



北京大学  
PEKING UNIVERSITY

主办方：北京大学基础医学院 协办方：北京创腾科技有限公司

## 2018年国家级继续医学教育项目

分子模拟技术在生命科学中的应用培训班

Training course on application of molecular simulation  
technology in the field of life science

### 第二轮通知

北京 .2018年11月

**项目主题：** 分子模拟技术在生命科学中的应用培训班

**项目编号：** 2018-02-08-009 (国)

**举办时间：** 2018年11月12-14日 (共3天)

**培训地点：** 北京大学医学部

**拟授学分类别：** I类

**拟授学分分值：** 6学分

随着多学科交叉理论的发展和计算机性能的提升，分子模拟技术已被应用到生命科学的各个领域，发展成为一种切实有效的手段与工具来加速科研的进程，越来越多的科研人员都已经意识到分子模拟技术的重要性并将其引入到平时的科研工作当中。由北京大学基础医学院主办，北京创腾科技有限公司协办的“分子模拟技术在生命科学中的应用培训班”将定于2018年11月在北京举办，培训为期三天。

本次培训旨在提高对生命科学中多种经典的分子模拟技术(同源建模、分子对接、蛋白对接、蛋白设计、药效团)的系统掌握，同时依托综合性应用于生命科学领域的Discovery Studio分子模拟平台，通过上机加深对操作流程、参数设置技巧、结果分析的理解，提升解决问题的能力，以辅助进行生命科学的研究，包括：新药设计、蛋白结构功能研究、抗体设计等。我们诚邀广大科研工作者报名参加，现将有关事项通知如下：

## 一、培训内容

- **Discovery Studio 软件基本介绍：** 分子模拟概述，DS 软件基本情况介绍及基础操作。
- **分子间相互作用的预测——分子对接：** 介绍不同分子对接方法的原理、应用和操作流程，蛋白-小分子/蛋白-蛋白(抗体-抗原)结合模式的确定、结合表面关键残基的分析方法并上机操作。
- **蛋白质(含抗体)三维结构的预测——同源建模：** 介绍同源建模方法的原理和操作流程，介绍蛋白建模、抗体建模的方法并上机操作。
- **蛋白亲和性、稳定性的优化——蛋白理性设计：** 介绍通过蛋白虚拟氨基酸突变、聚集效应预测方法进行蛋白质改造优化的原理和操作，实现抗体亲和性成熟、抗体稳定性优化等应用。
- **药效团模型的构建及应用：** 介绍不同药效团模型的构建方法与操作，介绍基于药效团模型的药物虚拟筛选和反向找靶并上机操作。

## 二、培训方式

- 专业针对分子模拟进行系统培训，培训模式结合了理论授课及上机操作；
- 通过文献案例分析介绍多种经典的分子模拟技术，及相应功能模块的原理介绍；
- 通过上机操作讲解每种计算方法的具体操作流程及参数设置，进行实战演练，有利于全方位的熟悉并掌握分子模拟技术并应用于生命科学领域。

## 三、培训对象

所有对分子模拟感兴趣、希望了解分子模拟并将模拟技术应用于药物研发、蛋白结构功能研究、抗体研究、酶研究、多肽研究或环境毒理研究等领域的科研人员；所有对 DS 感兴趣、希望进一步系统掌握 DS 平台中所有经典功能的原理及应用并能够快速上机模拟操作相关课题的老师和同学等。

## 四、培训议程

日期	时间	培训内容
第一天	08:00-09:00	<b>报到和注册</b> 报到地点：另行通知
	09:00-10:30	• <b>Discovery Studio 基本界面</b> DS 背景介绍，DS 界面介绍，蛋白与小分子的预处理方法介绍与入门操作
	10:30-10:45	<b>茶歇</b>
	10:45-12:00	• <b>蛋白质（含抗体）三维结构的预测-同源建模 MODELER</b> 同源建模核心原理介绍，同源建模参数设置讲解、实际操作技巧及结果分析。
	12:00-13:30	<b>午餐</b>
	13:30-14:45	• <b>蛋白质（含抗体）三维结构的预测-同源建模 MODELER</b> 抗体建模，参数设置讲解、实际操作技巧及结果分析。
	14:45-15:00	<b>茶歇</b>
	15:00-16:30	• <b>蛋白-小分子对接 LibDOCK</b> 分子对接的核心与原理，蛋白活性位点定义方法，分子对接结果的分析，最优对接构象的选取方法，LibDOCK 的原理等； LibDOCK 参数设置技巧、实际操作技巧及结果分析。
	16:30-17:00	<b>课程讨论及答疑</b>

日期	时间	培训内容
第二天	09:00-10:30	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>蛋白-小分子对接 CDOCKER</b></li> </ul> 关键氨基酸的识别与显示方法，作用机理的解释手段，CDOCKER 原理介绍、参数设置技巧和实际操作技巧等。
	10:30-10:45	茶歇
	10:45-12:00	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>蛋白-小分子对接 Flexible Docking</b></li> </ul> 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。
	12:00-13:30	午餐
	13:30-15:00	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>蛋白-蛋白 (抗体-抗原) 相互作用预测 ZDOCK</b></li> </ul> 大分子对接，蛋白-蛋白/核酸/多肽结合模式的确定，结合表面关键残基的分析，原理介绍、案例分析、参数设置、实际操作技巧及结果分析。
	15:00-15:15	茶歇
	15:15-16:30	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>蛋白设计：蛋白虚拟氨基酸突变</b></li> </ul> 突变位点、突变组合的建议以提高蛋白复合物亲和力或者提高蛋白的热稳定性，pH 和温度等环境因素的考虑，抗体亲和力成熟，抗体稳定性优化，原理介绍、参数设置、实际操作技巧及结果分析
16:30-17:00	课程讨论及答疑	
第三天	9:00-10:15	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>药效团模型的构建及应用-定性药效团模型的构建 HipHop</b></li> </ul> 经典的基于配体的药物设计方法，训练集分子的选取依据，药效团模型的评价方法，基于药效团的药物虚筛方法。Hiphop 参数设置技巧、实际操作技巧及结果分析。
	10:15-10:30	茶歇
	10:30-12:00	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>药效团模型的构建及应用-定量药效团模型的构建 HypoGen</b></li> </ul> 经典的基于配体的药物设计方法，训练集分子的选取依据，药效团模型的评价方法。HypoGen 参数设置技巧、实际操作技巧及结果分析。
	12:00-13:30	午餐
	13:30-14:45	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>药效团模型的构建及应用-基于靶标结构的药效团模型构建 SBP</b></li> </ul> SBP 方法的原理、实际操作方法。
	14:45-15:00	茶歇
	15:00-16:30	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>药效团模型的构建及应用-基于受体-配体复合物的药效团模型构建 CBP, 基于药效团模型数据库 P PharmaDB 的反向找靶</b></li> </ul> CBP 方法的原理及操作，反向找靶的策略，基于药效团反向找靶的结果分析，靶标的确认方法等。
16:30-17:00	课程讨论及答疑	

## 五、培训费用

统一注册费用：3400 元/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。  
2、现场报道时工作人员会跟您确认发票信息，发票内容为“**培训费**”。

## 六、参加方式

说明：

- 1、学习班名额最多 40 人，额满截止报名。
- 2、学员可获得国家级 I 类继续教育学分 6 分，课程结束后学员将获得学校颁发的证书 [ 项目编号 2018-02-08-009 (国) ]

- 1) **报名登记**：[点击登录网站](#)，在线提交报名信息；
- 2) **手机报名**：识别右侧二维码，手机提交预报名表；

手机报名二维码



## 七、报到信息

报到时间：2018 年 11 月 12 日早上 8: 30-9:00

报到地点：北京大学医学部

## 八、周边住宿推荐(请学员自行预定，费用自理)

- 1) 宾馆名称：汉庭酒店（北京中关村学院桥店） 010-82326688  
宾馆地址：北京市海淀区学院路 31 号 6 号楼
- 2) 宾馆名称：海友良品酒店（中关村学院桥店） 010-61196131  
宾馆地址：北京市海淀区北四环中路 265 号
- 3) 宾馆名称：牡丹宾馆 010-62025544  
宾馆地址：北京市海淀区花园东路 31 号

**注：以上三个经济型酒店供学员参考，请学员提早预定住宿。**



周边住宿地图参考

## 九、交通路线参考

### • 北京南站

- 1、【北京南站 (C 南口)】上车乘坐地铁 4 号线大兴线 (安河桥北方向)，【海淀黄庄站】下车，换乘 10 号线 (知春里方向)，【西土城站 (B 东北口)】下车，步行 444 米到【学知桥北站】乘坐 386 路公交车 (清河营公交场站方向)，【学院桥东站】下车，步行 100 米到达，全程约 1 小时 10 分钟。
- 2、打车约 18.6 公里，全程需 40 分钟。

### • 北京西站

- 1、【北京西站 (A 北口)】上车乘坐地铁 9 号线 (国家图书馆方向)，【国家图书馆站】下车，换乘 4 号线大兴线 (安河桥北方向)，【海淀黄庄站】下车，换乘地铁 10 号线 (知春里方向)，【西土城站 (B 东北口)】下车，步行 425 米到【学知桥北站】换乘 693 路公交车 (育新小区方向)，【北京航空航天大学站】下车，步行 783 米到达，全程约 53 分钟。
- 2、打车约 14 公里，全程需 35 分钟。

### • 北京站

- 1、【北京站 (D 南口)】上车乘坐地铁 2 号线 (崇文门方向)，【车公庄站 (B 东北口)】下车，步行 332 米到【车公庄北站】乘坐 632 路公交车 (五彩城公交场站方向)，【北京航空航天大学站】下车，步行 233 米到达，全程约 50 分钟。
- 2、打车约 19 公里，全程需 45 分钟。

## 十、联系方式

叶老师, 0512-67509707 转 220 ; 18761873335

陈老师, 021-51821768 转 233 ; 13916858963

邮箱: [market@neotrident.com](mailto:market@neotrident.com)

主办方: 北京大学基础医学院  
协办方: 北京创腾科技有限公司  
2018年10月23日