

2020 年创腾科技生命科学分子模拟在线课程

分子模拟在食品、环境等科学中的应用

培训相关信息如下：

培训时间：2020 年 6 月 17-19 日，共三天

培训地点：**在线课程**

学员福利：凡**第三次或以上**参加“创腾学院”DS 培训班的学员，均可领取一张当年内有效的半价券。
(注：本券只限本人使用，不可转让)

一、培训主旨

俗话说，民以食为天，食品是一种与人类讲课有着密切关系的必需品。食品工业在世界主要工业化国家的国民经济中均占有重要地位。而食品科学是食品工业的科学基础，它是一门交叉学科，是整合和应用生物学、化学、物理学、医学及工程学等基础学科理论去研究食品的性质、导致食品变质的因素、加工过程原理以及改造食品的学科。许多食品本身即可以作为食物也可以作为药物，食物和药物之间并无绝对的分界线。如我们平时食用的山药和山楂既是食品也是药品。所谓药食同源表明医药与饮食属于同一个起源。而从食物中发现的一些药物分子与合成设计的药物分子相比较，具有副作用小等优势。

毒理学 (toxicology) 是一门研究外源因素 (化学、物理、生物因素) 对生物系统的有害作用的应用学科。是一门研究化学物质对生物体的毒性反应、严重程度、发生频率和毒性作用机制的科学，也是对毒性作用进行定性和定量评价的科学。毒理学在药物研发领域和环境研究领域具有重要的作用。分子模拟利用计算机以原子水平的分子模型来模拟分子结构与行为，进而模拟分子体系的各种物理、化学性质的方法。通过分子模拟方法，可以帮助食品科学和环境科学研究人员大大降低科研工作中的各类成本，缩短研发周期，提高研发效率等。

二、培训对象

从事食品、药物、环境毒理等相关领域的科研工作者，有兴趣想要借助 Discovery Studio 软件来开展相关设计工作的相关人员，希望能进一步系统掌握分子模拟技术、软件使用技巧、能够快速上机模拟操作相关课题的老师和同学。

三、培训内容

本次培训班将以 Discovery Studio2020 的基础操作和应用为核心、以食品科学中将会涉及到的分子模拟相关技术进行介绍与上级操作，包括：食品与靶标作用机理研究、食品科学中小分子的设计与优化改造、蛋白的序列预测、蛋白的三维结构预测、蛋白的设计改造、基于二硫键和聚集预测的蛋白稳定性预测、GPU 加速的分子动力学模拟及分子的毒性预测等。



本次培训将为参加人员开通 MAXFLOW 标准版账号，参加人员可以通过 MAXFLOW 标准版使用 DS 全部教程。MAXFLOW 标准版是创腾科技为广大 DS 用户提供的云端技术服务平台，通过 MAXFLOW 大家可以享受到以下服务和资源：

支持中心：

- 1、支持社区，用户提出问题，技术专家会及时做出解答
- 2、问题精析，DS 常见的一些使用问题解答

知识中心

- 1、操作教程，DS 各功能模块使用操作步骤教程
- 2、视频中心，各功能模块操作视频教程

资源中心

- 1、文献中心，DS 在模拟设计中的文献应用案例
- 2、新功能精析，DS 各版本新功能介绍

四、培训形式

- 通过文献案例分析介绍经典分子模拟方法在食品研究等方面的应用；
- 演示操作：讲解具体操作流程及参数设置（提供完整的培训教程）；
- 学员交流与讨论，工程师进行在线答疑。

五、培训费用

1 人参加	特惠价格及条件（符合任一条件即可）： 1、同一单位，≥2人参加； 2、同一学员（2011年至今）曾参加过DS培训课程。
3100/人	2500/人

- 注：1、培训费包含 **100 元邮寄纸质版教材费用**，课程结束后不再发送电子版 PPT 和教材。
- 2、发票为电子发票，学员缴费后扫码填写发票信息，发票将发送到学员邮箱，发票内容为 **“培训费”** 或 **“会议费”**。
- 3、本次培训不提供增值税专用发票，统一开增值税普通发票。

六、报名方式

- 1、**报名方式**：登录创腾学院官网 <http://training.neotrident.com/> 在线提交或下载**报名回执**。名额有限，报名从速，额满为止。

- 2、**付费方式**：

银行汇款 **（请在汇款时务必备注参加人员姓名）**

户 名：苏州创腾数据科技有限公司（行号：308305008189）

开户行：招商银行苏州分行营业部

账 户：512907942610802

创腾学院微信公众号



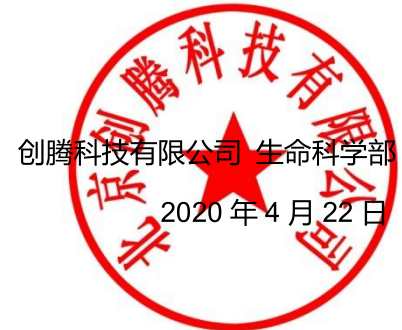
七、培训班联系人

创腾科技有限公司 市场部

电话: 0512-67509707 (转 220) (叶小姐) ,
021-51821768-233 (陈小姐) , 13916858963

Email: market@neotrident.com

培训网站: <http://training.neotrident.com/>



附：培训班日程安排。



日期	时间	内容
第一天	08:30-09:00	报到和注册
	09:00-10:15	Discovery Studio 的基本界面及基本操作 DS 背景介绍, DS 界面介绍, 小分子、多肽、寡糖分子构建、蛋白与小分子的预处理方法介绍与入门操作。
	10:15-10:30	茶歇
	10:30-10:50	食品与靶标作用机理研究专题之一: 分子对接简介 从基于受体的角度, 借助分子对接的模拟方式, 阐述食品和生物大分子直接的相互作用。涉及分子对接的核心与原理, 蛋白活性位点定义方法等。
	10:50-11:45	食品与靶标作用机理研究专题之二: 分子对接 LibDock 化合物虚筛流程的介绍, 分子对接结果的分析, 最优对接构象的选取方法, 分子对接算法的选取方法, 虚筛真阳性分子命中率的提高方法, LibDOCK 的原理、参数设置及案例分析。
	11:45-13:30	午餐时间
	13:30-15:00	食品与靶标作用机理研究专题之三: 分子对接 CDOCKER 关键氨基酸的识别与显示方法, 作用机理解释手段, CDOCKER 原理介绍、参数设置技巧和实际操作技巧等。
	15:00-15:15	茶歇
	15:15-16:30	食品与靶标作用机理研究专题之四: 分子对接 Flexible Docking 对接过程中蛋白分子柔性的考虑方法, Flexible Docking 原理介绍、参数设置技巧和实际操作技巧等。
	16:30-17:15	课程讨论及答疑
第二天	09:00-10:15	食品与靶标作用机理研究专题之五: 大分子对接 ZDOCK 蛋白-蛋白/多肽/核酸间的对接, 结合位点、结合模式的确定, 结合表面关键残基的分析, ZDOCK 基本原理介绍、案例分析, 参数设置技巧、实际操作技巧及结果分析。
	10:15-10:30	茶歇
	10:30-11:45	食品科学中药效特征描述专题之一: 基于配体的药效团模型构建 利用现有活性小分子发现其中的药效特征, 构建药效团模型发现其他潜在药物小分子。Hiphop 和 Hypogen 的原理, 参数设置技巧、实际操作技巧及结果分析等。
	11:45-13:30	午餐时间
	13:30-15:45	食品科学中药效特征描述专题之二: 基于受体的药效团模型构建 利用受体结构构建药效团模型, 研究小分子和受体蛋白间的相互作用, SBP 和 CBP 的原理, 参数设置技巧、实际操作技巧及结果分析等。
	15:45-16:00	茶歇
	16:00-16:30	食品科学中药效团的应用专题之三: 反向找靶 利用 CBP 产生的药效团模型和 PhamaDB 数据库, 发现现有食品中可能存在的药物靶标。设计参数设置技巧、实际操作技巧及结果分析等。
16:30-17:15	课程讨论及答疑	
第三天	09:00-10:00	食品科学中生物大分子模拟专题之一: 蛋白质序列分析 蛋白序列的分析, 如进化分析、翻译后修饰位点的预测等, 应用与操作。
	10:00-10:15	茶歇
	10:15-11:45	食品科学中生物大分子模拟专题之二: 蛋白质同源建模



	同源建模核心原理介绍及案例分析，同源模板的选取技巧、同源模型的优化与评价等。
11:45-13:30	午餐时间
13:30-14:45	食品科学中生物大分子模拟专题之三：虚拟氨基酸突变 突变位点、突变组合的建议，原理介绍、参数设置技巧、实际操作技巧及结果分析。
14:45-15:00	茶歇
15:00-15:45	食品或环境研究中的分子性质预测：分子性质如毒性等预测 ADMET 及 TOPKAT 毒性预测基本原理介绍、参数设置技巧、实际操作技巧及结果分析。
15:45-16:30	支持 GPU 计算的分子动力学模拟介绍及应用 分子动力学原理、参数设置技巧、实际操作技巧及结果分析。
16:30-17:15	课程讨论及答疑

