

“人工智能+”挑战赛题目（六）

一、题目名称

基于人工智能的药物与先进药物递送智能体构建

二、题目介绍

随着人工智能技术的快速发展，其在生物医药领域的应用正逐步突破传统研发范式。本题目聚焦“人工智能驱动的药物设计与智能递送系统协同开发”，期望通过深度融合人工智能、计算生物学与纳米技术，打造智能药物研发基础设施，构建从药物分子发现到精准递送的全链条智能化解决方案，推动药物研发向高效化、精准化方向革新，推动医药行业向数据驱动范式转型，为攻克重大疾病提供创新解决方案。

本题目需重点把握以下两个方面：其一，AI 药物分子生成与优化，构建多模态药物分子生成模型。通过整合生物靶点结构数据库、化合物活性数据集及 ADMET 性质预测模型等，实现靶向特定疾病的高效分子生成与虚拟筛选。引入迁移学习策略，显著提升小样本场景下的模型泛化能力。其二，智能递送系统设计，开发基于强化学习的递送载体优化框架，结合分子动力学模拟等实验数据，自主设计具有环境响应特性的纳米递送载体。通过构建“病灶微环境-载体材料-药物释放”的多尺度仿真模型，实现载体粒径、表面修饰、控释特性的智能化适配，突破传统试错法局限。

三、题目要求

参赛作品需体现自主决策、动态学习、多模块协同的智能体特性，具体要求为：构建至少 1 个 AI 智能体。实现指定疾病靶点，输出 3-5 种候选药物分子，对应递送系统设计方案，至少 1 种验证方法。

四、作品评选标准

1. 医药价值（30 分）：功能设计是否符合药物研发痛点。
2. 技术创新（25 分）：模型优化策略、多模块协同、功能独创性。
3. 系统完整度（20 分）：端到端流程闭环性、界面易用性、容错机制。
4. 数据合规（15 分）：使用公开数据集或合理合成数据。
5. 商业潜力（10 分）：成本效益分析、可扩展性。

五、作品提交时间

2025 年 8 月 17 日 24 时前（北京时间），各参赛团队提交作品，具体提交要求详见作品提交方式。

六、参赛报名及作品提交方式

1. 网上报名方式

（1）请参赛同学 PC 电脑端登录报名网站（<https://2025.tiaozhanbei.net/>），在线填写报名信息。

（2）报名信息提交后，请将系统生成报名表下载打印，根据提示，由申报人所在学校的学籍管理部门、院系、团委等部

门分别进行审核（需严格按照要求在指定位置完成签字和盖章）。

（3）将审核通过的报名表扫描件上传系统。

（4）请参赛同学注意查看审核状态，如审核不通过，需重新提交。

2. 具体作品提交方式

请将作品以压缩包格式发送至邮箱（lmj-tiaozhansai@huahaipharm.com）。作品内容包括但不限于可运行的智能体系统代码、交互式可视化界面、验证数据包、技术文档、3 分钟演示视频。压缩包名称格式：提报单位（学校全称）—题目名称—作品名称—团队负责人姓名—团队负责人联系方式（例如：XX 大学—XXX—XXX—张三—185XXXXXXXX）。

提交具体作品时，务必一并提交 1 份报名系统中审核通过的参赛报名表（所有信息与系统中填报信息须保持严格一致）。

七、赛事保障

成立本题目专业顾问团队，可根据参赛团队实际需求、专业指导及其他项目必须条件等方面提供帮助（因行业特殊原因，研发数据、技术路线等均不在咨询范围内，请参赛团队使用开源数据）。参赛团队如需本题目提供与项目相关的其他必须帮助，请提前联系，可在许可范围内给予参赛团队帮助。

八、设奖情况及激励措施

1. 设奖情况。原则上设特等奖 5 个，一等奖 5 个，二等奖

5 个，三等奖 5 个，从特等奖获奖团队中产生 1 个得分最高的团队成为本题目的“挑战之星”。奖次最终设置情况可根据报送作品数量、质量等进行调整。

2. 奖励措施。（1）“挑战之星”10 万元/队（从特等奖中产生），特等奖 1 万元/队（不含“挑战之星”），一等奖 0.6 万元/队，二等奖 0.4 万元/队，三等奖 0.2 万元/队。（2）全部获奖队伍中应届毕业生参加浙江华海药业股份有限公司校园招聘时，符合应聘条件者，同等条件下可优先录取；符合公司实习岗位条件的，可优先安排到浙江华海药业股份有限公司暑期实习。

3. 奖金发放方式。以上奖金为税前，将通过银行转账方式发放至各获奖团队指定账号。

九、题目专班联系方式

1. 专家指导团队

梁老师，联系方式：0576-85016133

负责比赛进行期间技术指导保障。

2. 赛事服务团队

陈老师，联系方式：0576-85016131

负责比赛进行期间组织服务及后期相关赛务协调联络。

3. 联系时间

比赛进行期间工作日（8:30-11:30，14:00-17:30）。