

《计算机辅助药物设计》教学模式改革与创新

孙 娟, 黄 娟, 王亚敏, 吴元锋*

浙江科技大学生物与化学工程学院, 浙江 杭州

收稿日期: 2025年3月15日; 录用日期: 2025年4月14日; 发布日期: 2025年4月23日

摘 要

响应国家对应用型复合人才的培养需求, 研究生教育模式正逐步由单一学术导向转向学术与应用并举, 其中创新与实践能力成为人才培养的关键核心。作为药物研发的核心技术, 计算机辅助药物设计在医学和药学领域扮演着至关重要的角色。然而, 由于该领域知识体系庞大且更新迅速, 加之对学生实践能力的严格要求, 传统教学模式往往难以满足需求。针对这一问题, 本研究提出了一种创新课程设计思路, 将“药物研发体系”与“课程教学体系”有机结合, 构建了一套全新的教学体系。该课程打破了传统教学的局限, 融合数字化教学手段与综合创新能力培养模式, 通过以学生为中心的教学方式, 显著提升了学习的主动性与参与度。同时借助创新实践环节强化教学效果, 最终目标是培养具有创新思维和实践能力的复合型药学人才。

关键词

计算机辅助药物设计, 药物研发体系, 课程教学体系, 教学模式改革

Reform and Innovation in Teaching Models for the Course “Computer-Aided Drug Design”

Juan Sun, Juan Huang, Yamin Wang, Yuanfeng Wu*

School of Biological and Chemical Engineering, Zhejiang University of Science and Technology, Hangzhou
Zhejiang

Received: Mar. 15th, 2025; accepted: Apr. 14th, 2025; published: Apr. 23rd, 2025

Abstract

In response to the national demand for cultivating applied interdisciplinary talents, the graduate

*通讯作者。

文章引用: 孙娟, 黄娟, 王亚敏, 吴元锋. 《计算机辅助药物设计》教学模式改革与创新[J]. 教育进展, 2025, 15(4): 734-741. DOI: 10.12677/ae.2025.154609

education model is progressively shifting from a single academic focus to a dual emphasis on academia and application, with innovation and practical skills becoming the key core of talent development. As a pivotal technology in drug research and development, computer-aided drug design plays a vital role in the fields of medicine and pharmacy. However, due to the extensive and rapidly evolving knowledge system in this domain, along with the stringent requirements for students' practical abilities, traditional teaching models often struggle to meet these demands. To address this issue, this study proposes an innovative curriculum design approach that integrates the "drug research and development system" with the "curriculum teaching system," establishing a novel educational framework. This curriculum overcomes the limitations of traditional teaching by incorporating digital teaching methods and a comprehensive innovation capability training model. Through a student-centered teaching approach, it significantly enhances learning initiative and engagement. Additionally, by leveraging innovative practical components to strengthen teaching effectiveness, the ultimate goal is to cultivate versatile pharmaceutical talents with innovative thinking and practical abilities.

Keywords

Computer-Aided Drug Design, Drug Research and Development System, Curriculum Teaching System, Reform of Teaching Models

Copyright © 2025 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

随着基因组学和蛋白质组学的迅猛发展，大数据与精准医疗的时代已经悄然来临，微观层面的药物研究已成为药学领域不可分割的重要组成部分。作为一门深度融合理工医知识的交叉学科，计算机辅助药物设计能够从分子层面深入解析药物的作用机制[1][2]。目前，许多国际企业和机构已在药物研发过程中广泛应用计算机辅助药物设计技术，用于预测药物靶点、识别作用位点，并在早期阶段评估药物的动力学特性[3][4]。《计算机辅助药物设计》是研究生培养方案的专业教学课程。该课程理论性强，且与不同专业方向结合应用，又具有较强的实践性。课程体系的构建内容对医药及相关领域研究生的培养成效具有决定性影响，是研究生学科建设及其相关学科生态体系发展的重要支柱。所以，对于相关专业研究生的教育，必须顺应医药行业的发展趋势，围绕人才培养教育的特点，构建创新应用型人才的培养目标。

2. 《计算机辅助药物设计》课程教学模式改革意义

近年来，在国家大力倡导培养应用型复合人才的大背景下，研究生培养模式逐渐从学术型向应用与学术型并重转变，学生的创新和实践能力成为研究生培养工作的核心工作之一。计算机辅助药物分子设计的理论与实践研究已成为现代药物研发中不可或缺的关键环节，同时也是医学、药学及生物学等领域从业者必须掌握的核心技能之一[5][6]。该课程内容涵盖广泛，知识更新迅速，且对学生实践能力提出了较高要求[7][8]。为培养具备综合创新能力的药学人才，本研究以“药物研发体系”与“课程教学体系”深度融合为核心理念，构建了一套全新的计算机辅助药物设计课程体系。该课程整合了传统教学、数字化教学及创新培养模式，旨在突破时间、空间和硬件条件的限制，突出学生的主体地位，激发其学习主动性与积极性，并通过综合创新实践提升教学成效。具体研究内容如下：

1. 重塑教学目标，加强思维能力培养，融入思政教育目标，实现知识传授、能力培养和情感价值塑

造的有机融合。

- 2. 重构教学结构，基于创新应用思维，融入实践案例和前沿技术，实现教学内容的优化。
- 3. 创新教学方式，打造“药物研发体系”，并将其与计算机辅助药物设计课程的“课程教学体系”深度融合，同时依托现代化的网络课程教学模式，助力创新型人才的培养。
- 4. 创新实践方式，完善课程评价及持续改进方法。

3. 《计算机辅助药物设计》课程教学模式改革研究思路

为培养具备综合创新能力的药学人才，本课程以“药物研发体系”与“课程教学体系”深度融合为核心理念，秉持立德树人、以学生发展为中心、成果导向和持续改进的教育原则，旨在夯实研究生药物设计的理论基础，完善其计算机辅助药物设计的应用知识，并强化实践应用能力等专业技能，最终使学生具备一定的技术研发与创新能力。

课程教学创新的基本思路是从当前教学中存在的实际问题出发，整合传统教学模式、数字化教学模式以及综合创新培养模式，突破时间、空间和硬件条件的限制，突出学生的主体地位，激发其学习主动性与积极性，并通过综合创新实践提升教学效果。具体研究思路如下(图 1)：

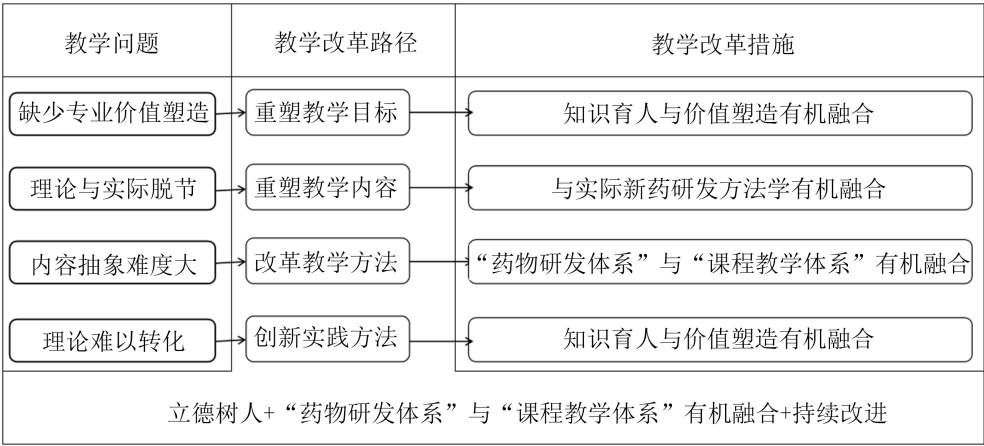


Figure 1. Research approach to the reform of computer-aided drug design course
图 1. 计算机辅助药物设计课程改革研究思路

4. 《计算机辅助药物设计》课程教学模式改革研究方法

4.1. 重塑教学目标

原教学目标侧重知识传授和能力培养，缺少对工匠精神、产业生产与科研实际等方面的专业价值塑造。在此基础上，课程重塑教学目标，加强思维能力培养，同时融入思政教育目标，推动知识传授、能力培养与价值塑造的深度融合，切实贯彻立德树人的根本目标。借助新药研发平台的成果与各类资源，搭建“药物研发体系”，并与计算机辅助药物设计课程的“课程教学体系”深度融合。同时，利用先进的AI大数据网络教学模式，推动创新型人才培养，促进学习资源的共享，全方位提升学生的综合能力。

- (1) 知识目标。掌握药物设计的基本理论和方法，熟悉药物研发的内容及过程。
- (2) 能力目标。具备新药研究和开发的能力，培养创新思维和独立性，成为新药研究与开发的开拓型人才。
- (3) 素质目标。将药物设计知识与社会和个人生活紧密联系，提高科学素养和科学辨别能力；树立绿

色低碳生产理念, 增强专业使命感和社会责任感。

4.2. 重构教学内容

4.2.1. 基于创新应用思维重构教学内容, 与实际新药研发方法学有机融合

课程构建的宗旨在于紧密结合教学内容与新药研发的实际方法, 紧扣计算机辅助药物设计在新药研发流程中的具体应用需求展开教学。新药研发依据药物作用靶点是否明确, 可划分为两大路径: 一方面, 当靶点清晰时, 可采用直接药物设计策略, 即通过探究受体与配体的相互作用, 设计或筛选出具有潜在活性的化合物; 另一方面, 若靶点尚未明确, 则需借助间接药物设计方法, 通过对已知活性化合物的构效关系进行分析, 进而设计或筛选出潜在活性化合物。基于此, 教学内容被分为两个主要板块: 一方面, 基于受体的药物设计, 包括同源建模、分子对接、动力学模拟和从头设计等方法; 另一方面, 基于配体的药物设计, 涉及定量构效关系研究、药效团模型搭建以及 ADMET 性质预测等知识模块。详见图 2。

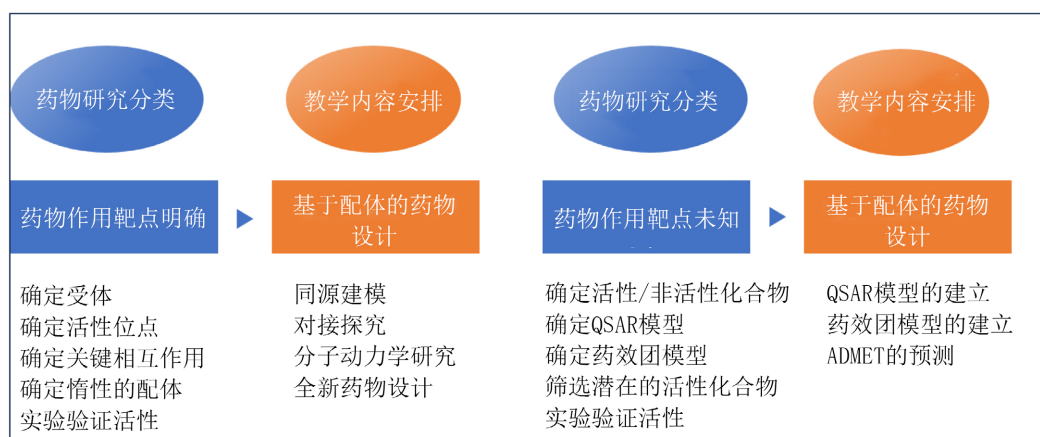


Figure 2. Main teaching content of the computer-aided drug design course

图 2. 计算机辅助药物设计课程主要教学内容

4.2.2. 有机结合思政内容, 实现专业价值引领和塑造

为构建全员、全程、全课程育人格局, 实现课程思政与思政课程同向同行, 协同育人, 本课程充分利用课堂教学主渠道, 将知识学习与价值塑造有机融合, 深入挖掘课程内容蕴含的思政元素, 把握行业发展方向和国家政策导向, 把“绿色制造”“碳达峰”“碳中和”“可持续发展”等思想渗透在课程教学中, 将行业前沿动态和时事热点融入课程思政资源库, 构建以学生为中心的教学体系, 将专业价值观的塑造贯穿于知识传授与能力培养的全过程, 实现专业知识教学与思想政治教育的高度统一。

4.3. 改革教学方法

4.3.1. 以应用思维为导向, 借助多种教学手段, 实现有效教学互动的教学模式

计算机辅助药物设计是一门综合性极强的新兴交叉学科, 它将药物化学、分子生物学以及分子动力学等多个学科有机融合。鉴于其内容广泛且高度综合, 本课程采用“激发-搭建-提升-巩固”的教学思路, 助力学生高效掌握该学科知识。在教学实践中, 强调思路清晰, 灵活运用线上线下相结合的现代教学模式。其中, 线下教学综合运用理论讲授、实验操作以及案例剖析等多种方式; 线上教学则以微课为核心形式。只有科学地融合线下课堂与线上虚拟教学手段, 才能将课程知识体系化、深度化地传授给学生, 激发他们的学习兴趣与主动性, 从而提升教学成效, 达成预期的教学目标(图 3)。

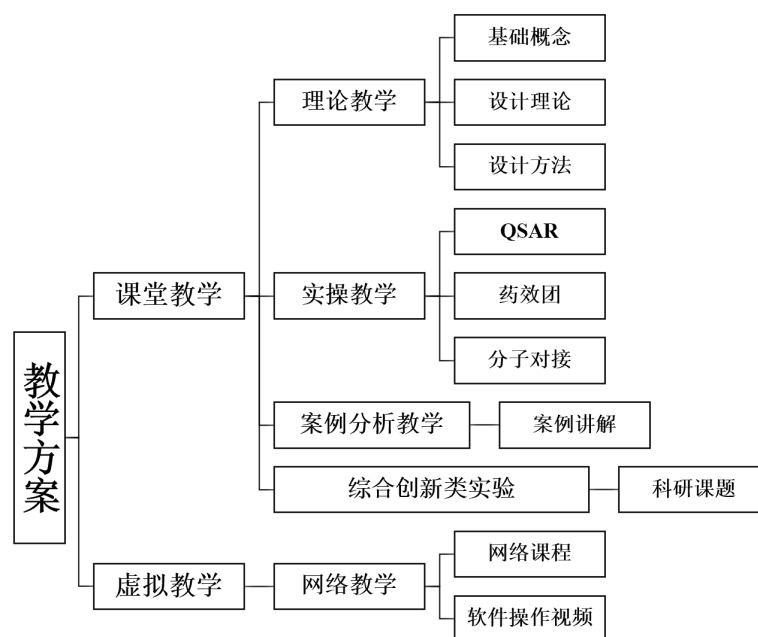


Figure 3. Main teaching methods of the computer-aided drug design course

图 3. 计算机辅助药物设计课程的主要教学方法

4.3.2. 加强配套教材建设

目前，以应用为导向的药物设计学教材相对匮乏。为契合教学模式的创新，在开设计算机辅助药物设计课程时，可以着手编写贴合本校学生实际需求的专属教材。教材编写过程中，可参考国内其他高校的同类教材资源，并结合当下主流药物设计软件的使用手册进行内容整合。比如，学院若已引入 Discovery Studio 等专业药物设计软件，可将该软件的使用教程、相关理论要点以及一些经典的药物设计案例融入教材编写之中。

4.4. 创新实践方式

培养创新应用型人才需要应对更为复杂的技术与工艺挑战，因此对实践能力的要求也更为严格。为此，创新型人才的培养应充分利用时间强化学生的实践技能，重点提升其动手能力。计算机辅助药物设计是一门以实践为核心的课程，因此必须重视学生在该领域的实际操作训练。在学生熟练掌握基础操作技能的基础上，指导他们研读专业文献，运用文献中的数据与软件工具开展模拟计算，并对比分析计算结果与现有研究成果之间的异同，以此锻炼他们运用计算机辅助药物设计应对实际问题的综合能力。同时，需持续将“药物研发体系”与“课程教学体系”、软件模块操作及前沿知识有机结合，真正实现理论与实践的统一。

考核是衡量学生知识掌握程度的关键手段，研究生课程的考核不仅应关注知识的测试，更应重视能力的检验，所以传统的单一模式的期末加平时的成绩考核方式已越来越不能满足教学发展的需要。为此，应构建多元化的评估体系，实施全过程评价。可以采用个性化选题的方式，要求每位学生阅读一篇文献，并提炼出文献的研究思路与药物设计策略。同时，将课堂提问的回答、课堂练习的表现、案例讨论的参与度、药物设计软件的操作熟练度以及实验技能的考核等纳入平时成绩，强调学习过程与过程性评价，降低期末考试在总评中的比重。通过这种方式，使考核评价能够更全面地反映学生的学习能力、知识综合运用能力以及科研思维能力。

5. 《计算机辅助药物设计》课程教学模式改革具体实施案例

5.1. 双体系融合案例分析

构建融合药物研发体系与课程教学体系的综合性教学案例,旨在通过理论与实践相结合的方式,提升学生对基于计算机辅助药物设计研发全流程的理解与实践能力。案例以“新型抗流感病毒药物的设计与开发”为项目主题,模拟从靶点识别到临床试验的完整药物研发过程。

首先,学生通过生物信息学工具 UniProt 识别并验证流感病毒的潜在药物靶点神经氨酸酶,通过 RCSB 数据下载蛋白单晶结构并提交靶点报告;随后,利用分子对接软件 Discovery Studio 进行虚拟筛选,从化合物库中筛选出先导化合物,并基于结构活性关系(SAR)对其进行化学修饰与优化,输出优化后的化合物结构及性质预测报告;接着,通过 ADMET 模块评估化合物的药代动力学性质与毒性,形成 ADMET 评估报告;最后,学生设计并模拟 I 期、II 期临床试验,分析药物的安全性、有效性与剂量反应关系,完成临床试验模拟报告。

在整个过程中,课程通过理论讲解与实践操作相结合,整合药物化学、药理学、生物信息学等多学科知识,培养学生的跨学科综合能力与创新思维。同时,学生以小组形式协作完成项目,进一步提升了团队合作与项目管理能力。本案例通过模拟真实的药物研发流程,不仅深化了学生对药物设计理论的理解,还强化了其实践能力,为培养具备创新能力的药物研发人才提供了有效的教学范式。

5.2. 思政元素与课程内容有机结合案例分析

在课程中实现思政元素与课程内容的有机结合,对于培养具有社会责任感和创新精神的药学专业人才具有重要意义。以“基于计算机辅助药物设计研发新型抗糖尿病药物”为例,可有效融入思政元素。

在课程教学中,向学生介绍计算机辅助药物设计在研发抗糖尿病药物中的应用时,引入“绿色制造”“可持续发展”理念。传统药物研发过程往往伴随着高能耗和高污染,而如今借助计算机辅助药物设计技术,可在虚拟环境中对大量化合物进行筛选和优化,减少不必要的实验合成步骤,降低化学试剂的消耗和废弃物的产生,这正是“绿色制造”在药物研发领域的体现。同时使学生明白通过提高研发效率、减少资源浪费,能够降低药物研发过程中的碳排放,助力实现“碳达峰”“碳中和”目标,为应对全球气候变化贡献力量。

5.3. 教学模式有效性检验

为验证基于“药物研发体系”与“课程教学体系”融合理念构建的教学模式在达成课程目标、提升学生自主学习能力等方面的有效性,本研究借助“学习通”平台发放问卷,广泛收集学生对本课程的反馈。此次调查共回收 47 位同学的有效反馈,为后续分析提供了数据支撑。

问卷中,对各项评价指标的反馈设置为 A、B、C、D 四个等级。其中,A 等级代表十分明确、十分注重、完全恰当、十分匹配、完全能、完全适量;B 等级代表比较明确、比较注重、比较恰当、比较匹配、比较能、比较适量;C 等级代表部分明确、部分注重、部分恰当、部分匹配、部分能、部分适量;D 等级代表不明确、不注重、不恰当、不匹配、不能、不适量。问卷内容涵盖课程各环节,学生评价结果详见表 1。

从课程目标达成情况统计结果来看,该课程在多方面表现良好。在学习目标清晰度上,超 80% 的学生明确课程及课堂目标,为学习指明方向。对于能力素质培养,多数学生认可课程的重视程度,但仍有提升空间。教学内容方面,无论是讲授内容的恰当性,还是与教材选用和课程目标能力培养的匹配度,都得到大部分学生的肯定。在学习效果衡量和课程任务明确性上,大部分学生能明确任务并衡量学习效

果,但少数学生存在疑惑。作业和小测试也基本能反映课程目标要求。在教学反馈与自主学习培养方面,教师能及时给予反馈并调整策略,且注重学生自主学习能力的培养,获得了学生的认可。此外,教师在教学中积极融入学科前沿知识,注重培养学生的国际视野、批判性和创造性思维,多数学生对此表示肯定。

Table 1. Statistical table of course objective achievement
表 1. 课程目标达成情况统计表

问卷题目	学生评价(人数)			
	A	B	C	D
你对课程要达到的学习目标是否明确?	32	15		
你对每次课的课堂目标是否明确?	35	12		
除了掌握理论知识,课程是否着重培养你的能力和素质?	29	15	3	
老师对课程讲授内容是否恰当?	36	11		
老师对课程教学参考书(教材)、讲授内容选用与课程目标的能力培养是否相匹配?	35	12		
你需要完成的课程任务是否明确?	28	15	4	
课程学习过程中你能否及时、有效地衡量自己有没有达到学习的目标?	28	15	4	
作业、小测试等内容,是否能反映课程目标的要求?	28	19		
训练是否适量且有一定挑战度?	30	17		
老师是否及时反馈学生学习中的问题,并能根据反馈信息及时动态调整教学策略?	34	13		
老师是否注重培养你的自主学习能力?	39	8		
老师是否将学科前沿的新理论、新技术和新方法融入课程教学内容?	37	10		
老师是否注重培养你的国际视野、批判性思维和创造性能力?	35	12		

总体而言,基于“药物研发体系”与“课程教学体系”融合理念构建的教学模式在达成课程目标、提升学生自主学习能力等方面取得了一定成效。

6. 结语

在国家大力推动应用型复合人才培养的进程中,研究生教育模式的转型已成为必然趋势。从学术型向学术与应用并重的转变,不仅是教育理念的更新,更是对人才培养目标的重新定位。创新与实践能力的培养,作为这一转型的核心,正深刻影响着高等教育的课程设计与教学实践。计算机辅助药物分子设计作为现代药物研发领域不可或缺的关键技术,其重要性不言而喻。它不仅为医学、药学等领域的从业者提供了强大的技术支持,也为新药研发的高效化、精准化开辟了新的路径。然而,这一领域的快速发展对课程教学提出了新的挑战:信息量庞大、更新迅速,以及对学生实践能力的高要求,使得传统教学模式难以满足现代教育的需求。

本研究以“药物研发体系”与“课程教学体系”融合为理念,创新性地设计了《计算机辅助药物设计》课程体系。通过整合传统教学、数字教学以及综合创新培养模式,课程成功突破了时间、空间和硬件条件的限制,实现了教学资源的优化配置与高效利用。更为重要的是,课程设计充分尊重学生的学习主体地位,通过激发学生的学习自主性和积极性,引导他们主动参与到知识的获取与应用中,从而有效提升了教学效果。课程实践表明,这种融合式教学模式不仅能够有效应对计算机辅助药物设计课程的复

杂性与挑战性，还为相关课程的教学改革提供了新的思路和方法。通过综合创新实践环节的设置，课程进一步强化了学生的实践能力和创新思维，为培养适应未来药物研发需求的高素质药学人才奠定了坚实基础。

面向未来，随着药物研发技术的不断进步和行业需求的持续变化，课程改革仍需不断深化。我们将继续探索如何进一步优化课程内容与教学方法，以更好地适应学科发展的前沿需求。同时，我们也将致力于加强课程的国际化视野，引入更多前沿研究成果和国际先进教学理念，为培养具有国际竞争力的复合型药学人才而不懈努力。

基金项目

浙江科技学院研究生教学改革研究项目(No. 2023yjsjg05)和 2022 年省级线上线下混合式一流课程《生物药物制剂》(2022-428) (浙教办函〔2022〕352 号)。

参考文献

- [1] 鄢龙家, 乐意, 刘力. 高校《新药设计》课程教学改革探讨[J]. 广东化工, 2020, 47(11): 247, 265.
- [2] 王贯, 王欣, 帅雯, 等. 新药开发前沿案例应用于药物设计学教学[J]. 大学化学, 2024, 39(12): 333-339.
- [3] 韩佳人, 曾文晔, 史彤, 等. 2023 年新药研发发展现状与未来趋势[J]. 生命科学, 2024, 36(1): 95-101.
- [4] 杜晗, 吴羿霏, 杜新. 人工智能在新药研发中的应用进展[J]. 药学进展, 2022, 46(11): 875-882.
- [5] 赵宏, 高琪, 王宇亮, 等. 分子对接技术在药物设计学教学中的应用[J]. 药学教育, 2024, 40(2): 55-59.
- [6] 靳如意, 范燧宝, 阮玉俊, 等. MOE 软件在分子对接教学中的应用[J]. 化学教育, 2021, 42(22): 93-97.
- [7] 谭秋彤, 徐俊, 李秋文, 等. 基于双链融合创新性药学人才培养模式的 CADD 课程建设[J]. 药学教育, 2018, 34(4): 19-23.
- [8] 黄增琼. 基于创新能力培养的药物设计学教学[J]. 药学教育, 2019, 35(1): 47-49, 54.