

上海市科学技术委员会

沪科〔2023〕148号

关于印发《上海市计算生物学创新发展 行动计划（2023—2025年）》的通知

各有关单位：

经市政府同意，现将《上海市计算生物学创新发展行动计划（2023—2025年）》印发给你们，请认真推进落实。

特此通知。

上海市科学技术委员会

2023年5月31日

（此件主动公开）

上海市计算生物学创新发展行动计划

(2023—2025年)

为深入贯彻习近平总书记关于数字中国的重要指示精神，抢抓上海计算生物学创新发展的战略机遇，建设具有国际影响力的计算生物学创新高地，赋能生物经济和数字经济的发展，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》《上海市战略性新兴产业和先导产业发展“十四五”规划》，制定本行动计划。

一、指导思想

以习近平新时代中国特色社会主义思想为指导，坚持“四个面向”，立足学科交叉融合不断发展、科学研究范式发生深刻变革的发展阶段，结合跨模态大数据迅速积累、人工智能算力急剧提升、可变现应用场景不断增加的发展趋势，针对可计算建模、可定量预测的发展特征，以推动数字技术和生物医药深度融合为主线，强化研发、技术、产品、场景、生态系统推进，有组织推进前沿导向的底层技术开发、战略导向的工具迭代优化、应用导向的平台体系建设，加快实现用我国自主的计算生物学技术与方法来解决关键科学研究问题、药物研发和重大疾病防诊治难题，有力推动计算生物学领域高质量发展。

二、基本原则

——**坚持科学引领**。遵循科学发展规律和重大应用需求，充

分发挥上海生命科学和医疗领域的基础优势，以关键科学问题为引领，以大规模数据和典型应用场景为依托，加快形成具有上海特色的计算生物学研发体系。

——坚持系统布局。着眼于生物技术和信息技术的相互赋能、融合突破，衔接布局创新链和产业链，联动各方资源，加强研发、技术、人才、资本等要素的集聚，加快推动研究成果转化应用。

——坚持自主创新。以原始创新、自主开发为重要标准，充分激发各类创新主体活力，打造人无我有、人有我优的原创理论和核心产品，将计算生物学打造成上海国际科创中心的策源标杆之一。

三、主要目标

到 2025 年，建立基于建模、预测、应用全链条的计算生物学研究范式，初步建成生物大数据平台等基础设施，培养、引进一批计算生物学人才，在多模态数据理论算法、蛋白质工程、AI 药物研发等领域率先实现重大理论突破，开发出一批具有自主知识产权和国际影响力的算法模型和软件，加速催生一批面向生命健康的颠覆性新技术，产出一批可有效规模化应用的新工具、新标准与新产品，为形成计算生物学领域的优势学科，把上海打造成计算生物学领域创新思想、科研范式和重大应用的策源地奠定基础。

四、实施重点项目攻关

围绕算法开发、模型构建、AI 药物设计等基础研究与应用基础研究进行系统布局。

方向一：生物大数据解析的共性算法。面向多尺度生物大数据解析的共性问题，发展生物医学大数据挖掘与解读的共性算法，开发面向跨尺度、多模态组学数据和真实人群多维组学数据的算法与模型，建立生物分子网络逆向工程模型和生物系统数字模型。

方向二：蛋白与核酸设计改造。发展人工智能助力的分子动力学和增强采样算法，开发我国独立自主的大分子结构预测与设计的算法和软件，构建大分子结构解析及其互作的分析计算流程和预测模型，构建大分子工程 AI 设计平台，指导大分子改造实验和结构优化。

方向三：AI 药物设计。发展 AI 药物研发的原创性算法、模型与计算平台，开发小分子药物大模型和生成算法，建立人工智能增强的抗体药物和肽类药物大模型与设计平台，发展中药复方药理药效预测模型，研发具有协同药效的现代复方。

方向四：重大疾病精准诊疗关键技术。发展原创计算建模手段和预测算法，探索肿瘤、衰老、心身疾病、神经退行性疾病等重大疾病中的多层次生物大数据规律，发现诊断标志物和潜在药物靶点，建立高风险毒株预测方法，促进临床和公共卫生转化应用。

五、保障措施

（一）设立专项支持

1. 在市科委科技创新行动计划中设立“计算生物学”专项。聚焦结构、组学、类器官、个体等多维度的生命科学重大问题和主要目标，以全链条创新的理念布局算法、模型构建、药物生成等基础研究方向，构建计算生物学的创新源头。

2. 积极谋划布局市级科技重大专项。依托上海优势，面向上海需求，围绕“一站式”药物研发工具、数据驱动的疾病机制研究和靶点发现、衰老机制研究与干预等领域，有组织开展前期预研，适时部署市级科技重大专项，将上海在计算生物学领域的优势力量有机整合起来，形成资源共享、优势互补的科研生态。

(二) 建设创新平台体系

3. 建设上海生物大数据平台。基于现有数据资源，进一步强化财政资金的引导作用，构建标准统一、强化应用的“核心+节点”数据库体系，形成我国自主可控的数据资源与核心技术，加强对数据安全和隐私保护的政策治理，为计算生物学的发展提供高质量基础保障，积极承接国家生物信息中心长三角节点建设。

4. 建设重点实验室。依托中科院在沪研究所、部属高校、科技型企业等各类主体，培育筹建计算生物学领域的全国和市级重点实验室，突破一批原创理论和共性技术。

5. 建设新型研发机构。建设高能级新型研发机构，联动有关企业机构，开展基础研究和应用基础研究，加强产学研合作，面向药物靶标、候选药物、诊疗技术等方向加快成果应用转化。

6. 成立计算生物学“创新联盟”。成立由高校、科研机构 and 主要企业共同组成的创新联盟，通过协同创新，促进共性算法、模型开发、分子设计等关键环节的交流与合作，实施“赛马制”“揭榜制”管理，提升科研攻关效率，形成该领域持续开发能力。

(三) 衔接产业发展

7. 举办上海计算生物学大赛。设立该领域的上海大赛，引导高校院所及企业在算法、软件、结构等多个环节的原创产品积极

亮相，建立以赛选项机制，吸引更多潜在用户，不断提高上海计算生物学在国内外影响力。

8. 带动创新能级提升。通过加强孵化，引导和培育“长期资本、耐心资本”等方式，加速技术产品化和产业化，实现全过程创新，孕育企业发展，带动全市计算生物学创新创业能级提升。

（四）加强人才引育

9. 培育优势学科。鼓励具有自主审核资格的高校、院所根据发展阶段设立“计算生物学”一级学科，建设全新课程资源和教学实践平台，加强研究生联合培养，构建该领域交叉专业人才培养体系，培养满足产业发展急需的创新型人才，为交叉学科提供更好的发展通道和平台。

10. 加强人才引进。优先吸引该领域具有全球号召力的顶尖科学家、企业家和投资家，同步完善领军人才落户、技术入股等方面的配套措施，加速提升上海科研原创水平、带动学科建设、推进产业发展、培养人才队伍。