



人工智能在药学教学中的应用与思考^{*}

刘文成^①, 黄天广¹, 柯博文¹, 孙秋^{②△}

1. 四川大学华西医院麻醉科 麻醉与危重急救医学实验室 疾病分子网络前沿科学中心(成都 610041);

2. 四川大学生物治疗全国重点实验室(成都 610041)

【摘要】 虽然人工智能(AI)与药学学科全方位、多层次、宽领域的交叉融合极大地推动了药学学科的发展,但是绝大部分药学人才对AI在药学中的应用仍知之甚少。尤其是近年来,以大语言模型为代表的生成式人工智能技术快速发展,为药学知识获取、药物信息挖掘与智能化教学带来了新的范式。与此同时,“AI+药学”的复合型人才在新药开发过程中发挥着至关重要且不可替代的作用。面对这一现状,药学教育工作者应当秉持“AI赋能,教育先行”的核心理念,积极传播人工智能前沿思想,大力发展交叉学科优势,以应对传统药学教学中的难题。“AI+药学”创新人才培养的核心目标是培养具备扎实药学专业知识、良好计算与数据思维、能够在真实科研与应用场景中综合运用人工智能技术解决复杂问题的复合型药学人才。为此,本文提出以“教学重构、科研反哺、师资保障”为三大支柱的“AI+药学”创新人才培养模式,旨在系统推动药学教育从课程体系、教学实践到师资建设的全方位改革,逐步构建并持续优化符合时代需求的复合型药学人才培养新范式,从而为药学学科的整体发展与新药研发提供可持续的人才支撑与创新动力。

【关键词】 人工智能 药学教学 交叉学科 复合型人才

Application and Reflection of Artificial Intelligence in Pharmacy Education

LIU Wencheng^①, HUANG Tianguang¹, KE Bowen¹, SUN Qiu^{②△}. 1. Department of Anesthesiology, Laboratory of Anesthesia and Critical Care Medicine, Frontiers Science Center for Disease-Related Molecular Network, West China Hospital, Sichuan University, Chengdu 610041, China; 2. State Key Laboratory of Biotherapy and Cancer Center, West China Hospital, Sichuan University, Chengdu 610041, China

△ Corresponding author, E-mail: sunqiu@scu.edu.cn

This work was supported by the Industry-University Cooperative Education Project of the Ministry of Education (No. 202102144022) and Sichuan University Key Teaching Reform Project (No. GSSCU2021044).

【Abstract】 Although the comprehensive, multi-level, and wide-ranging integration of artificial intelligence (AI) with pharmaceutical science has greatly advanced the development of the discipline, the majority of pharmaceutical professionals still have limited knowledge about the applications of AI in pharmacy. Particularly in recent years, the rapid development of generative AI technologies represented by large language models has introduced new paradigms for pharmaceutical knowledge acquisition, drug information mining, and intelligent education. Simultaneously, interdisciplinary talents in "AI + Pharmacy" play a crucial and irreplaceable role in the new drug development process. Faced with this reality, pharmaceutical educators should uphold the core philosophy of "AI empowerment, education first," actively disseminate cutting-edge AI concepts, and vigorously develop interdisciplinary advantages to address challenges in traditional pharmaceutical education. The core goal of cultivating innovative talents in "AI + Pharmacy" is to nurture interdisciplinary professionals with solid pharmaceutical expertise, strong computational and data-driven thinking, and the ability to comprehensively apply AI technologies to solve complex problems in real-world research and application scenarios. To this end, his paper proposes a three-pillar "AI + Pharmacy" innovative talent cultivation model centered on "teaching restructuring, research-driven feedback, and faculty support," aiming to systematically promote comprehensive reforms in pharmaceutical education—from curriculum systems and teaching practices to faculty development. This approach seeks to gradually establish and continuously optimize a new paradigm for interdisciplinary pharmaceutical talent cultivation that aligns with contemporary demands, thereby providing

^{*} 教育部产学合作协同育人项目(No. 202102144022)和四川大学教学改革重点项目(No. GSSCU2021044)资助

△ 通信作者, E-mail: sunqiu@scu.edu.cn

出版日期: 2026-05-20

sustainable talent support and innovative momentum for the overall advancement of pharmaceutical science and new drug development.

[Key words] Artificial intelligence Pharmacy education Interdisciplinary Comprehensive talents

2021年3月12日,《中华人民共和国国民经济和社会发展第十四个五年规划和2035年远景目标纲要》(以下简称《纲要》)正式发布,聚焦量子信息、光子与微纳电子、网络通信、人工智能、生物医药、现代能源系统等重大创新领域组建一批国家实验室。这些举措形成一套政策“组合拳”,为我国科技长远发展注入了强劲动力^[1]。《纲要》指出,各学科发展要“揭榜挂帅”、要“赛马”。国家层面“出重拳,办大事”,作为基层科研人员更要“攥小拳,拼眼前”,将学科人才培养作为工作核心。生物医药与人工智能(artificial intelligence, AI)作为国家科技发展中的“卡脖子的老难题”,是我国科研人员进行核心技术攻关的关键方向。药学学科是建立在医学、化学、生命科学等领域的一种典型的交叉学科,其知识体系由多门基础学科相互渗透彼此融合而构成,技术方法与理论知识更新速度十分迅速。药学教学作为药学人才在高等教育阶段培养的主要方式,是药学人才接受药学专业基础知识教育的关键阶段。当前药学教育的现状是,许多医药院校沿用传统的药学教学模式,在教学过程中贯穿以化学学科为主,医学学科为辅的教育模式,将基础学科作为药学教学的核心导向。

当今时代,科技发展日新月异, AI作为前沿领域,其进展尤为迅猛。对药学学科而言,基础研究是根基,交叉融合则是必然趋势。AI与药学的融合已历经多年,在药物发现与设计、药效预测、模型构建及药学数据库建设等方面发挥着关键作用^[2]。学科发展离不开人才培养,只有紧跟前沿,才能把握方向、赢得主动。然而,当前药学教育所培养的人才往往对学科前沿了解不足。面对真实科研与应用场景,许多药学专业学生视AI为遥不可及的技术,很少主动运用其解决实际问题。这一现状主要源于教学中缺乏系统引导,课程内容更新滞后,导致学生对“AI+药学”的交叉融合缺乏清晰认知。

近年来, AI for Science(AI4S)尤其是大语言模型与生成式人工智能的突破,正深刻改变药学教学与研究的形态。基于Transformer架构的模型如GPT系列、BioBERT、PubMedGPT等^[3-6],不仅具备出色的自然语言交互能力,经领域微调后还能完成药物结构解析、相互作用预测、试验报告辅助撰写等专业任务^[7-12]。这些模型依托海量药学数据训练,已具备一定的领域推理能力,为药学教育提供了智能化的教学支持与沉浸式学习环境。在多元教

学场景中,大模型可扮演“智能导师”,通过自然语言交互答疑、生成个性化学习材料、模拟科研对话乃至辅助设计虚拟实验。例如,学生借助对话式AI工具可即时获取药物代谢机制、不良反应或合成路径的图文解析,并能关联最新文献与案例,显著提升学习的互动性与时效性^[13-15]。

AI为药学教育开辟了新的应用场景与实施路径,其优势正逐步显现。如何依托智能化手段设计个性化课程,从而充分激发学生潜能,成为药学教育者必须面对的关键议题。面对技术迭代与学科发展的双重态势,药学教学应主动应变、加快改革,以更好地为国家培养具备交叉学科视野与创新能力的高层次人才。

基于上述背景,本文旨在系统梳理人工智能与药学教学融合的发展现状与应用场景,分析传统药学教学面临的困境与改革需求,进而提出“AI+药学”创新人才培养的核心理念、目标模型与实施路径,重点从教学重构、科研反哺、师资保障三个方面展开论述,以期药学教育工作者提供理论与实践参考,推动复合型药学人才培养体系的构建与优化。

1 人工智能与药学教学的新融合

20世纪50年代,计算机科学之父阿兰·图灵的论文《计算机器与智能》启蒙式地开启了人工智能研究^[16]。直到20世纪90年代,药学与AI技术才碰撞出星星火花,人们开始尝试用AI技术解决药学发展中的部分问题。21世纪初,随着计算机技术在硬件上的创新与突破,不再受算力限制的AI技术突飞猛进,与此同时AI与药学的融合发展进程也顺利步入快车道。2010年以来,药学学科随着AI技术的进步在多个方面取得飞跃式的发展, AI与药学学科的全方位、多层次、宽领域的交叉融合被视为AI技术促进人类科技发展的模范领域。AI在教育信息化发展中同样承担了十分关键的角色,目前的教育正朝着智能化、个性化、精准化的方向发展。对于药学教学而言,在AI的多角度渗透下,教学内容与教学场景将会得到进一步的丰富与优化。在具体的应用方向上, AI技术将展示其自身的巨大价值与优势。

1.1 人工智能与药学的交叉发展

AI技术诞生之前,就像门捷列夫梦到元素周期表一样,“无中生有”地设计药物分子是很困难的事情,而AI技术将这种“天马行空”的想法变成了现实。本研究团队基

于Web of Science数据库(2020–2025年)检索数据,利用CiteSpace软件进行文献计量分析后,绘制的AI与药物研究热点图附图1(详见网络资源附件),反映了AI在药学领域的研究热点分布与交叉融合态势,涵盖药物发现、靶点预测、分子设计等核心方向。通过对近年来相关文献的系统梳理,我们发现AI在药学领域的应用已贯穿药物研发的全链条,主要体现在以下几个方向:在药物化学研究方向,AI可以帮助药物化学家寻找具有较高成药性的新化学实体,分子生成技术完全革新了从头药物设计领域,将基于特定规则的策略与根据化学专利文献中合成路线训练的机器学习模型相结合,这种独特的组合能够在化合物骨架跃迁与正向合成可行性之间保持平衡。经过大量数据训练得到的算法模型往往能在最短的时间内找到稳定、快捷、高效的合成“捷径”^[17-20]。在化学生物学方向,尤其是计算化学,生物信息学等新兴学科快速发展过程中AI技术更是大展拳脚,在相关的物理化学模拟模型或数学统计模型中都具有十分广泛的应用,极大地促进了学科发展。在药理学研究领域,AI技术也在包括药物-靶点相互作用(drug-target interaction, DTI)、药物-药物相互作用(drug-drug interaction, DDI)等药学科学家高度关注的领域展现出了得天独厚的优势^[21-23]。同时,在药物分析研究领域,AI技术在为先进分析仪器产生的数据提供有效分析方法的基础上,不仅促进了经典化学计量学的发展,而且催生了数据驱动的深度学习与光谱分析相结合的化学计量学研究新热点。深度神经网络可以从原始光谱中学习关键模式,多个处理层的组合提高了拟合和特征提取能力,使其适用于各种分析任务。同时,AI算法自身的飞速发展也将在未来药物设计和发现的应用过程中提供有价值的指导。AI技术已经帮助药学工作者解决了研究领域内的诸多棘手问题,所以我们应积极尝试将AI技术带入到药学教学的过程之中,因地制宜,因材施教,解决传统药学教学难题,培养复合型药学专业人才,促进药学学科更好更快地发展。

近年来,随着自然语言处理技术的突破性进展,大语言模型在药学领域的应用逐渐成为新的研究热点。以ChatGPT、BioBERT、SciBERT等为代表的大型预训练模型,已在药学文献挖掘、药物相互作用语义分析、临床试验报告自动撰写等方面展现出强大能力^[24-26]。如,通过训练面向药物化学与药理学领域的专业大模型,研究人员能快速从海量文献中提取药物靶点关系、副作用机制、合成路径等关键信息,极大提升了科研信息处理效率。此外,基于大语言模型的问答系统与智能检索工具,正逐步被引入药学教学中,帮助学生更高效地理解复杂药理

机制、药物代谢路径等内容,实现“语义化学习”^[27-29]。

1.2 人工智能解决传统药学教学难题

1.2.1 教学场景局限, 缺少思考实践

目前药学的教学场景一般局限于教室内,除了一些常规的实验课外,药学专业学生对理论性的知识缺少实际的认识。这对于一门自然科学类的实证类学科教学来说,是不妥的。对药学人才的培养与考核不应再仅仅停留在试卷或是实验报告中,一张试卷很很难表现出学生对学科的思考,而实验报告也不是对实验步骤的复述,而是学生自身对实验的分析与思考。社会在不断发展,以往的药学教学方法局限于粉笔黑板或电子白板,对复杂系统的呈现形式较为单一,缺乏形象且深刻的教学方法。随着教学技术的不断发展,灵活应用全媒体技术展现AI与药学学科融合是药学教学中可尝试的新路子,从而更好地在课堂中安排“非教材时间”,例如,利用虚拟现实(VR)技术模拟药物分子与靶点的动态结合过程,或利用交互式可视化工具展示AI模型预测药物吸收、分布、代谢、排泄、毒性(ADMET)的结果^[30]。

无论是在本科教育还是研究生教育阶段,AI与药学教学融合发展的关键主要在于为学生构建全新的药理学学习理念与模式。以AI作为出发点,引导学生了解药理学学科发展的最新动态,深入浅出,融会贯通。现代药学教育不是绝对的应试教育,思考与实践才是药学人才考核的关键。在药学本科教育中提倡完成AI“泛教学”,药学教师应以兴趣为导向,将AI的内容灵活穿插于多个药理学学科板块之中,鼓励学生完成自我驱动学习,全方位培养学生的创新素质。在药学研究生教育中,将更注重AI“精教学”,设立相关的人工智能药学专业。除了安排基础的算法课程外,应以软件技术作为核心教学方向,以实践应用解决创新药物研发的核心问题为关键要务,培养拓展“AI+药学”新业态的高层次、复合型人才。现如今,AI应用于药学教学的实际场景十分广泛,以四川大学药学专业为例,在研究生课程《药物设计与先导化合物优化》中,不仅系统安排了人工智能药物设计(AIDD)的理论教学,还要求学生以DrugFlow平台为载体,全流程完成从靶点筛选到分子生成的药物设计任务。DrugFlow是一款国内自研的集成分子对接、成药性预测、分子生成等模块的一站式AI药物发现平台,采用零代码可视化操作,便于药学专业学生快速上手。该平台已在多所高校的药学教学中作为实践工具使用,能够有效支撑AIDD理论教学与全流程模拟操作的深度融合,通过真实场景下的平台化操作强化学生对AI算法的理解与应用能力。AI使我们的学习与科研过程变得更快捷高效,人脑与AI的思维碰撞将

在很大程度上发挥药学人才在科研过程中的主观能动性,如此创新将为药学事业发展提供澎湃原动力。

1.2.2 学科内容彼此分离, 缺乏系统整合

目前药学学科中各个二级学科专业化程度越来越高,二级学科自身体系日趋完善,但往往会忽略对这些二级学科之间知识内容整合与知识体系构建。药学学科中二级学科之间具有密不可分的关系,药物研发中的一系列过程不外乎是药学二级学科之间的无缝衔接。AI与药学的发展过程就充分展现了药学二级学科之间的交叉融合,正是在这些多场景、多任务的复杂工作中,才得以实现AI的真正价值。AI在多个药学二级学科中交叉发展,同时完成了药学二级学科的串联与整合,这种串联将深刻体现在药学科研的场景之中。

DTI预测对了解药物分子功效、用途和选择性至关重要。图1展示了基于AI预测的DTI异质网络,其中节点代表药物或靶点,边表示多种相互作用关系。AI可通过构建此类网络预测新型的DTI、DDI以及靶点-靶点(蛋白-蛋白)相互作用,且这些新关系均能够通过生物学实验加以验证。在具体方法上,基于初级蛋白质序列和小分子结构特征开发的AI工具可预测一系列蛋白质-配体相互作用,其中具有较强亲和力的相互作用为新药研发提供了更多可能^[21];同时,这类预测还可用于老药新用,显著降低研发支出^[31]。在DTI预测中,从始至终贯穿了药物化学、化学生物学、药理学等多个药学学科单元。遇到如此复杂的药学科研场景时,需要具有药学与计算机学科背景的高素质人才全方位地交流,共同完成课题推进。总之,以AI作为完成药学学科整合的桥梁,建立起药学学科枢纽,推动药学教学的新一轮升级改革,这将为整体提升药学学科建设能力与水平做出突出贡献。

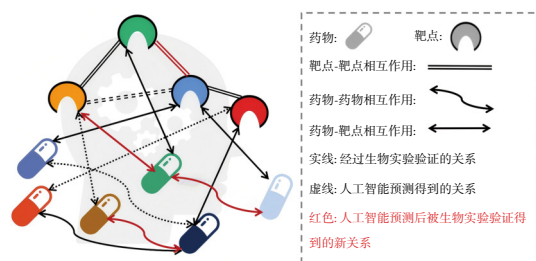


图1 人工智能预测得到的药物-靶点相互作用异质网络

2 “AI+药学”创新人才培养的核心理念、目标与培养模式构想

2.1 核心理念与目标: 发展交叉学科优势, 培养复合型药学人才

交叉学科将始终是世界科技发展的“排头军”,这是

交叉学科自身的属性所决定的。2018年,教育部、财政部和发展改革委联合发布了《关于高等学校加快“双一流”建设指导意见》。《意见》明确指出,“双一流”高校要打破传统学科之间的壁垒,在前沿和交叉学科领域培植新的学科生长点。从某种程度而言,交叉学科发展决定了一个高校未来的发展方向^[32]。药学学科作为典型的交叉学科,自始至终地与多学科保持了协同发展的步调,其他学科的最新发展都时刻影响着药学学科的发展。AI时代背景下,交叉学科已成为科技创新与高层次人才培养的重要策源地。“AI赋能,教育先行”不仅是技术发展的客观要求,也是药学教育主动适应学科变革的必然选择。药学学科本身具有高度交叉性,其发展始终与化学、生命科学、医学及信息科学保持紧密联系。随着人工智能在药物发现、药效预测和药学数据分析等领域的广泛应用,药学教育亟需在理念层面完成从“知识传授”向“能力塑造”的转变。

培养高质量的药学复合型人才是药学教学的最终目标。除了对学生要求具有一定的多学科的知识储备,更多地希望将这些知识转化为个人综合素质的提升。对于药学人才来说,学以致用是关键。在信息快速流通的今天,药学人才需要在药学科研或其他应用场景中,不断发现问题,发挥创新精神而自主探索解决问题的途径,提高对学科的综合认识。“AI+药学”创新人才培养,核心目标在于培养具备扎实药学专业基础、良好计算与数据思维、能够在真实科研与应用场景中综合运用AI技术解决复合问题的复合型药学人才。通过在药学教学中有机融入AI思想、方法与工具,引导学生理解学科前沿、发现科研问题并开展自主探索,使其逐步形成跨学科视角和创新意识,从而更好地适应现代药学研究和产业发展的实际需求。

2.2 “AI+药学”创新人才培养的总体模式构想

2.2.1 AI深度融入, 重构药学教学全流程

教学重构是模式实施的基础层,其核心是利用AI技术打破传统教学的时间、空间与形式限制,实现从“千人一面”到“一人一策”的范式转变。首先建立个性化学习与智能管理,依托AI学习管理系统,实时采集与分析学生的学习行为、知识掌握程度与兴趣偏好数据,构建动态学习者画像。系统据此智能推送差异化的学习资源、定制化的学习路径与挑战性任务,实现真正意义上的自适应学习,最大化激发每位学生的潜能。第二,利用虚拟仿真与安全实训,针对药物研发周期长、成本高、部分实验危险性大或伦理限制多的痛点,构建覆盖“药物设计、化学合成、药理评价、制剂生产、临床试验”等一系列的全产业虚拟仿真教学平台。学生可在高度仿真的数字环境中进行分子对

接、合成路线探索、动物实验模拟等操作,在零风险、低成本的前提下获得沉浸式实践体验,有效衔接理论与产业实践。第三,进行智能评估与过程反馈,变革以期末考试为主的单一评价方式,引入基于AI的过程性、发展性评价体系。通过分析学生在虚拟实验、项目报告、算法设计和课堂互动中产生的多模态数据, AI系统可对学生的批判性思维、创新解决问题能力、科研素养及协作精神进行量化评估,并提供即时、精准的反馈与改进建议,推动考核重心从“知识复现”向“能力生成”转移。

2.2.2 科研反哺, 打造“研-学-创”一体化平台

科研反哺是模式发展的动力源,旨在破除教学与科研的壁垒,将最前沿的AI制药工具、真实科研问题与产业需求无缝融入教学过程,形成“以研促学、以学助研、研学创融合”的良性循环。

为了系统展示当前AI辅助药物研发领域的主流工具及其特点,帮助师生在教学与科研实践中快速了解和应用,表1列举了具有代表性的核心工具,涵盖其在药物研发不同阶段的应用场景、主要功能及优势。

表 1 当前AI辅助药物研发领域的核心工具及其特点

工具名称	应用场景与功能	优势与特点
AlphaFold ^[33]	靶点发现与蛋白质结构预测	高精度、开源、支持多靶点,蛋白质三维结构预测标杆
DeepPurpose ^[22]	DTI预测,基于深度学习建模	编码方式与模型架构灵活,一站式DTI建模库
DrugCLIP ^[23]	全基因组规模高通量虚拟筛选,通过深度对比学习匹配蛋白口袋与小分子	筛选速度较传统方法提升百万倍,单日可完成10万亿次匹配,开源免费
REINVENT ^[34]	分子生成与优化,生成具有理想性质的新分子结构	支持强化学习与定向优化,分子设计可定制性强
PocketXMol ^[35]	小分子与多肽的统一生成、对接、构象预测等多种分子设计任务	全原子的多任务扩散生成模型,无需微调适配所有任务
MolFormer ^[36]	分子性质预测与毒性筛选,基于Transformer的大规模化学语言模型	自监督预训练,捕获分子结构与性质深层表征,适用于超大规模分子库
ADMETlab 2.0 ^[30]	药物代谢、毒性及ADMET性质全面预测,集成多任务图注意力框架	在线平台,免费开放;覆盖88个终点(理化性质、ADMET等),预测准确性高
Chemma ^[37]	合成路线预测,包括逆合成分析与反应产物预测	基于大语言模型加速有机合成,在逆合成、产率预测等任务上超越已知最优结果
PharmBERT ^[38]	药物信息提取与文献挖掘,如药物-靶点关系抽取、临床试验语义分析	专为药学领域微调的大语言模型,语义理解精准

DTI: 药物-靶点相互作用; ADMET: 药物吸收、分布、代谢、排泄、毒性

以上工具涵盖了从靶点发现到临床前研究的多个关键环节,为药学教学提供了丰富的实践素材。具体而言,应在专业课程中系统引入当前AI药物研发的核心工具与场景作为教学载体。专业课程应系统引入上述表格中的核心工具作为教学载体。例如,利用AlphaFold^[33]讲解靶点发现与蛋白质结构预测,借助 DeepPurpose^[22]或 DrugCLIP^[23]演示药物-靶点相互作用预测与高通量虚拟筛选,通过 REINVENT^[34]或 PocketXMol^[35]展示深度学习驱动分子生成与优化。通过这些工具,向学生阐明AI如何将极端复杂的药物设计问题转化为技术可行、复杂度可控的计算任务,以及如何通过数据挖掘建立药物结构-活性关系,乃至实现“老药新用”。同时,可设立基于真实科研数据的“微课题”和“挑战赛”,引导学生利用上述工具解决具体问题,使学生在实践中理解从数据、模型、训练到预测的完整AI逻辑。此外,还应引导学生使用PharmBERT^[38]等专业大语言模型进行药物重定位分析、文献智能综述、实验辅助设计等任务,培养其运用“提示工程”解决药学问题的能力。最后,与制药企业、研发机构合作建立联合实验

室,将企业真实项目转化为教学案例,让学生在校期间体验从靶点发现到先导化合物优化的模拟流程,在解决真实问题的过程中培育创新思维与协作能力。

2.2.3 跨学科课程体系与“AI+药学”师资队伍建设

课程与师资是模式可持续发展的坚实支撑。二者必须协同改革,共同构建能够承载“AI+药学”知识体系与教学要求的新基建。首先构建“渗透式”跨学科课程矩阵,系统培育AI思维与技能,对现有药学课程体系进行系统性重构,旨在早期激发学生兴趣,并系统培养其计算思维、数据思维及基础实践能力。通过基础课系列(思维启蒙与技能筑基),面向全体药学学生开设《人工智能概论》《药学数据科学基础》等通识课程,早期引导学生正确认识AI与药学的融合前景,破除对技术的陌生感与距离感。同时,开设《Python在药学中的应用》等必修课程,旨在使学生掌握关键的“第一步”——基础编程能力。教学重点并非培养算法专家,而是使学生具备利用编程语言调用AI工具、处理药学数据的基本能力,感受数据之美与编程之美,为后续应用奠定基础。通过融合课系列(知

识渗透与能力融合),在传统药学专业核心课程,如药物化学、药理学、药剂学、药物分析中,全面增设“AI赋能”模块。例如,在药物化学中融入AI辅助分子设计与逆合成分析,在药理学中引入基于深度学习的DTI预测,在药物分析中讲解AI用于光谱解析与质谱数据分析的最新进展,向学生阐明AI在降低问题复杂度、建立多源数据关联、挖掘潜在价值等方面的核心优势,实现AI思维与药学专业知识的有机渗透。通过前沿课系列(创新牵引与实战拓展),为学有余力或研究方向明确的学生开设《AI驱动药物发现前沿》《生物医药大模型与应用》等选修课或研讨班。内容应涵盖AI制药全流程,并纳入计算机辅助药物设计(computer aided drug design, CADD)与人工智能药物设计(artificial intelligence in drug discovery, AIDD)等知识模块,同时关注网络安全、数据隐私与AI伦理,对接学术与产业最前沿。

在师资队伍建设方面,实施师资队伍“引、育、联”战略,保障课程落地。“引”即设立交叉学科人才引进绿色通道,大力吸引兼具药学与人工智能、计算科学、生物信息学背景的复合型人才,或引进产业界资深AI制药专家作为兼职教授、产业导师,快速补充核心师资。“育”即建立系统化的校内教师发展体系。通过举办“AI+药学”教学研讨会、开设教师编程与AI工具应用工作坊、支持教师赴顶尖机构访学进修等方式,全面提升现有药学教师的数字化素养,AI工具使用能力及跨学科教学水平,实现内部转型。“联”即深化协同机制,在学院层面,建立药学院与计算机学院、人工智能学院的长效合作机制,通过师资共享、联合授课、合作研究等方式,促进知识融合。在校企层面,与制药企业、AI医药科技公司共建“双师型”教学团队,邀请企业工程师参与实践课程教学、毕业设计指导及教材编写,确保教学内容与行业技术发展同步。

通过上述“渗透式”课程分级矩阵与“引、育、联”并举的师资建设策略,最终目标是打造一支既能扎实传授药学核心知识,又能熟练运用AI工具、有效培养学生计算思维与创新能力的“双师型”教学团队,从而为“AI+药学”创新人才培养模式的落地、迭代与可持续发展提供根本保障。

3 机遇与挑战

世界范围内的许多发达国家已将AI作为推动未来经济发展、社会前进的主要动力。在社会趋于智能化的今天,AI与我们的生活息息相关。面对新一轮的科技革命和产业变革,这不仅将改变未来的科研范式,更将改变全

球的科研格局。目前,我们与国外的“AI+药学”融合发展还有一定的距离,复合型人才培养就是减少差距甚至弯道超车的最好办法,新时代下“AI+药学”的融合发展必将寄希望于也必须依赖于新时代的药学人。作为药学工作者,我们应积极引导药学人才树立远大理想,立志为解决国家关键核心技术的“卡脖子”难题作出贡献。AI时代最宝贵的不是数据,而是数据带来的技术创新。过去的创新来源于实验室,现在的创新来源于数据,来源于场景。AI已成为人类有史以来最具革命性的技术之一,AI与药学的融合发展是机遇更是挑战。与此同时,多模态大模型与智能体技术的快速发展,为“AI+药学”教育带来了显著的机遇,不仅推动了教育过程的个性化与智能化,也为跨学科科研协作与药物研发提供了新的动力。国内部分高校在国内首设人工智能药学专业学位研究生培养方向,已在交叉课程体系方面展开积极探索,通过开设《药物信息学》《生物大分子模拟》等前沿课程,为药学高层次人才的人工智能能力培养奠定了基础。

然而,该模式的落地仍面临多重挑战。教师普遍面临接受度与专业转型的压力,多数药学教师缺乏AI相关背景,系统化的培训与激励机制尚不完善,影响了其在教学融合中的积极性。跨部门协作机制亦不顺畅,药学院、计算机学院、人工智能研究院及附属医院等单位之间缺乏有效的统筹管理机制,在课程共建、师资共享等方面仍存在障碍。此外,虚拟仿真等新型教学模式尚未建立长期效果评估体系,难以科学追踪其对实践能力与创新思维的实际影响。生成式人工智能在药学知识生成中的“幻觉”现象也带来可靠性质疑,尤其在药物机制解析与文献辅助等场景中需加强质量把控。同时,药学教育中涉及的患者数据与试验信息对隐私保护和AI伦理提出了更高要求,相关伦理教育及数据治理能力亟待提升。

展望未来,教育工作者应主动顺应智能化趋势,将“AI+药学”理念贯穿人才培养全过程,通过持续优化课程体系、创新教学方法、加强师资建设,系统培养具有跨学科视野与创新能力的复合型药学人才,为我国药学科发展及新药研发提供坚实支撑。

* * *

作者贡献声明 刘文成负责论文构思、正式分析、调查研究、初稿写作和审读与编辑写作,黄天广负责论文构思、数据整理和验证,柯博文负责论文构思、经费获取、项目管理和审读与编辑写作,孙秋负责论文构思、监督指导和审读与编辑写作。所有作者已经同意将文章提交给本刊,且对将要发表版本进行最终定稿,并同意对工作的所有方面负责。

Author Contribution LIU Wencheng is responsible for conceptualization, formal analysis, investigation, writing--original draft, and writing--review and editing. HUANG Tianguang is responsible for

conceptualization, data curation, and validation. KE Bowen is responsible for conceptualization, funding acquisition, project administration, and writing--review and editing. SUN Qiu is responsible for conceptualization, supervision, and writing--review and editing. All authors consented to the submission of the article to the Journal. All authors approved the final version to be published and agreed to take responsibility for all aspects of the work.

利益冲突 本文作者柯博文是本刊编委会青年编委。该文在编辑评审过程中所有流程严格按照期刊政策进行,且未经其本人经手处理。除此之外,所有作者均声明不存在利益冲突。

Declaration of Conflicting Interests KE Bowen is a member of the Junior Editorial Board of the journal. All processes involved in the editing and reviewing of this article were carried out in strict compliance with the journal's policies and there was no inappropriate personal involvement by the authors. Other than this, all authors declare no competing interests.

参 考 文 献

- [1] 黄奇帆. 伟大复兴的关键阶段——学习《中华人民共和国国民经济和社会发展规划第十四个五年规划和2035年远景目标纲要》的认识和体会. *人民论坛*, 2021(15): 6-10. doi: 10.3969/j.issn.1004-3381.2021.15.001.
- [2] 凌曦, 赵志刚, 李新刚. 人工智能技术在药学领域的应用——基于Web of Science的文献可视化分析. *中国药房*, 2019, 30(4): 433-438. doi: 10.6039/j.issn.1001-0408.2019.04.01.
LING X, ZHAO Z G, LI X G. Application of artificial intelligence technology in pharmacy field: visual analysis of literature based on Web of Science. *China Pharm*, 2019, 30(4): 433-438. doi: 10.6039/j.issn.1001-0408.2019.04.01.
- [3] LEE P, BUBECK S, PETRO J. Benefits, limits, and risks of GPT-4 as an AI chatbot for medicine. *N Engl J Med*, 2023, 388(13): 1233-1239. doi: 10.1056/NEJMSr2214184.
- [4] LEE J, YOON W, KIM S, *et al.* BioBERT: a pre-trained biomedical language representation model for biomedical text mining. *Bioinformatics*, 2020, 36(4): 1234-1240. doi: 10.1093/bioinformatics/btaz682.
- [5] IPATHI S, GABRIEL K, TRIPATHI P K, *et al.* Large language models reshaping molecular biology and drug development. *Chem Biol Drug Des*, 2024, 103(6): e14231. doi: 10.1111/cbdd.14568.
- [6] SCHILLING-WILHELM M, RÍOS-GARCÍA M, SHABIH S, *et al.* From text to insight: large language models for chemical data extraction. *Chem Soc Rev*, 2025, 54(3): 1125-1150. doi: 10.1039/D4CS00913D.
- [7] SRINIVASAN A, BERKOWITZ J, FRIEDRICH N A, *et al.* Large language model analysis of reporting quality of randomized clinical trial articles: a systematic review. *JAMA Netw Open*, 2025, 8(8): e2529418. doi: 10.1001/jamanetworkopen.2025.29418.
- [8] 曹铭晨, 曲海军, 李文静, 等. 全球临床药学人工智能应用现状、中国路径及变革挑战. *英国医学杂志中文版*, 2025(6): 488-494. doi: 10.3760/cma.j.cn101909-20250831-00155.
CAO M C, QU H J, LI W J, *et al.* Current status of AI applications in clinical pharmacy in the world, China's pathway, and transformational challenges. *Digit Med Health*, 2025(6): 488-494. doi: 10.3760/cma.j.cn101909-20250831-00155.
- [9] 丁伯祥, 胡健, 王继芳. 人工智能在药物研发中的应用进展. *山东化工*, 2019, 48(22): 70-73. doi: 10.19319/j.cnki.issn.1008-021x.2019.22.025.
DING B X, HU J, WANG J F. Progress in the application of artificial intelligence in drug development. *Shandong Chem Ind*, 2019, 48(22): 70-73. doi: 10.19319/j.cnki.issn.1008-021x.2019.22.025.
- [10] 唐谦, 陈柔柔, 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. *中国药科大学学报*, 2024, 55(3): 295-305. doi: 10.11665/j.issn.1000-5048.2024031501.
TANG Q, CHEN R F, SHEN Z Y, *et al.* Research progress of artificial intelligence-based small molecule generation models in drug discovery. *J China Pharm Univ*, 2024, 55(3): 295-305. doi: 10.11665/j.issn.1000-5048.2024031501.
- [11] 杜哈, 吴羿霏, 杜新. 人工智能在新药研发中的应用进展. *药学进展*, 2022, 46(11): 875-882. doi: 10.20053/j.issn1001-5094.2022.11.009.
DU H, WU Y F, DU X. Advances in application of artificial intelligence in new drug research and development. *Prog Pharm Sci*, 2022, 46(11): 875-882. doi: 10.20053/j.issn1001-5094.2022.11.009.
- [12] 李风雷, 胡乔宇, 熊若凡, 等. 基于深度学习的药物设计方法. *自然杂志*, 2021, 43(5): 383-390. doi: 10.3969/j.issn.0253-9608.2021.05.009.
LI F L, HU Q Y, XIONG R F, *et al.* Computational drug design methods by deep learning algorithms. *Chin J Nat*, 2021, 43(5): 383-390. doi: 10.3969/j.issn.0253-9608.2021.05.009.
- [13] 祝智庭, 魏非. 教育信息化2.0: 智能教育启程, 智慧教育领航. *电化教育研究*, 2018, 39(9): 5-16. doi: 10.13811/j.cnki.eer.2018.09.001.
ZHU Z T, WEI F. Educational informatization 2.0: starting on a journey of intelligence education guided by smart education. *E-Educ Res*, 2018, 39(9): 5-16. doi: 10.13811/j.cnki.eer.2018.09.001.
- [14] 杨龙华, 单丽红, 张恩, 等. 人工智能在计算机辅助药物设计模块教学中的应用与思考. *药学教育*, 2025, 41(5): 33-36. doi: 10.12147/j.cnki.1671-5216.2025.05.008.
YANG L H, SHAN L H, ZHANG E, *et al.* Application and reflection of artificial intelligence in the teaching of computer-aided drug design modules. *Pharm Educ*, 2025, 41(5): 33-36. doi: 10.12147/j.cnki.1671-5216.2025.05.008.
- [15] 卢宇, 余京蕾, 陈鹏鹤, 等. 生成式人工智能的教育应用与展望——以ChatGPT系统为例. *中国远程教育*, 2023, 43(4): 24-31. doi: 10.13541/j.cnki.chinade.20230301.001.
LU Y, YU J L, CHEN P H, *et al.* Educational application and prospect of generative artificial intelligence: taking ChatGPT system as an example. *Chin J Distance Educ*, 2023, 43(4): 24-31. doi: 10.13541/j.cnki.chinade.20230301.001.
- [16] TURING A M. Computing machinery and intelligence. *Mind*, 1950, 59(236): 433-460. doi: 10.1093/mind/LIX.236.433.
- [17] 沙明瑞. 人工智能算法在化学反应预测中的应用. *当代化工*, 2025, 54(7): 1710-1715. doi: 10.3969/j.issn.1671-0460.2025.07.038.
SHA M R. Application of artificial intelligence algorithms in chemical reaction prediction. *Contemp Chem Ind*, 2025, 54(7): 1710-1715. doi: 10.3969/j.issn.1671-0460.2025.07.038.
- [18] 周成卓, 谢召军. 人工智能预测模型在有机化学实验教学中的应用初探. *大学化学*, 2025, 40(2): 320-331. doi: 10.12461/PKU.DXHX202405090.
ZHOU C Z, XIE Z J. Exploring the application of artificial intelligence prediction models in organic chemistry laboratory teaching: a preliminary study. *Univ Chem*, 2025, 40(2): 320-331. doi: 10.12461/PKU.DXHX202405090.
- [19] 李帅鑫, 李子昊, 孙婕, 等. 深度学习在化学分子逆向合成路线规划中的应用进展. *宁夏大学学报(自然科学版)*, 2024, 45(1): 44-50. doi: 10.3969/j.issn.0253-2328.2024.01.007.
LI S X, LI Z H, SUN J, *et al.* Recent advances in application of deep learning for the retrosynthetic planning of chemical molecules. *J Ningxia Univ (Nat Sci Ed)*, 2024, 45(1): 44-50. doi: 10.3969/j.issn.0253-2328.2024.01.007.
- [20] 许建耘. 自主合成机器人利用人工智能加速分子的化学发现. *石油炼制与化工*, 2024, 55(6): 60. doi: 10.3969/j.issn.1005-2399.2024.06.013.
- [21] 李添添, 王俊杰. 基于深度学习的“药物-靶点”亲和力和预测方法设计. *中华医学图书情报杂志*, 2022, 31(3): 34-39. doi: 10.3969/j.issn.1671-3982.2022.03.004.
LI T T, WANG J J. Drug-target affinity prediction based on deep learning. *Chin J Med Libr Inf Sci*, 2022, 31(3): 34-39. doi: 10.3969/j.issn.1671-3982.2022.03.004.
- [22] HUANG K, FU T, GLASS L M, *et al.* DeepPurpose: a deep learning library for drug-target interaction prediction. *Bioinformatics*, 2020, 36(22/23): 5545-5547. doi: 10.1093/bioinformatics/btaa1005.
- [23] JIA Y J, GAO B, TAN J X, *et al.* Deep contrastive learning enables genome-wide virtual screening. *Science*, 2026, 391(6781): eads9530. doi: 10.1126/science.ads9530.

- [24] HOUSSEIN E H, MOHAMED R E, ALI A A. Machine learning techniques for biomedical natural language processing: a comprehensive review. *IEEE Access*, 2021, 9: 140628-140653. doi: [10.1109/ACCESS.2021.3119621](https://doi.org/10.1109/ACCESS.2021.3119621).
- [25] CHEN H Y, MARTIN B, DAIMON C M, *et al.* Effective use of latent semantic indexing and computational linguistics in biological and biomedical applications. *Front Physiol*, 2013, 4: 8. doi: [10.3389/fphys.2013.00008](https://doi.org/10.3389/fphys.2013.00008).
- [26] OIKONOMOU E D, KARVELIS P, GIANNAKEAS N, *et al.* How natural language processing derived techniques are used on biological data: a systematic review. *Netw Model Anal Health Inform Bioinform*, 2024, 13(1): 23. doi: [10.1007/s13721-024-00458-1](https://doi.org/10.1007/s13721-024-00458-1).
- [27] 刘明, 吴忠明, 廖剑, 等. 大语言模型的教育应用: 原理、现状与挑战——从轻量级BERT到对话式ChatGPT. *现代教育技术*, 2023, 33(8): 19-28. doi: [10.3969/j.issn.1009-8097.2023.08.003](https://doi.org/10.3969/j.issn.1009-8097.2023.08.003).
- LIU M, WU Z M, LIAO J, *et al.* Educational applications of large language models: principles, status and challenges—from light-weighted BERT to conversational ChatGPT. *Mod Educ Technol*, 2023, 33(8): 19-28. doi: [10.3969/j.issn.1009-8097.2023.08.003](https://doi.org/10.3969/j.issn.1009-8097.2023.08.003).
- [28] 张颖慧, 刘洋, 那顺乌力吉, 等. “新工科”背景下人工智能专业建设与教学改革探索. *工业和信息化教育*, 2021(8): 27-31. doi: [10.3969/j.issn.2095-5065.2021.08.008](https://doi.org/10.3969/j.issn.2095-5065.2021.08.008).
- [29] 刘泓泽, 王耀国, 唐圣晟, 等. 医学大语言模型的应用现状与发展趋势研究. *中国数字医学*, 2024, 19(8): 1-7. doi: [10.3969/j.issn.1673-7571.2024.08.001](https://doi.org/10.3969/j.issn.1673-7571.2024.08.001).
- LIU H Z, WANG Y G, TANG S S, *et al.* Research on the current application and development trend of medical large language model. *Chin Digit Med*, 2024, 19(8): 1-7. doi: [10.3969/j.issn.1673-7571.2024.08.001](https://doi.org/10.3969/j.issn.1673-7571.2024.08.001).
- [30] XIONG G L, WU Z X, YI J C, *et al.* ADMETlab 2.0: an integrated online platform for accurate and comprehensive predictions of ADMET properties. *Nucleic Acids Res*, 2021, 49(W1): W5-W14. doi: [10.1093/nar/gkab255](https://doi.org/10.1093/nar/gkab255).
- [31] 袁菁, 侯跃芳, 韩珂蔓, 等. 基于多组学数据融合挖掘的药物重定位研究. *医学信息杂志*, 2025, 46(11): 67-73. doi: [10.3969/j.issn.1673-6036.2025.11.010](https://doi.org/10.3969/j.issn.1673-6036.2025.11.010).
- YUAN J, HOU Y F, HAN Y M, *et al.* Study on drug repositioning based on multi-omics data mining. *J Med Inform*, 2025, 46(11): 67-73. doi: [10.3969/j.issn.1673-6036.2025.11.010](https://doi.org/10.3969/j.issn.1673-6036.2025.11.010).
- [32] 教育部, 财政部, 发展改革委. 关于高等学校加快“双一流”建设的指导意见. 中华人民共和国国务院公报, 2019(1): 69-76.
- [33] JUMPER J, EVANS R, PRITZEL A, *et al.* Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. *Nature*, 2021, 596(7873): 583-589. doi: [10.1038/s41586-021-03819-2](https://doi.org/10.1038/s41586-021-03819-2).
- [34] OLIVECRONA M, BLASCHKE T, ENKVIST O, *et al.* Molecular de-novo design through deep reinforcement learning. *J Cheminform*, 2017, 9(1): 48. doi: [10.1186/s13321-017-0235-x](https://doi.org/10.1186/s13321-017-0235-x).
- [35] PENG X G, GUO R H, GUO F L, *et al.* Unified modeling of 3D molecular generation via atomic interactions with PocketXMol. *Cell*, 2026, 189(7): 1904-1922.e28. doi: [10.1016/j.cell.2026.01.003](https://doi.org/10.1016/j.cell.2026.01.003).
- [36] ROSS J, BELGODERE B, CHEN V, *et al.* Large-scale chemical language representations capture molecular structure and properties. *Nat Mach Intell*, 2022, 4(12): 1256-1264. doi: [10.1038/s42256-022-00580-7](https://doi.org/10.1038/s42256-022-00580-7).
- [37] ZHANG Y, HAN Y, CHEN S, *et al.* Large language models to accelerate organic chemistry synthesis. *Nat Mach Intell*, 2025, 7(7): 1010-1022. doi: [10.1038/s42256-025-01066-y](https://doi.org/10.1038/s42256-025-01066-y).
- [38] VALIZADEHASLANI T, SHI Y, REN P, *et al.* PharmBERT: a domain-specific BERT model for drug labels. *Brief Bioinform*, 2023, 24(4): bbad226. doi: [10.1093/bib/bbad226](https://doi.org/10.1093/bib/bbad226).

(2025-12-11收稿, 2026-04-22修回)

编辑 姜 恬



开放获取 本文使用遵循知识共享署名—非商业性使用 4.0 国际许可协议 (CC BY-NC 4.0), 详细信息请访问

<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>。

OPEN ACCESS This article is licensed for use under Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International license (CC BY-NC 4.0). For more information, visit <https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>.

© 2026 《四川大学学报(医学版)》编辑部

Editorial Office of Journal of Sichuan University (Medical Sciences)