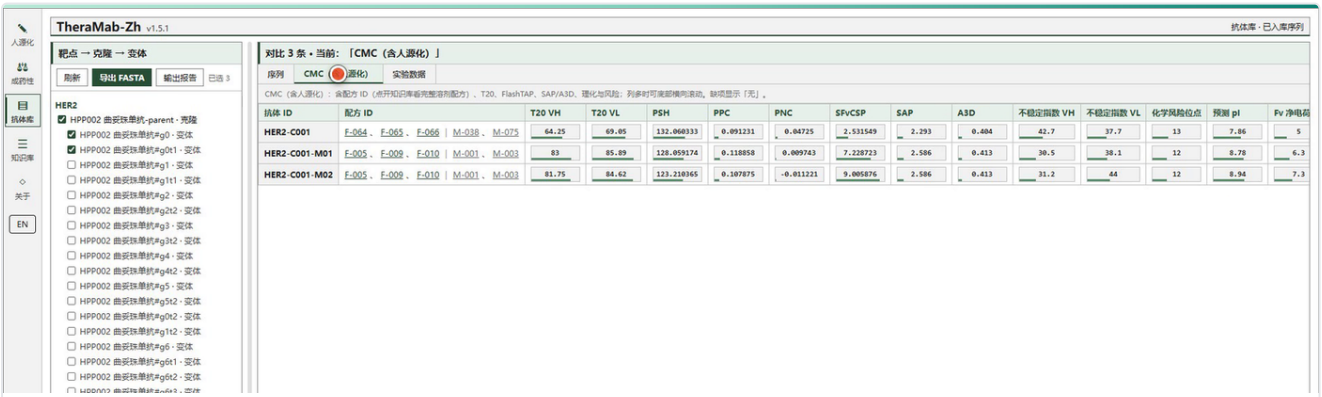
2. 人源化：系统给出多个框架配对，每个配对有不同的回复突变档位（无回突、保守、平衡、激进）。客户选定关心的配对，后面的评估只按选定的配对显示。



▲ 图2：框架与配对：列出可搭配的轻链候选及配对记录数

3. 评估：人源性、理化成药性、FlashTAP、CMC 综合。每个参数用位置图和雷达图显示在参考范围里，并配有轴说明和结果分析。
4. 优化：风险位点分 CDR 和 FR 两张表。FR 位点给出替换建议，勾选后一键生成优化序列，可导出，也可加回评估表。
5. 再评估：优化序列加回评估表后自动重新评估，全抗体、仅 CDR、仅 FR 三种口径都有结果，可以直接看优化是否改善了关键参数（从步骤 4 到步骤 5 可以重复）。

6. 配方建议：皮下和静脉分层的配方建议、配方编号、与之理化相似的已上市分子；风险位点对应的配方杠杆链接到知识库里的具体配方。
7. 入库和报告：候选序列可以入自己账号下的序列库，并生成包含配方建议与理由的综合报告。



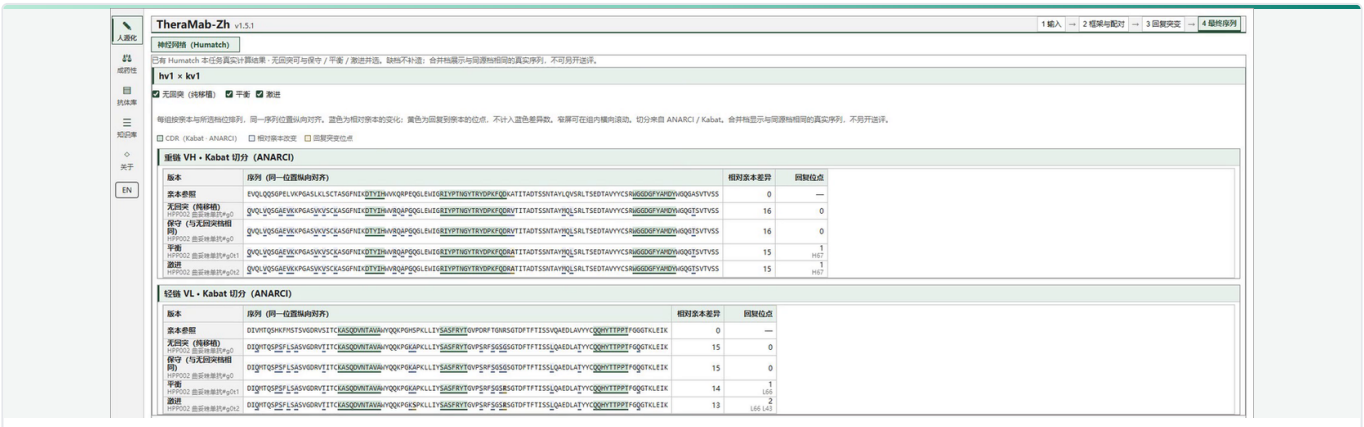
▲ 图3：抗体库按靶点、克隆、变体组织，并可并列对比 CMC 参数

分析状态会按作业保存在客户自己的浏览器里，查看知识库或切换页面后可以回到原来的结果；点“新建分析”可以一键清空重来，不影响已入库的序列。

06 核心能力

人源化

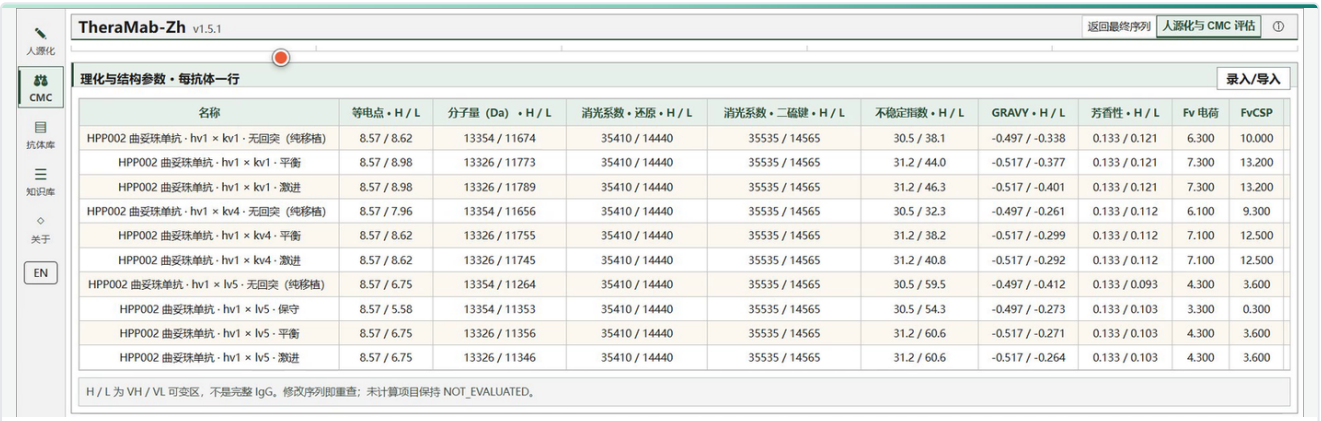
对非人源抗体同时提供两条路径：经典的 CDR 移植，和保留更多亲本框架的神经网络（NN）设计。两条路径都有四个回复突变档位（无回突、保守、平衡、激进），用同一套回复突变规则。两者的区别在起点：CDR 移植整条嫁接胚系框架，需要考虑的回复位点较多；NN 保留亲本的大部分框架，需要考虑的位点较少。客户在第 3 步选定关心的框架配对，后面的评估就只按选定的配对显示。



▲ 图4：最终序列按亲本对齐（蓝色为改变，黄色为回复位点）

成药性与可开发性评估

- 理化与结构参数：不稳定指数、疏水性（GRAVY）、化学风险位点、pI、Fv 净电荷、粘度指标 FvCSP、疏水斑块（SAP）、聚集倾向（A3D）。

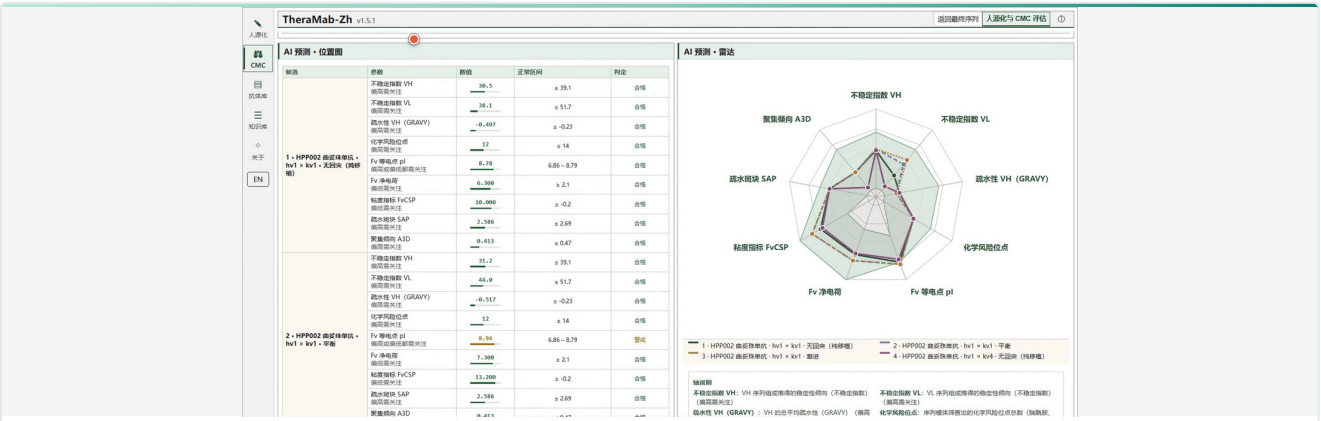


名称	等电点 · H / L	分子量（Da） · H / L	消光系数 · 还原 · H / L	消光系数 · 二硫键 · H / L	不稳定指数 · H / L	GRAVY · H / L	芳香性 · H / L	Fv 电荷	FvCSP
HPP002 曲妥珠单抗 · hv1 × kv1 · 无回突（纯移植）	8.57 / 8.62	13354 / 11674	35410 / 14440	35535 / 14565	30.5 / 38.1	-0.497 / -0.338	0.133 / 0.121	6.300	10.000
HPP002 曲妥珠单抗 · hv1 × kv1 · 平衡	8.57 / 8.98	13326 / 11773	35410 / 14440	35535 / 14565	31.2 / 44.0	-0.517 / -0.377	0.133 / 0.121	7.300	13.200
HPP002 曲妥珠单抗 · hv1 × kv1 · 激进	8.57 / 8.98	13326 / 11789	35410 / 14440	35535 / 14565	31.2 / 46.3	-0.517 / -0.401	0.133 / 0.121	7.300	13.200
HPP002 曲妥珠单抗 · hv1 × kv4 · 无回突（纯移植）	8.57 / 7.96	13354 / 11656	35410 / 14440	35535 / 14565	30.5 / 32.3	-0.497 / -0.261	0.133 / 0.112	6.100	9.300
HPP002 曲妥珠单抗 · hv1 × kv4 · 平衡	8.57 / 8.62	13326 / 11755	35410 / 14440	35535 / 14565	31.2 / 38.2	-0.517 / -0.299	0.133 / 0.112	7.100	12.500
HPP002 曲妥珠单抗 · hv1 × kv4 · 激进	8.57 / 8.62	13326 / 11745	35410 / 14440	35535 / 14565	31.2 / 40.8	-0.517 / -0.292	0.133 / 0.112	7.100	12.500
HPP002 曲妥珠单抗 · hv1 × lv5 · 无回突（纯移植）	8.57 / 6.75	13354 / 11264	35410 / 14440	35535 / 14565	30.5 / 59.5	-0.497 / -0.412	0.133 / 0.093	4.300	3.600
HPP002 曲妥珠单抗 · hv1 × lv5 · 保守	8.57 / 5.58	13354 / 11353	35410 / 14440	35535 / 14565	30.5 / 54.3	-0.497 / -0.273	0.133 / 0.103	3.300	0.300
HPP002 曲妥珠单抗 · hv1 × lv5 · 平衡	8.57 / 6.75	13326 / 11356	35410 / 14440	35535 / 14565	31.2 / 60.6	-0.517 / -0.271	0.133 / 0.103	4.300	3.600
HPP002 曲妥珠单抗 · hv1 × lv5 · 激进	8.57 / 6.75	13326 / 11346	35410 / 14440	35535 / 14565	31.2 / 60.6	-0.517 / -0.264	0.133 / 0.103	4.300	3.600

H / L 为 VH / VL 可变区，不是完整 IgG。修改序列即重查；未计算项目保持 NOT_EVALUATED。

▲ 图5：理化与结构参数评估表，每个候选一行

- **FlashTAP：类 TAP 的快速风险指标。**
- **位置图和雷达图：每个参数放在基于我们的临床观察与测算得到的参考范围里，用“合格、警戒、超出、不及”的位置标签表示，并配有轴说明和结果分析。这是位置标签，不是湿实验的成败判定，也不是放行条件。**



▲ 图6：位置图与雷达图（浅绿环带为常见范围）

- **实验值录入表：客户填自己的实测值（Tm、表达量、HIC、SMAC、AC-SINS、PSR、加速稳定性斜率、BVP 等），系统对照阈值标出位置，并提醒要用临床抗体做同条件头对头对照。**
- **知识库：“实验项目与成药性”一页说明每个实验和计算参数的含义、风险方向、与成药性的关系和局限。**



▲ 图7：知识库「实验项目与成药性」页

风险位点优化

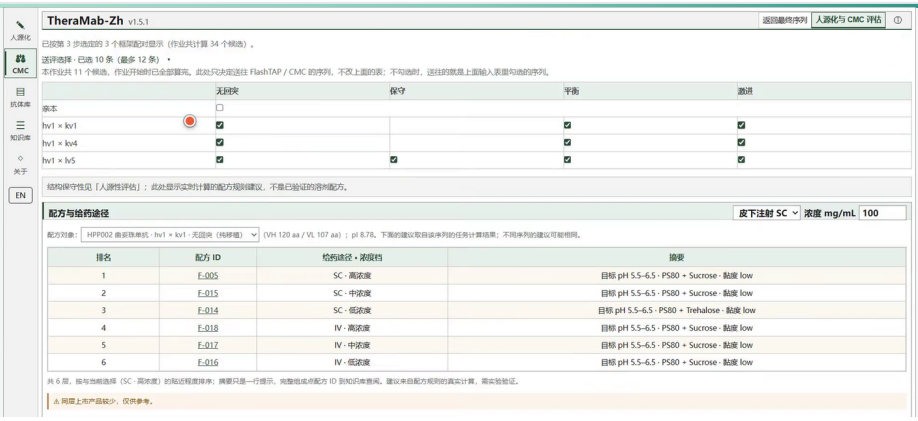
CDR 和 FR 风险位点分开呈现。CDR 位点涉及结合，只给配方和工艺提示；FR 位点给出具体的替换建议和备选，并对保守性色氨酸等位点保持保守。客户勾选后一键生成优化序列，可导出　　FASTA，也可加回评估表重新评估，用“全抗体、仅 CDR、仅 FR”三种口径看是否改善。



▲ 图8：风险位点与优化建议（CDR / FR 分表，可生成优化序列）

CMC 配方优化与建议

- **分层建议：皮下和静脉两类给药路径，每类有高、中、低浓度档，给出 pH、缓冲体系、辅料、粘度风险。**



▲ 图9：送评选择与配方建议（皮下与静脉；高、中、低浓度档）

- **配方编号和比对：给出配方编号，并列出与客户序列理化相似的已上市分子作参考。**
- **杠杆与配方联动：每个风险位点对应一个配方杠杆（例如氧化位点对应抑制氧化的做法），并链接到知识库里具体的配方条目（最多列出几个参考）。**
- **报告：“配方建议与理由”一页列出组成、pH、辅料、粘度说明和杠杆理由，标明这是规则提示，需实验验证。**



七 · 配方建议与理由 规则提示，须实验验证

项	HER2-C001 亲本	HER2-C001-M01 变体 M01	HER2-C001-M02 变体 M02
配方代号	未评估	F-005	F-005
目标 pH	5.9–6.5	5.5–6.5	5.5–6.5
缓冲体系	Citrate / Succinate / Histidine / Phosphate	Citrate / Glutamate / Acetate / Succinate / Histidine / Phosphate	Citrate / Glutamate / Acetate / Succinate / Histidine / Phosphate
辅料	未评估	Polysorbate 80 (PS80) 0.12–0.5 mg/mL + Sucrose 61.0–84.0 mg/mL	Polysorbate 80 (PS80) 0.12–0.5 mg/mL + Sucrose 61.0–84.0 mg/mL
粘度风险	未评估	low	low
理由（风险位点相关杠杆）	未评估	未评估	未评估

基于我们的临床观察与测算；以上是规则提示，不是已验证的配方，须经实验验证。完整配方内容按代号在知识库查阅。
杠杆理由不随入库保存，此处不显示（未评估）；已存记录只解析配方代号对应的目录组成与入库摘要中的配方信息。

仅供科学研究与早期研发参考，不构成临床决策、诊断、治疗或监管申报依据。任何候选进入开发前须由具备资质人员结合实验与法规要求独立判断。
判定基准：基于我们的临床观察与测算 · 参考系快照 2026-11-22 00:39 UTC · 参考分布会随数据更新；不同时间生成的报告判定可能不同，请以快照时间为准。
第 5 / 6 页

▲ 图10：综合报告「配方建议与理由」（规则提示，须实验验证）

配方相关的输出是基于规则和替代指标的建议，不是粘度预测模型，也不是实验验证过的结论。

07 隐私与信息安全

隐私与信息安全是产品的前提。下表列出网络版已经实现的措施，每一项都经过独立的审核和验证。

方面	措施
数据隔离	每个客户保存在自己账号下的序列库和作业，其他账号看不到，访问别人的作业和访问不存在的作业得到完全相同的结果；试用示例序列共用只读。
访问控制	登录认证，账号由我们邀请开通；账号身份由接入层传入并校验，客户端伪造的身份头会被丢弃；没有有效身份时写操作一律拒绝。
算法与数据库保密	页面和接口不显示来源名、库名、样本量、文献出处；对外输出去掉内部字段，内部参考用中性编码；页面脚本压缩去注释；公开接口限流。
网络安全	全站 HTTPS，HSTS、安全头、隐藏服务器版本、限流和请求体大小限制；旧的直连端口对外已关闭。
客户端状态	分析状态和草稿只保存在客户自己的浏览器里，不上传到服务器；“新建分析”一键清除。
备份与恢复	每日一致性备份序列库和账号信息，每周恢复测试，健康检查和告警。
审计与变更	每次上线都先经独立审核，再在隔离环境验收，由另一人独立核验，并保留随时可用的回退手段。

数据说明：平台保存客户提交的序列、计算结果和入库条目。只有客户自己的账号能看到；运维人员只为运维和按客户要求删除而访问。保存到客户要求删除为止，备份中最长再保留约两个月。删除请求请联系为您开通账号的 TheraMab 团队成员。

边界，如实说明：目前采用账号级数据隔离和访问控制，没有第三方安全认证或独立渗透测试；备份目前在同一主机上，异地副本尚未接入；运维人员在服务器层面能读取私有数据文件。针对高度敏感的序列，我们建议使用本地运行的桌面版。

08 输入、输出与使用方式

环节	支持的内容
输入	在文本框里粘贴重链和轻链的可变区或完整序列（自动裁掉信号肽和恒定区）；批量上传 CSV、FASTA、Excel，提供模板和格式说明；一次最多评估 12 对。
人源化结果	多个框架配对、每个配对四个回复突变档位的序列，并附人源性和理化评估。
评估结果	位置图、雷达图、参数表、风险位点表、FlashTAP、CMC 综合。
优化结果	替换建议、优化后的序列（可导出 FASTA、可回评估）。
配方结果	皮下和静脉分层的配方建议、配方编号、相似已上市分子。
导出	序列（FASTA）、评分表（CSV）、综合报告（含“配方建议与理由”一页，可打印）。
序列库	候选序列可入自己账号下的库，按靶点、克隆、变体组织；重复序列会提示“已存在”，不会覆盖已有记录。
语言	中文和英文界面。

全人源抗体或其他软件人源化的序列，直接进入评估，输出理化参数、FlashTAP、SAP 和 A3D、带区域的风险位点、配方建议。

09 适用范围与局限

这是一个科学研究和早期研发的参考工具，以下边界需要客户事先知道。

- 位置标签不等于实验结果：“合格、警戒、超出、不及”表示候选在参考范围里的位置，不是湿实验的成败，也不是放行条件。实验条件不同，阈值会变，建议用临床抗体做同条件对照。
- 配方是规则建议：基于规则和替代指标，不是粘度预测模型，需要实验验证。
- 外部序列的人源性比较有缺口：对已经是全人源或其他软件设计的序列，没有 OASis 人源性评分；没有提供亲本序列时，和亲本的比较（环、H3、Vernier、界面、回复突变）显示为未评估。
- 不支持的分子形式：单链抗体（scFv）和纳米抗体（VHH）目前不支持。
- 规模限制：一次最多评估 12 对；评估接口每 5 分钟最多 15 次。
- 安全边界：见上一节“边界，如实说明”。

本产品用于科学研究与早期研发参考，不构成临床决策、诊断、治疗或监管申报依据。任何候选进入开发前，都需要由具备资质的人员结合实验和法规要求独立判断。

10 路线图与声明

即将上线（随下一个版本）：第 1 页“已是全人源抗体，直接做可开发性分析”和“新建分析”按钮；批量上传的格式说明和 CSV 模板、导入后自动评估；优化序列的配方编号、相似已上市分子和替换建议；任何返回路径都能恢复分析状态；数据与隐私说明页。

计划中，安排视需求而定：

- 把 OASis 人源性评分接入外部序列的评估。
- 新入库序列保存配方和杠杆理由，使综合报告对新入库序列更完整。
- 高浓度粘度预测类模型的可行性调研（授权、验证、算力）。
- 备份异地副本。

声明：本白皮书描述的是产品当前的设计与已经验证的能力。内容仅供科学研究与早期研发参考，不构成临床决策、诊断、治疗或监管申报依据；不保证候选在实验中的表现。版本、功能以实际交付为准。

11 试用与联系

如需试用 TheraMab，或下载本白皮书以外的说明材料，请写信至 TheraSik 邮箱。我们按账号邀请方式开通网络版试用。

contact@therasik.com