**강의개요**

Protein structure prediction with AI

단백질은 신호전달, 대사, 면역 등 우리 몸에서 일어나는 거의 모든 생명현상에 관여하고 있는 중요한 생체분자이다. 단백질은 각자의 기능을 수행하기 적합한 3차원 구조를 가지고 있으며, 이러한 구조는 단백질의 서열에 따라 결정되는 것으로 알려져 있다. 즉, 단백질의 기능을 잘 이해하기 위해서는 서열로부터 그 구조를 아는 것이 매우 중요하다. 단백질의 서열을 기반으로 그 3차원 구조를 정확하게 예측할 수 있다면 단백질과 연관된 수많은 생명현상에 대한 답을 찾는데 큰 도움을 주지 않을까?

본 강의에서는 단백질 구조 예측 방법이 어떻게 발전해왔는지 살펴보고, 인공지능이 단백질 구조 예측에 어떤 혁신을 가져왔는지 알아보고자 한다. 또한 인공지능 기반의 단백질 구조 예측이 단백질-단백질 상호작용 예측, 단백질 디자인과 같은 다른 연구분야에 어떤 영향을 주었는지 살펴본다. 강의에서 다루는 방법들을 실제 실습을 통해 사용해보고, 각 방법의 장단점을 알아보고자 한다.

강의는 다음의 내용을 포함한다:

* 단백질 구조 예측의 기본 원리
* 인공지능을 활용한 단백질 구조 예측
* 단백질-단백질 상호작용에의 응용
* 단백질 디자인으로의 응용

\*교육생준비물: 노트북

\* 강의 난이도: 중급

\* 강의: 백민경 교수 (서울대학교 생명과학부)

**Curriculum Vitae**

**Speaker Name: Minkyung Baek, Ph.D.**

**A person wearing glasses

Description automatically generated with low confidence**

▶**Personal Info**

Name Minkyung Baek

Title Assistant Professor

Affiliation Seoul National University

▶**Contact Information**

504-523, 1 Gwanak-ro, Gwanak-gu, Seoul 08826

Email minkbaek@snu.ac.kr

Phone Number 02-880-6755

**Research interest :** Structural bioinformatics, computational biology, protein structure prediction, artificial intelligence

**Educational Experience**

2013 B.S. in Chemistry, Seoul National University, Korea

2018 Ph.D. in Chemistry, Seoul National University, Korea

**Professional Experience**

2018-2019 Postdoctoral researcher, Seoul National University

2019-2022 Postdoctoral scholar, University of Washington, USA

2022- Assistant Professor, Seoul National University

**Selected Publications (5 maximum)**

1. Minkyung Baek, *et al.,* Accurate prediction of protein structures and interactions using a three-track neural network, Science, 373 (6557), 2021.
2. Ian R. Humphreys†, Jimin Pei†, Minkyung Baek†, Aditya Krishnakumar†, et al., Computed structures of core eukaryotic protein complexes, Science, 374 (6573), 2021. (†co-first authors)
3. Minkyung Baek, Ivan Anishchenko, Hahnbeom Park, Ian R. Humphreys, and David Baker, Protein oligomer modeling guided by predicted inter-chain contacts in CASP14, Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics, 89 (12), 2021.
4. Ivan Anishchenko†, Minkyung Baek†, Hahnbeom Park†, et al., Protein tertiary structure prediction and refinement using deep learning and Rosetta in CASP14, Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics, 89 (12), 2021. (†co-first authors)

**강의 시간표**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | | |
| **시 간** | **발 표 내 용** | **연 자** |
| 09:00-09:20(20) | 등 록 | |
| 09:20-09:30(10) | 공지사항 전달 | |
| 9:30–10:50(80) | Introduction to protein structure prediction   * Homology modeling * Coevolution-guided modeling * Early AI-based approaches | 백민경 교수 |
| 10:50–11:00(10) | 휴 식 | |
| 11:00-12:10(70) | 단백질 구조 예측 실습 I   * MSA generation, template search * homology modeling * contact prediction & modeling | 백민경 교수 |
| 12:10–13:40(90) | 점 심 | |
| 13:40-15:10(90) | AI-based protein structure prediction   * AlphaFold/RoseTTAFold * Applications to PPI prediction & protein design | 백민경 교수 |
| 15:10-15:20(10) | 휴 식 | |
| 15:20-16:50(90) | 단백질 구조 예측 실습 II   * AlphaFold, RoseTTAFold 실습 및 응용 | 백민경 교수 |