

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...				