

题目编号：XA-202623

AI 药物分子计算平台比赛方案

一、发榜单位

企业名称：雄安分算人工智能科技有限公司

企业类型：民营企业

企业地址：河北省雄安新区人工智能产业园

二、题目名称：AI 药物分子计算平台

三、题目介绍

1. 题目背景

当前全球创新药研发普遍面临周期长、成本高、成功率低、风险大的行业痛点，传统实验驱动模式下，一款新药从靶点发现到上市往往耗时超 10 年、投入数十亿美元，临床阶段失败率居高不下，严重制约生物医药产业创新升级与民生用药保障能力提升。与此同时，我国正加快推进健康中国与创新驱动发展战略，推动医药工业数智化转型，亟需以颠覆性技术破解研发瓶颈、实现从“仿制药大国”向“创新药强国”跨越。

在此背景下，人工智能与计算化学、分子模拟、高性能算力深度融合，催生了 AI 驱动药物研发新范式，成为全球科技竞争与产业变革的核心赛道。AI 技术可高效完成分子设计、ADMET 性质预测、蛋白质结构解析、虚拟筛选、合成路线规

划等关键环节，大幅压缩研发周期、降低成本、提升成药性与数据安全可控性，为药物研发全流程提供智能化、精准化、自主可控的底层支撑。

2. 目标介绍

本项目以打造国内领先、自主可控的 AI 药物研发智能平台为核心目标，聚焦创新药研发“长周期、高成本、高风险”关键痛点，通过融合人工智能与计算化学前沿技术，构建覆盖 ADMET 性质预测、分子生成、骨架跃迁、合成路线规划、蛋白质结构预测等全模块的一体化系统，能把获奖（含擂主）参赛项目作品的全部知识产权（含软件著作权）免费并无附件条件转移到出题单位。

平台致力于大幅提升新药发现效率与成功率，缩短研发周期、降低研发成本，为药企与科研机构提供精准、高效、定制化的 AI 研发服务；同时依托内网安全部署方案，保障核心数据与研发成果安全可控，推动可解释 AI 在药物分子计算领域的落地应用。

最终实现技术自主创新、产业赋能升级、民生用药普惠三重目标，助力我国从仿制药大国向创新药强国转型，支撑健康中国战略与生物医药产业高质量发展。

3. 选题意义

（1）益技术意义

在解决科技发展前沿技术难题层面，聚焦药物分子复杂体

系精准模拟这一科学前沿，通过融合物理先验知识与深度学习，破解“精度-效率”悖论，推动可解释 AI 的理论创新；

在突破制约产业发展技术瓶颈层面，直击创新药研发“长周期、高成本、高风险”的核心痛点，通过高通量筛选与精准预测大幅提升研发效率、降低临床失败率，赋能产业升级；

在回应社会科学领域重大课题层面，通过加速原创药研发、降低药品成本、提升突发公卫事件应急响应能力，切实推动“健康中国”战略落地。

（2）经济社会效益

在经济效益方面，通过大幅缩短药物研发周期、降低研发成本，推动我国药企产出具有全球竞争力的原创药物，形成千亿级新增市场规模，同时培育自主高端工业软件产业，开辟新的经济增长点；在社会效益方面，通过降低药品研发成本提升患者用药可及性，切实减轻群众用药负担，并通过自主可控的计算平台筑牢国家生物安全防线，显著提升突发公共卫生事件应急响应能力。

在提升产业竞争力层面，平台将推动我国从“仿制药大国”向“创新药强国”转型，构建自主可控的技术底座，赋能中小药企创新活力，形成良性产业生态，提升我国生物医药产业在全球价值链中的位势。

在助力国家经济社会高质量发展层面，平台高度契合“健康中国”与“创新驱动发展”战略，以科技创新支撑高水平科技自立

自强，以绿色计算模式推动研发低碳转型，以优质平价药物惠及民生，实现创新驱动、产业升级与民生改善的协同共进，为我国经济社会高质量发展注入强劲的科技动能。

四、参赛对象

青年科技人才赛道：在高等院校、科研院所、企业等各类创新主体中具有较高科研热情和较强科研能力的青年科技工作者可通过青年科技人才赛道申报作品参赛。参赛人员年龄在 40 周岁以下，即 1986 年 6 月 1 日（含）以后出生。

高校青年教师在指导学生参赛的同时不得以参赛人员身份参加同一选题比赛。发榜单位及同发榜单位有相关隶属关系单位的青年不得参加本单位选题比赛。

参赛对象可以团队或个人形式参赛，每个团队不超过 10 人，每件作品可由不超过 3 名指导教师进行指导。可以跨专业、跨学校、跨单位、跨地域组队，但同一团队所有成员均应符合本赛道相关年龄、身份要求。每件作品只可由 1 所高等院校、科研院所或企业等作为参赛主体提交申报。

五、答题要求

参赛作品需完整呈现 AI 药物分子计算平台的系统架构与核心功能，全面覆盖 ADMET 性质预测、基于配体的药物设计、分子生成、骨架跃迁、大环 Linker 生成、合成路线规划、蛋白质结构预测及蛋白质模型质量评估等全部模块，清晰说明各模块所采用的 AI 与计算化学技术及性能优势，充分体现平台定制

化服务能力，可根据客户需求灵活组合功能模块，并重点展示内网环境下保障数据安全的部署方案。作品须通过真实或模拟药物研发案例验证平台在提升新药发现效率与成功率方面的实际效果，各模块需明确对应的 AI 模型与计算化学方法，提供预测准确率、生成成功率、计算效率等量化性能指标，鼓励在关键预测模块增加模型可解释性分析，建议与至少一款行业主流工具开展性能对比以突出平台优势。作品使用的数据须注明来源或构建方式，使用开源代码或预训练模型须明确标注并遵守相关开源协议，平台设计应遵循药物研发伦理规范，在毒性预测等模块中清晰说明模型局限性，部署说明中需明确平台运行最低硬件配置及典型任务平均响应时间。

参赛者须一次性完整提交所有材料，内容保持一致，提交形式包括详细的作品说明书、演示 PPT、核心代码、部署说明文档及演示视频，演示视频须真实反映平台操作过程。进入答辩环节的团队应准备系统实时演示，重点说明本平台相较于同类解决方案的差异化优势。所有参赛作品须为团队原创，通供与参赛作品相关的知识产权（含软件著作权）清单，能实现参赛项目作品的全部知识产权（含软件著作权）免费并无附加条件转移到出题单位。评审将重点围绕平台完整性、技术创新性、实际应用价值、数据安全机制、案例验证可信度及系统集成能力进行综合评定。

六、作品评选标准

评审将围绕平台集成功能的完整性与技术先进性展开综合评定，重点考察 ADMET 性质预测、基于配体的药物设计、分子生成、骨架跃迁、大环 Linker 生成、合成路线规划、蛋白质结构预测及蛋白质模型质量评估等核心模块，要求各模块明确所采用的 AI 模型与计算化学方法，并提供预测准确率、生成成功率、计算效率等可量化性能指标。评审将严格评估内网环境下的数据安全部署方案，验证安全机制的合理性与可行性，同时通过药物研发实际或模拟案例，检验平台在加速新药发现、提升研发成功率方面的真实效果，参赛项目作品的可实现全部知识产权（含软件著作权）转移到出题单位的可行性评估。在此基础上，综合评价作品的技术创新性、实际应用价值、系统集成能力、案例验证可信度、研发伦理规范性及原创性，形成最终评审结果。

七、作品提交时间

2026 年 5 月至 9 月上旬，各参赛团队选择榜单中的题目开展研发攻关，各高校、企业、科研机构等组织协调机构应组织学生和青年科技工作者参赛，安排专业人员给予指导，为参赛团队提供支持保障。

2026 年 9 月 15 日前，各参赛团队要向发榜单位完成作品提交，具体要求详见本方案第八点第（二）款，并严格遵照发榜单位明确的提交规范执行。

2026 年 9 月 30 日前，由发榜单位完成初审，确定入围终审

擂台赛的晋级作品和团队。

2026 年 10 月，发榜单位安排专门团队提供帮助和指导，各晋级团队完善作品。

2026 年 11 月，组织终审擂台赛，角逐“擂主”。

八、参赛报名及作品提交方式

（一）报名方式

（1）参赛选手登录“挑战杯”官网 www.tiaozhanbei.net，在“揭榜挂帅”擂台赛报名入口注册账号，登录大赛申报系统在线填写报名信息。报名信息提交后，下载打印系统生成的报名表。

（2）申报人在报名表对应位置加盖所在学校或所在单位公章。

（3）将盖章版报名表扫描件上传至报名系统，等待系统审核。请参赛选手注意查看审核状态，如审核不通过，需重新提交。

（4）系统开放报名时间为 2026 年 5 月 30 日—6 月 30 日，逾期后系统将自动关闭报名功能。

（二）作品提交方式

各揭榜团队参赛作品需提交给各发榜单位，参赛团队的作品以电子邮件方式提交到指定邮箱（13716063999@139.com）。各参赛团队在提交作品（含 1 份与参赛题目相关的《知识产权清单》）时，同步报送 1 份经报名系统审核通过的参赛报名表，报名表所有信息须与系统内填报内容完全一致。

九、赛事保障

详细为参赛团队可以提供指导老师，以直接联系指导老师沟通交流，确保参赛作品质量。

十、设奖情况及奖励措施

1. 设奖情况

青年科技人才赛道设：“擂主”1个，特等奖5个、一等奖5个、二等奖5个、三等奖5个，最终授奖数量视作品申报数量和质量情况动态调整。

2. 奖励措施

青年科技人才赛道“擂主”的奖励10万元、特等奖2万元、一等奖1万元、二等奖0.5万元、三等奖0.2万元的奖励，以上均为税后奖励。

3. 奖金发放方式

比赛结束后，单位比赛专班工作人员与获奖团队取得联系，填写奖金申请表，待获奖团队参赛项目作品的全部知识产权（含软件著作权）免费并无附加条件转移到出题单位后，再提供银行卡详细信息，1个季度内将奖金一次性发放至获奖团队提供的银行卡中。

十一、比赛专班联系方式

1. 专家指导团队

顾问专家：代老师，联系电话：15552588320

2. 赛事服务团队

联络专员：林老师，联系电话：18638618199

3. 联系时间

比赛期间工作日（9:00-17:00）

4. 申报联系人

姓名：傅超阳 职务：经理 联系电话：13716063999

微信号：13716063999 邮箱：13716063999@139.com

附：发榜单位简介

雄安分算人工智能科技有限公司（简称：雄安分算）成立于雄安新区人工智能产业园的科技创新型企业。公司专业技术研发团队为实现 AI 应用在生物医药领域的研发技术产业化，依托拥有自主知识产权的“算力数据可视化分析平台”和“分子结构计算建模工具应用系统”，采用最新算法技术并应用贴切的数据模型表征方式，联合国内权威科研机构研发的药物分子计算人工智能技术应用。荣获科技部“第十四届中国创新创业大赛河北赛区三等奖”、“第十四届中国创新创业大赛全国赛入围奖”；“第十三届河北省创新创业大赛三等奖”、“第十届“创客中国”创新创业大赛河北省三等奖”等多个荣誉。