

AIDD 101 课程大纲

课程说明

最近想报名1对1系统课的同学越来越多，我一个人实在忙不过来，所以课程模式调整为“**直播免费、回放收费**”：观看腾讯会议直播免费；直播回放会上传到B站并设为充电视频。课程中用到的所有代码都会**永久开源、永不收费**（只要你有一定基础，其实完全可以不看讲解视频，直接跑代码也能学会）

这次的**AIDD 101 课程**试图系统覆盖入门知识点，补上我之前B站视频凌乱、不成体系的不足，希望可以让大家更顺畅地入门AIDD。如果大家对课程大纲有任何补充或修改建议，非常欢迎在群里提出

至于回放为何收费，主要原因是系统课程的讲义编写、代码准备、讲解录制以及后期剪辑都非常耗费时间和精力。收费是为了覆盖制作成本，也让我能在保证内容质量的前提下持续更新课程，望大家理解

另外补充一句：理论上大家确实可以在直播时自行录屏，这样就不必付费观看B站回放。但还是希望大家尽量付费观看回放，或至少不要随意传播、转卖录屏内容。感谢大家的理解与支持：）

主讲人：小闪电

B站链接：https://space.bilibili.com/122699831?spm_id_from=333.788.0.0

VX：xxxFLASHxxx



扫一扫上面的二维码图案，加我为朋友。

AIDD 101 课程目录

每周大概两节课，每节课1-2小时

Part 0：导论

第0节课：深度学习与 AIDD 概论

从零开始梳理深度学习的基本思想、关键概念和发展脉络；讲清楚为什么 AI 能帮助药物发现；系统介绍 AIDD 的典型任务、主流模型、研究范式，以及整个课程的知识结构与学习路线

Part 1：小分子任务-Google Colab 平台

第1节课：小分子任务——基于图神经网络的建模（模型原理 + Colab 代码实操）

讲解 GNN 模型在AIDD中的应用（原子/键、图结构）、常见 GNN 架构（GCN、GAT、MPNN 等），并手把手训练一个小分子性质预测模型

第2节课：小分子任务——基于 Transformer 的建模（模型原理 + Colab 代码实操）

讲解 SMILES 作为序列的建模方法、位置编码、注意力等关键机制；实操训练一个小分子序列预测模型

第3节课：小分子任务——多模态模型融合（模型原理 + Colab 代码实操）

让 GNN + Transformer 融合，介绍图-序列联合建模策略、分子跨模态融合方式，并训练一个多模态增强模型

Part 2：大分子任务-Google Colab 平台

第4节课：蛋白质任务——基于图神经网络的建模（模型原理 + Colab 代码实操）

讲解如何将蛋白质结构转化为图、残基级/原子级图表示，并构建一个蛋白质性质预测模型

第5节课：蛋白质任务——基于 Transformer 的建模（模型原理 + Colab 代码实操）

带你构建一个蛋白质序列 Transformer，并完成下游预测任务

第6节课：蛋白质任务——多模态模型融合（模型原理 + Colab 代码实操）

讲解“序列 + 结构 + 接触图”融合策略，带你实操构建一个多模态蛋白质表征模型

Part 3：生成式模型-本地/服务器环境

第7节课：生成式模型——GAN（模型原理 + Vscode代码实操）

从生成器/判别器讲起，构建一个最小可运行的分子 GAN，理解模式崩塌与稳定训练技巧

第8节课：生成式模型——VAE（模型原理 + Vscode代码实操）

讲清楚潜空间、重参数技巧、KL 散度等核心概念，并训练一个小分子 VAE 生成模型

第9节课：生成式模型——Diffusion（模型原理 + Vscode代码实操）

系统讲解扩散模型原理（前向扩散、反向采样），并带你跑通一个最小可复现的分子 Diffusion 模型

Part 4：工程与综合实践-本地/服务器环境

第10节课：算法应用型 AIDD 实践（本地代码实操）

带你基于已有的 AIDD 模型与算法，解决真实的小分子或蛋白质药物设计问题，从数据准备 → 调用现有模型 → 分析预测结果 → 设计迭代策略，完整体验 AIDD 在实际研发场景中的应用流程

第11节课：算法创新型 AIDD 实践（本地代码实操）

带你理解如何基于已有模型做创新（加 GNN、加结构条件、加扩散头、多模态融合等），构建一个“能写进论文”的小型创新模型 Demo

第12节课：Web App 与本地 App 搭建及部署

带你从零搭建一个可在线访问的 AIDD Web App，并演示如何使用 Streamlit / FastAPI 封装模型；同时教你利用 PyInstaller 将模型打包成本地可执行应用，让用户无需安装任何环境即可一键运行，实现真正意义上的“模型即服务”与“本地即开即用”发布

Part 5：番外篇

补充遗漏的知识点和满足小众需求

后续计划：AIDD 进阶 / 高级课程

AIDD 101 带大家从零上手 AIDD 的核心任务、模型与工程实践；在此基础上，后续会推出 **AIDD 进阶 / 高级课程**，重点面向希望在科研中实现算法创新、模型突破、论文发表的同学。课程将聚焦以下三大内容：

内容 1：AIDD 算法创新体系（Algorithm Innovation Framework）

从“怎么跑通”升级到“怎么做创新”，系统讲解 AIDD 中常见的改进套路，包括但不限于：

- 如何设计一套合理且创新性明确的模型架构
- 如何基于已有模型做创新（结构条件、领域先验、多模态融合、GNN + Transformer、Diffusion 增强等）
- 如何做可被接收的 Ablation Study（消融实验）
- 如何构建高质量 Benchmark 与实验设置
- 如何设计一个真正有贡献度的 AIDD 模型

让你不仅能“用模型”，还具备“设计模型”的能力

内容 2：从模型到论文：科研方法论（Research Mindset）

重点讲解科研全过程的方法论与落地技巧：

- 如何形成研究点、创新点与实验路线
- 如何评价模型是否比前人做得更好
- 如何在没有灵感时，用系统方法逼出创新点
- 如何构建“论文级”的图表、对比实验、可视化结果
- 如何管理科研工程：数据、脚本、实验记录、版本控制

帮助你建立从 idea → 实验 → 结果 → 论文 的完整闭环

内容 3：论文写作全流程（包括 Cover Letter / Response Letter）

重点解决大家最头疼的内容：

- **论文结构模板**：Introduction、Method、Experiment、Results、Conclusion 的写作套路
- **如何描述创新点，让审稿人“必须认可”你的贡献点**
- **Cover Letter 的完整写法**：如何向编辑解释研究价值
- **Response Letter 写法**：如何逐条回应审稿意见、如何反击不合理评论
- **实际案例拆解**：Nature 系列、NeurIPS、ICLR、Bioinformatics 等写作风格差异

目标是让你不仅能做研究，还能顺利把研究写出来、发出去

AIDD 101—Part 0：导论