

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 알아보려고 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 알아보려고 한다.

강의는 다음의 내용을 포함한다:

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

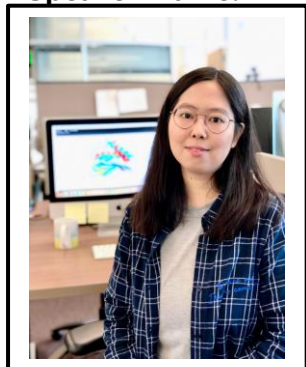
*교육생준비물: 노트북

* 강의 난이도: 중급

* 강의: 백민경 교수 (서울대학교 생명과학부)

Curriculum Vitae

Speaker Name: Minkyung Baek, Ph.D.



► 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