

การอบรมเชิงปฏิบัติการ: เทคนิคปัญญาประดิษฐ์และโมเลกุลาร์ด็อกกิ้งในการค้นหายา
Workshop on AI and Molecular Docking Techniques in Drug Discovery (AIMoDock)
วันที่ 27-28 พฤศจิกายน 2568
ณ คณะเภสัชศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหิดล

หลักการและเหตุผล

ในปัจจุบัน การค้นหายาใหม่มีแนวโน้มขยายตัวอย่างต่อเนื่อง และมีบทบาทสำคัญในงานวิจัยด้านเภสัชเคมี โดยทั่วไปแล้ว ยาหรือสารออกฤทธิ์มักมีที่มาจากผลิตภัณฑ์ธรรมชาติ หรือจากการคัดกรองฤทธิ์ทางชีวภาพในห้องปฏิบัติการ ซึ่งได้นำไปพัฒนาต่อยอดเป็นสารออกฤทธิ์ที่น่าสนใจในรูปแบบของสารอนุพันธ์ การออกแบบและพัฒนาสารอนุพันธ์ให้มีประสิทธิภาพสูง จำเป็นต้องอาศัยข้อมูลเชิงลึกในระดับโมเลกุล เช่น การระบุเป้าหมายของสาร (molecular target) และกลไกการออกฤทธิ์ของสารดังกล่าว หนึ่งในเครื่องมือที่สำคัญในการออกแบบโครงสร้างทางเคมีของยาและคัดกรองโมเลกุลที่มีศักยภาพในการจับกับ molecular target ได้แก่ **เทคนิคการจำลองการจับกันระหว่างโมเลกุล (Molecular Docking)** ซึ่งเป็นการจำลองปฏิสัมพันธ์ระหว่างลิแกนด์ (ligand) กับเป้าหมาย (target) เพื่อทำนายทิศทางการวางตัวของลิแกนด์ในบริเวณจุดจับ (binding site) พร้อมทั้งคำนวณค่าพลังงานการจับ (docking score) ด้วยอัลกอริทึมเชิงคอมพิวเตอร์ ผลลัพธ์ที่ได้สามารถใช้ประเมินความเหมาะสมของลิแกนด์ในการเป็นสารออกฤทธิ์ต่อโมเลกุลเป้าหมาย

ในช่วงไม่กี่ปีที่ผ่านมา **เทคโนโลยีปัญญาประดิษฐ์ (Artificial Intelligence: AI)** ได้ถูกนำมาใช้ร่วมกับเทคนิคทางเคมีเชิงคำนวณในการค้นหายาอย่างแพร่หลาย AI มีบทบาทสำคัญในการวิเคราะห์ข้อมูลขนาดใหญ่ (big data) จากฐานข้อมูลโมเลกุล การพยากรณ์โครงสร้างที่เหมาะสม การจำแนกคุณสมบัติของลิแกนด์ ตลอดจนการปรับปรุงความแม่นยำของการทำนายผล docking ผ่านเทคนิค machine learning และ deep learning ซึ่งช่วยลดระยะเวลาและต้นทุนในการพัฒนายาได้อย่างมีนัยสำคัญ

ดังนั้น เทคนิค **molecular docking** และ **AI** จึงนับเป็นเครื่องมือร่วมสมัยที่ทรงพลังในการออกแบบโครงสร้างยาและการค้นคว้ายาใหม่ในงานวิจัยด้านเภสัชศาสตร์ นอกจากนี้ ยังสามารถประยุกต์ใช้ในสาขาเทคโนโลยีชีวภาพและเคมีชีวภาพ เช่น การศึกษาการเข้าจับระหว่างเอนไซม์กับซับสเตรต หรือระหว่างโปรตีนกับโปรตีน การจัดฝึกอบรมในครั้งนี้จึงเป็นโอกาสอันดีที่นักวิจัยและนักศึกษาจะได้เรียนรู้การทำ **molecular docking** และทำความเข้าใจการประยุกต์ใช้ **AI** ในกระบวนการค้นหายาเชิงปฏิบัติ เพื่อเสริมสร้างความรู้และทักษะที่สามารถนำไปประยุกต์ใช้ในการวิจัยเชิงลึกหรือต่อยอดงานวิจัยในอนาคตได้อย่างมีประสิทธิภาพ

วัตถุประสงค์

1. เพื่อเพิ่มพูนความรู้ความเข้าใจ เกี่ยวกับความรู้ทางด้านการประยุกต์ใช้เทคนิค AI และ molecular docking เพื่อออกแบบโครงสร้างยาจากสารผลิตภัณฑ์ธรรมชาติหรือสารสังเคราะห์ ให้มีประสิทธิภาพมากขึ้น
2. เพื่อการถ่ายทอดเทคนิค AI และ molecular docking ในการวิเคราะห์ข้อมูลความสามารถในการจับกันระหว่างสารที่สนใจกับโปรตีนเป้าหมาย ควบคู่กับการวิเคราะห์การอันตรกิริยา เพื่อประเมินความจำเพาะต่อ molecular target

หน่วยงานที่รับผิดชอบ

- ภาควิชาเภสัชเคมี คณะเภสัชศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหิดล โทรศัพท์ 0-26448695
e-mail: headpypc@mahidol.ac.th
- หน่วยห้องสมุดสารเคมีสำหรับการค้นพบยาใหม่ มหาวิทยาลัยมหิดล (CLSC)
- แพลตฟอร์มวิจัยอินซิลโกและแบบจำลองโมเลกุล คณะเภสัชศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหิดล (MUPY-IMOD)
- หน่วยจัดกิจกรรมวิชาการ คณะเภสัชศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหิดล โทรศัพท์ 088-9829049
- งานคลังและพัสดุ คณะเภสัชศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหิดล โทรศัพท์/โทรสาร 0-23544316
e-mail: thosawan.iem@mahidol.ac.th

ผู้เข้าร่วมประชุม

อาจารย์ นักวิจัย นักศึกษา ที่มีความสนใจการทำจำลองแบบ molecular docking จำนวน 40 คน

วัน เวลา และสถานที่

วันที่ 27-28 พฤศจิกายน 2568 เวลา 09:00–16:30 น. ณ คณะเภสัชศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหิดล

ผลที่คาดว่าจะได้รับ

ผู้เข้าร่วมประชุมมีทักษะในการจำลองการเข้าจับระหว่างลิแกนด์และโมเลกุลเป้าหมายและวิเคราะห์ผลเพื่อนำไปใช้ต่อในงานวิจัยของตนเอง และสามารถประยุกต์ความรู้ที่ได้รับไปใช้ต่อเชิงการศึกษาและงานวิจัยอื่น ๆ

ตัวชี้วัดระดับโครงการ

- จำนวนผู้เข้าร่วมประชุมไม่ต่ำกว่า 40 คน
- ความพึงพอใจจากการอบรมไม่น้อยกว่า 4 จาก 5

สอบถามข้อมูล

ติดต่อสอบถามข้อมูลเพิ่มเติมได้ที่

- หน่วยจัดกิจกรรมวิชาการ โทรศัพท์ 088-9829049
- ผศ.ดร.ฉัตรชากร เอื้อติวงศ์, คุณจิตรลดา เหมินทรภรณ์, โทรศัพท์ 086-8871918, 0-2644-8695
- e-mail: headpypc@mahidol.ac.th

ค่าลงทะเบียน

ค่าลงทะเบียน คนละ 6,000 บาท

กำหนดลงทะเบียนและชำระเงินภายในวันที่ 21 พฤศจิกายน 2568

การสมัครและชำระค่าลงทะเบียน

โปรดกรอกใบสมัคร online ทาง www.pharmacy.mahidol.ac.th/conference พร้อมชำระเงิน โดยโอนเงินเข้าบัญชีธนาคารไทยพาณิชย์ สาขารามาริบัติ บัญชีประเภทออมทรัพย์ เลขที่บัญชี 026-443603-5 ชื่อบัญชี การประชุมวิชาการคณะเภสัชศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหิดล พร้อมแนบไฟล์หลักฐานการโอนเงินชำระค่าลงทะเบียนลงในระบบลงทะเบียนเพื่อการตรวจสอบ โดยสามารถติดต่อสอบถามข้อมูลเพิ่มเติมที่ หน่วยจัดกิจกรรมวิชาการ โทรศัพท์ 088-9829049 หรือ ภาควิชาเภสัชเคมี โทรศัพท์ 0-26448695 e-mail : headpypc@mahidol.ac.th

การอบรมเชิงปฏิบัติการ: เทคนิคปัญญาประดิษฐ์และโมเลกุลาร์ด็อกกิ้งในการค้นหายา
Workshop on AI and Molecular Docking Techniques in Drug Discovery (AIMoDock)
วันที่ 27-28 พฤศจิกายน 2568
ณ คณะเภสัชศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหิดล

วัน/เวลา	เรื่อง	วิทยากร
วันที่ 27 พฤศจิกายน 2568		
8.30-9.00	ลงทะเบียน	
9.00-9.10	พิธีเปิด	คณบดี
9.10-10.00	Synergizing <i>in-silico</i> and experimental workflows in modern drug discovery	ผศ.ดร.ภก.จตุรงค์ ประเทืองเดชกุล รศ.ดร.ภก.กิตติศักดิ์ ศรีภา
10.00-10.15	พักรับประทานอาหารว่าง	
10.15-11.15	From binding affinity to pharmacokinetics: molecular docking and ADMET prediction in drug discovery	ผศ.ดร.ฉัตรชากร เอื้อติวงศ์ อ.ดร.ภก.สุเมธ จรุงจิโรจน์
11.15-12.00	Molecular docking workshop I	ผศ.ดร.ฉัตรชากร เอื้อติวงศ์
12.00-13.00	พักรับประทานอาหารกลางวัน	
13.00-14.00	Molecular docking workshop I (cont.)	ผศ.ดร.ฉัตรชากร เอื้อติวงศ์
14.00-14.30	พักรับประทานอาหารว่าง	
14.30-15.15	Molecular docking analysis I	ผศ.ดร.ฉัตรชากร เอื้อติวงศ์
15.15-16.30	Molecular docking workshop II	อ.ดร.ภก.สุเมธ จรุงจิโรจน์
วันที่ 28 พฤศจิกายน 2568		
9.00-10.00	Molecular docking analysis II	อ.ดร.ภก.สุเมธ จรุงจิโรจน์
10.00-10.15	พักรับประทานอาหารว่าง	
10.15-11.30	Artificial intelligence–Driven innovations in drug discovery and the biological sciences	ผศ.ดร.ทิพาจินต์ ไทยพิสุทธิกุล ผศ.ดร.ภก.ศาสวัต วิศาลศิริกุล
11.30-12.30	พักรับประทานอาหารกลางวัน	
12.30-14.00	AI technique in drug discovery workshop	ผศ.ดร.ทิพาจินต์ ไทยพิสุทธิกุล ผศ.ดร.ภก.ศาสวัต วิศาลศิริกุล
14.00-14.30	พักรับประทานอาหารว่าง	
14.30-16.00	AI technique in drug discovery workshop (cont.)	ผศ.ดร.ทิพาจินต์ ไทยพิสุทธิกุล ผศ.ดร.ภก.ศาสวัต วิศาลศิริกุล
16.00-16.15	Discovery studio as an <i>in-silico</i> tool for drug discovery	ผศ.ดร.ภก.จตุรงค์ ประเทืองเดชกุล
16.15-16.30	Compound library for drug discovery Mahidol University	ผศ.ดร.ภก.ศาสวัต วิศาลศิริกุล