

让AI落地
—touch down—

ICMS&AI
第十二届国际分子模拟与人工智能应用学术会议
2025.10 苏州·中国

2025 第十二届 THE 12th 中国·苏州 国际分子模拟与人工智能应用学术会议

主办单位：

上海药学会人工智能药学专委会
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

第一轮通知

第十二届国际分子模拟与人工智能应用学术会议

The 12th International Conference on Molecular Simulations and Artificial Intelligence Application

2025.10 中国·苏州

ICMS&AI . 2025

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**2025年10月9日-11日**在苏州隆重举行，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：“**让AI落地**”。

会议概况

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 and 解决复杂科学和工程问题的重要方法之一。

近年来以大语言模型以及机器学习和深度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，大会已成功举办了十一届，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。本次会议通过“**让AI落地**”这一主题，探讨基于数据驱动的BI智能分析、人工智能和分子模拟的相关技术在材料创新、新药发现、配方研发与工艺智能等领域的落地应用，同时针对“让AI落地”这一主题，分享交流最新的分子模拟与人工智能的新技术和新算法。

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！



500+

专业参会代表



100+

知名演讲嘉宾



300+

前沿学术成果分享



3

主题分会场



100+

领袖厂商技术



100+

一对一

让AI落地
- touch down -

第十二届国际分子模拟与人工智能应用学术会议

The 12th International Conference on Molecular Simulations and Artificial Intelligence Application

2025.10 中国·苏州

大会组织

会议主办单位

- 上海药学会人工智能药学专委会
- 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(机)化学专业委员会

● 副主任:



徐筱杰教授



来鲁华教授



杨胜勇教授



代振宇博士



付伟教授



王宝俊教授



王正博士



冯华副总

会议学术委员会

● 主 任:



陈凯先研究员

● 秘 书:



代亚东博士

会议组织委员会

主 任: 侯廷军、王宝俊、李洪林、代亚东

副主任: 付伟、李人则

秘书长: 陈思

成 员: 孙嘉蔚、蒋佳丽、胡逸然、葛艺

学术委员会成员及所在单位 详见附录

第十二届国际分子模拟与人工智能应用学术会议

The 12th International Conference on Molecular Simulations and Artificial Intelligence Application

2025.10 中国·苏州

大会报告、主持人及特邀嘉宾（部分）

本届大会部分嘉宾



陈凯先 研究员
中国科学院上海药物研究所



徐筱杰 教授
北京大学



尤启冬 教授
中国药科大学



邓炳初 博士
四川怡德润康医药科技有限公司



罗勇 董事长
华谊集团精细化工有限公司



蔡加强 联合创始人、CSO
苏州宜联生物医药有限公司



来鲁华 教授
北京大学



侯廷军 教授
浙江大学



杨胜勇 教授
四川大学



李有勇 教授
苏州大学



王敏敏 副总裁、首席科学官
百济神州广州创新中心



王宝俊 教授
太原理工大学



王正 博士, 研发计算与
智能化部负责人
上海齐鲁制药创新研究
中心



张弛 博士, 研究员
国药集团上海生物制品
有限公司



代振宇 博士, 教授级高级
工程师
中国石油天然气股份有限
公司石油化工研究院



付伟 教授
复旦大学



李冠霖 博士
珀莱雅化妆品股份有限公司



任雪艳 董事长兼总经理
北京鼎材科技有限公司



贾小伟 博士
西安瑞联新材股份有限公司



张晓华 博士
华东医药



刘英哲 博士
西安近代化学研究所



代亚东 博士
创腾科技有限公司



陈淼 投资基金负责人
华泰紫金



楼群 董事总经理
成为资本

近100位报告嘉宾持续更新中，敬请关注！

第十二届国际分子模拟与人工智能应用学术会议

The 12th International Conference on Molecular Simulations and Artificial Intelligence Application

2025.10 中国·苏州



会议特色

会议主题：让AI落地 (AI Touch Down)

探讨利用基于数据驱动的智能分析技术、分子模拟技术、大语言模型技术、最新的机器学习和深度学习算法和云计算平台推动诸如新药创制、电子材料，能源化工等行业创新发展和落地应用。

最新的AI与分子模拟的落地应用分享与交流

来自新药创制、电子材料、能源化工和含能材料领域的专家，分享利用新一代的机器学习、深度学习、大语言模型、分子模拟和基于数据驱动的智能分析的新技术新方法的落地应用与最新探索。

直击前沿学术成果

近100位行业专家与业界领袖分享其经验与视野。

分子模拟与人工智能最新算法研讨

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，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。

会议设置

材料科学分会

分子模拟与人工智能在材料科学领域的应用

生命科学分会

CADD与AIDD

智能研发分会

数据驱动智能研发

让AI落地
— touch down —

第十二届国际分子模拟与人工智能应用学术会议

The 12th International Conference on Molecular Simulations and Artificial Intelligence Application

2025.10 中国·苏州

分会内容

材料科学分会:

分子模拟与人工智能在材料科学领域的应用

分会议题:

- 1、催化材料的性能研究与设计
- 2、高分子材料及复合材料(聚酰亚胺、橡胶、纤维、塑料、胶粘剂、涂料、薄膜等)性能研究与设计
- 3、相关电子材料的创新研究与落地应用(OLED、光刻胶、湿化学品及胶黏剂)
- 4、含能材料的研究与设计
- 5、石油化工研究中的应用
- 6、航空航天研究中的应用
- 7、海洋化工研究中的应用
- 8、纳米材料与器件的性能研究及设计
- 9、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
- 10、金属材料性能研究及设计/ 半导体材料性能研究及设计/ 新型超硬材料的研究及设计/ 新型超导材料的研究及设计/ 新型压电材料的研究及设计/ 新型非线性光学材料的研究及设计/ 新型稀土材料的研究及设计/ 新型形状记忆功能材料的研究及设计
- 11、晶体材料的结构表征、解析与预测
- 12、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
- 13、人工智能相关新算法及新技术
- 14、材料信息学
- 15、材料基因组

生命科学分会:

CADD与AIDD

分会议题:

- 1、药物设计和筛选
- 2、基于受体药物设计/ 基于片段药物设计/ 基于配体的药物设计/ 基于功能基因组和结构基因组的药物分子设计
- 3、FEP结合自由能的计算
- 4、AI在先导化合物发现中的应用
- 5、中药和天然产物的作用机制研究及网络药理学
- 6、药物分子设计与合成理论、工艺、方法及生物活性研究
- 7、AIDD和CADD在大分子药物发现中的应用
- 8、抗体药物发现与设计
- 9、合成生物学领域
- 10、蛋白质结构预测、设计方法与应用
- 11、蛋白质工程与酶工程
- 12、药物分子设计和筛选相关新算法及新技术
- 13、自由能计算新算法和新技术
- 14、QSAR、ADMET新算法和新技术
- 15、生物大分子设计和筛选新算法和新技术
- 16、抗体分子设计和优化新算法和新技术
- 17、合成生物学领域新算法和新技术
- 18、蛋白质结构与功能新算法和新技术
- 19、生物信息学领域

智能研发分会:

数据驱动智能研发

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、AI技术在智能化研发阶段的应用模式探讨
- 4、如何降低AI技术应用门槛,实现相关技术在研发领域的快速普及和应用
- 5、如何通过信息化技术提升企业在资本市场的估值
- 6、打造数字化创新实验室的实战经验分享
- 7、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
- 8、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
- 9、电子化数据的合规管理需要注意哪些事项
- 10、GAMP5指导原则下的SaaS验证模式探索
- 11、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
- 12、SaaS模式在研发数据安全性方面的优势探讨
- 13、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
- 14、大量历史数据及复杂的Excel数据如何有效清洗及分析
- 15、研发系统是否需要和企业ERP、OA、MES等系统对接,数据互联的最佳业务实践是什么

第十二届国际分子模拟与人工智能应用学术会议

The 12th International Conference on Molecular Simulations and Artificial Intelligence Application

2025.10 中国·苏州

会议日程

时间	内容
10月 9 日(星期四)	会议注册报到(全天)
10月10日(星期五)	开幕式、大会报告、专题分会报告研讨
10月11日(星期六)	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100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 (30mins)
- 分会邀请报告 (20mins)
- 分会口头报告 (15mins)



往届ICMS&AI会议盛况会议最大规模近1000人

口头报告、墙报交流

口头学术报告:

欢迎申请口头学术报告,请您以Email附件的方式提交到 lunwen@neotrident.com 信箱。

基本要求:

- 报告题目:粗体(Bold),英文
- 报告人:姓名,所在单位,地址,邮编,电子邮件
- 报告摘要:100-300字,英文,如果使用了软件,请在摘要中注明软件名称
- 报告方向:请注明所属的分会主题
- 请以Email附件的方式提交:lunwen@neotrident.com
- 申请截止日期:2025年9月20日
- 申请一经通过,会议组委会2025年9月20日前签发“口头报告回复单”。

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2025年9月30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

第十二届国际分子模拟与人工智能应用学术会议

The 12th International Conference on Molecular Simulations and Artificial Intelligence Application

2025.10 中国·苏州

会议日程

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
		● 9月10日前交纳注册 ● 同一单位≥3人参加
教师及企业代表	RMB 2800元/人	RMB 2500元/人
学生代表 (报到时需出示学生证)	RMB 1800元/人	RMB 1500元/人
外宾代表	USD450/人	USD400/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

联行号：308290003716

报名方式

● 电脑端报名链接：[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！



9月10日前提交报名可享受优惠价格



第十二届国际分子模拟与人工智能应用学术会议

The 12th International Conference on Molecular Simulations and Artificial Intelligence Application

2025.10 中国·苏州

会议联系

会议事务：

☎ 葛老师:0512-67509707-807
☎ 陈老师:13916858963
✉ huiyi@neotrident.com

墙报交流、口头报告申请：

☎ 胡老师:18035314075
✉ lunwen@neotrident.com

大会公众号



- 上海药学会人工智能药学专委会
- 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-2025

更多报告详情将在2025年8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！

2025-ICMS&AI (中国·苏州)



让AI落地
— touch down —

第十二届国际分子模拟与人工智能应用学术会议

The 12th International Conference on Molecular Simulations and Artificial Intelligence Application

2025.10 中国·苏州

附录：学术委员会成员及所在单位(以下排名不分先后)

- 蔡加强联合创始人&CSO——苏州宜联生物医药有限公司
- 曹春来总经理——珠海联邦生物医药有限公司
- 曹泽星教授——厦门大学
- 陈 淼博士——华泰紫金投资有限责任公司
- 陈光明 副总裁——福建海西新药创制股份有限公司
- 陈凯先研究员——中国科学院上海药物研究所
- 陈难先教授——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
- 代振宇博士——中国石油天然气股份有限公司
石油化工研究院新材料研究所
- 杜冠华研究员——中国医学科学院药物研究所
- 段 雪教授——北京化工大学
- Prof. Michael Doyle - Dassault Systèmes BIOVIA
- 冯 华副总——创腾科技有限公司
- 付 伟教授——复旦大学
- 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
- 胡书明主任——江苏恩华药业股份有限公司
- 黄 维教授——西北工业大学
- 贾小伟主任——西安瑞联新材股份有限公司
- 蒋 青教授——吉林大学
- 蒋佳丽技术主管——创腾科技有限公司
- 金传飞副总经理——广东东阳光药业股份有限公司
- 来鲁华教授——北京大学
- 李冠霖博士——珀莱雅化妆品股份有限公司
- 李洪林教授——华东师范大学
- 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
- 李有勇教授——苏州大学
- 刘昌俊教授——天津大学
- 刘英哲博士——西安近代化学研究所
- 柳百新教授——清华大学
- 罗勇董事长——华谊集团上海华谊精细化工有限公司
- 马健鹏教授——Baylor College
of Medicine, Rice University
- 马力副主任——中国石油化工股份有限公司
石油化工科学研究院
- 彭练矛教授——北京大学
- 彭述明研究员——中国工程物理研究院
- 乔 刚副院长——中国科学院上海药物所
苏州药物创新研究院
- 任雪艳董事长&总经理——北京鼎材科技有限公司
- 沈百荣教授——四川大学
- 沈倍奋研究员——军事医学科学院
- 苏虎林CIO——珠海联邦生物医药有限公司
- 孙 淮教授——上海交通大学
- 孙嘉蔚总监——创腾科技有限公司
- 唐亚林研究员——中国科学院化学研究所
- 田永君教授——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
- 王敏敏博士——百济神州(广州)创新科技有
限公司
- 王任小教授——复旦大学
- 王 正博士——上海齐鲁制药研究中心有限
公司
- 魏于全教授——四川大学
- 吴 锋教授——北京理工大学
- 吴玉章教授——第三军医大学
- 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
- 杨金龙教授——同济大学
- 杨胜勇教授——四川大学
- 尤启冬教授——中国药科大学
- 张 弛博士——上海生物制品研究所
- 张红星教授——吉林大学
- 张礼和教授——北京大学
- 张亮仁教授——北京大学
- 张晓华博士——华东医药股份有限公司
- 赵国屏研究员——中国科学院上海生命科学院
- 赵纪军教授——大连理工大学
- 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