

人工智能 AlphaFold3 与 ChatGPT 辅助药物设计培训班

时间：2024 年 9 月 15-16 日

线上直播课程、赠送回放视频、长期答疑

报名方式请拉至文末

近年来，随着计算机科学及相关基础学科的发展与进步，基于计算机图形学、数据库技术、人工智能等新技术的药物分子设计手段正日臻成熟，不断取得突破性进展，有力推动药物设计领域日趋完善。这不仅为新药创制事业提供了新利器，更有效加速了新药成功开发的概率、缩短新药上市周期，更好地满足临床需求。

AlphaFold3 与 ChatGPT 的引入，为计算机辅助药物设计（computer-aided drug design, CADD）带来了新的变革。AlphaFold3 在蛋白质结构预测方面取得了前所未有的突破，而 ChatGPT 则能提供智能化的研究辅助。这些方法大大加快了新药设计的速度，节省了药物发现的人力和物力，使药物学家能够以理论为指导，有目的地开发新药。同时，在药物机制的研究中，在用实验方法验证药物与受体的相互作用之前，通常会用分子对接的方法预测药物与靶标的结合，以节省实验花费。计算机辅助药物设计已经成为新药开发、药物机制研究中重要的研究手段之一。

一、时间地点：

2024 年 9 月 15-16 日

腾讯线上会议

二、学习目标：

本课程将系统讲解 AlphaFold3、ChatGPT 及 AutoDock 系列软件在 CADD 中的创新应用，结合实际案例进行实战演练。您将学会：

- 应用传统 CADD 技术，如分子对接和虚拟筛选，解决药物设计问题
- 应用 AlphaFold3 进行高精度蛋白质结构、蛋白与配体相互作用预测
- 利用 ChatGPT 辅助编写 CADD 相关的 Python 程序，提高工作效率

我们保证：零基础起步，课程结束时，您将能独立运用这些尖端工具进行药物设计研究。

三、授课方式：

本学习班全程在线电脑实战教学，90%以上为上机指导操作，无繁琐的理论授课。建立专属班级交流平台，学员学完后可以继续在此群与老师同学交流问题，巩固学习内容。

四、参会对象：

各级医院临床医生、药师、科研单位研究人员、高校老师、硕/博士研究生、对计算机辅助药物设计感兴趣的广大师生（尤其适合初学者和无基础的学员，无需任何基础，也无需学习任何编程语言）。

五、主讲专家：

本次主讲老师是生物信息学博士，大学教授，从事计算生物学、生物信息学方向研究十余年，主持参与了多项国家自然科学基金项目，发表数十篇 SCI 论文，含多篇 5 分以上的文章。讲课效果好，深得学员好评。在本次课程中，主讲老师将深入讲解 AlphaFold3 和 ChatGPT 在计算机辅助药物设计中的最新应用，分享前沿研究成果和实践经验。

六、课程安排：

日期	时间	授课内容
9月15日	8:30-12:00	1. 分子对接基础知识 2. 分子结构文件的获取和处理 ● 化合物结构的获取 ● 化合物 ADMET 性质预测 ● 多肽结构的获取 ● 蛋白结构的获取 ● 蛋白结构的同源建模 ● 不同格式结构文件的转换 3. PyMol 软件介绍 ● 蛋白对象的操作、展现、隐藏、标记、测量 ● 分子对接结果的美化展示 4. 配体-受体结合位点可视化分析工具介绍
	14:00-17:30	1. 用 AutoDock 及 autoDock vina 进行小分子与蛋白对接 ● 准备工作 ● 准备受体文件 ● 准备配体文件 ● 确定对接盒子 ● 蛋白受体格点计算 ● 设置对接参数 ● 用 AutoDock 作分子对接

		● 结果查看与分析 ● 用 AutoDock vina 作对接 ● 确定对接盒子的其他方法 2. 用 AutoDock Vina 作虚拟筛选 ● 蛋白活性口袋的预测 ● 化合物的下载与处理 ● AutoDock vina 进行一对多或多对多的对接 ● 计算 redocking 多个 pose 的 RMSD ● 虚拟筛选
9月16日	8:30-12:00	1. 金属酶蛋白与小分子对接 ● 用 AutoDock4Zn 作对接的方法 ● 用 AotoDock vina 作对接的方法 ● 金属离子与蛋白结合位点预测与对接 2. 蛋白-小分子柔性对接 3. 蛋白-多肽对接 ● 用免费在线平台作对接 ● 用 ADCP 作对接—结合位点已知的情况 ● 用 ADCP 作对接—结合位点未知的情况 4. 蛋白-蛋白对接
	14:00-18:00	AlphaFold3 在 CADD 中的应用 1. AlphaFold3 简介 2. 蛋白结构预测 3. 糖基化蛋白结构预测 4. 蛋白-金属离子相互作用预测 5. 蛋白-RNA 相互作用预测 6. 蛋白-DNA 相互作用预测 7. 蛋白-多肽相互作用预测 8. 蛋白-蛋白相互作用预测 9. 蛋白-化合物相互作用预测 10. 应用 ChatGPT 编写分子对接相关程序 11. 批量构建和上传预测任务
备注：自带笔记本电脑，安装 WINDOWS 10。		

七、主办单位：

合肥华斯泰生物医学科技有限公司

八、收费标准：

参会费用 3000 元/人，8 月 20 日前报名并缴费 2800 元/人，（5 人及以上团体报名另优惠 300 元/人）。提供正式会议发票和盖章版会议通知。

注意事项：

此次课程为线上直播授课模式（腾讯会议网络平台授课），报名付费成功后，会务组将在开班前一周内发给您培训需要安装的软件及电子版课件资料。

缴费方式：

1. 银行转账

户 名：合肥华斯泰生物医学科技有限公司

开户行：中国银行合肥临泉路支行

帐 号：181246448304

2. 支付宝账号

户 名：合肥华斯泰生物医学科技有限公司

账 号：kf@huasitai.com

3. 信用卡及公务卡支付(报名后另发收款码)

注：汇款时请务必注明“CADD”和学员姓名，汇款后将回单电子邮件发给我们，以便我们确认。

九、报名方式：

请填写**报名表**通过电子邮件发送至: info@huasitai.com, 或在线报名(www.Huasitai.com)

我们收到您的报名信息后将及时与您联系确认。

十、会务咨询：

联系人：章老师

电 话：13121195178（微信同号）

E-mail: info@huasitai.com

网 站: www.huasitai.com



人工智能 AlphaFold3 与 ChatGPT 辅助药物设计培训班

报名回执表

时间：2024 年 9 月 15-16 日 线上直播(腾讯会议)

单位名称					
单位地址				邮编	
姓名	性别	职务/职称	从事专业	手机	E-mail
发票抬头			纳税人识别号		
发票内容	☐ 会议费 ☐ 会务费 ☐ 培训费				
备注					

- 1. 确定参加后，请将报名表发至 info@huasitai.com ,邮件发出后两日内若无回复,请电话联系确认。
- 2. 联系人:章老师 电话:13121195178