

2024 年创腾科技暑期 AI 特训班通知

生命科学分子模拟与人工智能课程

把握 AI 药物设计新风向，成就药物研发未来之星

2024 年 8 月 · 苏州

培训主题：分子模拟与人工智能在药物设计领域的应用

培训时间：2024 年 8 月 23-25 日（周五至周日），共 3 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

你是否想过，有一天，人工智能技术能够为新药研发带来革命性的变革？现在，这个梦想已经逐渐成为现实。计算机辅助药物设计（CADD）与人工智能驱动的药物设计（AIDD）正在引领新药创新的浪潮，为药物研发领域带来前所未有的机遇和挑战。

为了让更多科研工作者深入了解并掌握这一前沿技术，创腾科技特举办 2024 年暑期培训班，**邀请来自复旦大学的付伟教授、国药中生上海生物制品研究所张弛博士、上海市生物医药技术研究院戴文韬博士亲临授课**。通过专业讲解和实践经验分享，您将深入了解 CADD 和 AIDD 的技术原理、应用场景和实践案例。

本次培训注重实战落地，不仅让您掌握理论知识，更让您学会如何将 CADD 和 AIDD 应用到实际工作中，提升研发效率，降低成本。我们相信，通过这次培训您将能够在课题研究、工作进展推动和工作应聘中游刃有余，拓展思维，成为**药物研发领域的 AI 人才精英**。赶快加入我们，开启您的药物研发新篇章，与专家一起探索人工智能在新药创新中的无限可能！期待您的参与！

二、特邀嘉宾介绍



付伟 教授
复旦大学药学院

复旦大学药学院教授，博士生导师。主持 7 项国家自然科学基金项目、3 项上海市生物医药基础重点项目、1 项国际合作项目、GF 重大项目子课题，973 和 863 项目骨干。发表学术论文 90 篇，授权 18 项专利，在美国和中国获多个奖项。主编国家级十四五规划战略级教材 1 部，主编专著 1 部，国家级一流课程



负责人。担任 CBDD 编辑,担任上海市衰老与退行性疾病协会常务理事、中国肝病联盟创始核心成员、中国药学会麻醉专委会会员、上海市女科学家协会会员。



张弛 博士

国药中生上海生物制品研究所 新靶点发现总监

本科毕业于中山大学药学院,硕士毕业于英国剑桥大学生物化学系,2015年博士毕业于英国伦敦大学癌症研究所肿瘤学专业,师从英国皇家科学院院士 Paul Workman 教授。2015-2021年历任英国伦敦大学癌症研究所博士后与研究员。2021年加入上海生物制品研究所任药物靶点研发总监。2022年入选国家高层次人才计划和上海市“浦江人才计划”,担任发展中国家生物制药联盟(EBPMN)科学顾问和上海生物工程学会理事。曾主持英国 Wellcome Trust 资助新药发现研究课题一项;主持英国 Cancer Research UK 资助的药物早期研发课题一项。作为主要完成人参与英国 Cancer Research UK 资助的研究课题两项。发表 SCI 科研论文 13 篇。主要科学发现在英国推动了 I 期临床实验一项;推动新靶点药物研发项目进入先导化合物优化阶段并获得 A 轮融资一项。



戴文韬 博士

上海市生物医药技术研究院, 研究员

2008年6月华东师范大学获生物技术学士学位;2014年6月中国科学院生物物理研究所获生物信息学博士学位。2014年8月至2022年8月,历任上海生物信息技术研究中心(众信生物)助理研究员,副研究员。2022年9月至2023年12月,任上海市生物医药技术研究院副研究员。2024年1月至今,任上海市生物医药技术研究院研究员。

上海市疾病与健康基因组学重点实验室联合课题组长,复旦大学药理学硕士生导师,上海理工大学生物医学工程硕士生导师。中国生物物理学会生物医学信息分会委员。曾入选上海市青年科技英才扬帆计划和上海产业技术研究院创新先锋计划,获得上海市科技系统青年五四奖章(个人)和优秀共产党员、上海科学院和上海市生物医药技术研究院优秀共产党员等荣誉。

研究方向为生物信息学,转化医学,生物药设计。发展跨尺度多层次时空组学整合挖掘和生物分子计算所需数据库与分析方法,支持基于转化医学的诊断标志物和药物研发。聚焦转录代谢调控,发展适用于空间代谢多组学整合分析的数据库和计算方法,特别关注多模态学习和脂质代谢相关细分领域;



在计算结构生物学领域，发展一系列计算工具，涵盖序列比对，结构预测和分子对接等功能，重点关注蛋白类生物大分子的设计优化；利用自主研发的计算工具，参与解决一系列重要科学问题和标志物及新药研发工作，成果发表在 Nature Medicine、Nature Communications、Nucleic Acids Research、Bioinformatics、Artificial Intelligence in Medicine 等杂志。发表 SCI 论文 40 余篇，其中第一及通讯作者 17 篇。作为负责人主持国家自然科学基金、上海市青年科技英才扬帆计划等项目 6 项。作为子项负责人或骨干参与国家重点研发计划精准医学专项、上海市科委重大项目等 5 项。

三、培训对象

本课程面向致力于新药开发的实验人员与模拟专家，对药学专业深感兴趣的大学生及研究生群体，以及那些热心于探索分子模拟与人工智能融合领域、对此交叉学科怀有浓厚兴趣的各界人士。

四、培训内容

本次培训首先将对常用的分子模拟技术与人工智能技术的算法原理及应用进行深入的入门介绍，让您对这一领域有一个全面而系统的了解。我们将以 MaXFlow 平台为依托，对 MaXFlow 在新药发现领域中的应用进行全面介绍与探讨，您将学习到如何利用 AI 算法优化药物设计流程，提高研发效率。

- **小分子药物设计**：利用包含结构和活性数据的化合物库，构建用于虚拟筛选的 QSAR 模型；根据模型评价指标选择最优模型并进行基于 AI 模型的第一轮虚拟筛选，筛除无活性分子结构；使用分子对接进行基于物理模型的第二轮虚拟筛选，筛选活性较强的分子结构；利用分子动力学模拟采样计算结合自由能；
- **抗体药物设计**：根据已知的抗体序列信息，使用 AI 模型预测其三维结构，这对于理解抗体如何与其特定抗原结合至关重要。借助于抗体亲和力成熟工具，能够在分子层面精确优化抗体，增强其与特定抗原的结合能力；同时利用众多抗体相关 AI 的模型，降低其免疫原性，提高抗体的成功率。
- **AI 算法的实际应用**：我们将结合实际案例，让您深入了解 AI 技术在药物设计中的应用。您将学会如何利用 MaXFlow 平台进行大规模的分子筛选和优化，提高药物研发的效率。

五、培训目标

- 1、了解计算机辅助药物设计（CADD）和人工智能辅助药物设计（AIDD）的基本原理与流程；
- 2、掌握 AI 技术（包括机器学习、深度学习）在新药研发中的最新应用；
- 3、学习如何利用 CADD+AI 工具进行新药的虚拟筛选、设计与优化；



- 4、了解抗体药物设计的特殊要求与 CADD/AI 在其中的应用；
- 5、实战操作，通过案例分析提升解决实际新药研发问题的能力。

通过本次培训，您将掌握分子模拟技术与人工智能技术在药物设计中的应用，学会如何利用 AI 算法优化药物设计流程，提高研发效率。同时，您还将获得与行业专家面对面交流的机会，拓宽研究视野，激发创新灵感。

六、培训形式

- 1、阐述新药设计的前沿策略，通过文献案例解析新药成功设计的思路，并进行相应功能模块的原理介绍，帮助学员理解如何将理论知识转化为实际应用；
- 2、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）；
- 3、学员交流与讨论，工程师进行现场答疑答疑。

七、报到及培训时间

报到时间：

2024 年 8 月 22 日 9:30-19:00（A2 幢 3 层 创腾科技）

2024 年 8 月 23 日 8:00-9:00（A3 幢 2 层 培训中心）

培训时间：

2024 年 8 月 23~25 日（三天）9:00~12:00 & 13:30~18:00

八、培训费用

注册类型	培训费用 (1 人参加)	早鸟价 8 月 9 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)
教育/政府科研客户	3500 元/人	3000 元/人	2500 元/人
企业客户	4500 元/人	4000 元/人	3500 元/人



注意：

- 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；学员需要自带电脑；**
- 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，我们会将 PDF 版本基本操作教程通过邮件发给您；
- 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。

九、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 **3 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：培训现场可通过支付宝或微信扫码支付。

十、周边住宿（请学员自行预定，费用自理）

- 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：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：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。



十一、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。

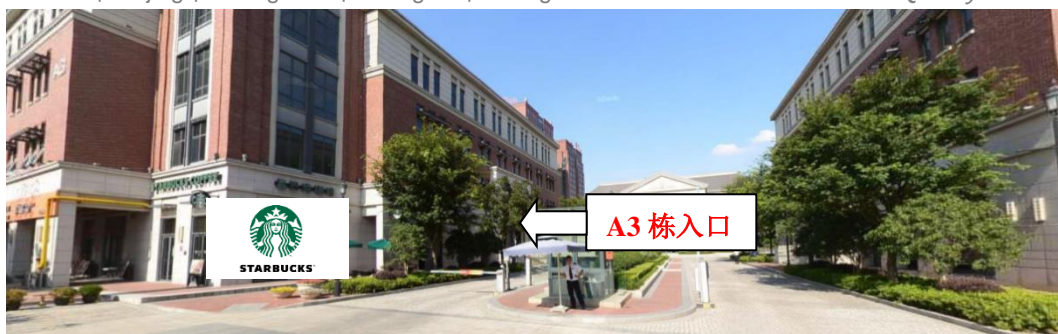
● 苏州北站

- 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。



• 地理位置





- 2.5 产业园入口处



- 左图：A3 幢入口
- 右图：A2 幢入口

十二、培训班联系人

创腾科技有限公司

电话：13916858963 (陈老师), 0512-67509707-805 (葛老师)

Email：market@neotrident.com

附：培训日程

创腾科技有限公司 生命科学部
2024 年 7 月 20 日



2024年“分子模拟与人工智能在药物设计领域的应用”培训日程

日期	时间	内容
8月23日 第一天	8:00-9:00	报到和注册 8月22日全天报到地点：苏州2.5工业园区A2栋3层，创腾科技 8月23日上午报到地点：苏州2.5工业园区A3栋2层，培训中心
	9:00-12:00	付伟 教授, 复旦大学 ▶ 药物设计学 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 ▶ 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 ▶ 基于结构的药物设计 介绍SBDD的基本理论、技术和方法；介绍分子三维结构的理论计算方法；介绍分子模型技术；介绍直接药物设计与间接药物设计的方法。
	12:00-14:00	午餐
	14:00-15:00	张弛 博士, 国药中生上海生物制品研究所 分享主题：人工智能驱动的新生抗原发现与验证
	15:00-16:00	戴文韬 博士, 上海市生物医药技术研究院 分享主题：生物大分子药物研究的计算分析基础及应用实践
	16:00-16:15	休息
	16:15-17:15	圆桌讨论：张弛博士、戴文韬博士、冯华副总 讨论主题：智能药物设计前沿：从新生抗原发现到生物大分子药物创新
	9:00-10:00	MaXFlow 界面和基本操作 MaXFlow 背景介绍，界面介绍，入门操作、小分子结构构建、同源建模的原理、参数设置、同源模板的选取、模型的评估。
10:00-10:15	休息	



8月24日 第二天	10:15-12:00	AIDD 方法介绍 介绍 MaXFlow 平台中的 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、QSAR 模型、逆合成预测、贝叶斯优化实验设计 EDBO 等)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。
	12:00-14:00	午餐
	14:00-16:00	CADD 方法介绍 介绍 MaXFlow 中的分子对接以及分子动力学的原理和应用场景、分子力场、系综模拟、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;结合自由能计算方法:MMPBSA、炼金术转移法(ATM)和自由能微扰(FEP)的原理及应用。
	16:00-16:10	休息
	16:10-16:50	科学数据基因组 SDH 专题 结合 SAR 分析与机器学习,指导结构设计。
	16:50-18:00	 workflows 搭建练习、课程讨论及答疑
8月25日 第三天	9:00-10:20	常用数据库介绍 PDB、UniProt、AlphaFold 等大分子数据库;ChEMBL、PubChem、DUD-E 等小分子数据库。
	10:20-10:30	休息
	10:30-12:00	小分子药物设计案例 结合实际案例,进行基于 AI 模型的虚拟筛选(QSAR 模型)和基于物理模型的虚拟筛选(分子对接、分子动力学模拟、结合自由能计算)。
	12:00-14:00	午餐
	14:00-15:30	抗体药物设计案例 结合具体研发场景,进行抗体人源化及免疫原性预测进行,采用 AI 方法预测抗原、抗体结构,抗体-抗原互作模型的生成,之后进行抗体亲和力成熟,从而筛选出具有更高的亲和力和特异性的抗体。
	15:30-15:40	休息
	15:40-17:30	案例分享、课程讨论及答疑
	17:30-18:00	颁发培训证书

