

2023 年创腾科技生命科学分子模拟与人工智能课程 分子模拟与人工智能在小分子药物设计领域的应用

培训相关信息如下：

培训时间：2023 年 7 月 27-30 日，共 4 天

培训地点：江苏省苏州市工业园区东长路 88 号 2.5 产业园 A3 栋 2 层 培训中心

一、培训主旨

中国对于创新药的研发有着非常强烈的需求，然而一个新药从研发到商业化销售，要经历药物发现、药物设计、临床前、临床研究，等候审批上市等阶段，其中耗费的时间成本、人力物力成本十分庞大，这使得国内药企和科研院所对于创新药开发既爱又恨。

近年来，利用高性能计算机来进行药物虚拟筛选已经被广泛应用，计算机辅助药物设计可以提高药物研发的成功率，降低研发成本，缩短研发周期，是目前创新药物研究的核心技术之一。随着医药大数据的积累和人工智能技术的发展，运用 AI 技术并结合大数据的精准药物设计也不断推动着创新药物的发展。为了提高教学质量、让学员对 CADD 与 AIDD 有更深刻的理解，本次创腾科技暑期培训班特邀来自复旦大学的付伟教授和上海大学的陆文聪教授，分别针对药物设计学以及机器学习来进行授课。同时本次培训班为了帮助学员系统了解、掌握如何应用分子模拟技术与人工智能算法解决新药设计中的一些热点问题并快速上机操作，在实战环节划分了两个领域，分别是：基于全新靶点的药物设计、基于热点靶点的药物设计，涉及的功能有：同源建模、全新分子生成、药靶亲和力预测、分子对接、分子动力学、ADMET 预测、QSAR 模型搭建、小分子逆合成预测等，旨在通过本次培训班让学员在后续的课题研究、工作进展推动以及工作应聘中可以游刃有余、拓展思维。

二、特邀嘉宾介绍



付伟 教授 复旦大学

2001 年博士毕业于吉林大学理论化学研究所

现任复旦大学药学院教授、博士生导师

主持国家自然科学基金 7 项、上海市生物医药基础重点项目 3 项，国际合作项目 2 项，做为骨干参加了国家 973、863 等项目。在国内外著名期刊发表论文 80 篇，以第一发明人获授权专利 17 项，申请 PCT 专利 1 项，在美国和上海市获得多项学术奖项。主编国家级十四五规划战略教材《药物设计学》，主编专著《计算机辅助药物设计导论》，参编教材/专著 3 部，国家级一流线上课程《药物设计学》负责人，开设国际化慕课。现任 SCI 期刊 Chemical Biology & Drug Design 杂志编辑，上海市衰老与退行性疾病协会常务理事，中国非酒精性脂肪肝 NASH 联盟创始核心成员。





陆文聪 教授 上海大学

1986 年本科毕业于清华大学化学系物理化学专业，2000 年博士毕业于中科院上海冶金所材料物理和化学专业。现任上海大学教授、博士生导师，兼任中国化学会计算机化学专业委员会委员、《Advances in Manufacturing》SCI 期刊副主编。

长期从事基于数据挖掘/机器学习的材料设计和工业优化等研究工作，开发了材料数据挖掘在线计算平台，为材料大数据的机器学习提供了在线计算方法和模型共享功能；开发了基于大数据挖掘的工业优化系统，利用化工生产大数据建立机器学习模型，用于产品质量和产量的优化控制。先后主持国家自然科学基金项目 4 项，国家重点研发计划课题 1 项，上海科委项目 5 项，企业合作项目 20 余项。已发表学术论文 230 余篇、研究专著 3 本，获得省部级科技奖 4 项，获得国家发明专利授权 12 项。

先后主持国家自然科学基金项目 4 项，国家重点研发计划课题 1 项，上海科委项目 5 项，企业合作项目 20 余项。已发表学术论文 230 余篇、研究专著 3 本，获得省部级科技奖 4 项，获得国家发明专利授权 12 项。

三、培训对象

从事新药设计与合成相关领域的科研工作者以及高校药学专业或对药学专业感兴趣的大学生、研究生，希望了解分子模拟与人工智能、对分子模拟与人工智能感兴趣、想借助分子模拟与人工智能技术来开展新药研究工作并能快速上机模拟操作的相关人员。

四、培训内容

本次培训首先会对目前常用的分子模拟技术与人工智能算法的原理及应用进行入门的介绍。同时以 MaXFlow 平台为依托，对 MaXFlow 中多种分子对接算法、分子动力学模拟技术、全新分子生成、QSAR 模型构建方法、ADMET 性质的预测及类药性的分析等技术方法及在新药发现领域中的应用进行全面介绍与探讨。

▪ **基于全新靶点的药物设计**：通过同源建模得到靶点结构，以基于靶点的全新分子生成数据库为虚筛来源，基于药靶亲和力预测、分子对接、分子动力学、ADMET 预测、类药性分析进行虚拟筛选，通过小分子逆合成预测进行小分子合成路线分析；

▪ **基于热点靶点的药物设计**：通过基于配体的分子生成数据库作为虚筛来源，基于药靶亲和力预测、分子对接、QSAR 模型、ADMET 预测、类药性分析进行虚拟筛选，通过小分子逆合成预测进行小分子合成路线分析。

五、培训形式

- 1、邀请权威讲师介绍药物设计与 AI 的原理、方法、应用及发展方向等，让学员对新药设计的方法有着更系统全面的认识；
- 2、通过文献案例分析讲解新药设计策略，以及相应功能模块的原理介绍；
- 3、上机操作：讲解新药设计过程中每一步骤的具体操作流程及参数设置（提供完整的培训教程）；
- 4、学员交流与讨论，工程师进行现场答疑。



六、报到及培训时间

报到时间:

2023年7月26日 9:30-19:00 (A2幢303室 创腾科技)

2023年7月27日 8:00-9:00 (A3幢2层 培训中心)

培训时间:

2023年7月27~30日 (四天) 9:00~12:00 & 13:30~18:00

七、培训费用

注册类型	培训费用 (1人参加)	优惠价 7月20日前缴费 或同一单位≥2人参加	团购价 5人以上组团 (不限同单位)	团购价 10人以上组团 (不限同单位)
教育/政府科研客户	4800/人	3800/人	3000/人	2800/人
企业客户	5800/人	4800/人	4000/人	3800/人

*注:

- 1、培训费包含听课费、资料费、上机费、午餐。**住宿和交通费自理; 需要学员自带电脑;**
- 2、由学员自行组织团购, 不限同一个单位, 报名时务必备注团长姓名;
- 3、收到您的报名费后工作人员会将《参训指南》通过邮件发给您;
- 4、统一开据发票内容为“**培训费**”, 发票将在培训期间发给学员, 若您对发票内容有特殊要求请发邮件至 market@neotrident.com 说明。

八、报名方式

• 报名方式:

- 1、在线报名: [点击此处](#)
- 2、手机识别右侧二维码, 提交报名

*注: 提交报名信息后**1个工作日内**会收到成功报名的邮件, 请收到确认邮件后再安排付款。



• 付费方式:

- a、银行汇款 (**请在汇款时务必备注参加人员姓名**)
户名: 北京创腾科技有限公司上海分公司
开户行: 招商银行上海荣科路支行
账户: 121919707510501
- b、现金支付: 培训现场可收取现金或支付宝和微信支付。



九、周边住宿 (请学员自行预定, 费用自理)

- 宾馆名称: 苏州汀兰酒店 0512-65001115
宾馆地址: 苏州工业园区星龙街 515 号
- 宾馆名称: 臻庭精选酒店 (苏州工业园区奥体中心店) 0512-62628333
宾馆地址: 苏州工业园区淞北路 330 号文华公寓 9 号楼 1 楼
- 宾馆名称: 汉庭酒店 (苏州凤凰新天地店) 0512-62805388
宾馆地址: 苏州工业园区南榭雨街 9 号凤凰新天地商业二期 41 幢 103 号

*注: 以上 3 个经济型酒店供学员参考, 周边住宿较紧张, 建议学员提早预定。

十、交通地图

培训地址: 江苏省苏州市工业园区东长路 88 号 2.5 产业园 A3 栋 2 层 (靠近产业园西 1 号门, 与星巴克同一幢)

交通路线参考:

• 苏州园区火车站

- 1、【沪宁城铁园区站广场站】上车坐 116 路公交, 【港田路绿野桥站】下车, 步行 1100 米到。全程约 1 小时 10 分钟。
- 2、打车最短距离约 11 公里, 费用约 36 元。

• 苏州站

- 1、地铁 4 号线 (同里方向) 【苏州火车站】上车, 【乐桥】下车换乘地铁 1 号线 (钟南街方向), 至【南施街】下车 1 号口出, 【园区城管大厦】上快 7 路公交, 【凤凰城首末站】下车, 步行 316 米到。全程约 1 小时 12 分钟。
- 2、打车最短距离约 21 公里, 费用约 60 元。

• 苏州北站

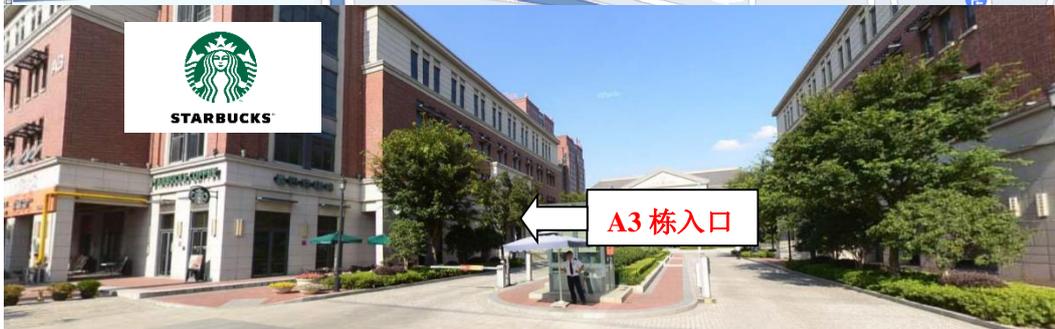
- 1、步行 1100 米到【京沪高铁苏州北站】坐快 7 路公交, 【凤凰城首末站】下车, 步行 316 米到。全程约 1 小时 48 分钟。
- 2、打车最短距离约 22 公里, 费用约 65 元。



Beijing | Shanghai | Suzhou AI Driven Innovation & Quality



• 地理位置



• 2.5 产业园入口处



• 左图：A3 幢入口

• 右图：A2 幢入口

十一、培训班联系人

创腾科技有限公司 市场部

电话：0512-67509707-805 或 15262446522 (崔小姐)

13916858963 (陈小姐)

Email: market@neotrident.com

创腾科技有限公司 生命科学部

2023 年 7 月 6 日

附件：培训日程安排



附件:

培训日程安排

日期	时间	内容
第一天 复旦大学 付伟教授 药物设计学	08:00-09:00	报到地点及时间 A2 幢 303 室创腾科技 (7 月 26 日 19:00 前) A3 幢 2 层 培训中心 (7 月 27 日 8:00-9:00)
	09:00-09:30	药物设计学导论 进行药物设计学概述、药物设计基本原理以及先导化合物发现途径
	09:30-10:45	药物靶点及其理论 主要涉及靶点的概念、假设、分类、要求以及经典与现代药物发现
	10:45-11:00	茶歇
	11:00-12:00	基于结构的药物设计 I 介绍 SBDD 的基本理论、技术和方法; 介绍药物受体相互作用理论, 药物-受体相互作用力的类型和性质 , 介绍分子三维结构的理论计算方法 I: 量子化学, 密度泛函, 半经验方法。
	12:00-13:30	午餐
	13:30-15:30	基于结构的药物设计 II 介绍分子三维结构的理论计算方法 II, 分子力学, 分子动力学; 介绍分子模型技术; 蛋白结构和功能的关系, 直接药物设计与间接药物设计的方法, 活性位点分析, 分子对接, 基于片段的药物设计技术, 介绍基于配体的药效团模型, 3D-QSAR 方法。
	15:30-15:45	茶歇
	15:45-17:15	先导化合物性质设计优化 介绍先导化合物优化原则, 先导化合物优化工具: SBDD 优化理论方法: 分析受体-配体作用模式, SBDD 及 PDBB 优化方法, 先导化合物优化方法, 前药及拼合原理。
17:15-18:00	课程讨论及答疑	



第二天 陆文聪教授 上海大学 机器学习与 深度学习	09:00-09:30	人工智能技术背景与现状 介绍目前人工智能算法的发展及现状、以及机器学习与深度学习常用算法的应用场景及特征工程的原理及使用，同时引入案例，让学员对人工智能算法的原理有更深刻的了解。
	09:30-10:45	常见机器学习算法原理 介绍目前常见的机器学习算法的原理及应用场景，包括分类模型（随机森林、逻辑回归、k近邻算法、Fisher法、决策树、随机森林、支持向量机、梯度提升树、XGBoost、MLP、集成学习等），回归模型（线性回归、k近邻、支持向量机、决策树、随机森林、梯度提升树、XGBoost、MLP、CatBoost、高斯过程回归、LightGBM、Stacking回归器、AdaBoost、Bagging和Voting等）。分类模型与回归模型常用的评价指标。
	10:45-11:00	茶歇
	11:00-12:00	常见特征工程的原理及应用场景 介绍机器学习中所涉及到的特征工程（F因子检验过滤、PCA降维、互信息过滤、包装法、卡方过滤、多重共线性过滤、多项式特征、嵌套法、方差过滤、相关性过滤）的原理及意义，以及在机器学习中的应用案例介绍。
	12:00-13:30	午餐
	13:30-15:30	常见深度学习算法的原理及应用 介绍目前常见的深度学习算法（GNN、CNN、DNN、RNN等）的发展、原理及应用场景
	15:30-15:45	茶歇
	15:45-17:15	常见深度学习算法的原理及应用 介绍目前常见的深度学习算法使用过程中涉及的网络设计、训练过程、数据处理等步骤的应用及应用过程中出现的一些问题的解决方案（如过拟合与欠拟合、数据、优化器选择、Dropout等等）。
	17:15-18:00	课程讨论及答疑



第三天	09:00-10:45	<p>分子动力学研究概述</p> <p>介绍分子动力学原理、方法、应用场景、溶剂化、力场、预平衡、系综、轨迹处理、性质分析（势能分析、RMSD、RMSF、回旋半径、氢键、溶剂可及表面积、蛋白质二级结构、盐桥、动态互相关矩阵、残基相互作用分析、主成分分析、自由能形貌图绘制、距离分析、π-π堆积、轨迹矫正、径向分布、蛋白质聚类、热力学性质分析）及相应的参数意义及设置，MMPBSA 与 FEP 的原理及应用，并结合实际应用场景进行案例分析。</p>
	10:45-11:00	茶歇
	11:00-11:30	<p>MaXFlow 基本界面</p> <p>MaXFlow 背景介绍，界面介绍，入门操作、小分子结构构建。</p>
	11:30-12:00	<p>MaXFlow 靶点结构的预测-同源建模</p> <p>同源建模的原理、参数设置及案例分析，同源模板的选取、序列比对的技巧，模型的评估。</p>
	12:00-13:30	午餐
	13:30-15:30	<p>MaXFlow 现有 AIDD 方法介绍</p> <p>介绍 MaXFlow 平台现有的 AIDD 算法（基于配体的分子生成、基于靶点的分子生成、药靶亲和力预测、ADMET 预测（GNN 版、Transformer 版、AutoML 版）、QSAR 模型、逆合成预测、）的原理及应用、意义，并结合 MaXFlow 进行相应功能的使用、参数的调整以及结果的查看与分析。</p>
	15:30-15:45	茶歇
	15:45-17:15	<p>基于全新靶点的药物设计（上）</p> <p>结合实例，以基于靶点的全新分子生成数据库为虚筛来源，基于药靶亲和力预测、ADMET 预测、类药性分析进行初步筛选，旨在得到成药性好的分子；同时结合 MaXFlow 进行相关工作流与 APP 的搭建与部署。</p>
	17:15-18:00	<p>基于全新靶点的药物设计（下）</p> <p>根据上节课筛选出来的分子通过分子对接、分子动力学进行二次虚拟筛选，只在得到与蛋白有更好结合亲和力的分子，找到苗头化合物，并通过小分子逆合成预测进行小分子合成路线分析；同时结合 MaXFlow 进行相关工作流与 APP 的搭建与部署。</p>



第四天	09:00-10:15	针对上节课遗留问题进行课程讨论及答疑
	10:15-10:30	茶歇
	10:30-12:00	基于热点靶点的药物设计（上） 结合实际案例，通过基于配体的分子生成数据库作为虚筛来源，基于药靶亲和力预测、ADMET 预测、类药性分析进行初步虚拟筛选；同时结合 MaXFlow 进行相关工作流与 APP 的搭建与部署。
	12:00-13:30	午餐
	13:30-15:30	基于热点靶点的药物设计（下） 收集该靶点现有的活性和结构数据，构建 QSAR 模型，并使用该模型预测上节课筛选出来的分子的活性值，通过分子对接、分子动力学进行虚拟筛选，通过小分子逆合成预测进行小分子合成路线分析；同时结合 MaXFlow 进行相关工作流与 APP 的搭建与部署。
	15:30-15:45	茶歇
	15:45-17:15	课程答疑

