

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

第二轮通知



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

第十二届国际分子模拟与人工智能应用学术会议（ICMS&AI 2025）将于2025年10月9日至11日在苏州召开。作为我国材料科学领域研发数字化与智能化转型方面水平最高、规模最大的学术会议之一，本届会议将由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联合主办，会议主题为“让AI落地”。

本届会议已邀请近百位来自知名企业及高校科研院所的专家代表，包括鼎材科技、鼎龙控股、华谊集团、中国石油石化院、西安近代化学研究所、京博控股、中石化大连院、中石化科院、张江实验室、瑞联新材、秀朗新材、坚锋新材料等材料企业及南开大学、东南大学、苏州大学、华东理工、中科大、太原理工等知名高校院所，将围绕数字化与智能化技术在材料研发中的前沿应用和重大进展开展深入交流。

会议重点关注以下议题：

- 1 分享分子模拟与人工智能技术在材料物性与化学性质研发阶段的多项应用成果，探讨这些技术如何变革传统研发模式，有效提升企业核心竞争力；
- 2 数字化与智能化转型在半导体、新能源、石油化工、精细化工、新材料、环保材料、含能材料等领域的行业应用与实践案例；
- 3 企业与科研机构研发数字化与智能化转型的技术应用与落地最佳实践（包括采用SaaS技术实现系统高效部署与快速实施，以及推动科研人员顺利适应数字化研发模式）；
- 4 企业与科研机构研发数字化与智能化转型的核心价值与收益，包括加速研发创新进程、节约研发成本、降低知识产权与合规性风险等；
- 5 企业与科研机构数字化与智能化转型相关前沿技术，以及分子模拟与人工智能领域的最新进展，包括工作流自动化、数据融合、先进深度学习与机器学习算法，以及分子模拟与理论计算方法的最新创新成果；

会议内容涵盖众多前沿应用与创新成果，为领域内高水平交流与合作提供重要平台。欢迎各企业、高校及科研院所专家学者踊跃参与，敬请于9月10日前完成报名以享受会议优惠。



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

会议议程

日期	时间	内容
10月9日(星期四)	全天	会议注册报到 报到地点:苏州吴中希尔顿酒店
10月10日(星期五)	上午	开幕式、大会报告
	下午	专题论坛报告研讨、大会晚宴
10月11日(星期六)	上午	大会报告
	下午	专题论坛报告研讨

* 本届大会形式为上午大会报告,下午分会报告

分会设置

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



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

大会开幕式嘉宾&大会主持人

大会主任：



陈凯先 研究员
中国科学院上海药物研究所

大会副主任：



徐筱杰 教授
北京大学

开幕式主持人：



尤启冬 教授
中国药科大学

大会报告主持嘉宾：



蔡加强 联合创始人、CSO
苏州宜联生物医药有限公司



李冠霖 博士
珀莱雅化妆品股份有限公司



陈森 投资基金负责人
华泰紫金



楼群 董事总经理
成为资本

材料科学报告嘉宾



任雪艳 董事长兼总经理
北京鼎材科技有限公司
机器学习赋能OLED新材料设计开发迭代



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
后石油新时代炼油化工分子水平
智慧转型的思考与探索



杨祁 博士、高级研发工程师
湖北鼎龙控股股份有限公司
数据贯通, 智能协同: 研发数字化系统的建设路径与应用案例
分享



李有勇 教授
苏州大学
图神经网络方法的发展及在
能源材料中的应用



任强 高级工程师
中石化石油化工科学研究院
有限公司
碳基吸附材料对高湿VOCs分子
吸附特性及表面改性研究



朱慧娥 博士、研究员
张江实验室
光刻材料的研发进展以及
人工智能赋能

以上排名不分先后

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

材料科学报告嘉宾



肖建平 研究员
中国科学院大连化学物理研究所
计算和数据驱动催化剂理性设计



唐亮 董事兼CIO
山东京博控股集团有限公司
“人工智能+”赋能化工行业数字化转型



贾小伟 博士
西安瑞联新材股份有限公司
TBD



丁思佳 副研究员
中石化(大连)石油化工研究院有限公司
计算化学在加氢催化剂设计方面的应用



郑玮 博士、研发总监
安徽秀朗新材料科技有限公司
产品快速迭代下的工艺稳定性



刘英哲 博士
西安近代化学研究所
报告题目TBD



王宝俊 教授
太原理工大学
理论计算方法在煤化工催化工艺中的应用



罗勇 董事长
华谊集团精细化工有限公司
报告题目TBD



麻一明 总经理
宁波坚锋新材料有限公司
报告题目TBD



章日光 教授
太原理工大学
碳基分子转化反应催化剂理性设计



代亚东 博士、首席科学家
创腾科技有限公司
报告题目TBD



刘进勋 教授
中国科技大学
报告题目TBD



吉远辉 教授
东南大学
报告题目TBD



赵莉莉 教授
南京工业大学
氮族元素的催化新活性与新型成键模式



何晓凯 工程师
西安近代化学研究所
层状含能材料结构与性能的多层级理论分析



练成 教授
华东理工大学
非平衡态电化学模型发展与应用



彭谦 教授
南开大学
数据驱动的高性能稀土有机单分子磁体预测



冯翔 教授
中国石油大学
AI辅助选择性氧化催化剂结构设计

更多嘉宾 持续更新.....

以上排名不分先后

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

生命科学报告嘉宾



邓炳初 博士
四川怡德润康医药科技有限
公司
小分子药物探发2025



来鲁华 教授
北京大学
功能蛋白质设计



杨胜勇 教授
四川大学
人工智能驱动的创新药物研发：
进展与挑战



付伟 教授
复旦大学
AIDD/CADD在药物发现中的应用



**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
AI在齐鲁落地的场景



王敏敏 副总裁、首席科学官
百济神州广州创新中心
具身智能和实验室自动化的未来
应用



侯廷军 教授
浙江大学
报告题目TBD



张弛 博士、研究员
国药集团上海生物制品有限公司
报告题目TBD



张晓华 博士
华东医药
数据驱动的人工智能药物设计



朱景阳 副总裁
上海云晟研新生物科技有限公司
人工智能如何降低新药研发的
时间与成本壁垒



任辉 CEO、创始人
苏州海狸生物医学工程有限公司
智能系统助力纳米磁珠技术研发



胡书明 高级工程师
江苏恩华药业股份有限公司
AIDD赋能研发情报立项工作探索



王晓威 高级经理
东曜药业有限公司
基于数据驱动的工艺研发平台



林福玉 副研究员
北京三元基因药业股份有限公司
AI数智化转型升级,助力医药企业
创新发展



王积平 博士、COO
浙江仙琚制药股份有限公司
基于数据驱动的智能研发-君业药
业经验分享



戴文韬 研究员
上海市生物医药技术研究院
数据和知识融合驱动发现化疗
耐药型胃癌潜在创新靶点
SLC7A9的转化医学研究



朱峰 教授
浙江大学
人工智能 (AI) 辅助的药物靶标
发现



白芳 研究员
上海科技大学
靶向“难成药”靶标的AI药物设计：
方法与应用

以上排名不分先后

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

生命科学报告嘉宾



李叙潼 副研究员

中国科学院上海药物研究所
MetaReact: 面向代谢酶、产物与
代谢位点预测的统一深度学习框架



徐志建 研究员

中国科学院上海药物研究所
物理与数据双驱动的含卤药物设计



李卫华 教授

华东理工大学
基于人工智能的药代动力学参
数预测研究



曹鑫 研究员

复旦大学附属中山医院
肿瘤干细胞靶向药物发现与转化
研究



江筠 副研究员

上海生物制品研究所有限
责任公司
尿酸酶类药物治疗痛风的机遇
和挑战



赵巍 副教授

山东大学
基于靶点探索和深度学习的
天然药物发现



庄笑梅 研究员

军事医学研究院
吸入药物肺靶向递送的机制解析
和PBPK建模仿真



庞志清 教授

复旦大学
报告题目TBD



曹东升 教授

中南大学
报告题目TBD



林建平 教授

南开大学
报告题目TBD



景连栋 博士、药化总监

苏州浦合医药科技有限公司
AIDD/CADD助力小分子精准
药物的研发



林涣杰 信息部, 处长

广东东阳光药业有限公司
报告题目TBD

更多嘉宾 持续更新.....

以上排名不分先后

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

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

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

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
		● 9月10日前缴纳注册费 ● 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！



会议酒店与报到

9月10日前提交报名可享受优惠价格

● 会议酒店：苏州.吴中希尔顿酒店(原名希尔顿逸林酒店)

● 酒店地址：苏州吴中区太湖新城君益路99号

● 报到时间：10月9日(周四)全天；10月10日(周五)上午

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

住宿与交通

住宿安排：(以下酒店自行选择预定)

- 酒店1: 苏州·吴中希尔顿【逸林】酒店
 - 酒店2: 苏州·吴中希尔顿【花园】酒店
- 地 址: 苏州吴中区太湖新城君益路99号

住宿会务价格：

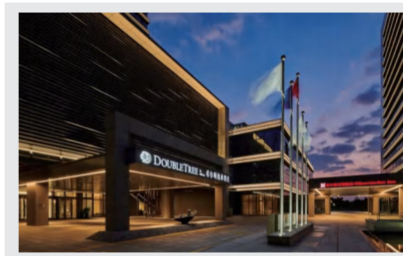
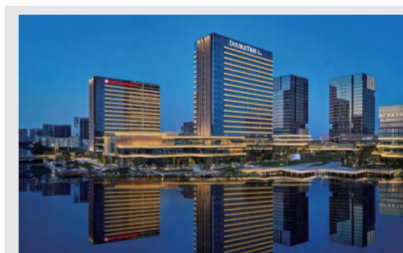
- 希尔顿【逸林】酒店：
大床(含单早)450元/天；双床(含双早)500元/天；
- 希尔顿【花园】酒店：
大床(含单早)300元/天；双床(含双早)340元/天；

如何预定住房：

参会代表可享受会议协议价格，如有住宿需求，根据以下操作自行提交住房预定。住宿费用直接与希尔顿酒店结算，退房当天在酒店前台开具发票。

- 1、选择希尔顿酒店的小程序码并提交预定
- 2、选择预定时间段:10月9日至12日期间
- 3、选择房间数量和人员数量
- 4、选择房型:大床或双床(含早餐)

注意:如有特殊情况,需更早入住或延迟离开酒店,可联系会务组,我们将与酒店协调为您开通。



希尔顿【逸林】酒店·预定



希尔顿【花园】酒店·预定



酒店位于“一核四城”的苏州南部。

- 苏州湾吴中太湖新城中央商务区。
- 毗邻东太湖仅2公里。
- 步行8分钟既可到达地铁4号线木里站
- 距离沪常高速公路入口仅2.4公里。

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

会议交通：

◆ 机场

■ 上海虹桥国际机场

- 驾车时长:约1个小时

■ 苏南硕放国际机场

- 驾车时长:约50分钟

◆ 火车站

■ 苏州站

- 出租：

距苏州吴中希尔顿酒店34公里。

乘坐时长约:35分钟

■ 苏州北站

- 出租：

距苏州吴中希尔顿酒店36公里。

乘坐时长约:47分钟

■ 苏州园区站

- 出租：

距苏州吴中希尔顿酒店32公里。

乘坐时长约:40分钟

■ 苏州新区站

- 出租：

距苏州吴中希尔顿酒店30公里。

乘坐时长约:33分钟

交通地图：



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

周边旅游



周边景点

- 天鹅湖 1.4公里
- 旺山景区(5A景区) 7公里
- 东太湖生态园 9公里
- 吴文化博物馆 15公里
- 同里古镇 15公里



周边商圈

- 永旺梦乐城(吴中店) 2.5公里
- ID PARK 歌林公园 2.3公里
- 西曼帆船俱乐部 2.3公里

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:



主办方:

- 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

让AI落地
— touch down —