

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。