文章类型：论文|刊号（ISSN）：2630-5178 /（中图刊号）：380GL019

生成式人工智能赋能下的新药研发课程教学改革研究——以《创新药物研发实践及成功案例解析》课程为例

雷剑
四川大学华西医院生物治疗全国重点实验室
DOI:10.32629/mef.v9i9.22187

[摘　要] 人工智能(Artificial Intelligence,AI)正深刻影响全球药物研发范式,对新药研发,尤其是对生物医药领域的人才培养模式、知识体系和能力结构提出了新的要求。当前,《创新药物研发实践及成功案例解析》课程在教学内容、教学模式及评价体系等方面与行业需求存在脱节。本研究依托该课程,面向AI时代开展教学改革探索,构建“AI+药物研发”模块化课程内容体系,并建立能力导向的多元评价机制,旨在形成一套可推广的“生物医药+AI”复合型人才培养改革方案。
[关键词] 人工智能；药物研发；课程改革
中图分类号：TP18　文献标识码：A

From traditional teaching to AI-enhanced learning: reforming education in drug development

Jian Lei
State Key Laboratory of Biotherapy, West China Hospital, Sichuan University

[Abstract] Currently, artificial intelligence (AI) has the potential to revolutionize the process of drug discovery and development. Thus, the corresponding education in the biomedicine and pharmaceutical fields should be reformed. To meet the demands of above changes, we performed a deepen teaching reform of the course: “Innovative drug development practice and successful cases”. In this project, the benefits and drawbacks of AI technologies are discussed, and possible strategies and for overcoming the AI obstacles are mentioned as well. Our teaching reform introduced a modular curriculum integrating various AI technologies, therefore, bridging the gap between conventional pharmaceutical education and new AI-driven drug development. This re-designed educational model will enhance students’ AI applying ability. Overall, this reform aims to provide a novel framework for pharmaceutical education.
[Key words] Artificial intelligence; Drug discovery and development; Teaching reform

在全球医药研发领域,人工智能(Artificial Intelligence,AI)在靶点发现、分子生成与临床结果预测等药物研发关键环节的应用,已显著提升研发效率并降低失败风险,推动了药物研发范式从经验驱动向数据智能驱动转型。这一技术变革对新药研发,特别是生物医药从业者的复合型知识结构提出较高要求,尤其需要其具备AI工具运用能力、跨学科协作素养及伦理风险意识。然而,当前国内高校药物研发相关课程普遍存在教学内容滞后、实践操作不足、伦理教育缺失等问题,导致生物医药人才培养难以满足行业需求[1]。以《创新药物研发实践及成功案例解析》课程为例,其现有体系在课程内容、教学模式及评价机制方面与“AI+药物研发”的行业实践存在显著差距。因此,本研究依托该课程,通过系统性地重构教学内容、创新教学模式、强化伦理教育,建立“生物医药+AI”融合的人才培养新模式,以期为“新医科”背景下的药物研发教育改革提供可推广的实践参照。

1 AI时代生物医药教育面临的机遇与挑战

创新药物研发是生物医药行业的核心驱动力。然而,全球医药研发长期处于高成本、长周期与低成功率的困境。单一创新药物从靶点确定到上市,通常需耗费十余年的研发周期与数十亿美元的高额投入,最终临床成功率不到10%[2],严重限制了新药的产出。

近年来,以AlphaFold为代表的人工智能结构预测技术和生成式AI为代表的大模型技术快速发展,为破解上述困境提供了新路径。在靶点发现环节,AlphaFold等蛋白结构预测工具能够快速提供潜在成药靶点的三维结构,加速对药物作用机制的解

Copyright © This work is licensed under a Commons Attribution-Non Commercial 4.0 International License.

析与验证[3]。在先导化合物设计与优化环节,生成式对抗网络等AI模型可基于已知活性分子,生成数百万级候选化合物,并同步预测其ADMET(吸收、分布、代谢、排泄和毒性)性质,将传统模式下耗时数年的分子发现周期压缩至数月甚至数周[4]。在临床试验环节,AI可借助其强大的算法对已有临床数据进行深度挖掘,优化受试者筛选策略等,提升临床试验的效率与成功率。

目前,AI辅助药物设计研发已取得较大进展。例如,英矽智能利用其自研AI靶点发现平台PandaOmics识别TNIK(一种丝氨酸/苏氨酸蛋白激酶)靶点,并借助生成式AI平台Chemistry42针对该靶点生成和设计出全新小分子化合物Rentosertib(INS018_055)[5]。该化合物于2021年2月被提名,并于同年11月进入临床阶段,成为全球首批由生成式AI驱动进入临床阶段的候选药物之一。2023年,Rentosertib获得美国FDA孤儿药认定,并获批在中国和美国开展II期临床试验[6]。英矽智能从靶点确定到提名候选化合物仅用时18个月,研发周期与成本均显著低于行业平均水平。

尽管AI技术在药物研发领域展现出巨大潜力,现有的《创新药物研发实践及成功案例解析》课程却仍以经典理论与传统方法为主体,对AI工具的深度融入不足,教学内容与产业需求之间形成明显断层。当前课程主要存在三点不足[7]：

首先,部分教学内容更新不及时。课程中的靶点发现和分子筛选仍主要围绕传统计算机辅助药物设计方法展开,对AlphaFold蛋白结构预测、AI分子设计等近年来发展较快的技术涉及较少。以靶点结构分析为例,之前的教学较多依赖已有实验结构或传统结构数据库,而学生在获取AI预测结构、判断预测结果可靠性等方面,课程缺少相应教学内容。

其次,现有课程实践环节单一,与完整的药物研发流程仍有距离。目前教学主要讲授传统AutoDock等分子对接软件,对生成式AI(如Schrödinger等)综合计算平台及云端计算资源接触较少。课堂练习通常只涉及少量分子,而实际虚拟筛选往往需要处理大量的化合物数据,仅掌握传统软件的基本操作,较难帮助学生完成现实研发中的复杂任务。

此外,课程对AI工具局限性的讨论不足。ChatGPT等通用AI工具在教学中多用于问答展示和信息整理,而对训练数据来源、模型偏差、输出结果可靠性等问题涉及较少。例如,当训练数据存在样本代表性不足或数据分布不均时,模型输出也可能受到影响；AI生成的靶点信息和分子结构不能直接等同于科研结论。如果教学只强调AI“能够完成什么”,而较少讨论“结果是否可信、在什么条件下可以使用”,学生容易陷入技术崇拜和依赖。

2 改革的核心策略：构建“内容更新—能力培养—风险防控”三位一体的教学体系

针对上述问题,《创新药物研发实践及成功案例解析》课程亟待系统性改革。本研究以该课程为载体,全面重构教学体系。与过去教学内容不同,新体系通过递进式实践培养助力能力养成,采用“技术—认知—伦理”教学框架的规范要求,建立能力导向的多元评价机制,最终形成涵盖“内容更新—能力培养—风险防控”三位一体的全新教学体系(图1)。

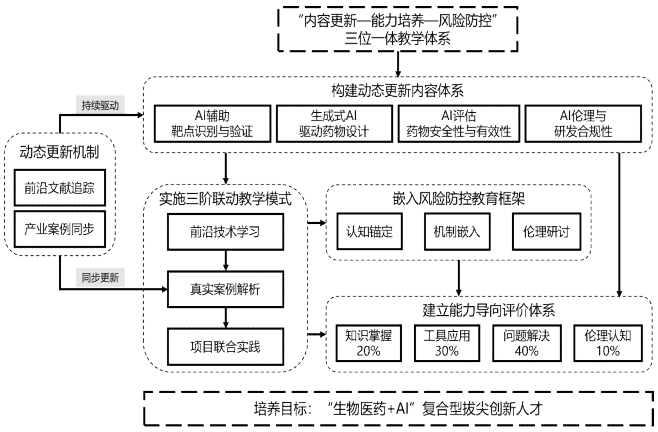


图1 《创新药物研发实践及成功案例解析》课程教学改革示意图

2.1重构课程内容：构建动态更新的“AI+药物研发”模块化体系

针对传统课程内容更新滞后于AI技术迭代的现实问题,本研究以药物研发全流程为主线,以AI核心技术工具为支撑,将课程内容重组为四大模块：

(1)AI辅助靶点识别与验证。本模块重点引入AlphaFold等蛋白质结构预测工具,引导学生从传统的文献与实验驱动的靶点发现模式,转向数据驱动的精准识别范式。以此为基础,课程进一步引导学生利用PandaOmics等平台对基因组学、蛋白质组学与临床表型等数据进行整合分析,借助PDB、UniProt等公开数据库完成靶点发现与验证的AI分析报告,帮助学生理解AI技术如何将靶点发现从“大海捞针”变为“按图索骥”。

(2)生成式AI驱动的分子设计。本模块教学内容集中聚焦于小分子与生物药的开发,通过拆解英矽智能Rentosertib等典型案例,展现AI辅助药物开发的全流程。教学内容涵盖ChemGPT、MolGPT等生成式模型的基本原理,培养学生利用AI进行化合物生成与优化。

(3)小分子的安全性与成药性的AI评估。本模块的教学内容重点会放在借助AI模型预测新分子的肝脏毒性、心脏毒性等方面;同时,课程也会基于大数据所反映的药物治疗效果预测新分子的成药性。学生需要对模块(2)中生成的候选化合物分子进行模拟毒理学与药理学评估,并撰写风险评估报告,借此形成“早期评估、前端防控”的风险意识。

(4)AI伦理与药物研发合规性。本模块计划组织学生围绕“算法偏见与药物研发公平性”、“患者数据隐私保护”、“AI成果的知识产权界定”等议题展开讨论。使得本课程教学不只停留在技术应用层面,会进一步拓展至社会责任范畴,着重培养学生的伦理意识与社会责任感。

2.2创新教学模式：实施“三阶联动”的递进式培养路径

在“教什么”已厘清的前提下,下一步要处理的,便是“如何教”的问题。本研究设计了“三阶联动”教学模式。

Copyright © This work is licensed under a Commons Attribution-Non Commercial 4.0 International License.

文章类型：论文|刊号（ISSN）：2630-5178 /（中图刊号）：380GL019

第一阶是前沿技术原理学习。这一阶段会在课程上系统地讲解AI工具的核心原理与算法基础,让学生能够理解AI模型的能力边界与局限所在,尽量消解技术“黑箱”,也为后续批判性地使用AI工具奠定认知基础。

第二阶是经典研发案例解析。这一阶段会选取英矽智能、石药集团等企业的AI研发项目,搭建“AI药物研发案例库”,使学生能比较直观地了解AI技术在实际研发场景中如何应用,实现理论与应用相结合。

第三阶是项目驱动实践操作。作为教学的核心环节,学生需要在云端平台独立完成“靶点预测→虚拟筛选→分子动力学模拟→成药性评价”这一整套AI辅助药物设计的流程。依托本次教改项目,把“做中学”理念落到实处,使学生从课堂一步步延伸到实践当中。

2.3筑牢价值底座：嵌入“技术—认知—伦理”融合的教育框架

为避免在AI技术应用过程中陷入“工具理性”认知陷阱,本研究将风险防控与伦理反思深度嵌入教学全过程,构建“技术—认知—伦理”三维约束体系。

在认知层面,教学中明确树立“AI是辅助工具,人是决策主体”的核心观念,通过对比“纯AI生成化合物”与“传统结构优化分子”在成药性等方面的差异,引导学生主动思考并评估AI模型的局限,避免对技术的盲目依赖。在伦理层面,配套制定《AI教学工具使用规范》,要求学生对生成式AI的输出结果进行三重审查：一是科学真实性审查,如对AI预测的蛋白质-配体结合模式,须通过PDB等数据库中的已知结构进行交叉验证；二是知识产权审查,可利用SciFinder、PatentScope等数据库对AI生成的新分子结构进行专利侵权筛查;三是数据隐私审查,确保所使用的训练数据不涉及受保护的患者信息。通过以上机制,将科研严谨性与合规性要求落实到教学细节中。

2.4革新评价体系：确立“能力导向”的多元动态考核标准

为匹配能力导向的培养目标,本研究对课程评价体系进行了根本性革新,由传统单一的知识考核转向综合素质与能力的多元动态评价,建立涵盖知识掌握(20%)、工具应用(30%)、问题解决(40%)与伦理认知(10%)的四维权重体系。

在此基础上,通过记录学生在云端教学平台的操作日志、项目进度、讨论区互动等学习行为数据,量化分析其知识掌握状况与共性难点,进而动态调整教学进度与辅导策略,形成“课程教学—数据采集—多元评价—反馈优化—教学调整”的闭环运行机制。

3 结论

本研究围绕AI时代生物医药人才培养的核心矛盾,以《创新药物研发实践及成功案例解析》课程为依托,基于生成式AI构建了涵盖“内容更新—能力培养—风险防控”的三位一体教学体系。该体系通过系统整合AI辅助靶点发现、生成式分子设计等前沿技术模块,形成逐层递进的实践训练链条,并将伦理决策训练贯穿教学全过程,缩小了传统教学内容与AI技术发展之间的代际落差,为“生物医药+AI”复合型人才培养提供了全新的可操作的教学路径。

(本文系2025年四川省研究生优质教育教学资源建设项目(SCYZJG2025037)的研究成果)。

[参考文献]

[1]姜兆玉,郗冬梅.人工智能融入生物与医药专业研究生教育:机遇、挑战与应对策略[J].科教导刊,2025,(06):5-7.

[2]赵永,王静怡,蒋欣怡,等.我国药品生产企业化学创新药研发项目阶段成功率及批准可能性多维度分析[J].中国药业,2025,34(6):1-5.

[3]宫维斌.AlphaFold结构预测的重大突破及其对蛋白质研究的影响与挑战[J].生物化学与生物物理进展,2024,51(12):3073-3083.

[4]唐谦,陈柔菜,沈哲远,等.基于人工智能的小分子生成模型在药物发现中的研究进展[J].中国药科大学学报,2024,55(3):295-305.

[5]Ren,F.,Aliper,A.,Chen,J.etal.Asmall-moleculeTNIKinhibitor targets fibrosis in preclinical and clinical models[J].Nat Biotechnol,2025,43,63-75.

[6]Xu,Z.,Ren,F.,Wang,P.et al.A generative AI-discovered TNIK inhibitor for idiopathic pulmonary fibrosis:a randomized phase 2a trial[J].Nat Med,2025,31,2602-2610.

[7]马蓁,洪兰,戚建平.人工智能赋能药学拔尖创新人才培养体系的探索[J].药学教育,2025,41(05):1-6.

作者简介：

雷剑(1981--),男,汉族,陕西富县人,博士研究生,教授,研究方向：抗病毒药物研发。

Copyright © This work is licensed under a Commons Attribution-Non Commercial 4.0 International License.