

“人工智能驱动的中药复方药效物质基础与作用原理研究”专项项目指南

中药复方是中医药临床防病治病的主要形式，立足整体，强调辨证论治。多成分、多靶点、整合调节的作用特征是其疗效优势和特色的重要基础。然而，药效物质基础不明确、作用原理阐释不充分，是长期以来制约中药现代化发展与创新药物研发的核心瓶颈。传统研究方法受限于技术手段，难以有效解析中药复方药效物质基础及其“多成分-多靶点-多通路”的复杂作用机制，导致中药复方的科学内涵阐释不充分。近年来，人工智能技术（Artificial Intelligence, AI）在生命科学与药物研发方面展示了良好的应用潜力和发展前景，也为中药复方药效物质基础和作用原理研究提供了全新的技术范式与解决途径，有望突破传统研究的局限，破解中药复方复杂体系的难题。

国家自然科学基金委员会（以下简称自然科学基金委）医学科学部设立“人工智能驱动的中药复方药效物质基础与作用原理研究”专项项目，旨在通过 AI 与中药复方研究的深度融合，发展面向中药复方复杂体系的多模态融合、因果推断与可解释 AI 等创新方法，构建中药复方药效物质的智能辨识技术，阐释“成分-靶点-病证”的关联规律、多成分药效协同的分子机制及其整合作用原理，为说清楚、讲明白中药复方的疗效提供科学依据。

一、科学目标

针对中药复方“成分多样性、药效多向性、机制多维性”的研究难点，构建 AI-ready 的中药复方高质量数据集，研发 AI 驱动的中药复方药效物质精准辨识-靶点预测-机制解析专用模型，提升预测效能；以临床疗效确切、特色突出的经典名方或具有高质量循证医学证据的现代中药复方为研究对象，采用 AI 模型预测与实验验证结合的研究策略，深度解析中药复方的关键药效物质，阐释多靶点、多途径的整合作用机制，为中药创新药物研发和临床精准用药提供支撑。

二、拟资助研究方向

1. 中药复方药效物质基础与作用原理解析的 AI 技术与方法研究。采用 AI 驱动的知识挖掘、数据建模、虚拟筛选等核心方法，建立适配中药多成分、多靶点、多途径特征的中药复方智能化解析技术。实现中药复方化学成分智能辨识，精准预测关键药效成分；开展成分、靶点、通路多维相互作用解析，预测复方药效调控机制。破解传统研究试错成本高、筛选效率低、难以阐释整体协同作用的技术不足，为中药复方药效物质基础与作用原理的智能化解析提供技术支撑。

2. 中药复方药效物质验证与新药效成分发现。围绕 AI 预测的中药复方药效物质，开展化学成分表征与定量分析的比较研究，构建与临床疗效关联的细胞、类器官与动物模型等多维评价验证体系，揭示复方化学成分-生物活性-病证效

应的关联规律，确证核心药效物质群，促进结构新颖、活性明确的新药效成分发现。

3. 中药复方多成分-多靶点整合机制阐释。针对 AI 预测的“成分-靶点-通路”调控网络，构建多组学关联分析与分子互作的整合药理验证体系，系统验证中药复方活性成分关键靶点与核心调控通路，阐明多成分协同配伍机制，揭示多成分-多靶点的复杂作用原理，为中药复方临床疗效机理提供确切科学依据。

4. 中药复方数据基座构建与维护。建立适配中药复方特点的科研数据共享机制，制定面向中药复方化学解析、药效验证、多组学机制阐释、病证关联研究的数据标准、元数据规范、质量控制指标及分级脱敏策略；建立跨项目科研数据共享协议，明确各方权责、数据权属。构建适配智能分析的中药复方数据基座，搭建异构数据一体化架构，研发多源实验数据汇交、审编及标准化治理工具链，建设服务应用的数据接口，形成面向中医药科研数据复用、分级分类访问共享与隐私防护的安全管控体系。

鼓励申请人积极开展跨学科合作研究，申请书研究内容应紧密围绕项目指南设置的资助方向，凝练明确的科学问题，具有显著的 AI 与中医药交叉融合特点，形成方法学创新与基础研究互补的研究范式。

三、资助期限和资助强度

本专项项目直接费用总额度约为 3500-4000 万元，项目资助期限为 4 年。计划资助同时覆盖研究方向 1 和 2、3 的联合申请约 6-8 对，资助强度约 400-500 万/对；资助研究方向 4 的项目 1 项，资助强度约 200-300 万/项。申请书中研究期限应填写为“2027 年 1 月 1 日—2030 年 12 月 31 日”。

四、申请要求及注意事项

（一）申请条件

本专项项目申请人应当具备以下条件：

1. 具有承担基础研究课题的经历。
2. 具有高级专业技术职务（职称）。

在站博士后研究人员、正在攻读研究生学位以及无工作单位或者所在单位不是依托单位的人员不得作为申请人进行申请。

（二）申请要求

本专项项目研究方向 1 和 2、3 实行 Co-PI 制度，每对项目必须由两位申请人联合申请（依托单位可以相同或不同），一位申请人（联合申请 A）应为 AI 相关领域专业人员，另一位申请人（联合申请 B）应为中医药研究领域专业人员，鼓励学科交叉融合开展原创性研究。一方申请人不作为另一方申请项目的项目组成员。联合申请双方需围绕同一个研究目标，分别撰写申请书。研究方向 4 不需联合申请【具体要求

参见（四）申请注意事项】。

申请人拟开展的研究工作须符合“科研诚信”“伦理”和“科技安全”等国家相关法律法规以及《2026 年度国家自然科学基金项目指南》中的有关要求。

（三）限项申请规定

1. 本专项项目从申请开始直到自然科学基金委作出资助与否决定之前，不计入高级专业技术职务（职称）人员申请和承担总数 2 项的范围；获资助后计入高级专业技术职务（职称）人员申请和承担总数的范围。

2. 申请人和参与者只能申请或参与申请 1 项本专项项目。

3. 申请人同年只能申请 1 项专项项目中的研究项目。

（四）申请注意事项

1. 申请接收时间为 2026 年 10 月 11 日—2026 年 10 月 15 日 16 时。

2. 本专项项目申请书采用在线方式撰写。对申请人具体要求如下：

（1）申请人在填报申请书前，应当认真阅读本专项项目指南和《2026 年度国家自然科学基金项目指南》的相关内容，不符合项目指南和相关要求的申请项目不予受理。

（2）申请人应围绕本项目指南公布的研究方向撰写申请书，提出明确的关键科学问题，阐述拟开展的研究内容、研究方案及经费预算等。申请书应突出有限目标和重点突破，

明确对实现本专项项目总体目标的贡献。

(3) 申请人登录科学基金网络信息系统 <http://grants.nsfc.gov.cn/>（没有系统账号的申请人请向依托单位基金管理联系人申请开户），按照撰写提纲及相关要求撰写申请书。

(4) 申请书中的资助类别选择“专项项目”，亚类说明选择“研究项目”，附注说明选择“科学部综合研究项目”，申请代码 1 请选择“H31 中医学”或“H32 中药学”，申请代码 2 根据项目研究所涉及的领域自行选择相应学科申请代码。以上选择不准确或未选择的项目申请不予资助。

(5) 每对项目的联合申请人应分别独立提交申请，但须填写相同的项目名称，项目名称后分别标注（联合申请 A）、（联合申请 B）。

(6) 每对项目的申请书正文开始部分，应首先说明联合申请的两个项目共同的研究题目、立项背景、共同的研究目标、研究思路和框架，具有合作研究的必要性及可行性，以及合作分工；随后应按照申请书的撰写要求填写各自负责的研究内容、实验设计以及其他各部分内容。申请应体现强强联合，开展互补的实质性研究工作，项目评审时对联合申请进行整体评审。

(7) 每对项目的申请书附件材料中需提供联合申请协议书，联合申请双方必须共同签字并由所在依托单位盖章，不可用只有单方签字的信函替代。

(8) 主要参与者中如有申请人所在依托单位以外的人员，

其所在单位即被视为合作研究单位（境外单位不视为合作研究单位）。每个项目申请的合作研究单位数合计不得超过 2 个，主要参与者必须是项目的实际贡献者。

（9）如果申请人已经承担与本专项项目相关的其他科技计划项目，应当在申请书正文的“研究基础与工作条件”部分论述申请项目与其他相关项目的区别与联系。与申请人承担的国家其他科技计划研究内容重复的项目申请不予资助。

（10）本专项项目联合申请的申请人与依托单位需在申请时承诺，将本专项项目产生的中药复方化学成分数据、靶点与通路数据、多组学数据、药效学验证数据、临床病证关联数据等关键科学数据，按照要求在规定时间内汇交到指定的数据平台。获资助项目负责人有义务遵守相关规范和标准，以确保各项目之间的数据兼容性和结果可比性。申请人须将承诺书（见附件 1，需本人签字和依托单位盖章）作为附件上传，否则项目申请将不予受理。

（11）本专项项目研究方向 4 的申请人与依托单位需在正式申请时承诺，如获资助后，将保证资源平台数据安全，并持续进行高质量维护和管理。申请人均须将承诺书（见附件 2，需本人签字和依托单位盖章）作为附件上传，否则项目申请将不予受理。

（12）申请人应根据《国家自然科学基金资助项目资金管理办法》《项目资金管理有关问题的补充通知》有关规定和《国家自然科学基金项目资金预算表编制说明》的具体要求，

按照“目标相关性、政策相符性、经济合理性”的基本原则，认真编制《国家自然科学基金项目资金预算表》。

(13) 申请人拟开展的研究工作须符合国家生物安全有关法规要求，涉及人的生物医学研究应提供依托单位的伦理审核证明。未按要求提供上述证明的申请项目将不予受理。

(14) 本专项项目实行无纸化申请，申请人完成申请书撰写后，在线提交电子申请书及附件材料。依托单位只需在线确认电子申请书及附件材料，无须报送纸质申请书，但应对本单位申请人所提交申请材料的真实性和完整性进行认真审核，在项目申请接收截止时间（2026年10月15日16时）前通过信息系统逐项确认提交本单位电子申请书及附件材料；在截止时间后24小时内在线提交本单位申请项目清单。项目获批准后，依托单位将申请书的纸质签字盖章页装订在《资助项目计划书》最后，在规定的时间内按要求一并提交。

(四) 其他注意事项

1. 自然科学基金委将在官方网站公布资助专项项目基本信息，并将相关项目负责人的项目执行情况计入信誉档案。

2. 专项项目负责人应主要精力投入专项项目的研究中；依托单位应加强对专项项目实施的监督、管理和提供服务，减轻项目负责人不必要的负担，为项目研究提供必要的制度和条件保障。为更好实现总体目标，项目负责人应积极参加专项组织的学术交流活动，包括项目启动会、年度进展交流会等。

3. 本专项项目咨询方式：

国家自然科学基金委员会医学科学部医学科学十处

联系人：毕老师

联系电话：010-62328634

电子邮箱：bimg@nsfc.gov.cn

附件 1:

承诺书

本人对所申请的医学科学部专项项目“.....
(请在此处列出所申请的专项项目名称)”做出如下承诺:

如获得资助,将本专项项目产生的测序数据、样本信息、临床队列信息等关键科学数据,在规定时间内汇交到指定的数据平台。本人将遵守相关规范和标准,以确保各项目之间的数据兼容性和结果可比性。本项目汇交的数据真实、准确、完整、有效,符合“科研诚信”“伦理”和“科技安全”等国家相关法律法规。

本承诺书自签字盖章之日起生效。

项目负责人(签字):

项目牵头单位(签章):

年 月 日

附件 2:

承诺书

本人对所申请的医学科学部专项项目“.....
(请在此处列出所申请的专项项目名称)”做出如下承诺:

如获得资助,将按照项目指南要求,完成资源平台的构建,保证数据的有效收集和安全使用,并持续提供不少于 10 年的高质量维护和管理。

本人将严格遵守国家关于数据安全的法律法规,不得擅自收集、使用、泄露、篡改或销毁科研数据。

本承诺书自签字盖章之日起生效。

项目负责人(签字):

项目牵头单位(签章):

年 月 日