

2019 年创腾科技暑期软件技术特训班

——Discovery Studio 北京班

培训相关信息如下：

培训时间：2019 年 8 月 19-23 日（周一至周五）

培训主题：药物发现与生命科学分子模拟技术暑期特训班

培训地点：北京林业大学

一、培训主旨

分子模拟经过几十年的发展，不论在基础理论还是在应用方面，都取得了巨大成就，已经成为化学和生命科学等领域一种必不可少的研究手段，引起了理论和实验工作者的广泛关注。Discovery Studio 是当前主流的面向生命科学领域的综合性分子模拟平台，通过高质量的图形界面、经多年验证的科学算法以及集成的环境，为科研工作者提供了易用高效的药物设计与大分子模拟技术和工具。趁着暑期，创腾科技有限公司将于苏州开设一场生命科学分子模拟暑期特训课程，该班至今已成功举办了二十次。本次培训班旨在帮助学员系统了解、掌握 Discovery Studio 中各种经典的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 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

本次培训班将会介绍 **Discovery Studio 新版本 2019** 在药物设计和计算生物学领域的每个应用技术专题，整个培训的技术专题包括：

- 蛋白序列分析、翻译后修饰位点预测
- 蛋白质三维结构预测
- 抗体结构预测
- 抗体人源化改造（New！）
- 蛋白-小分子相互作用预测
- 蛋白-蛋白（核酸/多肽）相互作用预测
- 蛋白质工程（酶/抗体的理性设计与改造）
- 分子动力学模拟
- 拉伸分子动力学模拟
- 分子力学/量子力学 QM/MM 模拟
- 基于靶标结构的药物设计（分子对接/片段药物设计）
- 基于小分子配体的药物设计（药效团模型/QSAR）
- Me too/me better 药物设计（化合物骨架跃迁等）
- 化合物库的虚拟筛选
- 全新药物设计
- 反向找靶/老药新用
- 组合化学及组合化合物库分析
- ADMET 性质预测（Updated！）
- FEP 计算配体相对结合自由能（New!）



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证书。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、7月30日前成功报名并汇款； 2、同一单位，≥4人参加；
4500/人	3600/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：苏州创腾数据科技有限公司（行号：308305008189）

开户行：招商银行苏州分行营业部

账户：512907942610802

b、现金支付：培训现场可收取现金或刷卡。

七、交通地图

培训地点：北京林业大学

培训地点：北京市海淀区清华东路 35 号

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），【中关村站（C1 东南口）】下车，步行 134 米，【中关村南站】上车，乘坐 355 路公交车（育新小区方向），【北京林业大学站】

北京创腾科技有限公司 | 北京·上海·苏州·广州
www.neotrident.com
苏州市工业园区东长路88号2.5产业园A2栋301
电话：(0512) 67509707



下车，步行 492 米到达，全程约为 1 小时 16 分钟。

2、 打车最短距离为 18.9 公里，全程约需要 55 元。

• 北京西站

1、【北京西站】上车，乘坐 387 路公交（慧忠路东口方向），【蓟门桥东站】下次，步行 370 米，【蓟门桥站】上车，乘坐 438 路公交（永丰公交场站方向），【北京林业大学站】下车，步行 353 米到达，全程约为 1 小时 19 分钟。

2、 打车最短距离约为 15.4 公里，全程约需要 42 元。

• 北京站

1、【北京站（D 南口）】上车，乘坐地铁 2 号线（建国门方向），【雍和宫站】下车，换乘地铁 5 号线（天通苑北方向），【大屯路东站】下车，换乘地铁 15 号线（清华东路西口方向），【清华东路西口站（B 东北口）】下车，步行 816 米到达，全程约为 1 小时 5 分钟。

2、 打车最短距离约为 19.6 公里，全程约需要 68 元。

八、周边住宿(请学员自行预定，费用自理)



- 1) 宾馆名称：7 天酒店清华大学东门店 010-85368080
宾馆地址：北京市海淀区双清路 14 号院
- 2) 宾馆名称：汉庭酒店（清华东门店） 010-62313232
宾馆地址：北京市海淀区王庄路 27 号（城建四公司）
- 3) 宾馆名称：如家快捷酒店北京清华大学东门店 010-82411980
宾馆地址：北京市海淀区双清路 16 号

注：以上三个经济型酒店供学员参考。暑期周边住宿非常紧张，请学员提早预定住宿。



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。

北京创腾科技有限公司 | 北京·上海·苏州·广州
www.neotrident.com
苏州市工业园区东长路88号2.5产业园A2栋301
电话：(0512) 67509707



培训班课程日程安排

日期	时间	内容
第一天	08:30-09:00	报到和注册 报到地点：北京林业大学
	09:00-10:15	Discovery Studio 的基本界面及基本操作
	10:15-10:25	茶歇
	10:25-11:55	基于受体的药物设计专题之一：基于“热区”匹配的高通量虚拟筛选模块：DS_LibDock
	11:55-12:00	培训班合影
	12:00-14:00	午餐时间（餐后可回宿舍休息或直接去教室上机，工程师 13:30 开始答疑）
	14:00-15:30	基于受体的药物设计专题之二：基于格点计算的精确分子对接模块：DS_CDOCKER
	15:30-15:40	茶歇
	15:40-17:10	基于受体的药物设计专题之三：全柔性的对接模块：DS_Flexible Docking
	17:10-17:30	基于受体药物设计专题总结
第二天	09:00-10:15	先导化合物优化&全新药物设计专题之一：AutoLudi
	10:15-10:25	茶歇
	10:25-10:55	先导化合物优化&全新药物设计专题之二：Ludi
	10:55-11:55	先导化合物优化&全新药物设计专题之三：MCSS
	11:55-14:00	午餐时间（餐后可回宿舍休息或直接去教室上机，工程师 13:30 开始答疑）
	14:00-14:45	先导化合物优化&全新药物设计专题之四：Grow Scaffold
	14:45-15:30	先导化合物优化&全新药物设计专题之五：Replace fragment
	15:30-15:40	茶歇
	15:40-17:10	先导化合物优化&全新药物设计专题之六：FEP 计算配体相对结合自由能
	17:10-17:30	先导化合物优化&全新药物设计的总结
第三天	09:00-10:20	药效团模型专题之一：基于配体的定性药效团模型构建（HipHop）及应用
	10:20-10:30	茶歇
	10:30-11:55	药效团模型专题之二：基于配体的定量药效团模型构建（HypoGen）及应用
	11:55-14:00	午餐时间（餐后可回宿舍休息或直接去教室上机，工程师 13:30 开始答疑）
	14:00-15:00	药效团模型专题之三：基于靶标结构的药效团模型产生及应用
	15:00-15:10	茶歇
	15:10-16:00	药效团模型专题之四：基于配体-受体晶体复合物的药效团模型产生及应用，反向找靶等
	16:00-16:15	药效团模型专题的总结
	16:15-17:30	构效关系分析（MMP）
第四天	09:00-10:15	二维/三维定量构效关系（2D-QSAR /3D QSAR）
	10:15-10:25	茶歇
	10:25-11:25	药物药代及毒性预测：DS_ADMET&DS_TOPKAT
	11:25-11:55	虚拟组合化合物库的设计与分析
	11:55-14:00	午餐时间（餐后可回宿舍休息或直接去教室上机，工程师 13:30 开始答疑）
	14:00-14:30	蛋白质序列分析：蛋白翻译后修饰位点预测、抗原线性表位预测
	14:30-15:50	蛋白质同源建模专题之一：球蛋白建模



	15:50-16:00	茶歇
	16:00-16:40	蛋白质同源建模专题之二：GPCR 类膜蛋白建模
	16:40-17:30	蛋白质同源建模专题之三：抗体建模
第五天	09:00-10:15	生物大分子间相互作用模式的预测：DS ZDOCK
	10:15-10:25	茶歇
	10:25-11:55	蛋白质设计专题之一：虚拟氨基酸突变
	11:55-14:00	午餐时间（餐后可回宿舍休息或直接去教室上机，工程师 13:30 开始答疑）
	14:00-14:30	蛋白质设计专题之二：蛋白质二硫键预测
	14:30-15:30	蛋白质设计专题之三：蛋白质聚集效应预测及抗体人源化
	15:30-15:40	茶歇
	15:40-16:40	分子力学、支持 GPU 计算的分子动力学模拟介绍及应用
	16:40-17:00	拉伸分子动力学简介及应用
	17:00-17:30	量子力学（QM）/分子力学（MM）简介及应用
	17:30-17:40	培训班闭幕，颁发证书

