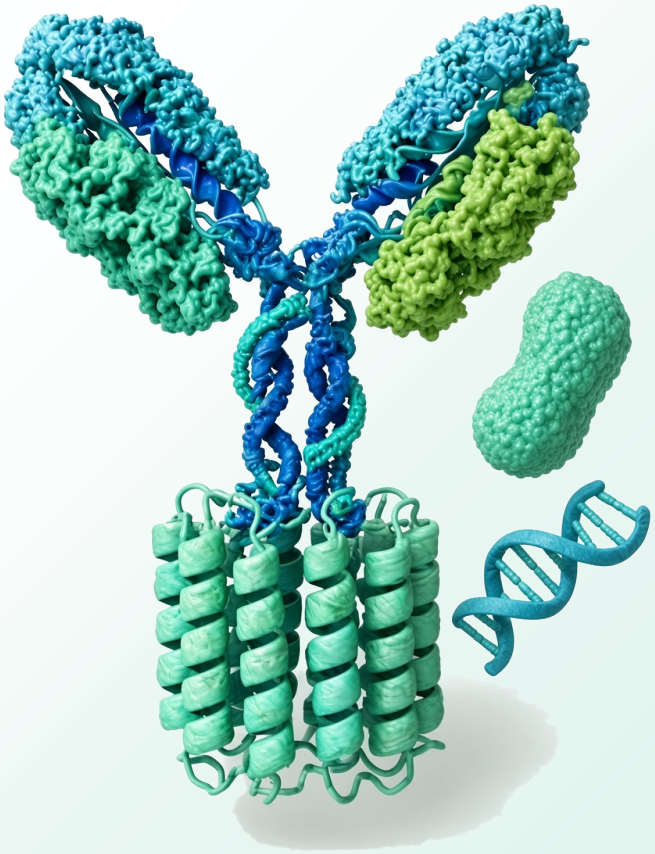
THERASIK · SaaS 白皮书

TheraSik：AI 赋能的药物研发与设计

AI-Enabled Drug R&D and Design



面向免疫创新药研发的实用 AI 工具、工作流与数据库。从靶点分析、候选设计与比较，到蛋白与 DNA 构建体序列准备。

TheraSik SaaS　邀请制

工具 · 工作流 · 数据库

2026 年 11 月 · TheraSik

本白皮书依据英文介绍页 insynbio.com/therasik/ 已经公布的能力整理，只描述当前可以说明的范围。平台是技术演示用的 MVP。结合、表达、稳定性与功能需由相应实验评估。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。

已经可以试用的起点

平台预装工具与工作流。目录共 210 项，其中 32 项已部署并有运行测试记录；工作流中 5 条标为可运行，其余为示例。

按任务定制

可按客户管线部署或开发工具、搭建工作流，并整理客户私有数据库。先从一项范围清楚的真实任务试起。

邀请制登录

中文平台登录地址是 saas.therasik.com，需申请邀请码。联系只写信至 contact@therasik.com。

目录

01 摘要 3

02 我们做什么、服务谁 3

03 服务与交付 3

04 研发能力：工具、工作流与数据库 3

05 可分析与设计的药物类型 4

06 工具目录覆盖的研发方向 4

07 端到端：从证据到构建体序列 5

08 自建专业数据库 5

09 平台案例与工作流示例 6

10 当前状态与建设方向 7

11 首次试用与联系 8

配套介绍页与本白皮书下载入口见 https://inlightbio.cn/therasik/。平台登录为邀请制，地址是 https://saas.therasik.com/。申请邀请码请写信至 contact@therasik.com。英文介绍页为 https://insynbio.com/therasik/。

阅读说明

本白皮书是 TheraSik SaaS 平台的中文介绍，依据英文页已经公布的能力整理，与介绍页 https://inlightbio.cn/therasik/ 使用同一份说明。正文按服务对象、交付内容、工具与数据库、端到端路径、案例、当前状态和首次试用展开，方便研发团队先看清平台现在能演示什么、试用时要核对什么、哪些结果仍需实验评估。

- 目录条目数不是已部署数，也不是科学验证数。已部署工具 32 项，工作流中 5 条标为可运行；端到端全链路仍待验证。
- 结合、表达、稳定性与功能由相应实验评估。部分工作流是示例，节点衔接与通跑要在试用中确认。
- 平台状态截至 2026 年 10 月。时间、费用、算力和数据保密在启动前书面约定；实验结果另行评估。

01 摘要

TheraSik 是面向免疫创新药研发的 AI 实施平台，提供实用的 AI 工具、工作流与数据库，覆盖从靶点分析、候选设计与比较，到蛋白与 DNA 构建体序列准备。平台当前是技术演示用的 MVP，邀请企业用真实任务试用，并一起做验证。

要点

- 预装，也可按任务定制。已有预装工具与工作流可作为起点；也可按客户管线和规则开发专用工具、配置工作流，并整理私有数据库。
- 以已经可以说清的能力为限。工具目录共 210 项，其中 32 项已部署并有运行测试记录。工作流中 5 条标为可运行，其余为示例。数据库已部署 10 类，另有 2 个外部条目尚未接通。
- 试用从一项真实任务开始。建议先做一件抗体或 VHH 工程任务：一对亲本分子和一个工程目标。登录为邀请制，地址是 https://saas.therasik.com/。

本白皮书只依据英文介绍页已经公布的内容整理，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。计算分析不能替代实验验证。

02 我们做什么、服务谁

生命科学 AI 实施团队

团队依托免疫学、抗体工程和临床前研究方面的经验，把合适的计算方法部署到客户的研发任务中。

服务对象

生物技术公司、CRO 和科研团队，尤其是已经有明确靶点、候选分子或自有数据的项目。

平台在合作中的角色

我们用当前的 MVP 演示方法和交付方式。再按客户需要部署或开发工具、搭建工作流，并整理客户私有数据库。这一轮希望找到愿意试用平台的企业，从范围清楚的真实任务出发，一起验证实际效用。

03 服务与交付

先确认研究问题、可用输入和交付目标，再约定验收标准和维护范围。

服务	主要交付物
工具与工作流部署	运行环境、适配后的工作流，以及使用说明。
定制工具与工作流开发（DIY）	专用工具、工作流或界面，并附验收示例。
定制私有数据库建设	规范化数据、检索字段、来源和更新规则。
研发项目计算服务	候选序列、结构模型、指标比较和方法说明。

04 研发能力：工具、工作流与数据库

我们已经有自建工具，以及经过整理和再加工的数据库，也可以按客户的研究规则继续开发和适配。

常规抗体与 VHH 人源化

CDR 嫁接、表面重塑，以及框架选择。

多特异性抗体序列设计

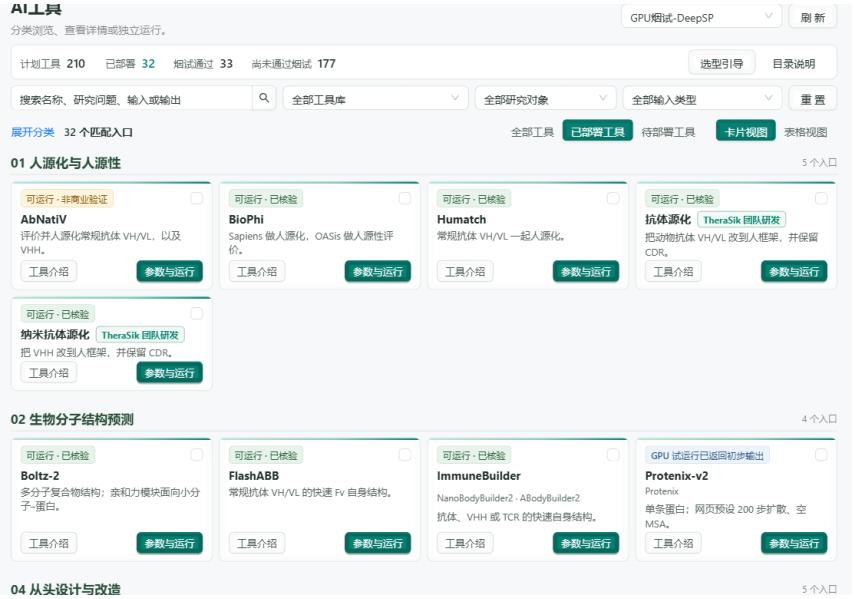
按已发表规则组装结合臂、接头和 Fc。

CAR 构建体序列设计

选择结合域、铰链、跨膜区和信号模块。

独立整理并再加工的数据库

靶点、抗体与 VHH、400+ 条 ADA 记录，以及 200+ 个 CAR 元件，作为设计时的参考。



▲图1：自建 AI 工具目录。目录条目数不是已部署数，也不是科学验证数。

客户定制（DIY）

开发专用工具，配置药物发现工作流，并整理、建设私有数据库。

05 可分析与设计的药物类型

药物 / 分子类型	支持的分析与设计	当前状态
常规抗体与 VHH	人源化、CDR 工程与从头设计；结构与可开发性比较。	已完成运行测试；按方法确认。
双特异 / 多特异性抗体	选择结合臂；按格式规则组装并检查序列。	构建体组装演示。
非抗体结合域	设计结合域；分析复合物与结合界面。	已搭建示例工作流。
新抗原疫苗	分析变异、表达与 HLA；筛选表位和长肽。	已搭建示例工作流。
ADC	整理抗体、接头与载荷组合，并衔接计算。	已搭建示例工作流。
CAR-T	选择结合域与 CAR 元件；组装构建体序列。	构建体组装演示。

试用按节点逐项确认。部分工作流是示例；结合、表达、功能等终点需要实验验证。

06 工具目录覆盖的研发方向

目录共 210 项，其中 32 项已部署。按研发任务分成 8 个方向，其中包括尚未部署的工具。

研发方向	目录项	包含的子类
抗体工程与新分子设计	42	人源化、从头设计、逆向折叠与突变评分。

研发方向	目录项	包含的子类
结构与相互作用分析	46	结构预测、构象与柔性、蛋白对接与界面评估。
可开发性与物理模拟	31	稳定性、聚集及相关指标；模拟、精修与能量评分。
序列检索与蛋白语言模型	44	检索、编号、结构处理、序列表征与模型评分。
肽与小分子扩展	16	肽设计、小分子对接及相关性质分析。
表达与复杂构建体设计	9	表达元件、DNA 构建体，以及多特异性抗体和 CAR 的序列生成。
免疫与细胞治疗分析	19	表位与 HLA、免疫组库分析，以及与 CAR 相关的模拟。
ADC 计算与评估	3	接头生成，以及与 ADC 组合相关的计算。

附图来自当期网站目录的一次截取，按 18 个子类汇总。目录条目数不是已部署数，也不是科学验证数。

07 端到端：从证据到构建体序列

靶点证据、特异性与专利检索

统一靶点身份；比较表达、表位、已有药物和公开专利。

抗体、VHH 与非抗体结合域候选

做人源化或从头设计；必要时再设计 CDR；审看结构与可开发性。

疫苗抗原与表位

新抗原还需要变异、RNA 和 HLA 信息。

序列设计与交付

蛋白和 DNA 序列、元件注释、计算结果和方法记录。

端到端方案仍待验证。外部专利检索尚未接通；ADC 还包含化学部分。衔接实验数据计划作为后续工作。

08 自建专业数据库

经独立整理、身份核对并再加工，形成 8 个专业数据库，并保留原始来源。

靶点证据

靶点表达与可成药性证据数据库。

抗体与工程参考

抗体 CMC、VHH CMC、双特异 / 多特异性抗体，以及 Fc 工程数据库。

免疫与细胞治疗资源

ADA、CAR 元件，以及 CAR 临床与研究数据库。



▲ 图2：专业数据库目录。外部来源另行列出：IEDB、Protegen、ADCdb 和专利检索。访问方式、版本和核验状态以记录为准。

09 平台案例与工作流示例

HER2 案例：从数据库记录到靶点分析

核对身份与证据：HER2 对应于 ERBB2，审看历史评分和证据维度。比较组织表达：按来源和单位查看表达分布，并提出需核实的风险问题。相关药物先例：比较已有分子格式，作为后续设计选择的参考。



靶点身份与证据评分



组织表达比较



相关药物与数据来源

▲ 图3：三张原图一并展示。评分引自 Cheever 等（2009），属于历史参考；具体项目需要补充当期证据。

困难靶点研究：VHH 从头设计

输入靶点结构、热点或表位，以及框架要求。生成 VHH 候选，交付序列、结构模型和界面比较。该路径已完成运行测试；困难靶点上的结合与功能需要项目级验证。



▲ 图4：VHH 从头设计工作流示例。路径已完成运行测试；结合与功能需项目级验证。

平台还展示了其他示例工作流，试用时按节点确认，不把示例写成已经全部跑通。

- 非抗体 CAR-T 结合域设计：用 BoltzGen 等路径生成并比较结合域，审看复合物与界面后，再整理 CAR 元件和构建体序列。示例已搭建；节点衔接与端到端通跑仍待验证。结合、表达和 CAR 功能需另行验证。
- ADC：抗体、接头与载荷：汇集抗体候选、接头、载荷和偶联要求，整理抗体计算与化学组分分析，为实验评估做准备。示例已搭建，部分组件尚未接通。偶联质量与药效需要实验评估。
- 新抗原疫苗：OpenVax 长肽设计：输入肿瘤与正常外显子组、RNA、HLA-I 和参考版本，经比对、变异检测和转录本分析，得到长肽候选。示例已搭建，全链路仍待验证。免疫反应需要实验评估。

计算结果与序列交接

结果列表保留所用工具、运行时间、相关指标和下载入口。候选可用于方案比较，或进入表达序列准备。确定构建体时，选择合适的宿主、载体、信号肽、接头和标签；检查蛋白和 DNA 序列，保留元件注释并导出。附图中的质粒图是公开骨架示例，用于演示图谱和注释功能；项目构建体需对照候选另行核实。



▲ 图5：单项任务结果示例，展示指标和文件获取方式。端到端验证作为试用任务另行确认。

10 当前状态与建设方向

模块	当前状态	试用时确认
AI 工具	已部署 32 项，并有运行测试记录。	输入、参数、算力和输出。
工作流	5 条标为可运行；其余为示例。	节点衔接、端到端通跑和结果交接。
数据库	已部署 10 类；2 个外部条目尚未接通。	来源、版本和身份核验状态。
端到端	已有计算和组装记录；全链路仍待验证。	分阶段验收后验证全链路。

平台状态截至 2026 年 10 月。平台是 MVP；结合、表达、稳定性与功能由相应实验评估。

后续建设与客户服务

建设方向	对客户的服务与交付
部署并开发约 200 项 AI 工具	部署和适配成熟工具，增加项目所需功能，并交付界面和验收示例。
搭建并验证场景工作流	覆盖抗体、疫苗、双抗、ADC 和 CAR-T；交付工作流和运行记录。
客户私有实验数据库	整理分子、样本和实验数据；交付把候选与结果联系起来的检索和比较页面。

可以先用一个工具、一段工作流或一类数据开始试用，再按需要扩展、部署和维护。

使用方式可以概括为三步：先用预装工具与工作流作为起点；再按客户管线搭建定制工作流和工具；然后用一项真实任务做免费试算，验证后再讨论定制。目录共 210 项，其中 32 项已部署。免费试算建议为一对亲本分子和一个工程目标——1 对 VH/VL 或 1 条 VHH。

11 首次试用与联系

建议范围：一个亲本分子和一个工程目标，先验证计算与交付工作流中的一段。

双方确认	首次试用示例安排
客户输入	1 对 VH/VL 或 1 条 VHH 序列，工程目标，以及已有的参考材料。
工作范围	选择合适的人源化或序列工程方法；约定候选数量和比较指标。
交付物	候选 FASTA、位点改造表、指标比较，以及方法与参数记录。
验收	检查序列、编号、改造位点和输出文件；审看来源和计算记录。

时间、费用、算力和数据保密在启动前约定；实验结果另行评估。其他任务也可以试用。欢迎共同资助验证；若考虑更长期合作，也可以讨论股权安排。

> 申请邀请码：请写信至 contact@therasik.com。
>
> 邀请登录：https://saas.therasik.com/
>
> 平台介绍与本白皮书下载：https://inlightbio.cn/therasik/
>
> 英文介绍页：https://insynbio.com/therasik/
>
> 联系只使用 contact@therasik.com。我们通常在 1–2 个工作日内回复。

本白皮书描述的是英文介绍页当前已经公布的设计与服务范围，不把未刊登的规划写成已经交付，也不把内部版本号写进对外说明。版本、功能与商务条款以实际交付和书面约定为准。