

2019 年创腾科技生命科学分子模拟课程

分子模拟在食品科学中的应用

培训相关信息如下：

培训时间：2019 年 10 月 23-25 日，共三天

培训地点：苏州创腾科技培训中心（江苏省苏州市工业园区东长路 88 号 2.5 产业园 A2 栋 301 室）

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。

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，可以帮助食品科学研究人员大大降低食品科研工作中的各类成本，缩短研发周期，提高研发效率等。

一、培训主旨

本次培训将就分子模拟与设计平台 Discovery Studio 2019 在食品科学研究中的应用及食品化学中的药物发现进行详细讲解，旨在帮助学员系统了解、掌握，分子模拟技术的核心原理、参数设置技巧、结果分析及应用思路，并能快速进行上机操作，从而在以后的科研工作中可以灵活调用相关的模拟功能开展模拟工作，解释实验现象或者为实验提供指导。

二、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食品研发与应用、食品相关的药物发现与设计等领域的科研人员；所有对 Discovery Studio 软件感兴趣、希望进一步系统掌握 DS 软件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。

三、培训内容

本次培训班将以 Discovery Studio 2019 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等等。

四、培训形式

所有培训学员每人一台计算机，可有充分的时间对培训班的每个技术点进行软件的上机操作，我们的工程师将全程提供技术服务。培训班结束后，我们将向每一位学员颁发创腾科技有限公司的生命科学模拟软件



技术认书。具体培训形式如下：

- 基础方法和技术原理的讲解
- 软件的基础操作、参数设置讲解与上机练习（提供完整的培训教程）
- 通过文献案例的分析分享该模拟技术与实际科研工作结合应用思路
- 学员交流与讨论，工程师进行现场答疑。

五、培训费用

培训费用	1 人参加	特惠价格及条件（符合任一条件即可）： 1、10月10日前成功报名并汇款； 2、同一单位，≥2人参加； 3、同一学员（2011年至今）曾参加过DS培训课程。
学术客户	3600/人	3000/人
企业客户	5400/人	4800/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、发票为电子发票，学员缴费后现场扫码填写发票信息，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

• **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。

• **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：招商银行上海晨晖支行

账 户：121919707510501

b、现金支付：培训现场可收取现金或刷卡。

七、交通地图

南门地址：江苏省苏州市工业园区东长路 88 号 A2 栋 301 室

西门地址：江苏省苏州市工业园区方中街东 50 米星巴克旁 A2 栋 301 室

【注：建议学员从西门进，离 A2 栋 301 室培训教室较近。】





交通路线参考：

• 苏州园区火车站

- 1、【沪宁城际园区站广场站】上车坐 258 路（星湖首末站北方向），【星湖立交南站】下车，换乘快线 7 号（凤凰城首末站南方向），【凤凰城首末站】下车，步行 350 米到。全程约 1 小时。
- 2、打车最短距离约 11 公里，费用约 30 元。

• 苏州站

- 1、地铁 4 号线（同里方向）【苏州火车站】上车，【乐桥站】下车换乘地铁 1 号线（钟南街方向），至【南施街站】下车 1 号口出，【园区城管大厦站】上快线 7 号路（凤凰城首末站方向），【凤凰城周末站】下车，步行 350 米到。全程约 1 小时 10 分钟。
- 2、打车最短距离约 21 公里，费用约 55 元。

• 苏州北站

- 1、【京沪高铁苏州北站】乘坐快线 7 号（凤凰城首末站方向），【凤凰城首末站】下车，步行 350 米到达，全程约 1 小时 30 分钟。
- 2、打车最短距离约 22 公里，费用约 60 元。

八、周边住宿(请学员自行预定，费用自理)

- 1) 宾馆名称：桔子酒店（精选） 0512-62628333（最近）
宾馆地址：江苏省苏州市吴中区港田路南 70 米文化人才公寓 9 楼

注：本酒店为创腾学院协议酒店，预定时说明是参加创腾培训即可享受协议价格。



- 2) 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
- 3) 宾馆名称：苏州东沙湖邻里商务酒店 0512-67997868
宾馆地址：苏州工业园区东沙湖路 100 号
- 4) 宾馆名称：宜必思酒店(苏州工业园区中心酒店) 0512-81879966
宾馆地址：江苏苏州市苏州大道东 292 号(地铁 1 号线南施街站 4 号出口处)

注：以上四个经济型酒店供学员参考。周边住宿非常紧张，提醒学员提早预定住宿。

九、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 报道地点：苏州创腾培训中心
	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，作用机理的解释手段，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	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	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	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	生物大分子模拟专题之四：蛋白稳定性预测 蛋白二硫键预测及蛋白聚集效应预测，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

