

从“概念”到“落地” AI技术在药物创新中的实践应用研讨会

2021年11月13日 | 上海·张江

会议议程

时间	会议议程
8:00-9:00	会议注册
9:00-9:10	致欢迎辞：曹凌霄 总经理，创腾科技有限公司
	主持嘉宾：郁征天 首席技术官，上海宇道生物技术有限公司
9:10-9:40	演讲题目：搞药化 演讲人：邓炳初 博士，成都百裕制药股份有限公司
9:40-10:10	演讲题目：世界一流医药企业的创新和转化卓越经验：分解与总成 演讲人：王敏敏 高级副总裁，Acerand Therapeutics
10:10-10:40	演讲题目：人工智能与药物设计 演讲人：李洪林 教授，华东理工大学
10:40-11:00	茶歇
11:00-11:30	演讲题目：先导设计平台构建与应用 演讲人：姚建华 研究员，中国科学院上海有机化学研究所
11:30-12:00	演讲题目：数据在左、模型在右——如何更好地欣赏智能化研发道路两旁的风景 演讲人：冯华 首席技术官，北京创腾科技有限公司
12:00-13:30	合影&午餐时间
	主持嘉宾：冯华 首席技术官，北京创腾科技有限公司
13:30-14:00	演讲题目：变构药物研发平台的基石：数据库和算力 演讲人：郁征天 首席技术官，上海宇道生物技术有限公司
14:00-14:30	演讲题目：数据驱动型“干”“湿”一体化药物以及中间体原料的合成生物学创新模式 演讲人：胡黔楠 研究员，中国科学院上海营养与健康研究院
14:30-15:00	演讲题目：靶向组蛋白甲基转移酶 MLL1-WDR5 蛋白互作的急性白血病候选药物发现 演讲人：郭小可 副教授，中国药科大学
15:00-15:20	茶歇
15:20-15:50	演讲题目：Discovery of Novel Potent Analgesics 演讲人：付伟 教授，复旦大学
15:50-16:20	演讲题目：药物预测模型从0到1 演讲人：王亚鑫 经理，北京创腾科技有限公司
16:20-16:30	互动抽奖 【100%有礼】
16:30	结语



邓炳初 博士
成都百裕制药股份有限公司

演讲题目：搞药化

演讲摘要：

以药物化学为主，把每个临床上市药物思路和大家共享。



王敏敏 高级副总裁
Acerand Therapeutics

演讲题目：世界一流医药企业的创新和转化卓越经验：分解与总成

演讲摘要：

从人才、项目、技术、资金四个主要维度，分享“世界一流医药企业的创新和转化经验”，并结合药物研发战略和目标，从技术策略和执行角度，探讨了数据积累、机器学习、人工智能等热点技术在药物研发过程中的应用。



李洪林 教授
华东理工大学

演讲题目：人工智能与药物设计

演讲摘要：

“人工智能药物设计”的核心和关键仍然是药物设计，目前，人工智能药物设计的公司多数集中在分子生成，进而探索化学空间的这一环节，但化学空间并非越大越好，如果探索空间是不可行解，将徒增研发成本和浪费时间。

如何将人工智能应用到精准的药物设计的环节中？我们自主研发的 1 类候选新药（治疗非小细胞肺癌），以我们发展的人工智能药物代谢位点和代谢产物的预测方法，在临床前用于解决了实际的问题，并快速推动该候选药物的临床前研究，获得了 CDE 的默认临床许可，是人工智能应用于药物设计的经典范例。



姚建华 研究员
中国科学院上海有机化学研究所

演讲题目：先导设计平台构建与应用

演讲摘要：

众所周知，新药研制是一个耗时、耗资、且投资风险巨大的工程。随着信息技术的发展，人们已认识到它对提高工作效率的积极作用。在药物研发领域，信息技术已在先导发现、药物靶点发现、药物与靶点作用机制研究、药物代谢和药物毒性等研究工作中得到应用。目前，用于先导设计的信息系统大部分是商业软件。由于商业软件的某些局限性，我们开展了一些化合物性质预测、反应预测等方法学研究和系统开发，并建立了对应的先导化合物设计平台。在本报告中，我们将介绍该平台的功能和应用实例。



冯华 首席技术官
北京创腾科技有限公司

演讲题目：数据在左、模型在右——如何更好地欣赏智能化研发道路两旁的风景

演讲摘要：

数据和模型是大数据时代实现药物研发智能化的两个核心要素。随着各类基础数字化研发系统的建立和使用，很多企业意识到，在数据利用阶段，数据按需获取的困难以及 AI（物理）模型建立及使用的技术门槛却成了数字化向智能化推进最大的障碍。本报告将从实际落地的角度探讨如何让所有药物研发人员都能快速获取自己需要的内外源数据，并用到最新的模拟及 AI 技术无门槛建立并分享自己的模型，真正实现数据自由及模型自由。



郁征天 部长
上海宇道生物技术有限公司

演讲题目：变构药物研发平台的基石：数据库和算力

演讲摘要：

当今 AI 技术在新药研发的领域正迎来一个百家齐放的兴盛期。变构药物，作为新药研发的不二选择，正越来越多的进入许多药企的研发管线。作为中国一家专注于变构药物研发平台与研发管线同时并进的生物技术公司，宇道打造了能解决变构药物开发中的瓶颈与挑战的 AI 赋能平台。AI 运用与成功的必要条件是具备一个良好的数据库以及由此演绎出的变构机制的“规则”。这个演讲将简单介绍宇道公司，特别地叙述宇道 AI 平台的数据库的结构和一些实例，以及算力的优化过程。



付伟 教授
复旦大学

演讲题目：Discovery of Novel Potent Analgesics

演讲摘要：

Management of moderate to severe pain relies heavily on opioid analgesics such as morphine, oxycodone, and fentanyl in clinics. However, their prolonged use was associated with undesirable side effects. Many new strategies to reduce side effects have been proposed, but not without disadvantages. Here we apply a series of molecular modeling techniques to discover novel potent analgesic with a new scaffold. The mechanism of agonist-induced activation of μ opioid receptor (MOR) was proposed by means of molecular dynamics simulation.



胡黔楠 研究员
中国科学院上海营养与健康研究院

演讲题目：数据驱动型“干”“湿”一体化药物以及中间体原料的合成生物学创新模式

演讲摘要：

数据驱动型“干”“湿”一体化药物以及中间体原料的合成生物学创新模式的报告内容包括：（1）生物制造数据(ChemHub, Cell2Chem, EnzyMine)；（2）生物制造途径设计工具(novoPathFinder, CF-Targeter, EcoSynther)；（3）生物制造有关的设计工具 (BCSExplorer, Bio2Rxn, RxnBLAST, PrecursorFinder)；（4）全新的干湿一体化合成生物学创新体系以及应用。



郭小可 副教授
中国药科大学

演讲题目：靶向组蛋白甲基转移酶 MLL1-WDR5 蛋白互作的急性白血病候选药物发现

演讲摘要：

WDR5 是 WD40 重复结构域蛋白家族的成员之一，通过影响 MLL1 复合物的稳定性及其甲基转移酶活性参与急性白血病的发生及发展。干扰 MLL1-WDR5 蛋白-蛋白相互作用已经成为 MLL1 重排型急性白血病的潜在治疗策略。通过骨架跃迁、构象调控等策略，设计、合成一系列具有全新苯胺嘧啶类骨架的 MLL1-WDR5 抑制剂，其中部分化合物显示出良好的 WDR5 的结合活性、并且能够选择性的抑制 MLL1 组蛋白甲基转移酶活性和 MLL 融合型细胞的增殖。该研究首次在裸鼠移植瘤中证明了 MLL1-WDR5 抑制剂的抗急性白血病的潜力，为该领域的药物开发提供参考。



王亚鑫 经理
北京创腾科技有限公司

演讲题目：药物预测模型从 0 到 1

演讲摘要：

AI 技术已经在不同的行业中实现应用，为各个产业赋能。虽然在医药研发领域，AIDD 与 CADD 的深度融合突显出巨大的潜力，然而对于一线的实验科学家，依然需要耗费大量的时间在软件摸索与新知识学习中。MaXFlow 提供了一个巧妙的解决方案，通过图形界面实现针对具体药物研发的 AI 模型创建与运用工具。从打通空间结构模型与数据预测模型的壁垒开始，结构模型也可以作为 AI 模型的数据，开启结构与数据的同步使用，实现经典模拟计算与新兴 AI 预测的巧妙融合。为医药研发行业提供一个填补数据产生保存与数据使用断层的粘合剂。

*** 参加下午现场抽奖互动，100%惊喜有礼 ***

会议联系

北京创腾科技有限公司上海分公司
电话：021-51821768-219 胡女士
手机：13916858963 陈女士
邮箱：market@neotrident.com
网址：<http://www.neotrident.com/>

