

上海市科学技术委员会

沪科指南〔2024〕25号

关于发布上海市 2024 年度“科技创新行动计划” 计算生物学领域项目申报指南的通知

各有关单位：

为深入实施创新驱动发展战略，加快建设具有全球影响力的科技创新中心，根据《上海市建设具有全球影响力的科技创新中心“十四五”规划》《上海市计算生物学创新发展行动计划（2023-2025年）》，上海市科学技术委员会发布2024年度“科技创新行动计划”计算生物学领域项目申报指南。

一、征集范围

专题一、生物大数据共性算法

方向 1：个体化基因表达调控元件功能解析算法

研究目标：开发解析基因表达和调控元件活性的算法，实现等位基因特异性调控元件的功能预测，性能相比国际主流算法提升 10% 以上。

研究内容：开发基于个体基因组的基因表达及调控元件活性定量解析算法，揭示人类基因组中等位基因表达及其调控的细胞和组织特异性机制；开发精准预测跨细胞和组织类型的等位基因特异性调控元件的计算模型，解析在神经系统发育和复杂疾病发生发展过程中的作用机制。

执行期限：2024 年 12 月 1 日至 2027 年 11 月 30 日。

经费额度：非定额资助，拟支持不超过 1 个项目，每项资助额度不超过 200 万元。

方向 2：细胞微环境调控网络的智能化解析算法

研究目标：开发解析细胞微环境调控网络的智能化分析算法，解析细胞微环境调控网络对细胞命运决定和表观遗传重塑的影响机制，性能相比国际主流算法提升 10% 以上。

研究内容：开发解析细胞微环境调控网络的智能化分析算法，精准解析胚胎发育、癌症发生等过程中细胞微环境多模态生物学特征间的相互关系，包括但不限于功能细胞组分、表观遗传景观、生物分子流等特征解析，并鉴定出与细胞命运决定和表观遗传重塑密切相关的重要细胞微环境特征。

执行期限：2024 年 12 月 1 日至 2027 年 11 月 30 日。

经费额度：非定额资助，拟支持不超过 1 个项目，每项资助额度不超过 200 万元。

方向 3：复杂表型的遗传与环境因素解析算法

研究目标：开发外部暴露与内部多模态表型之间的解析算

法，阐明关键遗传和环境因素对复杂表型的影响机制，预测性能相比国际主流算法提升 10% 以上。

研究内容：整合基因组、环境暴露组、微观表型和宏观复杂表型等数据，建立集基因定位解析、因果关系推断等功能的网络模型；开发影响人体细胞、分子等表型的遗传和环境因素解析算法，系统解析外部暴露与内部多模态表型之间的相互作用。

执行期限：2024 年 12 月 1 日至 2027 年 11 月 30 日。

经费额度：非定额资助，拟支持不超过 1 个项目，每项资助额度不超过 200 万元。

方向 4：生物神经元信息整合数学理论

研究目标：发展生物神经元整合信息的数学理论，建立新型类脑网络模型，实现 1 个量级以上参数量的优化，精度相比国际主流算法提升 5% 以上。

研究内容：开发能够解析真实生物神经元工作机制的数学理论分析框架，建立具有神经元树突计算功能的新颖脉冲神经元模型；发展神经元异构连接下的网络动力学编码数学理论，开发新型类脑神经网络以及动力学演化算法，并在经典图像（动态）识别、恢复及分类等基准问题上进行验证。

执行期限：2024 年 12 月 1 日至 2027 年 11 月 30 日。

经费额度：非定额资助，拟支持不超过 1 个项目，每项资助额度不超过 200 万元。

专题二、蛋白质与核酸设计改造

方向 1：蛋白质动态结构预测与设计

研究目标：开发低分辨率数据计算方法，提高蛋白质分子动力学模拟效率，实现天然无规蛋白的动态构象预测并指导蛋白质

的结构设计。

研究内容：基于晶体衍射或冷冻电镜等实验数据，开发提高结构解析分辨率的计算方法，从低分辨率实验数据分析提取大分子结构动态分布信息；发展生物大分子结构预测的柔性建模算法，建立蛋白质分子动力学模型；实现对大规模天然无规蛋白动态构象的系统预测，并指导蛋白质的结构设计。

执行期限：2024年12月1日至2027年11月30日。

经费额度：非定额资助，拟支持不超过1个项目，每项资助额度不超过200万元。

方向 2：核酸结构预测和设计优化

研究目标：建立自主可控的核酸大语言模型，提升核酸结构与功能的预测精度，核酸设计优化性能相比国际同期最高水平提升5%以上。

研究内容：基于大量核酸序列训练数据，开发自主可控的通用核酸序列语言模型，精准预测核酸结构、甲基化修饰、可变剪切等事件，实现RNA病毒演化趋势的预测，以及更高蛋白表达效率核酸序列的设计优化。

执行期限：2024年12月1日至2027年11月30日。

经费额度：非定额资助，拟支持不超过1个项目，每项资助额度不超过200万元。

专题三、AI 药物设计

方向 1：疾病靶标可干预变构位点的识别方法开发与验证

研究目标：开发可干预变构位点识别的新方法，构建达到国际先进水平的变构药物设计系统，发现2个以上候选小分子药物，获得动物水平有效性评价报告。

研究内容：构建标准化变构位点数据集，采用并优化增强采样、特征生成、功能评价等智能算法，识别靶标中可满足疾病干预需求的变构新位点；建立变构药物设计系统，筛选肿瘤等疾病的候选小分子药物并进行有效性验证。

执行期限：2024年12月1日至2027年11月30日。

经费额度：非定额资助，拟支持不超过1个项目，每项资助额度不超过300万元。

申报主体要求：本市企业。

方向 2：药物分子精准生成方法开发与验证

研究目标：开发分子三维构象生成模型和分子原位生成方法，完成候选药物分子生成和验证，发现2个以上候选小分子药物，获得动物水平有效性评价报告。

研究内容：基于分子图数据增强技术和生成式算法，建立精准的分子三维构象生成模型，开发片段分子表征方法和基于靶标结构的原位生成方法，实现多元分子的从头生成和结构优化，获得高成药性候选分子并进行有效性验证。

执行期限：2024年12月1日至2027年11月30日。

经费额度：非定额资助，拟支持不超过1个项目，每项资助额度不超过300万元。

申报主体要求：本市企业。

方向 3：抗体药物设计方法开发与验证

研究目标：开发抗体药物的虚拟筛选与设计优化技术，实现抗体药物的快速高效发现，发现2个以上候选抗体药物，获得动物水平有效性评价报告。

研究内容：解析构象表位与抗体特异识别机制，建立生成式

人工智能模型，实现大规模抗体序列库高效虚拟筛选；开发抗体药物的表位组合、免疫原性优化和毒副作用改造等成药性技术，实现肿瘤、自身免疫等高发疾病抗体药物的筛选和设计优化并进行有效性验证。

执行期限：2024年12月1日至2027年11月30日。

经费额度：非定额资助，拟支持不超过1个项目，每项资助额度不超过300万元。

申报主体要求：本市企业。

方向4：类抗菌肽药物设计方法开发与验证

研究目标：建立类抗菌肽药物的抗菌活性预测与结构智能设计模型，开发2个以上高效耐药细菌或真菌类的类抗菌肽，获得动物水平有效性评价报告。

研究内容：开发大分子通用表征技术，建立类抗菌肽药物的活性预测模型，实现构效关系的深入分析与精准预测；开发跨骨架的类抗菌肽生成模型，设计具有高效广谱抗菌活性的类抗菌肽并进行有效性验证。

执行期限：2024年12月1日至2027年11月30日。

经费额度：非定额资助，拟支持不超过1个项目，每项资助额度不超过300万元。

申报主体要求：本市企业。

专题四、计算生物学在临床重大疾病精准诊疗中的应用

方向1：疾病多组学测量数据的标准化处理

研究目标：开发批次效应校正等组学数据处理的标准化技术，实现肿瘤等重大疾病亚型的精准识别并完成性能验证。

研究内容：开发标准化的数据整合、批次效应校正等技术，提

升疾病队列多组学数据的质量；基于疾病多组学数据开发疾病的精准分型算法，识别肿瘤等重大疾病的分子亚型并实现临床应用。

执行期限：2024年12月1日至2027年11月30日。

经费额度：非定额资助，拟支持不超过1个项目，每项资助额度不超过300万元。

方向 2：基于医疗多模态数据的知识推理

研究目标：建立覆盖全科核心知识的医疗大模型，基于多种重大疾病多模态数据集的训练学习，实现2种以上重大疾病的协同会诊。

研究内容：采用知识推理、统计分析、动力学建模等方法，融合多维组学、临床信息等多模态医疗数据，构建医疗大模型，并在2种以上重大疾病的协同会诊和个体化精准治疗等应用场景进行应用验证。

执行期限：2024年12月1日至2027年11月30日。

经费额度：非定额资助，拟支持不超过1个项目，每项资助额度不超过300万元。

方向 3：基于泛基因组学的肿瘤精准诊疗分析

研究目标：开发肿瘤泛基因组构建技术，建立我国高发癌症的泛基因组，精准识别癌症诊疗标志物，识别准确性高于现有通用检测方法。

研究内容：开发具有良好可扩展性的肿瘤泛基因组构建技术，建立我国高发癌症的泛基因组；基于泛基因组开发癌症变异识别、分析及图形化展示系统，精准发现我国高发癌症的临床诊疗标志物。

执行期限：2024年12月1日至2027年11月30日。

经费额度：非定额资助，拟支持不超过 1 个项目，每项资助额度不超过 300 万元。

方向 4：重性精神疾病精准早期预警

研究目标：开发重性精神疾病多组学数据与环境因素交互作用的分析系统，实现对精神分裂症等重性精神疾病患者的早期预警。

研究内容：基于重性精神疾病大样本多组学资源平台，开发基因组结构变异、转录组剪切变异、表观修饰变异等数据分析算法，结合全基因组关联技术及回顾性环境因素数据，建立精神分裂症等重性精神疾病早期预警系统，为临床早期干预提供支撑。

执行期限：2024 年 12 月 1 日至 2027 年 11 月 30 日。

经费额度：非定额资助，拟支持不超过 1 个项目，每项资助额度不超过 300 万元。

二、申报要求

除满足前述相应条件外，还须遵循以下要求：

1. 项目申报单位应当是注册在本市的法人或非法人组织，具有组织项目实施的相应能力。

2. 对于申请人在以往市级财政资金或其他机构（如科技部、国家自然科学基金等）资助项目基础上提出的新项目，应明确阐述二者的异同、继承与发展关系。

3. 所有申报单位和项目参与者应遵守科研诚信管理要求，项目负责人应承诺所提交材料真实性，申报单位应当对申请人的申请资格负责，并对申请材料的真实性和完整性进行审核，不得提交有涉密内容的项目申请。

4. 申报项目若提出回避专家申请的，须在提交项目可行性方案的同时，上传由申报单位出具公函提出回避专家名单与理由。

5. 所有申报单位和项目参与者应遵守科技伦理准则。拟开展的科技活动应进行科技伦理风险评估，涉及科技部《科技伦理审查办法（试行）》（国科发监〔2023〕167号）第二条所列范围科技活动的，应按要求进行科技伦理审查并提供相应的科技伦理审查批准材料。

6. 已作为项目负责人承担市科委科技计划在研项目2项及以上者，不得作为项目负责人申报。

7. 项目经费预算编制应当真实、合理，符合市科委科技计划项目经费管理的有关要求。

8. 每位项目负责人申报项目不超过1项。

9. 鼓励项目产生的代码提交到GitHub等学术社区共享。

三、申报方式

1. 项目申报采用网上申报方式，无需送交纸质材料。申请人通过“中国上海”门户网站（<http://www.sh.gov.cn>）--政务服务--点击“上海市财政科技投入信息管理平台”进入申报页面，或者直接通过域名[https://czkj.sheic.org.cn/](https://czkj.sheic.org.cn)进入申报页面：

【初次填写】使用“一网通办”登录（如尚未注册账号，请先转入“一网通办”注册账号页面完成注册），进入申报指南页面，点击相应的指南专题，进行项目申报；

【继续填写】使用“一网通办”登录后，继续该项目的填报。有关操作可参阅在线帮助。

2. 项目网上填报起始时间为2024年9月26日9:00，截止时间（含申报单位网上审核提交）为2024年10月18日16:30。

四、评审方式

采用第一轮通讯评审、第二轮见面会评审方式。

五、立项公示

上海市科学技术委员会将按规定向社会公示拟立项项目清单，接受公众异议。

六、咨询电话

服务热线：8008205114（座机）、4008205114（手机）

上海市科学技术委员会

2024年9月18日

（此件主动公开）