

AI背景下《新药开发设计》教学改革研究

刘广渠^{1*}, 周文娜¹, 黄志凌¹, 徐润生¹, 刘春冬¹, 杨加宾²

¹湖州学院生命健康学院, 浙江 湖州

²南京中瑞药业有限公司, 江苏 南京

收稿日期: 2025年9月5日; 录用日期: 2025年10月4日; 发布日期: 2025年10月13日

摘要

随着人工智能(AI)技术的普及, 传统的《新药开发设计》课程在教学方法和教学内容上都受到一定的冲击, 比如AI整合不足、相关技术更新慢、重理论轻实践等。构建AI驱动的课程体系, 并探索强化实践与创新的教學模式, 具有现实紧迫性。改革后的课程强调AI技术在靶点识别、先导化合物优化和临床前评价等关键环节的融合, 倡导师生共学共建的教学机制, 突出项目驱动和实践训练, 旨在培养既精通药学专业知识, 又熟练掌握AI技术, 具备跨学科整合能力和创新精神的复合型药物研发人才。

关键词

AI, 新药开发设计, 教学改革

Teaching Reform Research of *New Drug Development and Design* in the Context of AI

Guangqu Liu^{1*}, Wenna Zhou¹, Zhiling Huang¹, Runsheng Xun¹, Chundong Liu¹, Jiabin Yang²

¹College of Life and Health, Huzhou College, Huzhou Zhejiang

²Nanjing Zhongrui Pharmaceutical Co., Ltd., Nanjing Jiangsu

Received: September 5, 2025; accepted: October 4, 2025; published: October 13, 2025

Abstract

With the widespread adoption of artificial intelligence (AI) technology, the traditional *New Drug Development and Design* course has faced challenges in both teaching methods and content, such as insufficient AI integration, slow updates in relevant technologies, and an emphasis on theory over practice. The construction of an AI-driven curriculum system and the exploration of teaching

*通讯作者。

文章引用: 刘广渠, 周文娜, 黄志凌, 徐润生, 刘春冬, 杨加宾. AI 背景下《新药开发设计》教学改革研究[J]. 教育进展, 2025, 15(10): 393-397. DOI: 10.12677/ae.2025.15101847

models that enhance practical skills and innovation are of urgent practical importance. The reformed curriculum emphasizes the integration of AI technology in key stages such as target identification, lead compound optimization, and preclinical evaluation. It advocates for a teaching mechanism where both teachers and students learn and build together, focusing on project-driven approaches and practical training. The goal is to cultivate interdisciplinary, innovative pharmaceutical R&D talents who are not only proficient in pharmaceutical knowledge but also skilled in AI technologies and capable of integrating expertise across fields.

Keywords

AI, New Drug Development and Design, Teaching Reform

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

目前人工智能(AI)技术发展迅猛,各类 AI 工具层出不穷,比如 ChatGPT、DeepSeek、Kimi 等,其在课程建设、药物研发领域的应用已成为推动教学改革、医药创新的重要力量[1][2]。药物开发是一个多学科交叉的领域,包括化学、生物学和医学等多个学科[3],以福州大学为例,其开设了药物研发的跨学科知识和技能课程,旨在提升学生的科研能力和创新能力[4]。相关课程还需要结合国际视野,培养学生的全球竞争力[5]。此外,课程还需要融入药物研发实例,增强学生对知识的理解[6][7]。AI 背景下,药物开发相关课程需要紧跟时代,适时改革,才能培养出医药产业需要的复合型药物研发人才。

以湖州学院为例,《新药开发设计》是制药工程专业学生三年级时的一门重要课程,本课程旨在系统讲授药物从靶点发现到上市的全流程理论和技术,帮助学生全面掌握药物系统性评价体系,培养学生开展药物研发的实践能力和创新能力。在此基础上,课程突出计算机辅助药物设计的现代研究方法,引导学生运用信息化手段提高药物开发的效率,强化多学科融合的综合素质,为学生未来从事医药领域等相关工作奠定坚实基础。在当前 AI 的时代背景下,笔者认为该课程主要存在教师效率瓶颈、内容滞后脱节和实践性不足的问题。

针对以上问题,通过提出并阐述一套面向 AI 时代、整合药物开发全链条的《新药开发设计》课程教学改革方案,让 AI 融合到课程中,探索药学教育的数字化转型,教师可进行高效课程管理,同时培养具备“新药开发设计全局观 + 计算机辅助药物设计核心技术 + AI 应用能力”的复合型人才,进而提升课程的前沿性和应用性。

2. 教学改革目标

通过对《新药开发设计》课程的改革,在教师层面,显著减轻备课、授课和成绩评定的压力,更高效地进行教学工作;在学生层面,掌握药物研发全流程,并能够使用前沿的药物设计 AI 工具链,解决药物研发过程中实际、复杂的问题;在课程层面,教学内容与时俱进,实现前沿化、实践化和高质量化。

3. 课程教学特点和存在问题

3.1. 教学特点

以湖州学院制药工程同学为例,在正式学习本课程之前,学生需要具备扎实的专业知识,包括药剂

学、药理学、药物化学、药物分析、科研方法与文献检索等课程内容，同时应具备一定的计算机操作与信息处理能力。课程需要将药学专业知识和计算机进行结合，对专业知识的要求较高，是一门高度综合性、应用性、前沿性的课程。

3.2. 存在问题

笔者在教学过程中不断反思和总结，认为该课程主要存在以下几个问题：① 教师在备课、授课、成绩评定方面缺少 AI 工具的介入，工作效率较低；② 教学内容偏重经典理论与工具(如分子对接，QSAR 等)，对 AI 驱动的现代方法(如 AlphaFold、DiffDock 等)引入不足；③ 教学模式以理论讲授为主，实践环节薄弱，导致学生解决实际问题 and 困难问题的能力不足。

4. 教学改革方法

4.1. 教师的自我学习和提升

在教学工作中，教师应该积极学习 AI 的相关知识，并将其融合到课程建设中。在课前，使用 AI 辅助生成教学大纲、教案和习题，比如超星学习通平台中的 AI 出题板块，可通过文本生成不同类型的题目，教师仅需要对题目进行确认即可，大大节省了备课时间，如图 1 所示，以临床试验相关内容为中心进行出题，可得到 4 道单选题和 2 道多选题，教师可根据实际情况对题目进行调整；在授课过程中，使用 AI 进行课堂管理、课程互动，能够让学生尽可能地参与课堂，提高教学质量，比如通过 AI 分析课堂实时问答、投票数据等，生成可视化词云，让教师快速把握课堂难点和热点；在课后，使用 AI 进行习题批改和学情统计，并根据反馈及时调整教学策略，实现高效、精准、个性化的教学闭环。



Figure 1. Example diagram of AI-generated exercises

图 1. AI 生成习题的示例图

4.2. 课程资源建设

概括性来说，本课程主要包括以下几个教学内容：新药开发概述、新药的发现、新药的临床前药学研究、新药的临床前药理毒理研究、新药的临床研究、新药的上市与评价。根据以上内容和专业侧重点，在课程部分模块引入 AI，让学生更好地掌握药物研发的相关知识，包括下列内容：① AI 与药物发现新

范式概述。在 AI 革命的背景下，药物研发流程面临重构，通过引入 AI 辅助药物研发案例，让学生了解 AI 对药物研发流程的影响，接触和了解前沿研究。② AI 与靶点发现和验证。通过讲述 AI 在组学数据挖掘、疾病机制建模、靶点成药性预测以及靶点结构预测等过程中的应用，让学生了解靶点发现和验证的新模式。③ AI 驱动先导化合物发现。除了从动物、植物、微生物中发现先导化合物等传统方法外，基于结构的 AI 筛选、基于配体的 AI 筛选、基于生成式 AI 的分子设计等方法，助力于高效发现先导化合物。④ AI 协同先导化合物优化。AI 辅助先导化合物的性质优化和结构优化，例如通过 AI 预测化合物的 ADMET 性质、合成可行性，提前对活性物质的成药性进行评估，提高药物研发的成功率。⑤ 临床前研究中的 AI 应用。临床前研究主要包括原料药研究和药物制剂研究，在原料药研究中，AI 可驱动原料药合成的设计、制造、测试和分析，同时融合机器人实验，实现原料药的自动化合成和优化；在药物制剂研究中，AI 可辅助药物处方和工艺的优化，同时可根据患者的生理数据模型，定制个性化制剂方案，实现精准用药。⑥ AI 时代的临床研究。药物开发中的临床实验包括 I、II、III 和 IV 期，在临床实验的过程中，从方案设计、患者招募、数据管理，到疗效预测、上市后监测，AI 都能起到很好的驱动作用，加快实验进程。

4.3. 课程实践的探索

4.3.1. 设立实践课程

《新药开发设计》除了理论课程之外，应该设有实践课程，以增强学生的实际应用能力。基于 AI 和计算机辅助药物设计的背景，实践课程主要包括以下几个方面：① 基础技能实训，如 Linux/Python 环境配置与命令行操作、ChemDraw 的使用、PDB 数据库的使用；② 项目实操，如 AlphaFold 预测蛋白结构、分子对接、ADMET 预测；③ 闭环验证，经过评估，对于可行性较高的实践项目进一步验证，例如针对凝血因子 Xa，虚拟设计小分子化合物，对于预估活性较好的化合物，自行合成或者委托合成，进一步测定化合物的实际抗凝活性，将实际结果和计算结果进行比对分析，撰写报告。

4.3.2. 学科竞赛与毕业论文

通过教学，让学生掌握药物研发的基本流程及前沿知识，同时在授课过程中不断启发学生发现新的课题，提升学生的创新能力、复杂问题解决能力以及团队协作能力。产生优秀成果后，鼓励学生申报省级/国家级大学生创新创业项目，参加省级/国家级大学生课外学术科技作品竞赛等。同时，这些成果可以作为学生的毕业论文内容，学生不必在四年级时再完成毕业论文，进而有更多的时间和精力准备深造或就业。

4.3.3. 企业见习、实习与就业

寻找机会与企业进行合作，进行短期见习或者暑期深度学习，以打通产学壁垒，让学生体验真实的药物研发流程，提升就业竞争力。面对当前大学生就业竞争激烈的形式，学校在本科阶段应更注重应用型人才的培养。学校应积极拓展与制药企业的合作资源，引入覆盖药物研发各环节的多元化企业，以增加学生的实践选择机会。在学生层面，应鼓励其自主规划实习和见习路径，这更符合学生的个人意愿，可以提升学生实践的积极性。见习和实习能让学生尽快明确职业方向，提升学生的职业认同感，进而促进就业。

5. 课程特色

5.1. AI 多赋能

科技发展日新月异，各种 AI 工具层出不穷，唯有掌握并选择性利用 AI 工具，才能更高效地完成各

项任务。对于《新药开发设计》这门课程来讲, AI 可以辅助教师教学、学生学习, 同时还可以应用到具体的药物开发中。在教师层面, 利用 AI 进行备课、授课和课程评价, 可以系统性地提高教学效率和质量; 在学生层面, 正确引导其使用 AI 工具, 能够高效获取并利用知识; 在课程内容层面, 将 AI 工具融入到药物开发的各个环节, 包括药物的发现、先导化合物的优化以及临床研究等。

5.2. 产教学研创一体

课程力争做到产(产业)、教(教育)、学(学习)、研(科研)、创(创新)五维融合。AI 背景下, 从这五个方向来说, 制药企业面临 AI 人才缺口; 教师教学负担重, 技术更新速度慢, 课程评价效率低; 学生应用能力差, 学习被动; 课程内容滞后, 科研与教学分离; 学生创新思维受到限制, 创意缺乏孵化路径。通过课程改革, 我们努力构建“产业驱动 - 教学应答 - 学生实践 - 科研攻关 - 创新转化”的课程体系, 培养全面发展的药物研发人才。

6. 结语

在 AI 飞速发展的时代, 《新药开发设计》课程的改革具有迫切性和必要性。改革的核心理念是“AI 赋能、项目牵引、实践巩固”, 旨在构建面向就业的药物研发人才培养模式。课程改革的实施对于我校药学教育质量的提升、应用型人才的培养具有重要意义, 同时为其它高校相关课程的建设提供了参考。未来技术的发展势必会更加迅速, 面对挑战, 我们应该不断反思和总结, 不断更新和优化内容, 以适应时代的发展。

基金项目

湖州学院 2025 年度教育教学改革研究项目(No: hyjg202522); 湖州学院人才引进科研启动项目(No: RK66001)。

参考文献

- [1] 孟亮. 教学智能化技术在高等教育新课程建设中的应用研究[J]. 新课程研究, 2024(21): 52-54.
- [2] 杨艳伟, 胡文元, 林志, 等. 大数据和人工智能技术用于计算机辅助药物设计的研究进展[J]. 药物评价研究, 2023, 46(6): 1369-1375.
- [3] 陈小平, 冯承涛, 常跃兴. 探析新药研发课程的知识体系与教学方法[J]. 医学教育研究与实践, 2017, 25(1): 99-101.
- [4] 高瑜, 陈海军, 江舟, 等. 新药研发的跨学科知识和技能课程教学实践[J]. 药学教育, 2023, 39(5): 49-52.
- [5] 郑威, 唐婷, 沈嘉伟, 等. 《新药研发概论》双语教学的探索与实践[J]. 教育教学论坛, 2018(44): 138-139.
- [6] 卢闻, 曾爱国, 张杰. 基于案例分析的新药研发课程教学[J]. 药学教育, 2022, 38(1): 44-48.
- [7] 任丽君, 赵寅, 严朗, 等. 新药研发实例融入新药研究与评价教学的探讨[J]. 现代职业教育, 2022(28): 145-147.