



โครงการจัดประชุมวิชาการนานาชาติ Mini-symposium on AI-driven Drug Discovery: The Future of Medicine และ การอบรมเชิงปฏิบัติการ “Computational Drug Discovery”

1. หลักการและเหตุผล

เทคโนโลยีดิจิทัลมีบทบาทสำคัญในการเป็นสื่อกลางการพัฒนาเทคโนโลยีต่าง ๆ โดยเน้นความร่วมมือระหว่างนักวิจัยจากหลาย ๆ ศาสตร์ ตั้งแต่แพทย์ วิศวกร นักเคมีเภสัช นักชีวเคมี มาทำงานทางด้านยาแบบสารโมเลกุลเล็กร่วมกัน มีการรวบรวมและประมวลผลข้อมูลขนาดใหญ่หรือข้อมูลมหัต (big data) เกิดเป็นฐานข้อมูลด้านการออกแบบยาที่มีขนาดใหญ่ มีการพัฒนาเทคโนโลยีดิจิทัลเพื่อใช้ในการประมวลผลข้อมูลเหล่านี้ให้มีประสิทธิภาพมากขึ้น ได้รับผลลัพธ์ที่ช่วยต่อยอดงานวิจัยต่างๆ ได้ในเวลาอันรวดเร็วและมีความถูกต้องมากขึ้น โดยกลุ่มวิจัยได้รับการสนับสนุนระบบคอมพิวเตอร์สมรรถนะสูงจากทางมหาวิทยาลัยมหิดล เพื่อการวิจัยขั้นสูงในการใช้ประโยชน์จากข้อมูลจากภาพใหญ่ไปจนถึงระดับเล็กที่สุดคืออันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลของยา เพื่อช่วยแก้ไขปัญหากับสุขภาพของประชาชน อนึ่ง มหาวิทยาลัยมหิดลเปิดกว้างและสนับสนุนการทำงานแบบข้ามสาขา (cross boundary) พร้อมทั้งเป็นผู้ดำเนินการหลัก (enabler) ที่ให้การจัดการอบรมติดอาวุธทางปัญญาให้กับนักวิจัยในการสร้างและใช้ประโยชน์จากแพลตฟอร์มออกแบบยา เพื่อใช้ทั้งในการวิจัยและการเรียนการสอนและช่วยให้ผู้เรียนเกิดการเรียนรู้อย่างไม่มีที่สิ้นสุด มหาวิทยาลัยมหิดลจึงได้สรรสร้างระบบช่วยออกแบบยาและเอื้อให้สามารถศึกษาผลกระทบของยาได้ โดยอาศัยความสามารถในการเชื่อมโยงฐานข้อมูลต่าง ๆ และตัวยาเข้าด้วยกัน ระบบนี้สามารถช่วยผู้เชี่ยวชาญทางด้านการออกแบบยา ทั้งในแนวกว้างคือในแง่ในการเข้าถึงฐานข้อมูล ทางชีวภาพขนาดใหญ่ที่สำคัญ ๆ ในคราวเดียวเพื่อเชื่อมต่อให้เกิดแนวคิดใหม่ ๆ เกี่ยวกับผลของยาที่มีต่อระบบ biological pathways ในร่างกาย และสามารถทำการวิจัยแนวคิดคือใช้ระบบในการวิเคราะห์ระยะและทิศทางจาก distance matrix ในแอคทิฟไซต์ของโปรตีนและช่วยในการทำความเข้าใจโครงสร้างสามมิติของโปรตีนเป้าหมายในลักษณะตัวต่อเลโก้ (Lego) สามมิติ ซึ่งจะต้องประกอบได้พอดีกับเลโก้ของตัวยา และจาก Data set ตัวอย่างพบว่าสามารถคาดการณ์ระยะที่ส่งอิทธิพลต่อการจับกับยาโดยอาศัย machine learning, big data, artificial intelligence และ computer graphics เพื่อชี้แนะระยะและทิศทางที่ควรเพิ่มหรือลดอะตอมของโมเลกุลยาให้สามารถจับกับโปรตีนเป้าหมายได้ดีและสามารถยืนยันได้ด้วยผลทางจลนพลศาสตร์ และทำให้ยากับโปรตีนเป้าหมายจับกันได้ด้วยประสิทธิภาพดีขึ้น นวัตกรรมซอฟต์แวร์ที่ได้จากโครงการวิจัยนี้สามารถนำไปพัฒนาต่อยอดการทำงานต่าง ๆ ที่เกี่ยวข้องกับการออกแบบยาได้ และเป็นแพลตฟอร์มที่จำเป็นต่อการพัฒนายาในอนาคต โดยมีการเชื่อมต่อกับความรู้ที่เกี่ยวข้องกับสารเคมีโมเลกุลเล็กที่เป็นยา โปรตีนเป้าหมาย biological pathway เนื้อเยื่อและระบบต่างๆ ในร่างกายเพื่อใช้ข้อมูลขนาดใหญ่ในการทำนายผลของยาก่อนที่จะมีการทำการทดลองในห้องปฏิบัติการซึ่งมักก่อให้เกิดสารเคมีตกค้าง ใช้เวลานานและมีค่าใช้จ่ายสูง ดังนั้นโครงการนี้จะช่วยลดระยะเวลา และค่าใช้จ่ายที่ต้องใช้ในการศึกษาวิจัยต้นน้ำที่เกี่ยวข้องกับการออกแบบยาได้เป็นอย่างมาก

2. วัตถุประสงค์

- 2.1 เพื่อเผยแพร่ความรู้เบื้องต้นเกี่ยวกับการออกแบบยาโดยอาศัยโครงสร้างให้แก่นักวิจัยยาในประเทศในรูปแบบงานประชุมวิชาการ Mini-symposium โดยนักวิจัยระดับโลกจากประเทศต่าง ๆ เช่น สหราชอาณาจักร และสหรัฐอเมริกา
- 2.2 เพื่อสร้างความร่วมมือกับนักวิจัยทางด้าน Structure-guided drug discovery ในระดับนานาชาติ
- 2.3 เพื่อจัดการอบรมเกี่ยวกับการใช้งานแพลตฟอร์มการออกแบบยาโดยอาศัยปัญญาประดิษฐ์สำหรับนักวิจัย 40 คน และผลักดันขับเคลื่อนให้ผลผลิตนี้เกิดผลลัพธ์ที่เป็นหลักสูตร up-skill/re-skill หรือการอบรมเชิงปฏิบัติการ ซึ่งจัดได้ต่อเนื่องทุกปี และเกิดผลกระทบระยะยาวเพื่อสร้างกำลังคนด้าน *in silico* drug design ให้แก่ประเทศ

3. ผู้รับผิดชอบโครงการ

สถาบันชีววิทยาศาสตร์โมเลกุล มหาวิทยาลัยมหิดล ร่วมกับ สมาคมโปรตีนแห่งประเทศไทย

4. เวลาและสถานที่

การจัดประชุมวิชาการนานาชาติ (Mini-symposium)

ดำเนินการจัดประชุมวิชาการนานาชาติ “Mini-symposium on AI-driven Drug Discovery: The Future of Medicine” ในวันที่พฤหัสบดีที่ 2 พฤศจิกายน 2566 เวลา 8.30–16.00 น. ณ ห้องแกรนด์บอลรูม ศูนย์ประชุมและอาคารจอดรถ มหิตลสิทธาคาร มหาวิทยาลัยมหิดล จำนวนผู้เข้าร่วมประมาณ 70–100 ราย

การสอนภาคปฏิบัติการ (workshop)

ดำเนินการสอน ณ ห้องปฏิบัติการคอมพิวเตอร์ อาคารสถาบันชีววิทยาศาสตร์โมเลกุล มหาวิทยาลัยมหิดล ตำบลศาลายา อำเภอพุทธมณฑล จังหวัดนครปฐม แบ่งการสอนเป็น 2 รุ่น

จำนวนรุ่นละ 20 ราย รายละเอียดดังนี้

รุ่นที่ 1 ในวันศุกร์ที่ 3 พฤศจิกายน 2566 เวลา 8.30–16.30 น.

รุ่นที่ 2 ในวันศุกร์ที่ 1 ธันวาคม 2566 เวลา 8.30–16.30 น.

5. ผู้เข้าร่วมโครงการ

นักวิจัยและผู้สนใจ โดยแบ่งออกเป็น 3 กลุ่ม คือ

- (1) นักศึกษาและบุคลากรสังกัดมหาวิทยาลัยมหิดล
- (2) บุคลากรภายนอกทั้งภาครัฐและเอกชน
- (3) บุคลากรสังกัดสมาคมโปรตีนแห่งประเทศไทย

6. ค่าลงทะเบียน

รูปแบบกิจกรรม	นักศึกษาและบุคลากร สังกัด มหาวิทยาลัยมหิดล	บุคลากรภายนอก มหาวิทยาลัยมหิดล (ภาครัฐบาล)	บุคลากรภายนอก มหาวิทยาลัยมหิดล (ภาคเอกชน)
Mini-Symposium	เข้าร่วมฟรี ไม่มีค่าใช้จ่าย	1,500 บาท	3,000 บาท
Workshop	เข้าร่วมฟรี ไม่มีค่าใช้จ่าย	4,000 บาท	10,000 บาท
Mini-Symposium + Workshop	เข้าร่วมฟรี ไม่มีค่าใช้จ่าย	5,000 บาท	12,000 บาท

7. ผลที่คาดว่าจะได้รับ

- 7.1 ผู้เข้าร่วมโครงการได้รับความรู้ความเข้าใจเบื้องต้นเกี่ยวกับการออกแบบยาโดยอาศัยโครงสร้างให้แก่ นักวิจัยยาในประเทศ
- 7.2 ผู้เข้าร่วมโครงการสามารถนำความรู้ที่ได้ไปใช้ประโยชน์และต่อยอดได้

8. เงื่อนไขในการลงทะเบียนดังนี้

ขั้นตอนการสมัครเข้าอบรม

8.1 ผู้ที่สนใจสามารถ สมัครออนไลน์ได้ที่ Website : www.mb.mahidol.ac.th

8.2 เจ้าหน้าที่จะแจ้งผลการสมัครให้ท่านทราบด้วย e-mail

8.3 เมื่อท่านได้รับการยืนยันสิทธิเข้าร่วมอบรม ให้ผู้สมัครโอนเงินค่าลงทะเบียนตามบัญชีที่แจ้งไว้

วิธีการจ่ายเงินค่าลงทะเบียน

บัญชีออมทรัพย์ ธนาคารไทยพาณิชย์ สาขาศิริราช

ชื่อบัญชี “มหาวิทยาลัยมหิดล” เลขที่บัญชี 016-2-10322-3

8.4 สำเนาเอกสารการโอนเงิน หรือ scan หรือถ่ายรูปเอกสารการโอนเงินส่งมาที่

นางสาวแก้วเกล้า บรรจง โทร 080 981 49948

หรือ e-mail address : kaewklao.ban@mahidol.edu

8.5 เจ้าหน้าที่ส่ง e-mail ตอบรับเข้าร่วมประชุม กรุณาปฏิบัติตามขั้นตอนที่ได้แจ้งไว้

หมดเขตรับสมัคร ภายในวันที่ 12 ตุลาคม 2566 สถาบันฯ ขอสงวนสิทธิ์พิจารณาอนุญาตให้เข้าฟังบรรยายเฉพาะผู้ที่เกี่ยวข้องโดยตรงเท่านั้น และการตัดสินใจของสถาบันฯ ถือเป็นที่สุด ทั้งนี้ ห้ามผู้ใดทำซ้ำ ดัดแปลง หรือเผยแพร่ อาจมีความผิดตามกฎหมาย

สอบถามรายละเอียดเพิ่มเติมที่ นางสาวแก้วเกล้า บรรจง โทร 08 0981 49948 หรือ

นางสาวชนิกานต์ บุญช่วย โทร 09 9245 1698

****โปรดตรวจสอบวันและเวลาในการเข้าร่วมอบรมโดยละเอียดก่อนชำระค่าลงทะเบียน
หากชำระค่าลงทะเบียนแล้ว ผู้เข้าอบรมฯ ไม่สามารถเข้าอบรมได้ด้วยสาเหตุอื่นนอกจากที่ระบุไว้ข้างต้น
สถาบันฯ ขอสงวนสิทธิ์ในการคืนเงินค่าลงทะเบียนทุกกรณี

“การลงทะเบียนจะเสร็จสมบูรณ์ต่อเมื่อได้โอนเงินค่าลงทะเบียน และส่งเอกสาร pay-in-slip”

Mini-Symposium on AI-Driven Drug Discovery: Shaping the Future of Medicine
Thursday, November 2, 2023
Grand Ballroom, Prince Mahidol Hall Conference Center, Mahidol University

- 8:30 AM – 9:15 AM: Registration
- 9:15 AM – 9:30 AM: Welcome Ceremony
Prof. Dr. Pattarachai Kiratisin. M.D., Ph.D., Mahidol University, Thailand
- 9:30 AM – 10:30 AM: **Prof. Sir Tom Blundell**, University of Cambridge, UK (Keynote Speaker)
“Revolutionary Developments in the Design of New Medicines: From Computational Statistical & X-ray Experimental Methods of the 1960s to AI/ML and cryoEM Approaches in the 2020s.”
- 10:30 AM – 11:00 AM: Coffee Break
- 11:00 AM – 12:00 PM: **Prof. Ruben Abagyan**, University of California San Diego, USA
(Live talk via Zoom)
“New Docking/AI platform to Screen Billions of Compounds for a specific Target-Property Profile”
- 12:00 PM – 1:00 PM: Lunch
- 1:00 PM – 1:45 PM: **Asst. Prof. Duangrudee Tanramluk**, Mahidol University, Thailand
“Solving Biomolecular Puzzles with Structure-Based Drug Design Platforms: MANORAA and SIMFONEE.”
- 1:45 PM – 2:30 PM: **Dr. Jiye Shi**, Eli Lilly and Company, USA
“Generative AI: a co-pilot for drug discovery.”
- 2:30 PM – 3:00 PM: Afternoon Snack Break
- 3:00 PM – 3:45 PM: **Dr. Arun Prasad Pandurangan**, University of Cambridge, UK
“Protein mutant stability prediction: Analyses of drug resistance mutations in infectious diseases.”
- 3:45 PM – 4:00 PM: Q&A Session and Closing Remarks

Workshop on AI-Driven Drug Discovery: Shaping the Future of Medicine
Friday, November 3, 2023 and Friday, November 1, 2023
Computer Laboratory, Institute of Molecular Biosciences

- 8:30 AM – 9:00 AM: Registration
- 9:00 AM – 12:00 AM: Practical Workshop #1
“Theory and Practice: Structural bioinformatics and drug discovery platforms”
Asst. Prof. Duangrudee Tanramluk, Ph.D.
- 12:00 PM – 1:00 PM: Lunch
- 1:00 PM – 2:30 PM: Practical Workshop #2
“Theory and Practice: Structural bioinformatics and drug discovery platforms”
Ittipat Meewan, Ph.D. and Jiraporn Panmanee, Ph.D.
- 2:30 PM – 2:45 PM: Afternoon Snack Break
- 2:45 PM – 4:00 PM: Practical Workshop #2 (continued)
“Theory and Practice: Structural bioinformatics and drug discovery platforms”
Ittipat Meewan, Ph.D. and Jiraporn Panmanee, Ph.D.
- 4:00 PM onwards: Closing Ceremony and Certificates Presentation

หมายเหตุ: การบรรยายเป็นภาษาไทย

1. Professor Sir Tom Blundell is a world class expert in structural biology and drug discovery, currently at the Biomedical Campus of University of Cambridge. He has produced software for homology modelling, for example Modeller cited 13,000 times, and now also leading generative AI/ML and cryoEM packages. As pioneer of fragment-based drug discovery, co-founding Astex, now with 2 oncology drugs on the market. He founded the UK research council BBSRC and was earlier scientific advisor of the conservative PM Margaret Thatcher, although earlier left wing Labour Party Councillor of the City of Oxford.
2. Prof. Ruben Abagyan, PhD
Dr. Ruben Abagyan is Professor of at Skaggs School of Pharmacy and Pharmaceutical Sciences at the University of California San Diego. Dr. Abagyan and his group work in specialized in developing and utilizing techniques for structure-based discovery, molecular modeling, and optimization of potential drug candidates, identifying targets, large scale bioinformatics and bioinformatics. The applications include viral, cancer, neurodegeneration, parasitic, and endocrine diseases.
3. Dr. Duangrudee Tanramluk is an Assistant Professor in Structural Bioinformatics at Mahidol University in Thailand. She lead the development of a revolutionary AI systems for Drug Discovery: MANORAA & SIMFONEE packages. Her data-driven platform enables in-depth and big picture analysis of small molecule drug discovery via programmable URL. Her webservice foster sustainability in drug design education and bring new hope for precision medicine.
4. Dr. Jiye Shi is the Associate Vice President, Global Head of Computational Design and Automation Platforms at Eli Lilly and Company. He is the world-class expert in AI-inspired biologics and small molecule drug discovery. His computational talents lead to the discovery of Romosozumab and Bimekizumab. He has developed novel structure-based AI/ML antibody design algorithms which led to the design of antibodies targeting a specific epitope and the design of dual-specific antibodies. He has established strong partnerships with academic and industrial partners, led to talents recruited by AI and biotech companies (e.g. DeepMind, BenevolentAI, Exscientia).

5. Dr Arun Prasad Pandurangan is a senior researcher at the Victor Phillip Dahdaleh Heart & Lung Research Institute, University of Cambridge. He is an expert in structural bioinformatics, genomics and modelling cryo-EM maps with specific interest in understanding the impacts of genetic mutations in disease and drug resistance. He is Associate Editors of BMC Bioinformatics, Computational and Structural Biotechnology Journal, etc.

6. Jiraporn Panmanee, PhD

I am currently a Lecturer at the Institute of Molecular Biosciences, Mahidol University. I possess a Ph.D. in Biological Sciences with research focuses on in silico structure-based drug design, neurotoxicity assessment of pesticides, structural biology, and neurobiology of neurodegenerative diseases. My academic pursuit has focused on unraveling complexities in these domains to contribute to advancements in healthcare and environmental science.

7. Ittipat Meewan, PhD

Ittipat Meewan is Lecturer at the Institutes of Molecular Biosciences, Mahidol University. His current research focuses on computational-aided development of small molecules and peptide antivirals, targeting viruses such as SARS-CoV-2, HBV, HCV, ZIKV, DENV, and HPV. The primary techniques include molecular docking, molecular dynamics, and machine learning are employed for virtual screening of large libraries against target proteins and identify potential drug candidates which are then validated experimentally.