

國家科學及技術委員會 函

地址：臺北市和平東路二段106號
聯絡人：李芳蘭
電話：02-27377511
傳真：02-27377671

受文者：國立臺灣科技大學

發文日期：中華民國114年12月11日
發文字號：科會生字第1140086998號

速別：普通件

密等及解密條件或保密期限：

附件：如文 (114B0P000566_114D2041549-01.pdf、114B0P000566_114D2041550-01.pdf、114B0P000566_114D2041551-01.pdf)

主旨：本會115年度「人工智慧賦能加速藥物開發計畫」，自即日起受理申請，請於115年2月3日(星期二)前檢附相關文件備函提出申請，逾期不予受理，請查照轉知。

說明：

一、本計畫以AI為軸心，結合跨域及跨產業資源，推動藥物開發之創新應用，並強化國內學研團隊在AI藥物開發工具之自主研發能力。申請機構及計畫主持人請詳閱本計畫徵求公告(如附件)，申請注意事項擇要說明如下：

(一)申請機構須為本會專題研究計畫之受補助機構，本計畫為單一整合型研究案，獲推薦補助之計畫列入本會研究案件數計算。

(二)計畫執行期間預計自115年6月1日至119年5月31日(採分年核定)。

(三)計畫類別請勾選「專題類-隨到隨審計畫」，計畫類別「一般策略專案計畫」、研究型別請勾選「整合型」，計畫歸屬請勾選「生科處」、學門代碼請勾選「B90-專



案」和子學門代碼請勾選「B90D004 - 人工智慧驅動藥物開發」；或「工程處」、學門代碼請勾選「E98-專案」和子學門代碼請勾選「E9882-人工智慧賦能加速藥物開發計畫-AI軟體」。

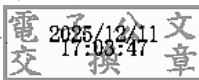
(四)計畫內容格式請依徵求公告網頁下方「附加檔案」之表CM03及表CM04格式撰寫，表CM03內容至多50 頁。

(五)計畫主持人須依「國科會補助專題研究計畫作業要點」規定，並依申請機構規定時間內，完成計畫書線上申請作業；由申請機構彙整送出並造具申請名冊1式2份，應於115年2月3日(星期二)前函送本會。

二、本專案計畫未獲補助案件恕不受理申覆。

正本：專題研究計畫受補助單位（共253單位）

副本：本會綜合規劃處、工程處、生科處



主任委員吳誠文

國家科學及技術委員會
生命科學研究發展處暨工程技術研究發展處
115 年度「人工智慧賦能加速藥物開發計畫」
共同徵求公告

114.12

一、計畫目標

為因應全球生技製藥產業與人工智慧（AI）技術加速融合之趨勢，本計畫旨在聚焦運用人工智慧技術加速藥物臨床前開發進程，以提升藥物研發之效率與成功率。此外，透過自主開發本土 AI 軟體工具，推動關鍵技術之創新與整合應用。期能建構具國際競爭力的整體研發能力，進而提升我國在全球生醫研發與創新領域的影響力。

二、計畫徵求重點

本計畫以 AI 為軸心，結合跨域及跨產業資源，推動藥物開發之創新應用，並強化國內學研團隊在 AI 藥物開發工具之自主研發能力，進而提升我國在生醫研發與產業應用上的整體競爭力。計畫徵求重點如下：

- (一) AI 藥物開發計畫：計畫旨在藉由國內學研團隊於藥物發現與臨床前開發階段的研發能量，運用 AI 相關技術與平台工具，以解決藥物開發過程中高成本、週期長與成功率低等痛點，加速新藥開發進程。計畫將透過 AI 輔助的分子設計、靶點預測、生物活性模擬，以及 ADMET 特性預測等技術，進行先導藥物之篩選，以提高藥物研發效率並降低早期開發的不確定性。疾病領域則優先聚焦於癌症、神經退化性疾病及代謝疾病等國人重大疾病，進行臨床前之藥物開發。計畫目標為在兩年內完成先導藥物經動物試驗或 AI 驗證之 ADMET 測試成果，取得藥物開發之關鍵數據，並據以支持先導藥物之可行性，全程目標於四年期程內推進至 IND 申請階段。藉由 AI 技術的導入，以有效縮短研發時程，提升國內藥物自主研發能量與國際競爭力，同時促進與產業需求之銜接，加速研究成果的轉譯與落地。
- (二) AI 軟體技術開發計畫：計畫旨在建構具自主研發能力與創新特性的 AI 驅動藥物開發軟體與平台環境，以補強目前國內於藥物研發流程中在 AI 工具、資料平台、模型準確度與整合性方面的技術缺口。

方向包含整體平台架構設計(含資料管理、運算模組、模型整合),核心 AI 演算法開發(涵蓋分子設計、分子特性預測、生物活性評估、臨床前決策支援等模組)以及模型驗證與準確度評估流程建立(跨資料來源、多階段驗證測試)等。計畫目標於兩年內完成各核心模組之研製、整合與初步技術驗證,達成可量化之性能指標(如預測準確度、召回率、模型穩健性、與現行國際工具的性能差距縮短程度),全程目標於4年內建立可支援臨床前藥物研發流程之 AI 輔助決策平台原型,以提升台灣在藥物研發 AI 化流程的自主性、加速研發進程、提升成果轉譯效率,並強化未來產業界可持續運用與擴充的能力。

三、申請機構與申請人(計畫主持人)資格

- (一) 申請機構：申請機構須為本會專題研究計畫之受補助機構。
- (二) 申請人：計畫主持人與共同主持人之資格，須符合「國科會補助專題研究計畫作業要點」之規定。
- (三) 鼓勵跨領域團隊組成，總計畫主持人須具備相關領域之學術聲望，負責團隊研究計畫之規劃、協調、研究進度及成果之掌握，並實質參與計畫之執行。
- (四) 總計畫主持人限申請1件本專案計畫，相同或相似題目、內容之計畫已獲其它單位補助者，不得再向本會重複提出申請，總計畫主持人須確認計畫成員符合上述規定。

四、計畫類型、執行期間及經費規模

(一) 計畫類型：

本計畫以單一整合型計畫形式推動，分為以下三類型：

1. 類別一「合作型計畫」：(兩件單一整合型計畫)同時涵蓋「AI 藥物開發」與「AI 軟體技術開發」之合作型計畫，計畫內容須分別符合以下類別二及類別三之要件。提案團隊需有兩位總計畫主持人合作撰寫，並分別研提「AI 藥物」與「AI 軟體技術開發」兩本計畫書，以促進跨領域間的整合與互動，並著重於技術開發與實際應用之間的協同創新與同步發展。
2. 類別二「AI 藥物開發計畫」：運用 AI 技術平台來優化及加速先導藥物發展為具開發利基及治療潛力之候選藥物，以有效推進

後續藥物研發流程，使研發成果於四年期程內達到 IND 申請階段。

3. 類別三「AI 軟體技術開發計畫」：建構本土且新穎之 AI 驅動藥物開發工具，完成整體架構設計及核心演算法開發，並進行驗證及效能評估。於四年期程內完成能實際應用在藥物開發的 AI 工具，並擴散此工具至學研或產業界應用。

(二) 執行期間：

1. 本專案計畫總期程 4 年，分為二階段受理計畫申請及執行，第一、二階段執行期程各為 2 年。

第一階段執行期程：預計自 115 年 6 月 1 日至 117 年 5 月 31 日

第二階段執行期程：預計自 117 年 6 月 1 日至 119 年 5 月 31 日

2. 第一階段計畫申請須完整規劃 4 年期計畫，獲審查通過之計畫採分年核定 2 年期計畫補助，次年度計畫補助經費將依期中年度考評結果而定。
3. 第一階段計畫經考評執行成果符合本專案計畫之規劃目標者，將可提送第二階段延續性計畫申請案，獲審查通過之計畫可執行第二階段計畫。

(三) 經費規模：

依計畫實際需求編列，類別一「合作型計畫」為鼓勵製藥領域與工程領域團隊共同研提，需同時涵蓋「AI 藥物開發計畫」+「AI 軟體技術開發計畫」，上述兩件單一整合型計畫之總補助金額每年以新臺幣 3000 萬元為上限；類別二「AI 藥物開發計畫」及類別三「AI 軟體技術開發計畫」每件計畫每年補助金額以新臺幣 1000 萬元為上限。

惟實際經費以本會依審議結果配合預算規定辦理，本專案計畫之年度所需經費如未獲立法院審議通過或經部分刪減，本會得依審議結果調減補助經費，並按預算法第五十四條規定辦理。

- (四) 本專案計畫之總計畫主持人，本會得核給研究主持費最高每個月新台幣 30,000 元整，以鼓勵總計畫主持人能專注投入執行。總計畫主持人於計畫執行期間僅得支領 1 份研究主持費，同一執行期間若同時執行本會計畫 2 件以上，以最高額度計算，並得於不同計畫內採差額方式核給。

(五)本專案計畫列入國科會專題研究計畫件數計算額度，經核定補助後，列入總計畫主持人執行計畫件數。

五、申請期限、申請方式及計畫撰寫說明

(一) 申請期限：115 年 2 月 3 日（星期二）

(二) 申請方式：

1. 總計畫主持人須依「國科會補助專題研究計畫作業要點」規定，並依申請機構規定時間內，完成計畫書線上申請作業；由申請機構彙整送出並造具申請名冊 1 式 2 份，經有關人員核章後，應於 115 年 2 月 3 日（星期二）前函送本會，逾期不予受理。
2. 申請機構應確實審查計畫主持人之資格條件，並於申請名冊之備註欄內逐案確認計畫主持人資格，符合者始得將其申請案彙整送出，並連同計畫主持人資格切結書經有關人員核章後，備函向本會提出申請。
3. 計畫書採線上申請作業方式，計畫主持人應循本會一般專題研究計畫之申請程序，登入「學術研發服務網」，於「申辦項目」項下點選「專題研究計畫」，填列製作計畫書。
4. 申請類別二「AI 藥物開發計畫」(生科處)：計畫類別請勾選「專題類-隨到隨審計畫」，計畫類別「一般策略專案計畫」、研究型別請勾選「整合型」、計畫歸屬請勾選「生科處」、學門代碼請勾選「B90-專案」和子學門代碼請勾選「B90D004-人工智慧驅動藥物開發」，依序填列製作完整計畫書。
5. 申請類別三「AI 軟體技術開發計畫」(工程處)：計畫類別請勾選「專題類-隨到隨審計畫」，計畫類別「一般策略專案計畫」、研究型別請勾選「整合型」、計畫歸屬請勾選「工程處」、學門代碼請勾選「E98-專案」和子學門代碼請勾選「E9882-人工智慧賦能加速藥物開發計畫-AI 軟體」，依序填列製作完整計畫書。
6. 申請類別一「合作型計畫」需同時提交兩本計畫書，分別對應以下「AI 藥物開發計畫」依類別二提生科處，及對應「AI 軟體技術開發計畫」依類別三提工程處。
7. 研究計畫中涉及人體試驗、採集人體檢體、人類胚胎、人類胚胎幹細胞者，應檢附醫學倫理委員會或人體試驗委員會核准文件；涉及基因重組相關實驗者，應檢附生物實驗安全委員會核

准之基因重組實驗申請同意書；涉及基因轉殖田間試驗者，應檢附主管機關核准文件；涉及動物實驗者，應檢附實驗動物管理委員會核准文件；涉及第二級以上感染性生物材料試驗者，應檢附相關單位核准文件。核准文件未能於申請時提交者，須先提交已送審之證明文件，並於 115 年 5 月 31 日前補齊核准文件。

8. 研究計畫涉及人體試驗或人體研究者，應增填研究中的性別考量檢核表。

(三) 計畫撰寫說明：

1. 本計畫為單一整合型計畫，每一計畫之總計畫及所有子計畫應全部書寫於一份計畫書，至少有 2 位共同計畫主持人，子計畫應為三個（含）以上，最多以不超過四個為限。總計畫主持人須同時主持 1 項子計畫，各子計畫主持人應實質參與研究，計畫書應詳實註明各子計畫主持人負責之研究主題，整合之計畫需有總體明確的目標。
2. 申請類別一「合作型計畫」時，提送之兩本計畫書應使用相同之「整合型總計畫名稱」。
3. 申請案應為單一整合型計畫，計畫內容格式(表 CM03 CM04)請務必下載本徵求公告網頁下方「附件下載」欄中之附件 1，撰寫 4 年期計畫後上傳，研究計畫內容(表 CM03)至多 50 頁，各團隊之執行內容及經費需求整合計畫書，並應依前述申請類別由總計畫主持人之服務機關提出申請。未依規定申請者，恕不予受理審查。

六、 審查方式及審查重點

(一) 審查方式：

1. 由本會邀請國內外相關領域學者專家組成審查委員會進行審查；必要時得請總計畫主持人至本會進行口頭報告及委員詢答。
2. 惟類別一「合作型計畫」經審查，「AI 藥物開發計畫」或「AI 軟體技術開發計畫」其一未獲推薦，則將已獲推薦之一件計畫，回歸相應類別二或類別三進行計畫執行。

(二) 審查重點：

1. 類別一「合作型計畫」

合作型計畫須同時含 AI 藥物開發與 AI 軟體技術開發兩面向，審查時將更重視跨領域整合性與協同創新能力。兩計畫間的合作是否具體、緊密且互補，兩團隊之合作是否能產生單一團隊無法獨立完成的成果，且具備智財與合作協議之完整性。

2. 類別二「AI 藥物開發計畫」

聚焦於運用 AI 加速藥物開發之可行性、成果可驗證性、臨床應用性，以及於跨界跨領域合作時智財與合作協議文件之完備程度。

3. 類別三「AI 軟體技術開發計畫」

聚焦於自主 AI 工具的創新性、模型可信性、效能提升、未來可擴充性與產業應用性。

- (三) 總計畫主持人應配合計畫考評及管考需求，於本會通知之期限內繳交相關執行成果報告，內容包括執行進度、績效指標達成情形等，必要時得安排進行口頭報告或成果實體展示等。

七、其他注意事項

- (一) 有關本徵求公告之相關資訊，請隨時留意國科會生科處或工程處網頁之最新公告。本會保留調整徵求公告內容之權利。
- (二) 本計畫屬專案計畫，無申覆機制。
- (三) 總計畫主持人執行本會專題研究計畫之計畫件數超過，或不符合本計畫所列之相關規範時，且經本會行政程序確認無誤者，本計畫申請案逕不送審。
- (四) 除特殊情形者外，不得於執行期中申請變更主持人或申請註銷計畫。
- (五) 本計畫之簽約、撥款、延期與變更、經費報銷及報告繳交等其他未盡事宜，應依本會補助專題研究計畫作業要點、本會補助專題研究計畫經費處理原則、專題研究計畫補助合約書與執行同意書及其他有關規定辦理。

八、聯絡人

- (一) 國科會生科處承辦人：李芳蘭科長

E-mail: fllee@nstc.gov.tw

電話：02-2737-7511

- (二) 國科會工程處專案召集人：國立清華大學資訊工程系 高宏宇教授

E-mail: hykao@cs.nthu.edu.tw

電話: 03-573-1214

- (三) 國科會工程處承辦人：陳淑鈞副研究員

E-mail：scnchen@nstc.gov.tw

電話：02-2737-7775

- (四) 國科會生科處承辦人：程沛文副研究員

E-mail：pwcheng@nstc.gov.tw

電話：02-2737-7545

- (五) 國科會生科處承辦人：宋瑞敏博士

E-mail：jmsung @nstc.gov.tw

電話：02-2737-7905

- (六) 有關電腦系統操作問題，請洽本會資訊系統服務專線

電話：0800-212-058、(02)2737-7590、7591、7592

三、研究計畫內容（以中文或英文撰寫）：

（一） 撰寫前請先勾選計畫簡述表

1. 申請計畫類別

☐類別一-合作型計畫（勾選此項者請回答以下第二-十題）

☐類別二-AI 藥物開發計畫（勾選此項者請回答以下第二-六題）

☐類別三-AI 軟體技術開發（勾選此項者請回答以下第七-十題）

2. 開發藥物領域別

☐惡性腫瘤 ☐心血管疾病 ☐腦及神經系統疾病 ☐肺及呼吸道系統疾病

☐代謝相關疾病 ☐免疫相關疾病 ☐消化系統疾病 ☐其他：_____

3. AI 軟體技術應用之藥物研發領域（可複選）

☐藥物篩選 ☐藥物設計 ☐藥物合成 ☐ADME 預測 ☐毒性模擬

☐臨床驗證預測 ☐其他：_____

4. 是否已有候選藥物？

☐無

☐有（請簡述）_____

5. 目前開發之藥物是否已與國內外 AI 技術服務提供者或 AI 公司合作？

☐無

☐有（若勾選本項目，請說明雙方目前就成果歸屬之協商進度：☐已簽署合約

☐尚未簽署合約 ☐其他，請說明：_____）

6. 對於本計畫是否已規劃所需之 CRO（臨床前委外研究）服務？

☐否

☐是（若勾選本項目，請說明已規劃之 CRO 服務機構/廠商：_____

及是否規劃使用本會補助計畫之 CRO 聯盟服務？☐是 ☐否 ☐尚未決定）

☐尚未決定

☐其他，請說明：_____

7. 欲開發之 AI 軟體技術類型（可複選）

☐分子生成模型 ☐分子特徵預測模型

☐反應路徑與合成規劃 ☐蛋白質結構/功能預測 ☐生物活性預測模型

☐資料標註/資料清理工具 ☐高效能運算/平台整合工具

☐其他：_____

8. 資料來源類型（可複選）

☐公開資料庫（如 ChEMBL、PubChem、PDB 等）

☐商業授權資料庫（請註明來源）：_____

☐醫療院所提供（已完成人體研究/IRB 授權）

☐自行產生或模擬資料（如 docking、simulation、生成式模型）

☐與藥物研發團隊合作（若勾選本項目，請一併提供合約）

☐已完成必要授權，可合法使用於模型訓練

☐其他：_____

9. 資料品質與處理方式（可複選）

☐資料量充足，可支援模型訓練

☐需進行資料清理（duplicate removal / normalization）

☐需進行資料標註或結構化

- ☐需進行資料補強/生成增強 (data augmentation)
- ☐計畫期間需建立資料管理流程 (metadata、versioning)
- ☐已完成資料品質評估 (如 noise rate、missing data 分析)

10. 目前開發之 AI 軟體技術是否已與國內外藥物開發團隊合作?

☐無

☐有 (若勾選本項目, 請說明雙方目前就成果歸屬之協商進度: ☐已簽署合約

☐尚未簽署合約 ☐其他, 請說明: _____)

(二) 請詳述本研究計畫所要探討或解決的問題、研究原創性、重要性、預期影響性、AI 技術應用於藥物研發之國內外研究現況、AI 技術應用於藥物開發之階段(藥物設計、ADMET 預測或其他)及應用之軟體、專利佈局、未來商業模式與價值以及國際發展趨勢與策略佈局、重要參考文獻之評述等。

(三) 填列研究方法、進行步驟及執行進度。請列述下列項目: 1.本計畫採用之研究方法與原因及其創新性。2.預計可能遭遇之困難及解決途徑。3.請預估技術發展可進入 IND 申請準備之時程。4.如為須赴國外或大陸地區研究, 請詳述其必要性以及預期效益等。

(四) 預期完成之工作項目及成果。請填列年度目標及預期成果表, 請列述下列項目: 1.預期完成之工作項目。2.對於參與之工作人員, 預期可獲之訓練。3.預期完成之研究成果 (如實務應用績效、期刊論文、研討會論文、專書、技術報告、專利或技術移轉等質與量之預期成果)。4.學術研究、國家發展及其他應用方面預期之貢獻。

四、整合型研究計畫項目及重點說明：

(一) 整合型研究計畫重點說明：

請就下列各點分項述明：

1. 整合之必要性：包括總體目標、整體分工合作架構及各子計畫間之相關性與整合程度。若申請「合作型計畫」，請說明藥物開發與 AI 軟體技術團隊的合作與串聯方式。
2. 人力配合度：包括總計畫主持人協調領導能力、各子計畫主持人之專業能力及合作諧和性。
3. 資源之整合：包括各子計畫所需各項儀器設備之共用情況及研究經驗與成果交流情況。
4. 申請機構或其他單位之配合度。
5. 預期綜合效益。

(二) 計畫分年目標及預期關鍵成果

本計畫為單一整合型研究計畫，並以藥物開發或/及支援臨床前藥物研發流程之 AI 軟體技術開發為導向。計畫主持人可依各階段目標，整合藥物臨床前開發或軟體技術開發所需之資源與跨領域團隊，並配合實際開發進度採行分年、分階段之滾動式調整，以確保各項成果得以有效銜接與持續推進。除強調計畫可行性、原創性及產業效益外，本計畫應具備良好的整合性與合作性，並確保各階段或各模組目標之間具有互補性與協同效應，以提升整體研發效能及成果轉譯價值。

表：年度預定目標及預期成果表(如預期執行臨床前 CRO 試驗項目，請包含於預估經費中)

計畫類型	AI 藥物開發			AI 軟體技術開發		
	階段性目標	預期成果 (量化指標/質化說明)	經費預估 (元)	階段性目標	預期成果 (量化指標/質化說明)	經費預估 (元)
第一年 (115 年)	簡要敘述每年度目標 1. 2.	■ (例)候選藥物體外、內藥理試驗... ■ (例)候選藥物 ADME 試驗.....				
第二年 (116 年)		■ (例)非 GLP 毒性試驗(委外) ■ (例)PK 試驗(委外)...				
第三年 (117 年)		■ (例)GLP 毒理學試驗... ■ (例)GLP 安全藥理學試驗...				
第四年 (118 年)		■ (例)候選藥物放大/量產... ■ (例)IND 申請文件準備...				