

2021.05
(中国·苏州)

第一轮通知

第十届中国国际分子模拟与人工智能应用学术会议

The 10th International Conference on Molecular Simulations and Artificial Intelligence Application

会议主办单位: 吉林大学汽车材料教育部重点实验室
北京创腾科技有限公司

中国科学院上海药物研究所
中国化学会计算(机)化学专业委员会



第十届国际分子模拟与人工智能应用学术会议

The 10th International Conference on Molecular Simulations and Artificial Intelligence Application

2021.05 苏州

ICMS&AI . 2021

作为国内历史最悠久、分子模拟领域公认的高水平国际学术会议，国际分子模拟与人工智能应用学术会议重磅回归。经过两年的精心筹备，本次会议将于2021年5月29日-5月30日在苏州市隆重举行，本次会议将为国内外从事分子模拟与人工智能应用的企业、高校、科研机构的专家与学者提供最为广泛的交流与合作平台。大会主题：迎接智能创新。

会议概况

人工智能、分子模拟赋能科技研发创新

过去20年，以计算化学、计算生物学、生物信息学为代表的分子模拟技术已经在生命科学和材料科学领域取得广泛的应用效果，成为包括化学化工、材料科学和生命科学等领域认识和解决复杂科学和工程问题的重要方法之一。

过去5年，以机器学习为代表的人工智能技术已经成为新一轮产业变革的核心驱动力，正在对世界经济、社会进步和人类生活产生极其深刻的影响。在科学研究领域，传统分子模拟技术与人工智能技术的碰撞与融合，将为新材料开发、新药设计与研发提供更强有力的推动力。

本次大会专注于分子模拟及人工智能技术在生命及材料科学领域最新应用成果的交流 and 分享，旨在以通过理论计算，分子模拟和科学数据驱动的AI技术来推动和变革传统的研发和创新模式。本次会议除了传统的理论计算和分子模拟在材料与生命科学的应用等主题外，还增加了分子模拟和人工智能最新算法以及数据驱动科学人工智能技术针对工业界的研发和创新应用等内容。欢迎业界的各位专家学者踊跃参加本届盛会，欢聚苏州，共享创新！



专业参会代表



知名演讲嘉宾



前沿学术成果分享



主题分会场
平行开展



领袖厂商技术
产品展演



一对一
商务洽谈

迎接智能创新

第十届中国国际分子模拟与人工智能应用学术会议

The 10th International Conference on Molecular Simulations and Artificial Intelligence Application

2021.05 苏州

大会组织

会议主办单位

- 吉林大学汽车材料教育部重点实验室
- 北京创腾科技有限公司
- 中国科学院上海药物研究所
- 中国化学会计算(机)化学专业委员会

顾问

陈冀胜院士	陈难先院士	陈 勇院士
段 雪院士	黄 维院士	李正名院士
柳百新院士	沈倍奋院士	王崇愚院士
魏于全院士	吴云东院士	谢克昌院士
张礼和院士	赵国屏院士	于吉红院士

会议组织委员会

主 任: 徐筱杰教授、蒋青教授、沈竞康研究员、蒋华良院士、冯华副总

副主任: 朱维良研究员、高旺教授、侯廷军教授、徐涛博士、代亚东博士

秘书长: 高旺教授、赵明教授

成 员: 刘力、刘微、朱永福教授、郎兴友教授、杨春成教授、王智力教授、文子教授、李晓霞教授、杨超、张忠仁、李人则、刘莹博士、陈思

会议学术委员会 (以姓氏拼音为序)

● 主席:



陈凯先院士

● 副主席:



沈竞康研究员



徐筱杰教授



蒋华良院士



蒋青教授



周涵教授



冯华副总

● 秘书:



徐涛博士



代亚东博士

学术委员会成员及所在单位 详见附录

第十届中国国际分子模拟与人工智能应用学术会议

The 10th International Conference on Molecular Simulations and Artificial Intelligence Application

2021.05 苏州

特邀嘉宾

大会致辞



陈凯先
院士
中国科学院上海药物研究所



徐筱杰
教授
北京大学

大会开幕式主持人



沈竞康
研究员
中国科学院上海药物研究所

大会报告主持人



王任小
教授
复旦大学



崔田
教授
宁波大学



王宝俊
教授
太原理工大学

本届大会报告邀请嘉宾(部分)



尤启冬
教授
中国药科大学



蒋青
教授
吉林大学



黎健
博士 副总裁
药明康德新药开发有限公司



来鲁华
教授
北京大学



杨金龙
院士
中国科学技术大学



蒋钰
博士 院长
江苏恩华药业苏州药物研究院



胡蓓
教授
北京协和医院



李隽
教授
清华大学



赵旭山
高级经理
中国福建能源器件与科学技术
创新实验室
宁德时代21C创新实验室



张亮仁
教授
北京大学医学部



李泓
研究员
中国科学院物理研究所
天目湖储能技术研究院



陈洁
博士, 副总经理
苏州开拓药业股份有限公司



杨胜勇
教授
四川大学



孙准
教授
上海交通大学



叶玲
博士, 运营总监
山东则正医药技术有限公司



侯廷军
教授
浙江大学



陈星秋
研究员
中国科学院金属研究所



冯华
首席技术官
北京创腾科技有限公司



郑明月
研究员
中国科学院上海药物研究所



丁向东
教授
西安交通大学

更多嘉宾 持续更新.....

迎接智能创新

第十届国际分子模拟与人工智能应用学术会议

The 10th International Conference on Molecular Simulations and Artificial Intelligence Application

2021.05 苏州

会议特色

会议主题:迎接智能创新

探讨利用分子模拟技术、大数据、云计算、机器学习及人工智能技术推动诸如重化工、能源、材料、生物制药等密切相关产业的发展 and 进步。

直击前沿学术成果:

收录了包括在“Nature, JACS, Adv. Mater, Nano Energy, Science”等众多有影响力的权威杂志上发表过的学术文章。

分子模拟与人工智能最新算法研讨会:

国内和国际上相关分子模拟,机器学习和深度学习算法的最新研发成果以及应用,同时包括研发数据采集,数据基因组技术(数据融合技术)以及最新的工作流技术的相关分享与应用。

产学研的一体化平台:

分子模拟与人工智能技术大大促进了工业界的研发创新能力,本次会议将增设分子模拟与人工智能技术的工业应用分会,并在会议期间增设专门“人才招聘环节”加强学术和企业人才互动,并为学术研究与企业间提供专门的课题合作及成果转让的平台和资源。

新一代分子模拟与人工智能创新平台的最新体验:

与会的各位专家和学者能够了解和体验新一代基于科学数据驱动的智能研发平台,包括基于云计算和移动应用的数据采集(iLabPower),科学数据融合(数据基因组SDH)以及分子模拟与AI(MaXFlow)三大智能创新平台。



会议设置

智能创新分会一

分子模拟与人工智能新算法和新技术

智能创新分会二

数据驱动智能创新技术在工业领域的应用

材料分会一

分子模拟与人工智能技术在化学化工领域的应用

生命分会一

分子模拟及人工智能在药物设计、生物大分子的应用

生命分会二

定量药理学与药物研发

材料分会二

分子模拟与人工智能技术在材料物理领域的应用



大会论文集&墙报交流

迎接智能创新

第十届国际分子模拟与人工智能应用学术会议

The 10th International Conference on Molecular Simulations and Artificial Intelligence Application

2021.05 苏州

分会内容

智能创新分会1: 分子模拟与人工智能新算法和新技术

分会议题:

- 1、最新的模拟算法的交流和分享
- 2、新的AI技术如何应用于研发领域
- 3、新算法及新技术的整合
- 4、新算法及新技术应用前景的讨论
- 5、新算法及新技术的实用性案例分享
- 6、如何降低新算法和新技术的使用门槛
- 7、如何快速实现新算法、新技术的产业化应用



智能创新分会2: 数据驱动智能创新技术在工业领域的应用

分会议题:

- 1、医药及新材料研发领域数字化转型如何开展
- 2、打造数字化创新实验室的实战经验共享
- 3、大数据时代企业如何积累研发数据的核心资产
- 4、科学数据中台对智能化研发的意义
- 5、研发项目管理中的难点、最佳实践及信息技术在其中的作用
- 6、精细化管理实验室试剂库存
- 7、科研院校实践数字化管理的特点和难点
- 8、信息化技术如何助力传统材料研发行业实现破局
- 9、新兴材料的研发如何利用数字化技术实现弯道超车
- 10、生物药研发的特点及数据管理、给IT支持带来的挑战
- 11、CADD和AIDD技术如何更好地辅助新药研发
- 12、如何通过智能化手段解决仿制药研发中最关键的质量问题
- 13、在合规的前提下实现生物分析实验室的全面数字化管理
- 14、最新药政、法规及指南的解读、研发数据如何管理满足申报的要求
- 15、面向智慧科研的信息化系统构建
- 16、AI技术在智能化研发领域的应用



材料科学分会1: 分子模拟与人工智能技术在化学化工领域的应用

分会议题:

- 1、分子模拟在高分子材料(橡胶、纤维、塑料、胶粘剂、涂料、薄膜等)及复合材料研究中的应用
- 2、分子模拟在生物、医药研究中的应用
- 3、分子模拟在煤化工研究中的应用
- 4、分子模拟在矿物浮选研究中的应用
- 5、分子模拟在环境科学研究中的应用
- 6、分子模拟在石油化工研究中的应用
- 7、分子模拟在航空航天研究中的应用

生命科学分会1: 分子模拟及人工智能在药物设计、生物大分子的应用

分会议题:

- 1、药物分子设计新技术新进展新应用
- 2、基于受体药物设计技术新进展及应用
- 3、基于片段药物设计技术新进展及应用
- 4、基于配体药物设计技术新进展及应用
- 5、QSAR, ADMET技术新进展及应用
- 6、分子模拟技术在天然产物的进展及应用
- 7、自由能计算技术新进展及应用
- 8、机器学习,人工智能技术新进展及在药物设计中的应用
- 9、抗体发现与抗体设计
- 10、分子模拟在合成生物学领域的技术进展及应用
- 11、蛋白质结构与功能研究进展及应用
- 12、分子模拟在蛋白质工程与酶工程的应用
- 13、机器学习及人工智能技术新进展及其在生物大分子设计中的引用

生命科学分会2: 定量药理学与药物研发

分会议题:

- 1、定量药理学
- 2、基于模型的药物研发(简介和示例)
- 3、药动学试验方案设计、数据计算及示例
- 4、平均、个体、群体生物等效性试验设计和计算
- 5、群体药动学与群体药效学的设计、计算及示例
- 6、药物安全性评价与后续试验的剂量选择
- 7、临床试验剂量选择试验的方案设计和计算
- 8、复方药物的临床试验设计浅析、药物-药物相互作用分析
- 9、PK/PD建模和仿真在大分子药物中的应用和进展



材料科学分会2: 分子模拟与人工智能技术在材料物理领域的应用

分会议题:

- 1、金属材料(稀土功能材料、稀有金属材料、功能合金材料、钢材料、轻型合金材料等)的性能研究及设计
- 2、电子信息材料(半导体材料、非线性光学材料、压电材料、磁性材料等)的性能研究及设计
- 3、新能源材料(锂电池材料、太阳能电池材料、储氢材料、燃料电池材料、核电材料等)的性能研究及设计
- 4、纳米材料的性能研究及设计
- 5、先进陶瓷材料的性能研究及设计
- 6、晶体材料的结构表征、解析与预测

迎接智能创新

第十届国际分子模拟与人工智能应用学术会议

The 10th International Conference on Molecular Simulations and Artificial Intelligence Application

2021.05 苏州

会议报告

会议语言: 中文或英文

报告规模: 盛邀超100位行业专家与业界领袖分享其经验与视野。

报告形式: 会议的报告组织采用邀请报告及征稿两种形式,由学术委员会负责确定大会邀请报告、分会邀请报告、口头报告及征稿评审工作,并由组织委员会负责具体执行。

- 大会邀请报告
- 分会邀请报告
- 分会口头报告



往届ICMS&AI会议盛况会议最大规模近600人

论文征集

投稿论文摘要撰写要求:

● **题目:** 粗体 (Bold), 中文三号黑体, 英文三号Arial。(1.5倍行距)

● **作者:** 姓名 (四号仿宋, 1.5倍行距), 所在单位, 地址, 邮编 (五号宋体, 单倍行距), Email (五号Times New Roman, 单倍行距)

● **投稿方向:** 请注明所属的分会主题

● **摘要正文:** 中文或英文, 请用Word排版, 页面设置为A4, 页边距选择“中等”, 上下2.54 cm, 左右1.91 cm。中文字符用五号宋体, 英文字符用五号Times New Roman, 单倍行距。不超过500字。英文, 如果使用了软件, 请注明所使用软件名称。

● **图片:** 可在文中插入代表性图片, 图表高度不超过4cm, 图题、表题及题注需用英文小五号Times New Roman。

● **关键词:** (关键词三个字使用黑体小四), 关键词一; 关键词二; 关键词三 (五号宋体, 关键词个数不超过5个)

● **参考文献:** (参考文献四个字使用黑体小四),

[1] Zhang, S.; Li, S.; Zhou, W.; Zheng, L. Chem. Phys. 2011, 135: 14304. (Times New Roman, 五号)

[2] 作者一, 作者二, 作者三, 作者四. 杂志名称, 2010, 26(4): 1051 (宋体或Times New Roman, 五号)

投稿论文要求:

- 征文范围包括自**2018年1月**后已发表或未发表的文章。
- 如文章已经在某些杂志上发表过, 请注明所发表的刊物及期刊影响因子, 并附上PDF文档。

- 有需要保密的数据请您在来稿前自行删除。
- 投稿论文请用Word排版, 正文字体请用五号Times New Roman, 1.5倍行距。页边距上下2.7 cm, 左右3.17 cm。
- 稿件后请附上手机和邮箱, 以便论文集的编辑者能与您及时取得联系。
- 投稿请以e-mail附件的方式提交: lunwen@neotri-dent.com
- **投稿截止日期: 2021年4月30日**
- 论文集仅供参会人员内部进行学术交流所用, 不作商业化印刷、发行。
- 论文一经录用, 会议组委会**2021年5月15日前**签发“论文摘要录用回复单”

墙报交流:

会议期间, 将以墙报的方式安排部分会议论文的交流。需在**2021年5月10日前**将墙报摘要EMAIL到lunwen@neotri-dent.com邮箱, 经学术委员会审核通过, 会Email通知您在会前准备好墙报, 并按指定地点自行粘贴、管理, 会期间自由交流。

墙报规格: 高1.2m, 宽0.9m

墙报摘要: 正文内容包含研究目的, 研究方法, 结果与结论
墙报交流地点: 待定

墙报张贴时间: 5月28日下午14:00-18:00

墙报交流时间: 5月29日茶歇时间, 自由交流

5月30日茶歇时间, 自由交流

墙报撤展时间: 5月30日下午18:00

第十届国际分子模拟与人工智能应用学术会议

The 10th International Conference on Molecular Simulations and Artificial Intelligence Application

2021.05 苏州

会议日程

时间	内容
5月28日(星期五)	会议注册报到(全天)
5月29日(星期六)	开幕式、大会报告、专题分会报告研讨
5月30日(星期日)	大会报告、专题分会报告研讨、座谈会、招聘会

注册信息

会议注册费:

包含会议资料、会议用餐、会议纪念品;参会人员住宿费及交通费自理

注:以下优惠只能选择其一,无叠加优惠。

注册类型	注册费	优惠费用及条件
教师及企业代表	RMB 2200元/人	● 5月10日前交纳注册 ● 同一单位>3人参加
学生代表(报到时需出示学生证)	RMB 1600元/人	RMB 1800元/人
外宾代表	USD 300/人	RMB 1200元/人
		USD 300/人

收费方式:

● 银行汇款

(请在汇款时务必注明用途“ICMSAI注册费”,以及参会代表姓名。汇款后请将银行底单发至会务组邮箱 huiyi@neotrident.com)

● 现场收取(现场支持刷卡、支付宝支付、微信支付)

公司名称:苏州创腾数据科技有限公司

纳税人识别号:91320594MA1WDUG37U

开户银行及账号:招商银行苏州分行 512907942610802

行号:308305008189

报名方式

PC端报名链接:[点击报名](#)

手机端报名:手机扫描并识别报名二维码

您将会在提交报名的三个工作日内收到一封成功报名的确认邮件!

5月10日前提交报名可享受优惠价格,5月25日截止报名。



报名二维码

第十届国际分子模拟与人工智能应用学术会议

The 10th International Conference on Molecular Simulations and Artificial Intelligence Application

2021.05 苏州

会议联系

会务事宜

北京创腾科技有限公司

☎ 胡小姐:021-51821768转219;

☎ 李小姐:0512-67509707转0;

✉ huiyi@neotrident.com

吉林大学

高旺教授 :0431-5705371

huiyi@neotrident.com

论文投稿、口头报告申请:

生命科学类论文:

☎ 罗博士:010-82676188转297

材料科学类论文:

☎ 蒋老师:010-82676188

✉ lunwen@neotrident.com

企业赞助事宜:

☎ 徐博士:021-51821768转232

✉ xutao@neotrident.com

大会微信



吉林大学汽车材料教育部重点实验室

中国科学院上海药物研究所

北京创腾科技有限公司

中国化学会计算(机)化学专业委员会

2021年03月1日

大会报告详情将在2021年4月发布的第二轮通知中公布

敬请关注, 欢迎并期待您地参与!

2021-ICMS&AI (中国·苏州)

第十届中国国际分子模拟与人工智能应用学术会议

The 10th International Conference on Molecular Simulations and Artificial Intelligence Application

2021.05 苏州

附录:学术委员会成员及所在单位(以下排名不分先后)

- 步宇翔教授 —— 山东大学
- 曹泽星教授 —— 厦门大学
- 陈 岗教授 —— 吉林大学
- 陈冀胜院士 —— 北京药物化学研究所
- 陈凯先院士 —— 中国科学院上海药物研究所
- 陈 淼博士 —— 华泰紫金投资有限责任公司
- 陈难先院士 —— 清华大学
- 程卯生教授 —— 沈阳药科大学
- 崔 田教授 —— 宁波大学
- 杜冠华研究员 —— 中国医学科学院药物研究所
- Prof. Michael Doyle —— Dassault Systèmes BIOVIA
- 段 雪院士 —— 北京化工大学
- 冯 华先生 —— 北京创腾科技有限公司
- 冯 晓总监 —— 成都康弘药业集团股份有限公司
- 高清志教授 —— 天津大学
- 高 旺教授 —— 吉林大学
- 官向国博士 —— 恒大全球电池研究院
- 郭宗儒教授 —— 中国医学科学院药物研究所
- 韩培德教授 —— 太原理工大学
- 侯廷军教授 —— 浙江大学
- 胡永洲教授 —— 浙江大学
- 黄京飞研究员 —— 中国科学院昆明动物研究所
- 黄 民教授 —— 中山大学
- 黄 维院士 —— 西北工业大学
- 蒋华良院士 —— 中国科学院上海药物研究所
- 蒋 青教授 —— 吉林大学
- 来鲁华教授 —— 北京大学
- 李明宪教授 —— 台湾淡江大学
- 李 隽教授 —— 清华大学
- 李晓霞研究员 —— 中国科学院过程工程研究所
- 李永旺研究员 —— 中国科学院山西煤炭化学研究所
- 李有勇教授 —— 苏州大学
- 李正名院士 —— 南开大学
- 柳百新院士 —— 清华大学
- 刘昌俊教授 —— 天津大学
- 刘万卉教授 —— 山东绿叶制药有限公司
- 马健鹏教授 —— Baylor College of Medicine, Rice University
- Prof. Mike Payne —— Cambridge University
- 彭练矛院士 —— 北京大学
- 彭师奇教授 —— 首都医科大学
- 彭述明研究员 —— 中国工程物理研究院
- 钱 宇教授 —— 华南理工大学
- 乔 刚副院长 —— 中国科学院上海药物所
苏州药物创新研究院
- 沈倍奋院士 —— 军事医学科学院
- 沈百荣教授 —— 四川大学
- 沈竞康研究员 —— 中国科学院上海药物研究所
- 帅志刚教授 —— 清华大学
- 孙 淮教授 —— 上海交通大学
- 唐亚林研究员 —— 中国科学院化学研究所
- 田永君院士 —— 燕山大学
- 王崇愚院士 —— 清华大学
- 樊卫斌研究员 —— 中国科学院山西煤炭化学研究所
- 王宝俊教授 —— 太原理工大学
- 王任小教授 —— 复旦大学
- 汪文川教授 —— 北京化工大学
- 魏于全院士 —— 四川大学
- 吴 锋院士 —— 北京理工大学
- 吴玉章教授 —— 第三军医大学
- 吴云东院士 —— 香港理工大学
- 徐建清博士 —— 上海药明生物技术有限公司
- 徐筱杰教授 —— 北京大学
- 杨光富教授 —— 华中师范大学
- 杨金龙院士 —— 中国科学技术大学
- 杨 锐研究员 —— 中国科学院沈阳金属研究所
- 杨胜勇教授 —— 四川大学
- 姚小军教授 —— 兰州大学
- 尤启冬教授 —— 中国药科大学
- 苑世领教授 —— 山东大学
- 张红星教授 —— 吉林大学
- 张礼和院士 —— 北京大学
- 张亮仁教授 —— 北京大学
- 张瑞勤教授 —— 香港城市大学
- 赵国屏院士 —— 中国科学院上海生命科学院
- 赵纪军教授 —— 大连理工大学
- 赵景泰教授 —— 上海大学
- 仲崇立教授 —— 天津工业大学
- 周 涵教授 —— 中国石油化工股份有限公司
石油化工科学研究院
- 周延春研究员 —— 中国航天科技集团航天材料及工艺研究所
- 朱维良研究员 —— 中国科学院上海药物研究所

欢聚苏州 共享创新

