

药学信息学硕士研究生的培养方向^{*}

顾东蕾

刘旭明

(中国药科大学图书馆 南京 210009) (中国药科大学生命科学与技术学院 南京 210009)

〔摘要〕 从技术信息学、服务信息学两方面阐明药学信息学的研究范畴,从导师设置、人才特征、学位课程和科研选题方面分析技术培养模式、服务培养模式的区别和不同发展方向,指出药学信息学硕士研究生应采取技术——服务型培养模式。

〔关键词〕 药学信息学;技术信息学;服务信息学

Training Direction of Pharmacy Informatics Master Graduates GU Dong-lei, Library of China Pharmaceutical University, Nanjing 210009, China; LIU Xu-ming, School of Life Science & Technology, China Pharmaceutical University, Nanjing 210009, China

〔Abstract〕 The paper elaborates the research scopes of pharmacy informatics from the two aspects: technology informatics and service informatics. The difference and the different development directions of technology-based training model and service-based training model are analyzed from following aspects: tutor settings, talents characteristics, curriculum settings and research topics. It points out that pharmacy informatics training of master graduates should adopt a model of technology-service.

〔Keywords〕 Pharmaceutical informatics; Technology informatics; Service informatics

1 药学信息学的研究范畴

1.1 概述

药学信息学是将严密精确的数据分析方法作为处理海量数据的工具,以服务于药物的研发、安全性评价及市场推广的一门学科。药学信息学借鉴了经济学、统计学、药物流行病学、健康服务研究等

相关知识。药学信息学前所未有地描述了数据、学科和技术的交叉,其本质体现在医师、药师及相关从业人员通过计算机和互联网获取并处理的海量数据中。

新药从研发到上市经过了图 1 所示的过程^[1],在各个发展进程中都产生了海量的数据需要处理分

〔收稿日期〕 2010-04-08

〔作者简介〕 顾东蕾,博士,副研究馆员,发表论文 40 余篇,参编论著 3 部。

〔基金项目〕 江苏省 2009 年度研究生教育创新计划项目教学改革研究与实践课题“药学信息学硕士研究生的培养模式研究”(项目编号:02705128)。

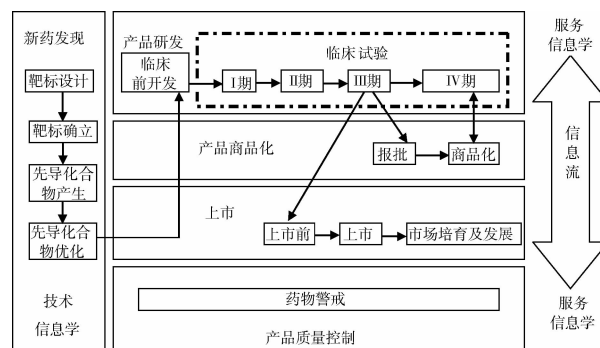


图 1 药品研发、上市流程

析。药学信息学的研究范畴为技术信息学和服务信息学,技术信息学以计算机及其相关技术完成了新药的研发,服务信息学以信息学的理论及方法处理产品研发、商品化、上市及质量控制过程中产生的信息流。

1.2 技术信息学

技术信息学通过生物信息学、医学信息学、毒理学、流行病学和化学信息学的知识和技能整合了疾病——机理——靶标——配体化合物的全面信息,进行分子的模拟和药物的发现,见图 2^[2]。

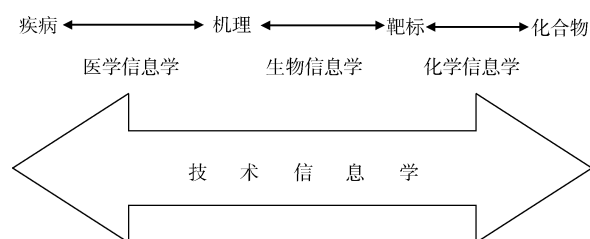


图2 技术信息学的含义

技术信息学完成的是一个反复叠代的任务^[3],见图 3。首先分析受体的结构,对于已知 X2 光晶体结构或 MD2NMR 结构的受体,用有关分子结构中原子的精确位置以及原子相互关系的信息,进行分子结构的模拟与能量优化,确定受体的结合位点空间形状和特征分布(电性、疏水性、氢键和范德华力等)。确定受体的活性区域,利用计算机找出结合位点(如氢键结合位点和疏水作用方式位点),寻找与受体结合位点相匹配的配体分子,得到候选化

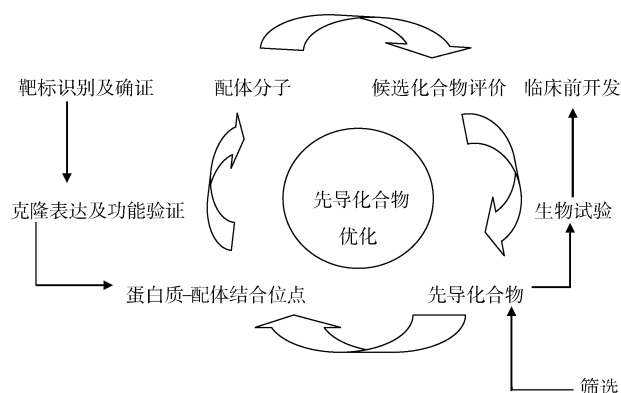


图3 技术信息学的反复叠代过程

合物。最后是对候选化合物进行评价,有人形象地称之为“对分子打分”。通过不断的叠代进行先导化合物的优化^[4-5]。

1.3 服务信息学

图 4 显示了从新药产品立项到最终患者使用流程中各环节间的信息流^[1],服务信息学的研究对象就是这样的信息流。所以服务信息学包括药疗信息学、药研信息学和药品信息学。

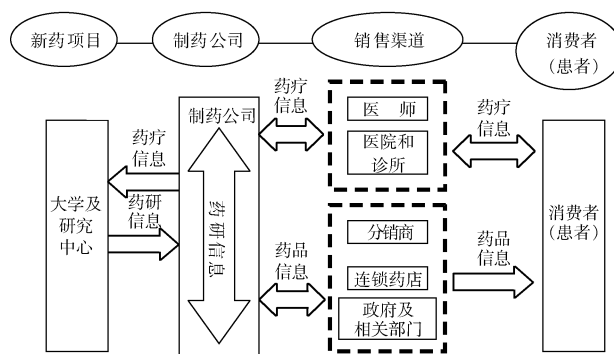


图4 新产品从研发到使用流程中各环节间的信息流

2 药学信息学研究生的培养方向

2.1 概述

综上所述,顺应于药学信息学形成和发展的要求,药学信息学硕士研究生也应从两个方向进行培养,也就是技术——服务的培养模式。技术培养模式就是使硕士生全面掌握技术信息学的理论与实践,为国家新药创新培养高精尖人才;服务培养模式就是使硕士生成为药学信息服务的高层次人才。

目前在我国的药学信息学硕士研究生的培养主要以中国药科大学和沈阳药科大学为主,其培养的模式还是以技术模式为主,几乎很少有服务模式。但是社会对于药学信息服务的需求是存在的,一份来自于 34 家单位对医学信息人才需求的调研报告表明:38.24% 的用人单位需要招收硕士以上的信息服务人才,33.18% 的在岗员工要求新聘职工的学历层次在硕士以上^[6]。

2.2 培养模式对导师的要求

技术培养模式的研究生导师应为从事新药研发与筛选的专家学者，目前中国药科大学的导师的研究背景为结构生物信息学、计算生物学、蛋白质或多肽类药物的设计研发及示踪、计算机辅助药物设计和生物序列分析；沈阳药科大学的导师研究背景为化学统计学、计算机辅助药物设计及药理学科学计算与数据挖掘。

服务培养模式的导师则应由长期进行药学信息咨询与服务的专家担任，在这一点上，目前国内还是有欠缺的。这个专业不同于综合性大学的信息管理专业，只有信息学的专业背景而没有药学的专业背景无法胜任指导研究生的工作。药学信息学是一门领域信息学，不同的领域信息学中，对信息的理解是有很大差别的，可以是抽象的通讯形式、单指计算机技术或者指一种研究方法。据统计，至 20 世纪 80 年代初，引进“信息学”的学术领域已不下 30 个。而至 20 世纪 90 年代中期，这个数字已扩展至 50。今天，在任何一门社会科学分支中，不想看到“信息”的出现已经是一件非常困难的事情。在药学信息学中既有一些关于信息的本质问题需要讨论，例如，信息的守恒性、不可还原性以及其本体论和认识论等^[7-8]；更有面广量大的面向教学、科研、生产和销售的信息流需要研究。因此服务培养模式的导师应该既有扎实的信息学理论基础，也有药学信息流处理的实践经验。从目前国内的状况来看，药学信息机构的专家应该能够胜任这项任务。

2.3 人才特征

来自于高等院校和科研院所的专家认为药学信息学硕士研究生核心专业知识为：第一，计算机辅助药物设计（Computer Aided Drug Design, CADD）的原理和方法，即利用计算化学基本原理，通过模拟药物与受体生物大分子的相互作用或通过分析已知药物结构与活性内在关系，合理设计新型结构先导化合物的药物设计方法^[9]。第二，多向药学和网

络药学的理论与实践，多向药学即通过基因组学和蛋白质组学来理解一个药物在生物体内作用的多靶点性或多重作用。网络药学是随基因组学、蛋白质组学、系统生物学发展应运而生，它是在理解“疾病表型——基因——靶点——药物”相互作用网络的基础上，通过网络分析，来观察药物对病理网络的干预与影响，使研发的新药更接近于疾病的实际情况，从而提高研发的成功率^[10]。

来自于企业的经理人认为药学信息学硕士研究生核心专业知识为：第一，药学领域进展，即了解药学的历史、现状和未来，能够从药理、药剂、药化、药分等药学不同角度出发，了解药物对个体健康和社会发展的促进作用和负面影响，以及如何合理用药、防止药物滥用和药源性疾病。第二，药学信息流的理论与实践，药学信息流的内容非常广泛，如新药研究和开发的信息、药物专利信息、药物生产和上市信息、药物市场的价格信息、药物经济学信息、药事管理信息、药学教育信息、药学各专业学科进展的信息、药物不良反应和药物相互作用等临床药学信息等都属于药学信息流的范畴。

上述调研结果正好吻合了技术——服务培养模式的人才特征，技术培养模式的人才特征将满足高等院校和科研院所对新药研发的高精尖人才的需求，而服务培养模式满足了社会对药学信息服务高层次人才的需求。

2.4 学位课程及科研方向

技术培养模式和服务培养模式将会有不同的学位课程和科研方向，见表 1。技术培养模式偏重于药学领域的纵向发展，而服务培养模式偏重于药学领域横向的知识延伸。

表 1 技术——服务培养模式的学位课程及科研方向		
培养模式	技术	服务
学位课程	计算机辅助、药物分子设计、网络药学	药学前沿、药学信息整序
任课教师	新药筛选专家	药学各分支学科的专家、药学信息服务专家
科研方向	新药设计与筛选、化学反应模拟	药学信息、数据挖掘、制药企业、知识管理

(下转第 94 页)