

115年度 「人工智慧賦能加速藥物開發計畫」 計畫徵求說明會

114年12月19日

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

| 大綱

- 政策依據
- 現況與因應策略
- 人工智慧在新藥開發各階段之應用
- 計畫目標及推動重點
- 計畫類型及經費
- 計畫期程
- 審查重點
- 計畫撰寫說明及申請須知

政策依據

賴清德總統： 國家希望工程

涵蓋三大國政願景與八大施政目標，其中八大施政目標包括：
「創新經濟，智慧國家」推動AI、半導體等高科技產業發展，提升國際競爭力。其中「創新經濟，智慧國家」之以科技研發驅動創新，包含生醫及精準健康。

2024-2025 BTC總體決議

2024「智慧創新、生醫永續、健康臺灣」，強調AI赋能醫療創新，運用AI於新藥設計與臨床數據分析，提升藥物探索、設計、篩選與開發效率與新藥開發時程。

2025「優勢延續、應用創新、永續與調適」，強調建構AI於靶點識別、ADMET評估及臨床試驗設計等研發工具，推動未被滿足重大疾病之創新藥物開發，並加速蛋白質及核酸工程AI應用落地。

現況與因應策略

痛點一

- 傳統的藥物開發產業正面臨全球競爭壓力
- 藥物開發的**高風險、高成本、低成功率**特性，使得傳統研發模式難以維持國際競爭力。

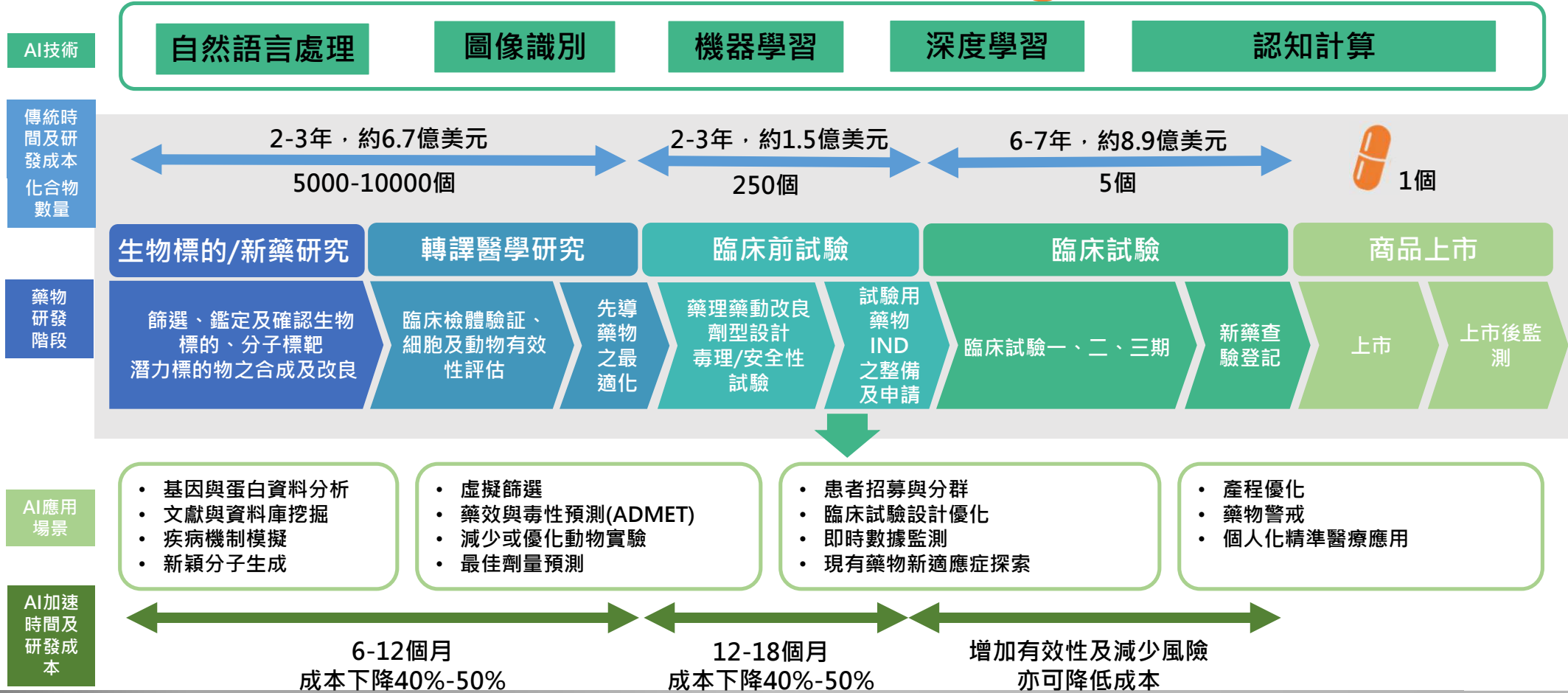
痛點二

- 目前AI軟體開發**仍以國外平台為主**，台灣在自主模型、資料基礎與端到端整合工具方面尚待強化，使研究者在因應在地需求時較難進行客製化開發。
- 此外，工具及資料格式較為分散，增加串接難度，對研發流程效率與本土技術能量的累積造成一定限制。



- 本計畫聚焦運用**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**。
- 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**。
- 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。

人工智慧在新藥開發各階段之應用



「加快速度、降低成本、提升成功率」

計畫目標及推動重點

推動目標

以**AI為軸心**，跨域跨產業整合產學研資源開發藥物，期縮短藥物開發**時間**、降低**成本**、提升**成功率**，增強藥物開發效能。並強化我國**主權AI**的技術根基，提升國際競爭力。4年總目標達先導藥物推進至**IND**申請階段，及建立可支援藥物臨床前研發之**本土AI軟體**技術。

執行架構



推動重點

- 優先聚焦開發具**利基**、治療**潛力**與臺灣**重大疾病**藥物(如：癌症、神經退化等)
- 優化及**加速**臨床前藥物研發與策略
- 2年內完成先導藥物經動物試驗或 AI 驗證之 **ADMET**測試成果
4年內達到 **IND** 申請整備階段
- 強化國內**自主AI模型**與平台能力，整合關鍵模組並提升預測效能
- 建構可支援臨床前藥物研發之**自主AI平台**
- **2年內**完成核心模組初步驗證達**可量化的性能指標**
4年內完成**藥物開發AI工具**並**擴散應用至學研產業**

計畫類型及經費(1)

- 計畫類型：單一整合型計畫
- 總計畫主持人計算研究案件數，研究主持費：3萬元/月
- 總計畫主持人限申請1件本專案計畫

類別二

AI藥物開發計畫

跨界合作
藥物開發團隊 × 現有AI工具

經費上限**1000萬元/件/年**

類別三

AI軟體技術開發計畫

自主研發
運用現有資料庫 × AI工具

經費上限**1000萬元/件/年**

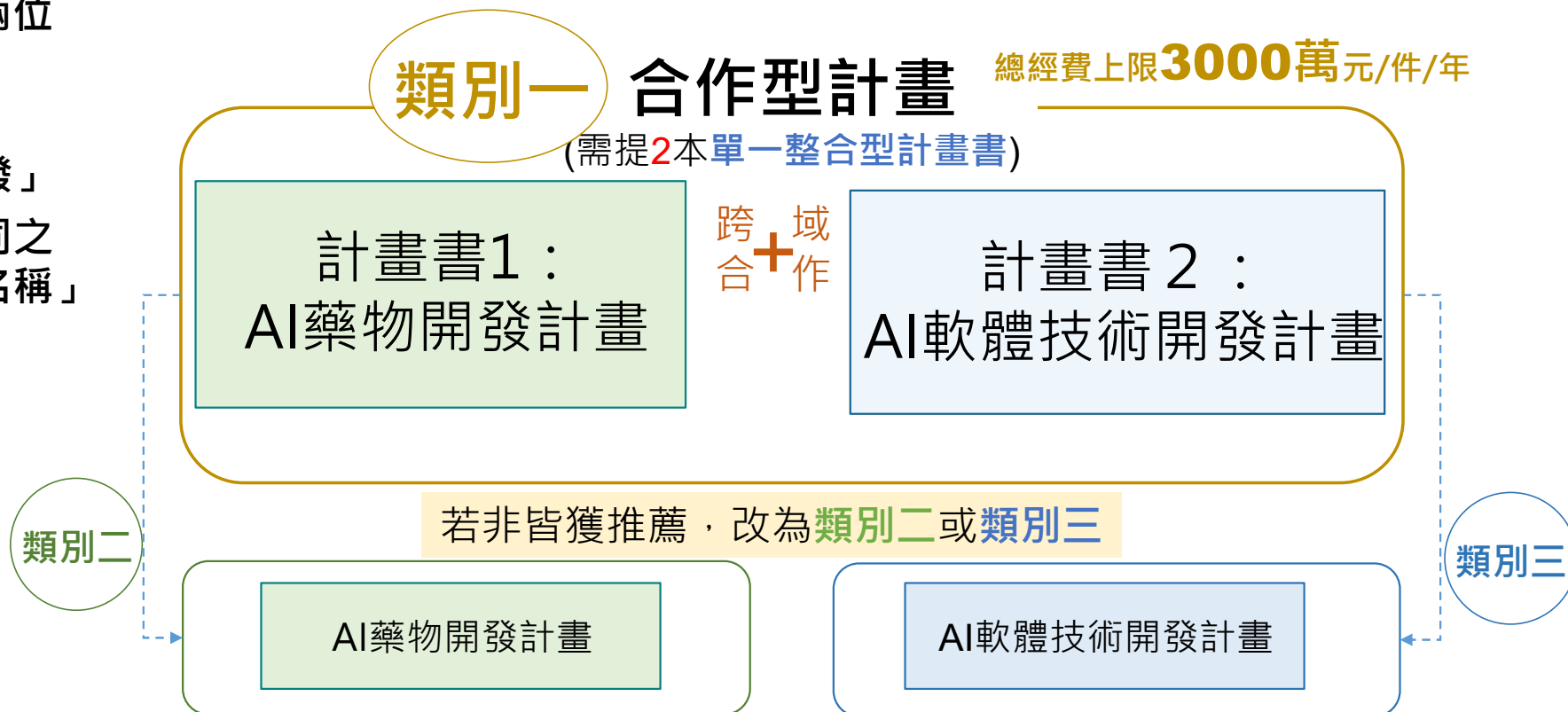
註1：現有AI工具/資料庫可來自學界、業界、法人等

註2：類別二：計畫團隊須與AI公司/機構與計畫執行機構成果歸屬運用主管單位確認智財及其歸屬運用等規範做法

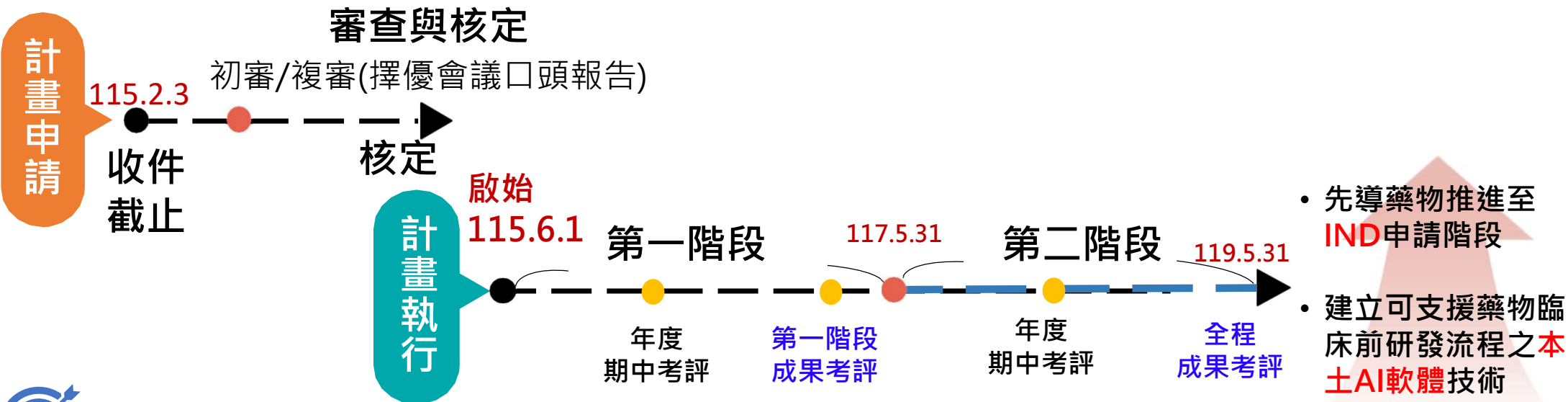
註3：類別三：計畫團隊須與資料庫公司/機構與計畫執行機構成果歸屬運用主管單位確認智財及其歸屬運用等規範做法

計畫類型及經費(2)

- 總計畫主持人：兩位
- 計畫書：2本
「AI藥物開發」
「AI軟體技術開發」
- 總計畫名稱：相同之
「整合型總計畫名稱」



計畫期程



- **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考評結果而定。
- 計畫年度**期中考評**：考評結果為次年經費核定之依據。
- **第一階段成果考評**：考評計畫執行二年之成果(完成先導藥物經動物試驗或 AI 驗證之 ADMET測試成果；完成核心模組之初步驗證，達成可量化之性能指標)；為可否進入第二階段(第3~4年)計畫之重要依據。
- **全程成果考評**：考評先導藥物推進至IND申請階段；建立可支援藥物臨床前研發流程之本土AI軟體技術。

生科處



共同

審查委員會

工程處

類別一：合作型計畫

- 同時涵蓋 **AI藥物開發**與**AI軟體技術開發**
- 強調**跨領域整合度**與**協同創新能力**
- 合作須具體、緊密且具互補性
- **智財與合作協議**之完整性
- 須完整規劃4年期計畫

類別二：AI藥物開發計畫

- 聚焦**AI加速藥物開發**的可行性
- 成果需具**可驗證性**及**臨床應用潛力**
- 跨界跨領域合作時，**智財與合作協議**文件的完備性(如：檢附與AI平台/公司之合作契約...等佐證資料)
- 須完整規劃4年期計畫

類別三：AI軟體技術開發計畫

- 著重 **AI工具創新性**
- 評估模型之**可信性**與**效能提升**
- 未來之**可擴充性**
- **具備產業應用性**
- 須完整規劃4年期計畫

計畫撰寫說明及申請須知(1)-撰寫表CM03

01

- 自「**徵求公告**」網頁「**附加檔案**」下載：
- 研究計畫內容(表**CM03**)至多50頁
 - 整合型研究計畫重點說明(表**CM04**)

02

表CM03：

- ① 撰寫前請先勾選計畫**簡述表**；
- ② 撰寫研究**計畫背景**、**研究方法**、**預期成果**等內容

三、研究計畫內容（以中文或英文撰寫）：

① (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 2-10 題）

類別二-AI 藥物開發計畫（勾選此項者請回答以下第 2-6 題）

類別三-AI 軟體技術開發（勾選此項者請回答以下第 7-10 題）

② (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

計畫撰寫說明及申請須知(2)-撰寫表CM04

03

表CM04：

- ① 撰寫整合型計畫重點說明。若申請「**合作型計畫**」，請說明藥物開發與AI軟體技術團隊的**合作與串連方式**；
- ② 撰寫計畫分年目標及預期關鍵成果。若含有臨床前委外CRO經費，請列示各項預估經費

① 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：

請就下列各點分項說明：

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。

②

(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(如含有臨床前委外 CRO 費用，請列示各項預估經費)

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)
OKR						

註：藥物開發驗證平台服務
(T-CROSS 台灣臨床前服務)
聯繫方式：
info@t.cross.org.tw
2507031@niar.org.tw

計畫撰寫說明及申請須知(3)-填寫範例



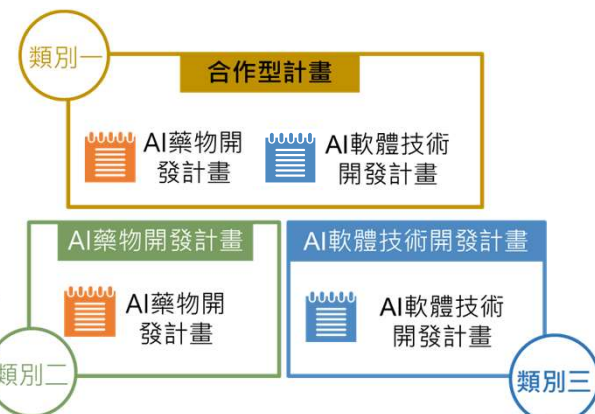
國科會
學術研發
服務網



專題類-
隨到隨審計畫



一般策略
專案計畫



① 計畫類別 **一般策略專案計畫**

研究型別* 個別 ② 整合型計畫

③ 計畫歸屬 **請選擇** 請依計畫主題所屬領域勾選適當處別

④ 學門代碼名稱 **請選擇** **請選擇**

⑤ 計畫主持人 **姓名(機構)**

⑥ 計畫名稱中文 **計畫名稱(中文)** (字數限制為100個中文字)

計畫名稱英文* **計畫名稱(英文)** (字數限制為300個英文字)

整合型總計畫名稱中文 ⑦ **合作型計畫，請填寫相同總計畫名稱，以利勾稽。** (字數限制為100個中文字)

⑧ 整合型總計畫主持人 姓名 服務機關 (若為本會研究人才，可自動帶出服務機構)

⑨ 全程執行期限* 共 年，自 至 (日期格式：西元 年/月/日)
 ※全程執行期限不滿一年計畫，請選擇一年，若超過一年但不滿兩年，請選擇共兩年，以此類推。

類別	計畫歸屬	學門代碼名稱
AI藥物開發	生科處	B90 (B90D004-人工智慧驅動藥物開發)
AI軟體技術開發	工程處	E98 (E9882-人工智慧賦能加速藥物開發計畫-AI軟體)

感謝聆聽 敬請指教

生科處

李芳蘭 科長

✉ fllee@nstc.gov.tw

☎ 02-2737-7511

程沛文 副研究員 (pwcheng@nstc.gov.tw)

☎ 02-2737-7545

宋瑞敏 博士 (jmsung@nstc.gov.tw)

☎ 02-2737-7905

工程處

專案召集人：高宏宇 教授
(國立清華大學資訊工程系)

✉ hykao@cs.nthu.edu.tw

☎ 03-5731214

陳淑鈞 副研究員 (scnchen@nstc.gov.tw)

☎ 02-2737-7775

資訊系統服務專線

☎ 0800-212-058、(02)2737-7590~92

附件

表CM03

(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2-10題)
- 類別二-AI藥物開發計畫 (勾選此項者請回答以下第2-6題)
- 類別三-AI軟體技術開發 (勾選此項者請回答以下第7-10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： _____)

表CM03(續)

(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。

表CM04

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：

- 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。
- 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。
- 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。
- 申請機構或其他單位之配合度。
- 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(如含有臨床前委外CRO費用，請列示各項預估經費)

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.	<ul style="list-style-type: none"> ■ (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)		<ul style="list-style-type: none"> ■ (例)非 GLP 毒性試驗(委外) ■ (例)PK 試驗(委外)... 				
第三年 (117年)		<ul style="list-style-type: none"> ■ (例)GLP 毒理學試驗... ■ (例)GLP 安全藥理學試驗... 				
第四年 (118年)		<ul style="list-style-type: none"> ■ (例)候選藥物放大/量產... ■ (例)IND 申請文件準備... 				