

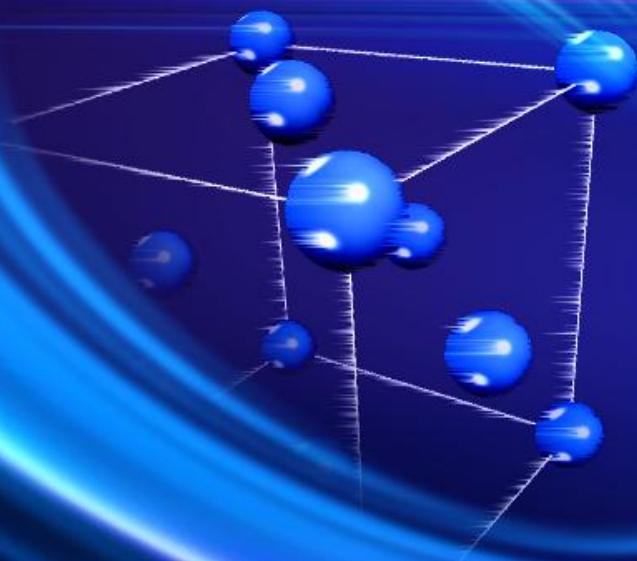
洞悉微观 预见未来

INSIGHT SEES THE FUTURE



第十一届国际分子模拟与人工智能应用学术会议

2023.05 成都·中国



2023.05
成都·中国

第十一届
THE 11th **2023**
国际分子模拟与人工智能
应用学术会议

International Conference on Molecular Simulations and
Artificial Intelligence Application

第一轮通知

会议主办单位：

四川大学华西医院生物治疗国家重点实验室
苏州创腾软件有限公司

中国科学院上海药物研究所
中国化学会计算化学专业委员会



第十一届国际分子模拟与人工智能应用学术会议

The 11th International Conference on Molecular Simulations and Artificial Intelligence Application

2023.05 成都·中国

ICMS&AI . 2023

作为国内历史悠久、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**2023年5月6日-7日**在**成都**隆重举行，本次大会将为国内外从事分子模拟人工智能应用和研发创新数字化转型的企业、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：**洞悉微观，预见未来。**

会议概况

模拟+AI——推动科研模式的“代际革命”

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。

近年来，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。

自2000年以来，大会已成功举办了十届，汇集了国内生物、制药、材料、新能源及化工领域相关的企业和科研机构。本届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、探讨如何改进现有的信息化平台以适应生命科学及材料科学领域对智能研发和持续创新的需求等内容。欢迎业界的各位专家学者踊跃参加本届盛会，欢聚成都，共享创新！



超千人

专业
参会代表



150+

知名
演讲嘉宾



300+

前沿学术
成果分享



6

主题分会场
平行开展



100+

领袖厂商技术
产品展演



100+

一对一
商务洽谈

洞悉微观 预见未来

第十一届国际分子模拟与人工智能应用学术会议

The 11th International Conference on Molecular Simulations and Artificial Intelligence Application

2023.05 成都·中国

大会组织

会议主办单位

- 四川大学华西医院生物治疗国家重点实验室
- 中国科学院上海药物研究所
- 苏州创腾软件有限公司
- 中国化学会计算化学专业委员会

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



来鲁华教授



杨胜勇教授



周涵教授



冯华副总

• 秘书:



杨欣副研究员



代亚东博士

会议组织委员会

主任: 徐筱杰教授、杨胜勇教授、来鲁华教授、沈竞康研究员、冯华副总

副主任: 李洪林教授、侯廷军教授、代亚东博士

秘书长: 杨欣副研究员、陈思

成员: 李国波、邹俊、刘博、何谷、李锐、江源远、汪益妃、杨振宇、代梦哲、罗炳男、张忠仁、李人则、孙嘉蔚、蒋佳丽

学术委员会成员及所在单位 详见附件

第十一届国际分子模拟与人工智能应用学术会议

The 11th International Conference on Molecular Simulations and Artificial Intelligence Application

2023.05 成都·中国

大会报告

本届大会部分嘉宾(部分)



杨金龙 院士
中国科学技术大学



沈竞康 研究员
中国科学院上海药物研究所



杨胜勇 教授
四川大学
生物治疗国家重点实验室



来鲁华 教授
北京大学



尤启冬 教授
中国药科大学



曹泽星 教授
厦门大学



陆文聪 教授
上海大学



侯廷军 教授
浙江大学



邓伟侨 教授
山东大学



张志远 联合创始人、CSO
维泰瑞隆(北京)生物科技
有限公司



蔡加强 联合创始人、CSO
苏州宜联生物医药有限公司



张弛 博士
上海生物制品研究所
有限责任公司



任雪艳 董事长
北京鼎材科技有限公司



李洪林 教授
华东理工大学



王利华 前沿材料研究院院长
浙江华友钴业股份有限公司



李有勇 教授
苏州大学



郑明月 研究员
中国科学院上海药物研究所



刘智攀 教授
复旦大学



李少伟 教授
厦门大学



张健 教授
上海交通大学



盛春泉 教授
海军军医大学



刘英哲 博士
西安近代化学研究所



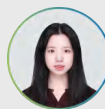
李进 董事长
成都先导药物开发股份
有限公司



代志龙 主任
湖北航天化学技术研究所



代振宇 博士
中国石油天然气股份有限公司
石油化工研究院



孙嘉蔚 产品总监
创腾科技有限公司



代亚东 博士
创腾科技有限公司

近150位分会报告嘉宾将在3月发布的第二轮通知中公示

第十一届国际分子模拟与人工智能应用学术会议

The 11th International Conference on Molecular Simulations and Artificial Intelligence Application

2023.05 成都·中国



会议特色

会议主题：洞悉微观·预见未来

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。

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, 在会议期间设专门“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。

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。

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

数字化研发分会

在SaaS大潮下的研发数字化转型

新兴算法与应用分会

材料领域、生物医药领域的新算法和新技术

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

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



生命分会一

分子模拟及人工智能在小分子药物设计中的应用

生命分会二

分子模拟及人工智能在分子生物学领域中的应用

大会论文&墙报交流

洞悉微观 预见未来

第十一届国际分子模拟与人工智能应用学术会议

The 11th International Conference on Molecular Simulations and Artificial Intelligence Application

2023.05 成都·中国

分会内容

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. 催化材料的性能研究与设计
2. 高分子材料(橡胶、纤维、塑料、胶粘剂、涂料、薄膜等)性能研究与设计
3. 复合材料性能研究和配方设计
4. 含能材料的研究与设计
5. 多孔材料的研究与设计
6. 离子液体的研究与设计
7. 超临界流体的研究与设计
8. 生物、医药研究中的应用
9. 煤化工研究中的应用
10. 矿物浮选研究中的应用
11. 环境科学研究中的应用
12. 石油化工研究中的应用
13. 航空航天研究中的应用
14. 海洋化工研究中的应用
15. 建筑材料研究中的应用

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. 新型热电材料的性能研究及设计
2. 纳米材料与器件的性能研究及设计
3. 新能源材料(锂离子电池、太阳能电池材料、储氢材料、固体氧化物燃料电池材料等)的性能研究及设计
4. 金属材料性能研究及设计
5. 半导体材料的性能研究及设计
6. 新型超硬材料的研究及设计
7. 新型超导材料的研究及设计
8. 新型压电材料的研究及设计
9. 新型非线性光学材料的研究及设计
10. 新型稀土材料的研究及设计
11. 新型形状记忆功能材料的研究及设计
12. 晶体材料的结构表征、解析与预测

新兴算法与应用分会:

材料领域、生物医药领域的新算法和新技术

分会议题:

1. 分子模拟技术(量子力学、分子力学及动力学、介观尺度等)相关新算法和新技术
2. 人工智能相关新算法及新技术
3. 多种新算法及新技术的融合
4. 新算法和新技术在研发领域的应用
5. 新算法、新技术的产业化应用
6. 材料信息学
7. 材料基因组
8. 药物分子设计和筛选相关新算法及新技术
9. 自由能计算新算法和新技术
10. QSAR、ADMET新算法和新技术
11. 生物大分子设计和筛选新算法和新技术
12. 抗体分子设计和优化新算法和新技术
13. 合成生物学领域新算法和新技术
14. 蛋白质结构与功能新算法和新技术
15. 生物信息学领域

生命科学分会1:

分子模拟及人工智能在小分子药物设计中的应用

分会议题:

1. 药物设计和筛选
2. 基于受体药物设计
3. 基于片段药物设计
4. 基于配体的药物设计
5. 基于功能基因组和结构基因组的药物分子设计
6. FEP结合自由能的计算
7. AI在先导化合物发现中的应用
8. 中药和天然产物的作用机制研究及网络药理学
9. 药物分子设计与合成理论、工艺、方法及生物活性研究

生命科学分会2:

分子模拟及人工智能在分子生物学领域中的应用

分会议题:

1. AIDD和CADD在大分子药物发现中的应用
2. 抗体药物发现与设计
3. 合成生物学领域
4. 系统生物学领域
5. 蛋白质结构预测、设计方法与应用
6. 生物信息学在蛋白质组学与宏蛋白质组学中的应用
7. 蛋白质工程与酶工程
8. 计算生物学

数字化研发分会:

在SaaS大潮下的研发数字化转型

分会议题:

1. 如何通过信息化的手段实现企业研发的降本增效
2. 数字化时代的项目管理、外包与协作
3. 如何通过信息化技术提升企业在资本市场的估值
4. 打造数字化创新实验室的实战经验分享
5. SaaS应用模式的普及能为企业数字化转型带来什么样的好处
6. 研发试剂及CMC阶段关键物料的管理要求有什么不同, 如何实现物料的全生命周期数字化监管
7. 电子化数据的合规管理需要注意哪些事项
8. GAMP5指导原则下的SaaS验证模式探索
9. 电子化的研发数据迎审时应该注意哪些事项, 国家监管部门最新法规政策解析
10. SaaS模式在研发数据安全性方面的优势探讨
11. 如何保障科研人员快速按需获取相关的业务数据并进行有效的分析与挖掘
12. 大量历史数据及复杂的Excel数据如何有效清洗及分析
13. 研发系统是否需要和企业ERP、OA、MES等系统进行对接, 数据互联的最佳业务实践是什么
14. 模拟及AI技术在智能化研发阶段的应用模式探讨
15. 如何降低模拟与AI技术的门槛, 实现相关技术在研发领域的快速普及和应用

洞悉微观 预见未来

第十一届国际分子模拟与人工智能应用学术会议

The 11th International Conference on Molecular Simulations and Artificial Intelligence Application

2023.05 成都·中国

会议日程

时间	内容
5月5日(星期五)	会议注册报到(全天)
5月6日(星期六)	开幕式、大会报告、专题分会报告研讨
5月7日(星期日)	大会报告、专题分会报告研讨、座谈会

会议报告

会议语言:中文或英文

报告规模:盛邀近150多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1000人

论文征集

论文要求:

- **题目:** 粗体(Bold), 英文
- **作者:** 姓名, 所在单位, 地址, 邮编, 电子邮件
- **摘要:** 100-300字, 英文, 如果使用了软件, 请在摘要中注明软件名称 (**摘要模板:点击下载**)
- **论文全文:** 中文或英文
- **投稿方向:** 请注明所属的分会主题

参考文献:

- 征文范围包括自**2020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。
- 有需要保密的数据请您在来稿前自行删除。
- 正文字体请用12号Times New Roman, 1.5倍行距。请用Word排版, 页边距上下2.7 cm, 左右3.17 cm。
- 稿件后请附上联系方法, 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@neotrident.com
- 投稿截止日期:**2023年4月15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**2023年4月20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**2023年4月20日**前将墙报摘要EMAIL到lunwen@neotrident.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, 会议期间自由交流。

墙报规格: 高1.2m, 宽0.9m

墙报交流地点: 待定

墙报张贴时间: 另行通知

墙报交流时间: 另行通知

墙报撤展时间: 另行通知

第十一届国际分子模拟与人工智能应用学术会议

The 11th International Conference on Molecular Simulations and Artificial Intelligence Application

2023.05 成都·中国

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 ● 4月10日前交纳注册 ● 同一单位>3人参加
教师及企业代表	RMB 2200元/人	RMB 1800元/人
学生代表(报到时需出示学生证)	RMB 1600元/人	RMB 1200元/人
外宾代表	USD350/人	USD300/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 huiji@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：北京创腾科技有限公司上海分公司

纳税人识别号：91310115671170772F

开户银行及账号：招商银行上海分行荣科路支行
121919707510501

行号：308290003716

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！

4月10日前提交报名可享受优惠价格。



扫描立即报名

第十一届国际分子模拟与人工智能应用学术会议

The 11th International Conference on Molecular Simulations and Artificial Intelligence Application

2023.05 成都·中国

会议联系

会务事宜

创腾科技有限公司

☎ 胡老师:021-51821759

☎ 崔老师:0512-67509707转220

✉ huiyi@neotrident.com

论文投稿、口头报告申请:

生命科学类论文:

☎ 牛老师

材料科学类论文:

☎ 吉老师

✉ lunwen@neotrident.com

企业赞助事宜:

☎ 葛女士:0512-67509707转249

✉ market@neotrident.com

大会主办方

- 四川大学华西医院生物治疗国家重点实验室
- 中国科学院上海药物研究所
- 苏州创腾软件有限公司
- 中国化学会计算化学专业委员会



ICMS&AI-2023 大会公众号

更多报告详情将在2023年3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!

2023-ICMS&AI (中国·成都)

洞悉微观 预见未来

第十一届国际分子模拟与人工智能应用学术会议

The 11th International Conference on Molecular Simulations and Artificial Intelligence Application

2023.05 成都·中国

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
- Prof. Mike Payne —— Cambridge University
- Prof. Michael Doyle —— Dassault Systèmes BIOVIA
- 曹泽星教授 —— 厦门大学
- 陈 岗教授 —— 吉林大学
- 陈 淼博士 —— 华泰紫金投资有限责任公司
- 陈凯先院士 —— 中国科学院上海药物研究所
- 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
- 代亚东博士 —— 创腾科技有限公司
- 杜冠华研究员 —— 中国医学科学院药物研究所
- 段 雪院士 —— 北京化工大学
- 樊卫斌研究员 —— 中国科学院山西煤炭化学研究所
- 冯 华先生 —— 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 旺教授 —— 吉林大学
- 高清志教授 —— 天津大学
- 官向国博士 —— 香港量子人工智能实验室
- 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 民教授 —— 中山大学
- 黄 维院士 —— 西北工业大学
- 黄京飞研究员 —— 中国科学院昆明动物研究所
- 蒋 青教授 —— 吉林大学
- 蒋佳丽女士 —— 创腾科技有限公司
- 来鲁华教授 —— 北京大学
- 李 隽教授 —— 清华大学
- 李明宪教授 —— 台湾淡江大学
- 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
- 刘昌俊教授 —— 天津大学
- 刘万卉教授 —— 山东绿叶制药有限公司
- 柳百新院士 —— 清华大学
- 马健鹏教授 —— Baylor College of Medicine, Rice 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
- 沈百荣教授 —— 四川大学
- 沈倍奋院士 —— 军事医学科学院
- 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
- 孙佳蔚女士 —— 创腾科技有限公司
- 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
- 汪文川教授 —— 北京化工大学
- 王宝俊教授 —— 太原理工大学
- 王崇愚院士 —— 清华大学
- 王任小教授 —— 复旦大学
- 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 锐研究员 —— 中国科学院沈阳金属研究所
- 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 弛博士 —— 上海生物制品研究所
- 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

洞悉微观 预见未来