

平行药物系统：基于大语言模型和三类人的框架与方法

林飞¹, 王飞跃^{1,2,3}, 田永林², 丁显廷⁴, 倪清桦^{1,5}, 王静², 申乐⁶

- (1. 澳门科技大学创新工程学院工程科学系, 澳门 999078;
2. 中国科学院自动化研究所复杂系统管理与控制国家重点实验室, 北京 100190;
3. 中国科学院大学人工智能学院, 北京 100049;
4. 上海交通大学生物医学工程学院, 个性化医学研究院, 上海 200030;
5. 青岛智能产业技术研究院, 山东 青岛 266109;
6. 中国医学科学院北京协和医院麻醉科, 北京 100730)

摘要: 近年来, 随着物联网、大语言模型、多模态交互等新一代人工智能技术的迅猛发展, 传统的药物研发、生产加工等过程面临着智能化转型的挑战。为此, 以平行智能为理念, 基于ACP方法和大语言模型提出了虚实交互的平行药物系统, 并将三类人(数字人、机器人和生物人)的概念引入系统中, 详细阐述了该系统的理论框架与构建方法。平行药物系统涵盖医药产业的全流程, 药物研发阶段考虑了药物发现、实验室研究、临床试验等过程; 药物生产加工阶段考虑了制药工厂运行、系统分析预测等方面; 药物医疗保健阶段考虑了个性化用药咨询、增强现实用药指导、隐私安全等内容。平行药物系统打造了一个数字化的“药物空间”, 旨在建立药物系统的新范式, 推动智能化药物的革命。

关键词: 平行智能; ACP方法; 大语言模型; 三类人; 平行药物系统; 药物研发; 药物生产加工; 药物医疗保健
中图分类号: TP399

文献标志码: A

doi: 10.11959/j.issn.2096-6652.202409

Parallel drug systems: framework and methods based on large language models and three types of humans

LIN Fei¹, WANG Fei-Yue^{1,2,3}, TIAN Yonglin², DING Xianting⁴, NI Qinghua^{1,5}, WANG Jing², SHEN Le⁶

1. Department of Engineering Science, Faculty of Innovation Engineering, Macau University of Science and Technology, Macau 999078, China
2. State Key Laboratory for Management and Control of Complex Systems, Institute of Automation, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China
3. School of Artificial Intelligence, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China
4. Institute for Personalized Medicine, School of Biomedical Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200030, China
5. Qingdao Academy of Intelligent Industries, Qingdao 266109, China
6. Department of Anesthesiology, Peking Union Medical College Hospital, Beijing 100730, China

Abstract: With the rapid development of the next generation of artificial intelligence technologies, such as the internet of things, large language models, and multimodal interactions, the traditional processes of drug research and production processing had been facing the challenges of an intelligent transition in recent years. In this context, this paper used the theory of parallel intelligence as the research philosophy and proposed a virtual-real interactive parallel drug systems, utilizing the ACP approach and large language models. It incorporated the concept of three types of beings—digital humans, robots, and natural persons—into the systems, providing a detailed discussion on the theoretical underpinnings, construction techniques, and potential application scenarios of the systems. The parallel drug systems covered the entire process of

收稿日期: 2024-01-16; 修回日期: 2024-02-26

通信作者: 王飞跃, feiyue.wang@ia.ac.cn

基金项目: 国家自然科学基金项目重点项目 (No.61533019); 澳门特别行政区科学技术发展基金 (No.0093/2023/RIA2)

Foundation Items: The National Natural Science Foundation of China (No.61533019), The Science and Technology Development Fund, Macao SAR (No.0093/2023/RIA2)

the pharmaceutical industry. For the drug development phase, it considered processes such as drug discovery, laboratory research, and clinical trials. In the production processing phase, it encompassed pharmaceutical manufacturing operations and system analysis predictions. The medical healthcare subsystem included personalized medication consultation, augmented reality drug guidance, and privacy security. The whole systems open up a digitized “drug space”, aiming to establish a new paradigm for the drug systems and propel the revolution of intelligent medication.

Key words: parallel intelligence, ACP approach, large language models, three types of humans, parallel drug systems, drug research and development, drug production processing, medical healthcare

0 引言

药物作为生命抵抗“熵增”的产物，在人类文明发展长河中扮演着重要的角色。中药学的开端可以追溯到东汉时期的药物学著作《神农本草经》^[1]，随着人类对化学研究的进步，现代中药学开始与西医学的知识体系接轨，同时保持其独特的理论与实践方法。1897年，德国化学家费利克斯·霍夫曼（Felix Hoffmann）发明了第一种合成药物——阿司匹林（Aspirin）^[2]，至此合成药物时代拉开了序幕。随着分子生物学、计算机技术和人工智能（artificial intelligence, AI）的发展，药物研发变得更加精准和高效。

传统的药物研发是一个复杂、耗时且成本高昂的过程。首先，研究者需要推演并分析出对应的生物靶标（例如蛋白质或基因），借助高通量筛选（high throughput screening, HTS）技术分析出有效化合物^[3]，经过初筛的化合物进入实验室阶段，需要严格地评估生物活性、药代动力学及毒理学特性。其次，新药的研发需要经过3~4个阶段的临床试验，以评估其安全性和有效性，最终获得监管机构批准，方能量产。整个过程需要投入大量的时间和金钱成本，并面临诸多挑战，如化合物优化的困难、HTS的资源消耗及假阳性结果，以及化合物预测模型的局限性等^[4]。

在药物研发成功后，面临的下一个重要任务是工业化量产，该过程需要严格遵循药品生产规范^[5]以确保药品质量，并且涉及一系列复杂的工程和运营挑战。首先，在实际操作中，施工建设与生产运行中出现的问题往往难以直接反馈给设计单位，导致生产线在后期运营中可能需要进行反复维护和调整。其次，生产线上不同系统和设备之间的数据整合不足，导致信息隔离，形成了所谓的“数据孤岛”。此外，制药工厂操作人员缺乏预测性的维护策略，对事件的响应往往是反应式的，而非预防性

的，进一步降低了生产的可靠性和安全性。

在药物销售和使用环节中，患者、医生和药剂师之间的信息交流存在挑战。首先，患者对药物的理解不足可能影响治疗的遵从性。其次，在利益关系的影响下，药剂师可能会推荐与患者病情不完全匹配的药品。此外，药品说明书通常包含大量的专业术语和复杂的医学信息，对于普通患者来说难以理解，尤其是在副作用和药物相互作用的说明方面，复杂的描述可能导致患者忽略重要信息，使其不恰当地使用药物，降低药效或引发不良反应。

王飞跃研究员提出的ACP方法^[6-9]，即人工系统（artificial systems, A）、计算实验（computational experiments, C）和平行执行（parallel execution, P）的结合，为药物系统提供了解决问题的新途径。ACP方法旨在通过虚拟空间的计算实验整合复杂系统中难以量化的部分，优化真实系统中复杂问题的解决方案。该方法已广泛应用于计算机视觉、联邦控制、智能交通系统等领域^[10-12]，大语言模型（large language models, LLMs）、多模态交互、物联网（Internet of things, IoT）、数字人等新兴技术为该方法的实现提供了技术支持。基于ACP方法、三类人（生物人、机器人、数字人）和3种模式（自主模式、平行模式、专家/紧急模式）^[13-14]，药物研发、生产加工和药物医疗保健面临重大变革。本文提出的平行药物系统将整合当下先进的智能技术，推动“药物空间”向智能化、数字化转型。

本文的内容安排如下：第1节介绍目前医药产业面临的需求与挑战；第2节介绍平行药物系统的体系框架；第3节介绍平行药物系统中的关键技术；第4节介绍平行药物系统面临的挑战；第5节总结全文，并进行展望。

1 医药产业中的需求与挑战

本节将探讨药物研发、生产加工和药物医疗保

健领域的发展现状和面临的挑战,回顾相关领域的发展历程、现有的技术方法以及目前存在的问题。

1.1 药物研发

针对传统药物研发面临的挑战,计算机科学和AI技术的进步提供了多种解决策略。计算生物学、计算机辅助药物设计(computer-aided drug design, CADD)和AI辅助药物设计(AI-assisted drug design, AIDD)的应用显著地提升了研发效率,并降低了研发成本^[15]。研究人员通过分子力学、分子动力学模拟和量子力学等方法,深化了蛋白质与配体之间相互作用的理解,AlphaFold^[16-17]等AI技术在蛋白质三维结构预测方面的突破,为靶标识别和药物设计提供了重要支持。这些技术手段提高了药物研发的效率,但并未从根本上解决研发过程中资源利用率低的问题。IBM的Watson^[18]和Atomwise的AtomNet^[19]等平台集成了文献分析和候选分子识别,但仍面临理论知识与实验数据整合不充分的挑战。药物研发人员在选择生物靶标时,仍然高度依赖于个人的专业知识和经验,这限制了研发流程的系统化和自动化。此外,即使通过初步筛选识别出潜在的化合物,后续的实验分析流程仍需大量的资源投入,不同化合物所需的实验参数差异、实验流程的多样性以及缺乏明确的实验优先级设定,均导致实验效率降低和成本增加。

数字孪生(digital twin, DT)技术的引入为药物研发和临床试验带来了强有力的支持。DT是实施ACP方法之人工系统中的第一步,此外还有软件定义与虚拟系统。DT技术通过高效的模拟仿真,加速了药物研发的流程^[20]。在单细胞研究领域,Lotfollahi等^[21]提出的scGen模型和Cui等^[22]基于Transformer模型构建的单体孪生细胞,为药物发现提供了新途径。细胞培养方面,Andreini等^[23]和Tang等^[24]分别在细菌生长和肿瘤微环境模拟方面进行了深入的研究。Chen等^[25]在动物模型的研究中,展现了DT技术的广泛潜力。人类表征方面,Allen等^[26]通过构建基于变分自编码器的DT模型,预测中风患者的疾病的进展,凸显了DT技术在疾病模拟中的应用价值。在临床试验领域,数字化临床试验的实施可以减少参与者的招募,数字技术的运用可以增强信息的粒度。Armeni等^[27]介绍了DT在临床试验设计和医院运营中的应用。Unlearn.AI公司基于生成式神经网络进行临床试验,表明了DT在加速临床决策中的潜力^[28]。DT技术

主要依据物理实体的数据来预测系统的发展变化,这种方法虽然在某些情况下有效,但其优化控制容易陷入局部最优,难以全面评估多种方案和参数下的系统表现。

1.2 药物生产加工

药物工业化量产过程包括制药工厂的设计、施工建设及运行管理,是一个高度复杂且需要精密协调的流程^[29]。传统方法往往将这些阶段独立对待,缺乏必要的整合与协同,从而影响生产效率和产品质量。但随着DT和AI的发展,这一局面正在发生转变。在设计阶段,DT和AI的应用显著地提高了设计的效率和准确性,例如,Aspen Tech的混合模型利用机器学习算法进行工程级的仿真^[30],AVEVA公司的P&ID软件和PDMS(plant design management system, 工厂设计管理系统)实现了数字化交付^[31]。在运行管理阶段,DT技术与分布式控制系统(distributed control system, DCS)的结合,可构建生产过程的实时数字镜像,提供直观的监控和故障预测。此外,将虚拟现实(virtual reality, VR)和增强现实(augmented reality, AR)技术应用于操作人员的培训,能够通过模拟真实操作环境,提升培训效果,并降低操作错误率。过程分析技术(process analytical technology, PAT)^[32]使药物质量把控趋向于智能化,药物工业化量已经开始探索使用PAT(process analysis toolkit)工具和建模方法(如有限元法、计算流体动力学和群体平衡模型等)^[33]。

尽管DT技术提高了药物工业化量过程的可观测性和可控性,但仍存在一些不可忽视的局限性,DT作为数字仿真的进一步发展,其核心在于高度精确地“仿”或“孪”现实世界中的物理系统,即物理系统的所有相关数据都需要准确获取,且系统间或数据间的关联模型要精确且可靠。然而,从全面获取物理系统的相关数据到建立精确可靠的关联模型,均面临巨大挑战,数据采集的全面性受到技术、成本等多重因素的限制,而复杂系统间错综复杂的关系也导致建立高度精确的模型变得异常困难。

1.3 药物医疗保健

医疗保健领域的发展和创新一直是全球关注的焦点。AI技术在传统临床医疗保健领域已经取得了显著的进展,在精神健康管理、药物推荐、疾病预测等多个方面展现了其独特的价值^[34]。例如:

在精神健康管理方面，AI技术可以进行抑郁和情绪的数字化跟踪；基于AI的虚拟医疗助手，可以用于对偏头痛、哮喘和慢性阻塞性肺病等常见疾病进行监控和管理。此外，LLMs技术被广泛用于该领域，如微软旗下的Nuance^[35]将GPT-4 API加入医疗笔记工具中，DeepMind和Google的研究人员发布的Med-PaLM模型^[36]在医疗执照考试上取得了较高的准确率，展现了LLMs在理解和处理医疗保健相关问题上的巨大潜力^[37-39]。

药物医疗保健面临的主要挑战是如何保证数据的隐私安全。《健康保险携带和责任法案》(Health Insurance Portability and Accountability Act, HIPAA)和《通用数据保护条例》(General Data Protection Regulation, GDPR)^[40]提供了法律框架，但在实际操作中，隐私数据传输和算法风险等问题依然存在^[41]。首先，随着云计算和大数据技术的应用，医疗数据的存储和处理变得更加复杂，提升了数据被泄露的风险。此外，AI和LLMs在医疗保健领域的应用日益广泛，但这些技术处理的数据往往包含敏感的个人健康信息，如果算法设计层面存在缺陷，可能会导致数据被错误地处理或泄露。

2 平行药物系统体系框架

本文提出的平行药物系统是ACP方法在药物研发、生产加工和药物医疗保健领域的扩展，从一体化的角度推进药物系统的进步。图1为平行药物系统的基本框架和体系结构。

针对不同的真实系统，平行药物系统的构建方式有所区别，应用的技术手段也有所不同。本文构建的平行药物系统由3个子系统组成，包括平行药物研发系统、平行制药工厂和随身药物系统。本节

首先简单阐述平行药物系统的理论架构；其次，分别对平行药物系统的3个子系统进行详细的阐述，说明系统的架构组成与交互方式。

2.1 平行药物系统理论框架

对于医药产业的整个过程来说，每个阶段均具备构成复杂系统的条件，而对复杂系统的研究往往不满足科学上“可实验”“可重复实验结果”这两个要求^[42]。ACP方法通过构建与真实系统相对应的人工系统，实现虚拟空间与真实空间的平行交互，并在虚实交互中融入计算实验，探寻复杂性科学问题解空间的突破。具体来说，平行药物系统中的真实系统涵盖了医药产业的全流程，以“人在回路”的方式进行理解、调整与反馈。人工系统为真实系统所对应的各类虚拟场景，其生成方式包括DT、软件定义和虚拟系统，其中DT可以视为人工系统的一个特例或子集^[43-44]。通过计算实验可以对人工系统进行实验、分析和评估，进而为真实系统提供引导^[45]。平行药物系统中的决策通过平行执行的方式产生，结合数字人系统、机器人系统和生物人系统，可以提供更加灵活且高效的决策执行。

在药物研发方面，平行药物系统能够加速识别和优化潜在药物候选分子，预测药物与生物靶标之间的相互作用，加快药物从实验室到临床试验的转化速度；在生产加工层面，系统可预见生产中的潜在问题，优化流程，确保药物生产的质量和效率。此外，平行药物系统在药物医疗保健应用中表现出巨大潜力，能够基于患者的特定情况提供个性化药物治疗方案，监测药效及副作用，确保治疗的安全有效。

2.2 平行药物研发系统

平行药物研发系统设计为多维交互框架，旨在

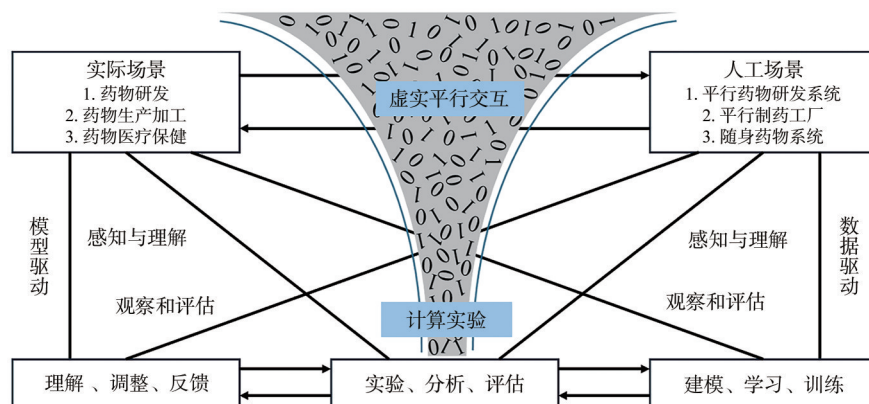


图1 平行药物系统的基本框架和体系结构

通过实际操作、虚拟模拟与计算实验的数据整合,加速药物研发流程^[46-48]。平行药物研发系统框架如图2所示,该系统主要包含真实系统、人工系统、计算实验模块3个核心组件。真实系统基于传感技术捕捉关键数据,并与人工系统实时交互,以反映出最新的研发进展和条件变更。人工系统和计算实验模块之间通过应用程序编程接口(application programming interface, API)和脚本执行等方式进行交互,这一交互过程的操作由5%的生物人(药物研发人员)和80%的数字人决定,以实现高效的决策支持和资源分配。15%的机器人系统和5%的生物人系统负责与实际系统的双向交互,通过TCP/IP和API等方式,数字人系统可以与机器人系统进行交互,进而引导机器人系统的行为决策,实现更高效的任务执行和流程管理。

系统涵盖从生物靶标识别到临床试验的全过程,利用数字建模、生成式AI等技术加速药物研发进程;计算实验模块集成CADD、AIDD等工具,为药物研发提供强大的分析能力;数字人依托药物研发领域垂类LLMs提出设计方案,制定实验流程;机器人系统辅助实际操作任务,机器人的行为既可以由数字人引导,也可以由生物人指导;生物人系统负责关键性决策和应急处理,确保研发流程的合理性和伦理性。

平行药物研发系统的系统模式分为三部分:即80%的时间系统处于自主模式(autonomous mode,

AM),此时系统主要依托数字人和机器人进行运转;15%的时间处于平行模式(parallel mode, PM),生物人通过云端或远程交互来指引数字人和机器人的行为,并进行分析处理;5%的时间处于专家/紧急模式(expert/emergency mode, EM),即处理系统发生的特殊情况,生物人需要亲自主导整个系统的运行。在自主模式下,系统依赖预定义的算法进行日常筛选和评估;平行模式下,生物人远程指导进一步分析和测试,调整研究方向以确保精确性;专家模式下,面对意外情况,如药物候选毒性反应,生物人介入评估并决定研发方向,确保问题迅速解决。

2.3 平行制药工厂

平行制药工厂的系统框架如图3所示,同样由真实系统、人工系统和计算实验模块构成,利用IoT技术实现真实与人工系统间的实时交互、数据同步和反馈^[49-50]。真实系统覆盖了制药生产的全流程,包含原材料处理、质量检测到产品包装等关键环节;人工系统通过高级建模与仿真技术,精确模拟生产过程,旨在优化流程、降低成本并提升市场反应速度。计算实验模块集成一系列计算分析工具,支持工艺优化分析和建模。数字人占系统人员组成的80%,通过LLMs的API接入,数字人之间可以通过相互问答的方式进一步优化决策;机器人占15%,通过集成强化学习算法等智能技术,可执行物料处理、设备操作等任务,同时可以接受生物

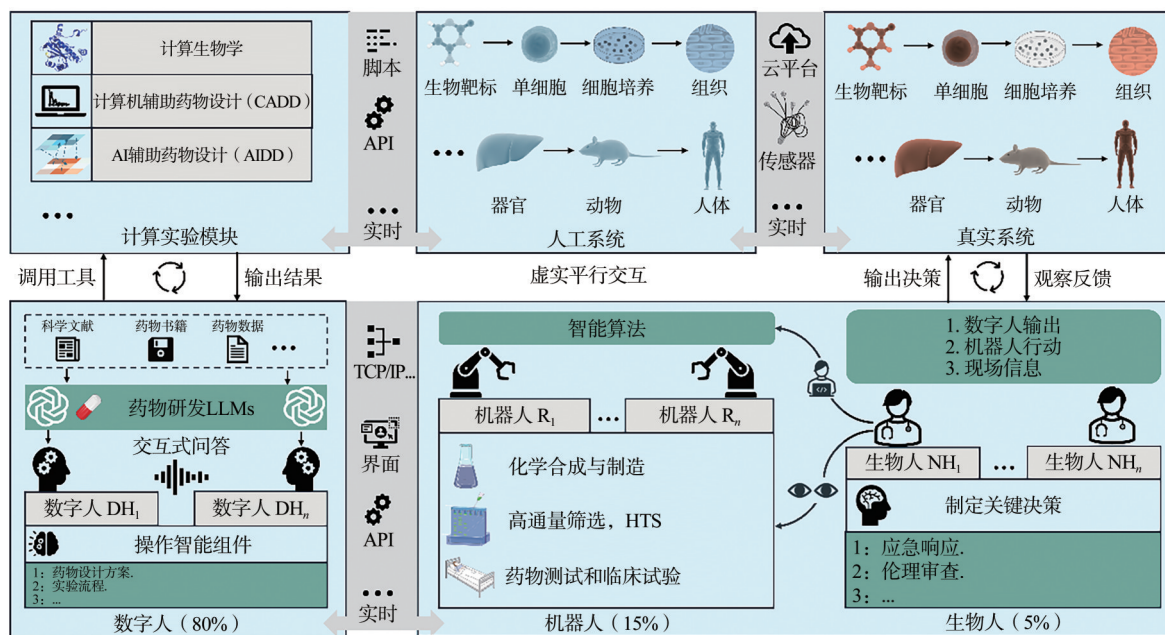


图2 平行药物研发系统框架

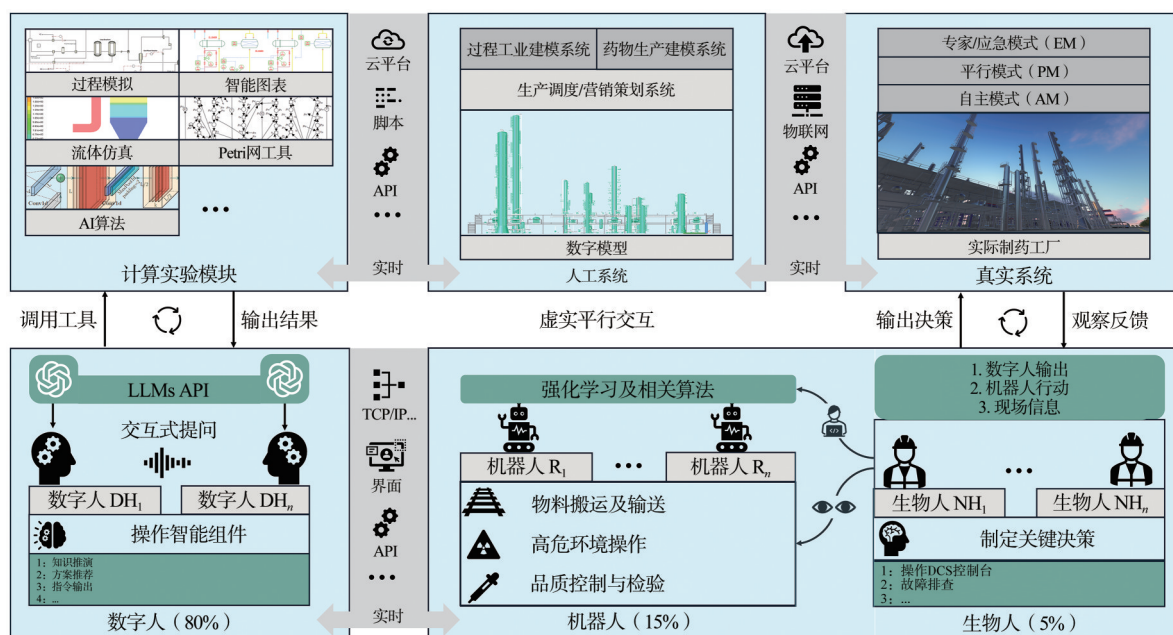


图3 平行制药工厂系统框架

人和数字人的指令；生物人占5%，负责制定关键决策，通过操作DCS等工具保障生产的顺利进行。

平行制药工厂系统的系统模式同样分为3种。AM下，系统自动检验原料并预测需求，不需要人工干预；PM下，面对质量问题，生物人远程协同数字人进行深入分析，共同确保产品质量；EM下，生物人专家直接介入进行故障诊断和决策，数字人和机器人提供数据支持并执行操作，以快速恢复生产。平行制药工厂的创新之处在于人机协同模式，充分结合生物人的决策智慧、数字人的数据处理能力以及机器人的执行效率^[51-53]。这种多元互动体系不仅确保了高效的智能化生产过程，而且提升了对突发事件的应对能力，保障药物生产连续性与稳定性。

2.4 随身药物系统

随身药物系统可以弥补药物医疗保健领域内信息交流的不足，尤其有利于加深患者对药物机理、作用及其潜在副作用的理解，以解答患者对医嘱的疑惑，提高用药遵从性。随身药物系统架构如图4所示，整合了真实系统与人工系统两大模块，创建了一个高效的信息互动平台。系统通过AR/VR技术（如HTC Vive Pro 2、Apple Vision Pro等），可实现虚实之间的平行交互，允许患者在虚拟环境中直观体验药物的作用过程；系统通过眼球追踪、手势控制等沉浸式技术，结合VR或AR设备，提供丰富直观的交互体验。人工系统基于庞大的数据

库，支持用户与LLMs之间进行可信问答，通过集成的垂类LLMs和通用视频生成技术（如OpenAI Sora模型等）^[54]，系统能够根据患者的具体需求，生成个性化的用药指导视频，这些视频不仅包括药物使用过程的基本指导，还能模拟药物在体内的变化过程，以及可能引起的身体状态改变，从而帮助患者更全面地理解药物信息。

此外，系统通过区块链技术和星际文件系统^[55]来加强数据的存储和传输安全，保障患者的隐私。当患者决定把与系统交互的信息分享给主治医生时，这种方式能够避免数据被未经授权的第三方访问。真实系统通过电子健康记录共享用药信息和健康数据，促进医生根据患者反馈及时调整用药策略^[56-58]。随身药物系统建立了一个综合性药物管理与教育指导方案，以满足患者对药物信息的深层需求，为患者和医疗专业人员提供互动平台，为药物医疗保健领域带来新的发展方向^[59]。

3 平行药物系统中关键技术

平行药物系统中的关键技术主要体现在两个方面，首先是人工系统的构建，其次是垂类LLMs的构建。

3.1 人工系统的构建

前文介绍了药物研发、药物生产加工过程中集成的DT技术，DT作为ACP方法中人工系统的一个子集，为构建平行药物系统提供了重要的技术支

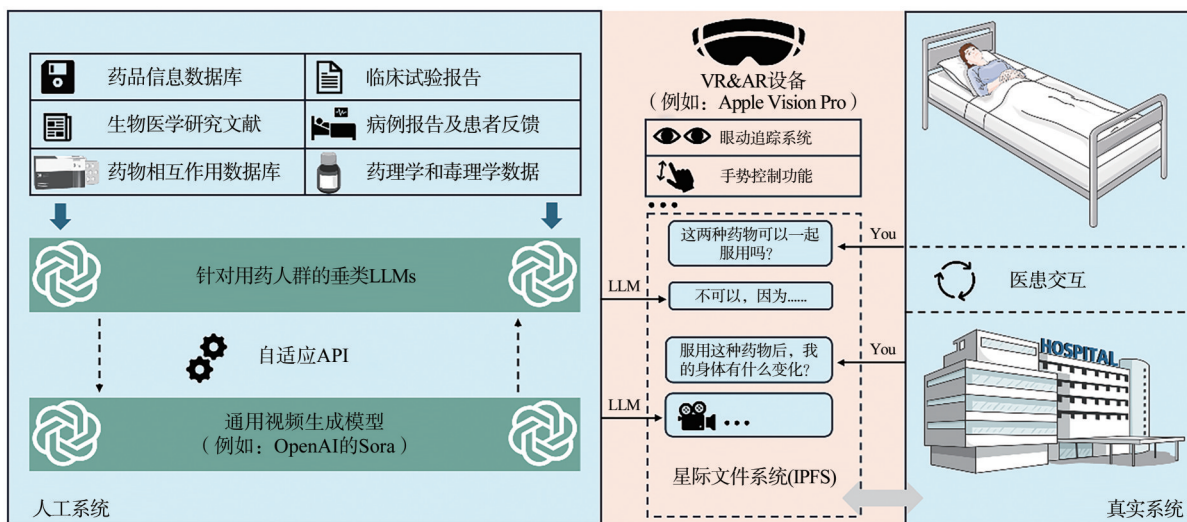


图4 随身药物系统架构

持和参考价值。进一步, ACP方法与平行智能已被广泛应用于智慧医疗, 并取得了显著成效^[60]。王飞跃研究员和Pak Kin Wong教授通过ACP方法构建的预测医疗智能系统, 为精准医学和智能健康管理提供了有效的解决方案^[61]; 2014年王飞跃研究员首次提出平行药物与智能药理学^[62], 为平行药物系统的研究奠定了坚实的理论基础。在随后的几年里, 基于ACP方法的研究在医疗领域进行了广泛的实践。平行眼^[63]通过构建虚拟人眼模型和虚拟眼科医生, 优化眼病治疗方案; 平行皮肤^[64]利用人工皮肤图像系统和计算实验完成诊断分析模型的构建与优化; 平行肠胃^[65]模拟胃肠道疾病诊疗情况, 通过计算实验评估最佳诊疗方案; 平行手术^[66]和平行麻醉系统^[67]分别在手术和麻醉管理中引入ACP方法, 通过虚实交互优化手术方案和麻醉过程。

ACP方法的成功应用验证了其在智慧医疗领域内的强大能力, 特别是在描述智能、预测智能和引导智能方面^[68-69]。平行药物系统的设计不仅可以引入现有DT技术, 而且可融合ACP方法以应对药物研发到生产加工过程中的挑战。该系统的设计理念在于不强调数据的完备性, 而是通过灵活的设计思路, 利用虚拟数据进行智能决策支持, 从而引导真实系统的优化。更重要的是, 平行药物系统通过整合数字人、机器人和生物人的能力, 实现了一个多元化的智能协作环境。

3.2 垂类LLMs的构建

垂类LLMs的构建是平行药物系统发展的核心^[70]。Savage^[71]以及Juhi等^[72]的研究展现了LLMs

在辅助药物发现方面的潜力。Liang等^[73]研发的“DrugChat”及Madani等研发的“ProGen”表明了LLMs在药物化合物分析和蛋白质序列生成中的应用。Michael Moor提出的通用医疗人工智能概念和多模态数据集成方法进一步拓展了LLMs在医疗领域的应用范围。

在药物研发领域, 构建垂类LLMs可以深化对药物化合物、药物相互作用的理解, 提高研发效率。平行制药工厂系统通过接入通用LLMs的API并进行微调来优化生产流程; 随身药物系统通过构建针对用药个体的多模态LLMs, 满足个性化用药需求。这些LLMs为平行药物系统提供“即插即用”的能力, 简化系统集成过程, 优化了整个药物系统^[74-75]。将LLMs与数字人系统集成, 可以通过API调用LLMs和其他工具, 从而实现高效的决策支持和任务执行。这种集成不仅加强了系统的交互和协作能力, 还允许LLMs在各类应用场景中发挥更大的作用, 提高系统的整体性能和用户体验。简而言之, 借助丰富的LLMs资源和数字人的智能化集成, 平行药物系统的应用将变得更加高效、灵活且智能。

4 平行药物系统面临的挑战

4.1 数据挑战

在平行药物系统的构建中, 面临的首要挑战是LLMs的数据需求和多模态数据的统一表征。药物领域的数据收集、清洗和标注过程尤为复杂, 由于数据种类多样(包括化学结构、生物活性、临床试验结果等)且质量和格式存在较大差异, 因此需要

对数据进行细致的清洗和标准化处理。同时，保持数据标注的科学准确性和一致性对于训练可信的LLMs至关重要。另外，多模态数据（文本、图表、图像、声音等）的统一表征也是一个难点。药物研发涉及的数据不局限于文本和图表，还包括药物分子结构图、患者访谈记录等数据，如何对这些不同模态的数据进行有效对齐，实现它们的统一表征，以便LLMs更好地训练与应用，是目前研究的热点^[76]。面对这些数据挑战，平行药物系统的构建需要综合考虑数据预处理、多模态数据融合技术的发展，以及跨模态注意力机制的优化，以确保系统的准确性和有效性。

4.2 隐私挑战

在平行药物系统应用中，隐私挑战尤为关键，特别是在随身药物系统的构建过程中。系统需要基于患者的案例和反馈信息进行训练，其中包括敏感的健康信息和身份识别信息。针对隐私保护的问题，联邦智能通过分布式训练，在不共享敏感数据的情况下更新模型，为解决隐私问题提供了新思路^[77]。尽管如此，由于随身药物系统涉及的患者数据量较小，限制了模型训练的效率 and 准确性。生成式模型（如扩散模型）^[78]能够通过生成虚拟数据集来缓解这一挑战，从而提供额外的数据以支持模型训练，但这同样面临着生成数据质量和隐私保护之间的平衡问题。虽然存在多种技术手段来应对隐私挑战，但在平行药物系统的实际应用中如何有效实施这些技术以保障患者隐私安全，仍然是一个有待解决的问题。

4.3 伦理挑战

平行药物系统中LLMs的应用引入了一系列伦理挑战，涉及医疗伦理、责任归属，以及技术实施可靠性等方面。一方面，LLMs可能“产生幻觉”，即生成的结果不基于输入数据或事实信息。这种现象在药物研发、生产加工和医疗保健中可能导致提供不可靠或完全错误的诊断、治疗建议或测试推荐。另一方面，伦理风险也是不容忽视的问题，例如，当LLMs的用药建议导致患者受到伤害时，确定责任归属成为一个复杂问题，是LLMs的开发者、使用该模型的医疗保健专业人员负责？还是采用该技术的机构负责？此外，为防止AI模型出现偏差，需要相应的监管措施，这些偏差可能在使用患者数据进行训练的过程中被引入，导致不公平的药物医疗保健结果。同时，过度依赖LLMs可能导

致人类专业知识的退化和潜在的错误判断，因此，制定相应的法规来平衡LLMs和人类专业知识的使用至关重要。

为应对这些伦理挑战，Ning等^[79]提出了TREGAI检查表，该检查表为平行药物系统的伦理实施提供了指导，TREGAI检查表纳入道德原则和建议行动，促进伦理审查向纪律化、全面化和透明化发展。面对数据生成的可靠性、责任归属、公平与偏见以及对LLMs的过度依赖等问题，需要行业、研究人员和监管机构共同努力，制定综合指导方针和法规，以确保平行药物系统的伦理健康。

4.4 应用挑战

在药物研发和应用领域，平行药物系统的实施面临着一系列挑战。首先，药物的可持续性是一个重要的考量因素，许多药物成分来源于自然界，包括植物、动物或微生物，对这些自然资源的过度开发可能导致资源枯竭或生态平衡破坏。因此，确保药物来源的可持续性，不仅需要科学家和制药公司的共同努力，还需要全球性的政策支持和公众意识的提升。其次，药物的来源多样性和制备过程的复杂性为质量控制带来了挑战，这要求建立更加严格的质量管理体系，从原材料的采集、加工到最终产品的生产过程，每一步都必须进行严格的质量检验，以确保药物的安全性和有效性。然后，污染和掺假问题是药物安全性的另一大威胁，环境污染可能导致药物原材料的污染，而市场上的掺假行为则可能使患者暴露于无效或有害的药物中。针对这一问题，需要加强对药物原料来源的监管和检测，同时提升公众鉴别药品真伪的能力。此外，一些药物的原料或合成方法可能涉及专利权，导致法律纠纷和争议。这不仅影响药物的研发进度，还可能导致研发成本的增加。因此，解决专利问题，促进知识产权的合理使用和保护，对于平行药物系统的成功实施至关重要。最后，新药物发现方法的不断涌现对平行药物系统提出了更高的要求，平行药物系统需要不断迭代更新，以适应新药物的研发与应用。

5 结论与展望

本文探讨了基于LLMs和三类人的全新框架——平行药物系统，旨在革新药物研发、生产加工及药物医疗保健的传统流程。该框架通过融合数字人、机器人和生物人3类参与者，提升了药物研发的效率和精度，优化了生产流程。系统的关键在

于其虚实交互能力,实时同步实际操作与虚拟模拟数据,为决策提供坚实的数据支持。利用LLMs处理复杂信息后,该系统可准确预测药物相互作用和患者反应,提高药物安全性和有效性评估。

未来平行药物系统的演进预期将突破现有技术壁垒,面对提高数据处理精准度、加强患者数据隐私保护及应对伦理挑战、应用挑战等关键问题,需要从算法优化、高级数据保护措施到伦理规范化等方面展开全方位研究。人工智能、生成式模型、边缘计算等多个维度的新突破将为平行药物系统带来新动力。跨学科合作在此过程中为促进技术创新和多领域知识融合起到至关重要的作用。平行药物系统将继续推动医药产业向智能化、个性化服务发展,优化药物研发生产流程和药物医疗保健模式。

后记

本文的写作经历了十余年的历程,起源于2010年前后我在美国亚利桑那大学与P. K. Wong关于利用计算机游戏和平行智能加速新药发现与研制的合作^[61]。部分设想和成果曾作为QAI智慧健康研究所的规划进行研讨^[62],并借2016年钱学森国际杰出学者讲座之机,邀请美国加州大学洛杉矶分校教授PK和丁显廷博士的导师C.-M. Ho先生在中国科学院进行更加深入的讨论(如图5所示),后由显廷与我完成平行药物的初稿^[80],以及相关的技术论文^[81]。由于各种限制,平行药物的完善稿一直在规划讨论中,直到2023年林飞的加入,经过大家一年的共同努力,终于有了本文的成果,以期成为未来研发的基础。希望这是迈向智慧药物和智能药学的的第一步,在此特向何先生和PK,以及林飞和丁显廷及各位共同作者表示感谢。王飞跃于IEEE PoE 2024, San Diego, CA。



图5 王飞跃、C.-M. Ho、丁显廷(左起)讨论平行药物与智能药学, 2016年

参考文献:

- [1] ZHU Y P. Chinese materia medica: chemistry, pharmacology, and applications[M]. Amsterdam: Harwood Academic, 1998.
- [2] MONTINARI M R, MINELLI S, DE CATERINA R. The first 3500 years of aspirin history from its roots - A concise summary[J]. Vascular Pharmacology, 2019, 113: 1-8.
- [3] BLAY V, TOLANI B, HO S P, et al. High-Throughput Screening: today's biochemical and cell-based approaches[J]. Drug Discovery Today, 2020, 25(10): 1807-1821.
- [4] BORREL A, HUANG R L, SAKAMURU S, et al. High-throughput screening to predict chemical-assay interference[J]. Scientific Reports, 2020, 10(1): 3986.
- [5] SOUTO E B, SILVA G F, DIAS-FERREIRA J, et al. Nanopharmaceutics: part I-clinical trials legislation and good manufacturing practices (GMP) of nanotherapeutics in the EU[J]. Pharmaceutics, 2020, 12(2): 146.
- [6] 王飞跃. 平行系统方法与复杂系统的管理和控制[J]. 控制与决策, 2004, 19(5): 485-489, 514.
WANG F Y. Parallel system methods for management and control of complex systems[J]. Control and Decision, 2004, 19(5): 485-489, 514.
- [7] 王飞跃. 平行哲学: 智能产业与智慧经济的本源及其目标[J]. 中国科学院院刊, 2021, 36(3): 308-318.
WANG F Y. Parallel philosophy: origin and goal of intelligent industries and smart economics[J]. Bulletin of Chinese Academy of Sciences, 2021, 36(3): 308-318.
- [8] 王飞跃. 平行哲学与智能技术: 平行产业与智慧社会的对偶方程与测试基础[J]. 智能科学与技术学报, 2021, 3(3): 245-255.
WANG F Y. Parallel philosophy and intelligent technology: dual equations and testing systems for parallel industries and smart societies[J]. Chinese Journal of Intelligent Science and Technology, 2021, 3(3): 245-255.
- [9] 王飞跃, 杨柳青, 胡晓姬, 等. 平行网络与网络软件化: 一种新颖的网络架构[J]. 中国科学: 信息科学, 2017, 47(7): 811-831.
WANG F Y, YANG L Q, HU X Y, et al. Parallel networks and network softwarization: a novel network architecture[J]. Scientia Sinica (Informationis), 2017, 47(7): 811-831.
- [10] 王坤峰, 苟超, 王飞跃. 平行视觉: 基于ACP的智能视觉计算方法[J]. 自动化学报, 2016, 42(10): 1490-1500.
WANG K F, GOU C, WANG F Y. Parallel vision: an ACP-based approach to intelligent vision computing[J]. Acta Automatica Sinica, 2016, 42(10): 1490-1500.
- [11] 李力, 林懿伦, 曹东璞, 等. 平行学习—机器学习的一个新型理论框架[J]. 自动化学报, 2017, 43(1): 1-8.
LI L, LIN Y L, CAO D P, et al. Parallel learning—a new framework for machine learning[J]. Acta Automatica Sinica, 2017, 43(1): 1-8.
- [12] 袁勇, 王飞跃. 平行区块链: 概念、方法与内涵解析[J]. 自动化学报, 2017, 43(10): 1703-1712.
YUAN Y, WANG F Y. Parallel blockchain: concept, methods and issues[J]. Acta Automatica Sinica, 2017, 43(10): 1703-1712.
- [13] 王飞跃. 平行管理: 复杂性管理智能的生态科技与智慧管理之DAO[J]. 自动化学报, 2022, 48(11): 2655-2669.
WANG F Y. Parallel management: the DAO to smart ecological technology for complexity management intelligence[J]. Acta Automatica Sinica, 2022, 48(11): 2655-2669.
- [14] 王飞跃. 平行哲学与智能科学: 从莱布尼茨的Monad到区块链之DAO[J]. 模式识别与人工智能, 2020, 33(12): 1055-1065.
WANG F Y. Parallel philosophy and intelligent science: from leibniz's

- monad to blockchain's DAO[J]. Pattern Recognition and Artificial Intelligence, 2020, 33(12): 1055-1065.
- [15] ZHANG Y, LUO M Q, WU P, et al. Application of computational biology and artificial intelligence in drug design[J]. International Journal of Molecular Sciences, 2022, 23(21): 13568.
- [16] JUMPER J, EVANS R, PRITZEL A, et al. Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold[J]. Nature, 2021, 596(7873): 583-589.
- [17] VARADI M, ANYANGO S, DESHPANDE M, et al. AlphaFold Protein Structure Database: massively expanding the structural coverage of protein-sequence space with high-accuracy models[J]. Nucleic Acids Research, 2022, 50(D1): D439-D444.
- [18] HIGH R. The era of cognitive systems: An inside look at IBM Watson and how it works[J]. IBM Redbooks, 2012, 1: 16.
- [19] WALLACH I, DZAMBA M, HEIFETS A. AtomNet: a deep convolutional neural network for bioactivity prediction in structure-based drug discovery[EB]. arXiv preprint, 2015, arXiv: 1510.02855.
- [20] BORDUKOVA M, MAKAROV N, RODRIGUEZ-ESTEBAN R, et al. Generative artificial intelligence empowers digital twins in drug discovery and clinical trials[J]. Expert Opinion on Drug Discovery, 2024, 19(1): 33-42.
- [21] LOTFOLLAHI M, WOLF F A, THEIS F J. scGen predicts single-cell perturbation responses[J]. Nature Methods, 2019, 16(8): 715-721.
- [22] CUI H, WANG C, MAAN H, et al. Scgpt: towards building a foundation model for single-cell multi-omics using generative ai. Nat Methods (2024), accepted, doi: 10.1038/s41592-024-02201-0.
- [23] ANDREINI P, BONECHI S, BIANCHINI M, et al. Image generation by GAN and style transfer for agar plate image segmentation[J]. Computer Methods and Programs in Biomedicine, 2020, 184: 105268.
- [24] TANG Y X, ZHANG J L, HE D D, et al. GANDA: a deep generative adversarial network conditionally generates intratumoral nanoparticles distribution pixels-to-pixels[J]. Journal of Controlled Release, 2021, 336: 336-343.
- [25] CHEN X, ROBERTS R, LIU Z C, et al. A generative adversarial network model alternative to animal studies for clinical pathology assessment[J]. Nature Communications, 2023, 14: 7141.
- [26] ALLEN A, SIEFKAS A, PELLEGRINI E, et al. A digital twins machine learning model for forecasting disease progression in stroke patients[J]. Applied Sciences, 2021, 11(12): 5576.
- [27] ARMENI P, POLAT I, DE ROSSI L M, et al. Digital twins in healthcare: is it the beginning of a new era of evidence-based medicine? A critical review[J]. Journal of Personalized Medicine, 2022, 12(8): 1255.
- [28] BERTOLINI D, LOUKIANOV A D, SMITH A M, et al. Modeling disease progression in mild cognitive impairment and Alzheimer's disease with digital twins[EB]. arXiv preprint, 2020, arXiv: 2012.13455.
- [29] TAYLOR D. The pharmaceutical industry and the future of drug development[M]. London: The Royal Society of Chemistry, 2015: 1-33.
- [30] SHARMA N, LIU Y A. A hybrid science-guided machine learning approach for modeling chemical processes: a review[J]. AIChE Journal, 2022, 68(5): e17609.
- [31] NASIRIFAR R, SHAFEGHATI S, VALIPOUR I. A new methodology in generating Digital Plants in AVEVA PDMS from Navisworks® model[J]. Journal of Project Management, 2019, 4(4): 257-266.
- [32] ARDEN N S, FISHER A C, TYNER K, et al. Industry 4.0 for pharmaceutical manufacturing: preparing for the smart factories of the future[J]. International Journal of Pharmaceutics, 2021, 602: 120554.
- [33] CHEN Y J, YANG O, SAMPAT C, et al. Digital twins in pharmaceutical and biopharmaceutical manufacturing: a literature review[J]. Processes, 2020, 8(9): 1088.
- [34] MESKÓ B, TOPOL E J. The imperative for regulatory oversight of large language models (or generative AI) in healthcare[J]. NPJ Digital Medicine, 2023, 6(1): 120.
- [35] NASHWAN A J, ABUJABER A A. Harnessing the power of large language models (LLMs) for electronic health records (EHRs) optimization[J]. Cureus, 2023, 15(7): e42634.
- [36] TU T, AZIZI S, DRIESS D, et al. Towards generalist biomedical AI[J]. NEJM AI, 2024, 1(3): AIoa2300138.
- [37] MOOR M, BANERJEE O, ABAD Z S H, et al. Foundation models for generalist medical artificial intelligence[J]. Nature, 2023, 616(7956): 259-265.
- [38] TOPOL E J. High-performance medicine: the convergence of human and artificial intelligence[J]. Nature Medicine, 2019, 25(1): 44-56.
- [39] ACOSTA J N, FALCONE G J, RAJPURKAR P, et al. Multimodal biomedical AI[J]. Nature Medicine, 2022, 28(9): 1773-1784.
- [40] TOVINO S A. The HIPAA privacy rule and the EU GDPR: illustrative comparisons[J]. Seton Hall L. Rev., 2016, 47: 973.
- [41] NEWAZ A I, SIKDER A K, RAHMAN M A, et al. A survey on security and privacy issues in modern healthcare systems: attacks and defenses[J]. ACM Transactions on Computing for Healthcare, 2(3): 27.
- [42] 白天翔, 沈震, 刘雅婷, 等. 平行机器: 一种智能机器的管理与控制框架[J]. 智能科学与技术学报, 2019, 1(2): 181-191.
- BAI T X, SHE N Z, LIU Y T, et al. Parallel machine: a framework for the control and management for intelligent machines[J]. Chinese Journal of Intelligent Science and Technology, 2019, 1(2): 181-191.
- [43] 张俊, 许沛东, 王飞跃. 平行系统和数字孪生的一种数据驱动形式表示及计算框架[J]. 自动化学报, 2020, 46(7): 1346-1356.
- ZHANG J, XU P D, WANG F Y. Parallel systems and digital twins: a data-driven mathematical representation and computational framework[J]. Acta Automatica Sinica, 2020, 46(7): 1346-1356.
- [44] 杨林瑶, 陈思远, 王晓, 等. 数字孪生与平行系统: 发展现状、对比及展望[J]. 自动化学报, 2019, 45(11): 2001-2031.
- YANG L Y, CHEN S Y, WANG X, et al. Digital twins and parallel systems: state of the art, comparisons and prospect[J]. Acta Automatica Sinica, 2019, 45(11): 2001-2031.
- [45] 薛霄, 于湘凝, 周德雨, 等. 计算实验方法的溯源、现状与展望[J]. 自动化学报, 2023, 49(2): 246-271.
- XUE X, YU X N, ZHOU D Y, et al. Computational experiments: past, present and perspective[J]. Acta Automatica Sinica, 2023, 49(2): 246-271.
- [46] WANG F Y. Toward a revolution in transportation operations: AI for complex systems[J]. IEEE Intelligent Systems, 2008, 23(6): 8-13.
- [47] YANG J, WANG X, TIAN Y L, et al. Parallel intelligence in CPSSs: being, becoming, and believing[J]. IEEE Intelligent Systems, 2023, 38(6): 75-80.
- [48] MIAO Q H, LYU Y S, HUANG M, et al. Parallel learning: overview and perspective for computational learning across Syn2Real and Sim2Real[J]. IEEE/CAA Journal of Automatica Sinica, 2023, 10(3): 603-631.
- [49] 王飞跃, 李乐飞, 黄星, 等. 关于长周期连续安全节能有效生产基础理论的探讨[J]. 计算机与应用化学, 2007, 24(12): 1711-1713.
- WANG F Y, LI L F, HUANG X, et al. A discussion of fundamental theory of long period continuous production emphasizing effectiveness, safety and energy saving[J]. Computers and Applied Chemistry, 2007, 24(12): 1711-1713.
- [50] 熊刚, 王飞跃, 邹余敏, 等. 提升乙烯长周期生产管理的平行评估方法[J]. 控制工程, 2010, 17(3): 401-406.
- XIONG G, WANG F Y, ZOU Y M, et al. Parallel evaluation method to

- improve long period ethylene production management[J]. *Control Engineering of China*, 2010, 17(3): 401-406.
- [51] WANG F Y, YANG J, WANG X X, et al. Chat with ChatGPT on industry 5.0: learning and decision-making for intelligent industries[J]. *IEEE/CAA Journal of Automatica Sinica*, 2023, 10(4): 831-834.
- [52] WANG F Y. New control paradigm for industry 5.0: From big models to foundation control and management[J]. *IEEE/CAA Journal of Automatica Sinica*, 2023, 10(8): 1643-1646.
- [53] WANG X X, YANG J, WANG Y T, et al. Steps toward industry 5.0: building “6S” parallel industries with cyber-physical-social intelligence [J]. *IEEE/CAA Journal of Automatica Sinica*, 2023, 10(8): 1692-1703.
- [54] WANG F Y, MIAO Q H, LI L X, et al. When does sora show: the beginning of TAO to imaginative intelligence and scenarios engineering [J]. *CAA Journal of Automatica Sinica*, 2024, 11(4): 809-815.
- [55] ZHENG Q H, LI Y, CHEN P, et al. An innovative IPFS-based storage model for blockchain[C]//*Proceedings of the 2018 IEEE/WIC/ACM International Conference on Web Intelligence (WI)*. Piscataway: IEEE Press, 2018: 704-708.
- [56] XUE X, YU X N, WANG F Y. ChatGPT chats on computational experiments: from interactive intelligence to imaginative intelligence for design of artificial societies and optimization of foundational models [J]. *IEEE/CAA Journal of Automatica Sinica*, 2023, 10(6): 1357-1360.
- [57] LIU S C, WANG J X, YANG Y J, et al. ChatGPT-powered conversational drug editing using retrieval and domain feedback[EB]. arXiv preprint, 2023, arXiv: 2305.18090.
- [58] MIAO Q H, ZHENG W B, LV Y S, et al. DAO to HANOI via DeSci: AI paradigm shifts from AlphaGo to ChatGPT[J]. *IEEE/CAA Journal of Automatica Sinica*, 2023, 10(4): 877-897.
- [59] 王飞跃. 平行医生与平行医院: ChatGPT与通用人工智能技术对未来医疗的冲击与展望[J]. *协和医学杂志*, 2023, 14(4): 673-679.
- WANG F Y. Parallel doctors and parallel hospitals: impact and perspective of ChatGPT-like AIGC and AGI on medicine and medicare[J]. *Medical Journal of Peking Union Medical College Hospital*, 2023, 14(4): 673-679.
- [60] 王飞跃. 数字医生与平行医疗: 从医疗知识自动化到系统化智能医学[J]. *协和医学杂志*, 2021, 12(6): 829-833.
- WANG F Y. Digital doctors and parallel medicare: from medical knowledge automation to systems intelligence medicine. *Medical Journal of Peking Union Medical College Hospital*, 2021, 12(6): 829-833.
- [61] WANG F Y, WONG P K. Intelligent systems and technology for integrative and predictive medicine: an ACP approach[J]. *ACM Transactions on Intelligent Systems and Technology*, 2013, 4(2): 32.
- [62] 王飞跃. 平行药物与智能药学[R]. QAI技术报告, 2014.
- WANG F Y. Parallel drugs and smart pharmacy[R]. QAI Technical Report, 2014.
- [63] 王飞跃, 张梅, 孟祥冰, 等. 平行眼: 基于ACP的智能眼科诊疗[J]. *模式识别与人工智能*, 2018, 31(6): 495-504.
- WANG F Y, ZHANG M, MENG X B, et al. Parallel eyes: an ACP-based smart ophthalmic diagnosis and treatment[J]. *Pattern Recognition and Artificial Intelligence*, 2018, 31(6): 495-504.
- [64] 王飞跃, 苟超, 王建功, 等. 平行皮肤: 基于视觉的皮肤病分析框架[J]. *模式识别与人工智能*, 2019, 32(7): 577-588.
- WANG F Y, GOU C, WANG J G, et al. Parallel skin: a vision-based dermatological analysis framework[J]. *Pattern Recognition and Artificial Intelligence*, 2019, 32(7): 577-588.
- [65] 张梅, 陈鸽, 王飞跃, 等. 平行胃肠: 基于ACP的智能胃肠疾病诊疗[J]. *模式识别与人工智能*, 2019, 32(12): 1061-1071.
- ZHANG M, CHEN L, WANG F Y, et al. Parallel gastrointestinal: an ACP-based approach for intelligent operations[J]. *Pattern Recognition and Artificial Intelligence*, 2019, 32(12): 1061-1071.
- [66] 王飞跃, 张梅, 孟祥冰, 等. 平行手术: 基于ACP的智能手术计算方法[J]. *模式识别与人工智能*, 2017, 30(11): 961-970.
- WANG F Y, ZHANG M, MENG X B, et al. Parallel surgery: an ACP-based approach for intelligent operations[J]. *Pattern Recognition and Artificial Intelligence*, 2017, 30(11): 961-970.
- [67] 赵毅飞, 申乐, 叶佩军, 等. 平行麻醉: 从麻醉自动化走向智慧型全周期麻醉平台[J]. *智能科学与技术学报*, 2023, 5(2): 234-246.
- ZHAO Y F, SHEN L, YE P J, et al. Parallel anesthesia: from anesthesia automation to intelligent full-cycle anesthesia platform[J]. *Chinese Journal of Intelligent Science and Technology*, 2023, 5(2): 234-246.
- [68] 王飞跃. 平行医学: 从医学的温度到智慧的医学[J]. *智能科学与技术学报*, 2021, 3(1): 1-9.
- WANG F Y. Parallel medicine: from warmth of medicare to medicine of smartness[J]. *Chinese Journal of Intelligent Science and Technology*, 2021, 3(1): 1-9.
- [69] 王拥军, 王飞跃, 王戈, 等. 平行医院: 从医院信息管理系统到智慧医院操作系统[J]. *自动化学报*, 2021, 47(11): 2585-2599.
- WANG Y J, WANG F Y, WANG G, et al. Parallel hospitals: from hospital information system(HIS) to hospital smart operating system(HSOS) [J]. *Acta Automatica Sinica*, 2021, 47(11): 2585-2599.
- [70] CHAKRABORTY C, BHATTACHARYA M, LEE S S. Artificial intelligence enabled ChatGPT and large language models in drug target discovery, drug discovery, and development[J]. *Molecular Therapy Nucleic Acids*, 2023, 33: 866-868.
- [71] SAVAGE N. Drug discovery companies are customizing ChatGPT: here's how[J]. *Nature Biotechnology*, 2023, 41(5): 585-586.
- [72] JUHI A, PIPIL N, SANTRA S, et al. The capability of ChatGPT in predicting and explaining common drug-drug interactions[J]. *Cureus*, 2023, 15(3): e36272.
- [73] LIANG Y, ZHANG R, ZHANG L, et al. DrugChat: towards enabling ChatGPT-like capabilities on drug molecule graphs[J]. arXiv preprint, 2023, arXiv: 2309.03907.
- [74] 田永林, 王雨桐, 王建功, 等. 视觉 Transformer 研究的关键问题: 现状及展望[J]. *自动化学报*, 2022, 48(4): 957-979.
- TIAN Y L, WANG Y T, WANG J G, et al. Key problems and progress of vision Transformers: The state of the art and prospects. *Acta Automatica Sinica*, 2022, 48(4): 957-979.
- [75] 田永林, 陈苑文, 杨静, 等. 元宇宙与平行系统: 发展现状, 对比及展望[J]. *Chinese Journal of Intelligent Science & Technology*, 2023, 5(1): 121-132.
- TIAN Y L, CHEN Y W, YANG J, et al. Metaverses and parallel systems: the state of the art, comparisons and prospects[J]. *Chinese Journal of Intelligent Science and Technology*, 2023, 5(1): 121-132.
- [76] QURESHI R, IRFAN M, GONDAL T M, et al. AI in drug discovery and its clinical relevance[J]. *Heliyon*, 2023, 9(7): e17575.
- [77] 王飞跃, 王艳芬, 陈慧竹, 等. 联邦生态: 从联邦数据到联邦智能[J]. *智能科学与技术学报*, 2020, 2(4): 305-311.
- WANG F Y, WANG Y F, CHEN Y Z, et al. Federated ecology: from federated data to federated intelligence[J]. *Chinese Journal of Intelligent Science and Technology*, 2020, 2(4): 305-311.
- [78] HO J, JAIN A, ABBEEL P. Denoising diffusion probabilistic models[J]. *Advances in neural information processing systems*, 2020, 33: 6840-6851.
- [79] NING Y L, TEIXAYAVONG S, SHANG Y Q, et al. Generative artificial intelligence in healthcare: ethical considerations and assessment checklist[EB]. arXiv preprint, 2023, arXiv: 2311.02107.

[80] 丁显廷, 王飞跃. 平行药物[R]. 上海交通大学, 2018.

DING X T, WANG F Y. Parallel drugs [R]. Shanghai Jiao Tong University, 2018.

[81] WANG B, DING X, WANG F Y. Determination of polynomial degree in the regression of drug combinations[J]. IEEE/CAA Journal of Automatica Sinica, 2017, 4(1): 41-47.

[作者简介]



林飞 (1994-), 男, 澳门科技大学博士生, 主要研究方向为平行系统、人工智能药物研发、大语言模型、多模态感知、生成式人工智能。



丁显廷 (1984-), 男, 博士, 上海交通大学特聘教授, 国际合作交流处副处长, 生物医学工程学院分子医学纳米平台主任, 个性化医学研究院常务副院长, 主要研究方向为基于人工智能的药物设计、个体化诊疗标志物发现与检测。



倪清桦 (1999-), 女, 澳门科技大学博士生, 主要研究方向为平行智能、区块链、数字孪生、智能系统等。



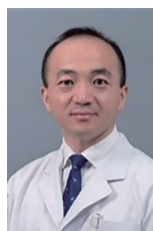
王飞跃 (1961-), 男, 博士, 中国科学院自动化研究所复杂系统管理与控制国家重点实验室主任, 澳门科技大学特聘教授, 主要研究方向为平行系统的方法与应用、社会计算、平行智能、知识自动化。



王静 (1992-), 男, 中国科学院自动化研究所工程师, 主要研究方向为平行医疗理论与方法、智慧医疗系统的构建与应用。



田永林 (1994-), 男, 中国科学院自动化研究所博士后, 主要研究方向为平行系统、自动驾驶、场景工程。



申乐 (1979-), 男, 医学博士与理学博士, 中国医学科学院北京协和医院麻醉科常务副主任 (主持工作), 主要研究方向为围术期麻醉医疗质量管理与患者安全、疼痛与瘙痒的机制与生物干预。