**강의개요**

**Machine Learning for Structural Bioinformatics and Drug Design**

신약개발에 소요되는 시간과 비용이 급속도로 증대됨에도 불구하고 신약 개발의 성공 사례는 그에 반해 날로 감소하고 있다. 이를 극복하기 위한 노력의 일환으로 다양한 종류의 생물정보 및 화학정보를 활용하여 신약개발의 효율을 획기적으로 증대 시키려는 노력들이 계속되고 있으며 그 중요성은 계속 증대되고 있다. 관련된 연구 분야로는 새로운 질병 타겟 발굴, 기존 약물의 신규 타겟 발굴, 약물의 재활용, 컴퓨터를 이용한 약물 설계 등이 있다. 이 강의에서는 다양한 생물정보 및 화학정보를 이용한 신약 개발 연구에 필요한 구조생물정보학 (Structural bioinformatics) 및 화학정보학 (Cheminformatics) 분야의 여러 방법들에 대해서 공부한다. 첫 번째로, 다양한 종류의 생체 분자 구조 정보와 화합물 정보에 관한 개요, 단백질과 분자들 사이의 상호작용의 분석 및 예측, machine learning 기법을 활용한 신약개발 연구 방법론, docking, QSAR 등의 분자 모델링 기법에 대해 공부한다. 또한, 최근 그 중요성이 대두되고 있는 Deep learning 기법이 어떻게 이 분야에 활용되고 있는지에 대해 논의한다.

강의는 다음의 내용을 포함한다:

* Introduction to structural bioinformatics and cheminformatics
* Machine learning algorithms for drug design and development
* Deep learning approach for drug design and development
* Protein-ligand docking
* QSAR modeling

\*참고강의교재:

\*교육생준비물: 노트북

\*조교: 이 경열

**Korean Society of Bioinformatics**

**BIML 2019**

|  |
| --- |
|  |
|  |
| **시 간** | **발 표 내 용** | **연 자** |
| 09:00-09:10 | 등 록  |
| 09:10-09:30 | 개 회 사 |
| 09:30-10:20 | * Introduction to Structural bioinformatics and Cheminformatics
* Topics:
	1. drug-target interaction prediction
	2. computational drug design
	3. drug repositioning
 | 김동섭 |
| 10:20-10:30 | 휴식 및 질의응답 |
| 10:30-11:30 | * Machine learning algorithms in structural bioinformatics and cheminformatics
	1. Protein-ligand docking
	2. QSAR modeling
	3. Network approach
	4. Deep learning approach
 | 김동섭 |
| 11:30-12:30 | * Methods and Tools
	1. Chemical databases
	2. Docking
	3. QSAR
 | 김동섭 |
| 12:30–13:30 | 점 심 |
| 13:30-14:20 | * Ligand Databases 활용 실습
	1. PubChem
	2. ChEMBL
	3. DrugBank
 | 이경열 |
| 14:20-14:30 | 휴식 및 질의응답 |
| 14:30-14:20 | * Molecular Descriptors 계산 실습
	1. Chemical fingerprints for calculating similarity
	2. Structure Clustering
	3. Molecular descriptors for QSAR
 | 이경열 |
| 14:20-14:30 | 휴식 및 질의응답 |
| 14:30-16:00 | * Protein-ligand docking 실습
	1. Autodock vina with PyRx
	2. PyMol
 | 이경열 |
| 16:00-16:10 | 휴식 및 질의응답 |
| 16:10-17:40 | * QSAR modeling 실습
 | 이경열 |

**Curriculum Vitae**

**Speaker Name: Dongsup Kim, Ph.D.**

▶**Personal Info**



Name Dongsup Kim

Title Professor

Affiliation KAIST

▶**Contact Information**

Address Department of Bio and Brain Engineering, KAIST, Daejeon

Email kds@kaist.ac.kr

Phone Number 042-350-4317

**Research interest:** Structural bioinformatics and computational drug development

**Educational Experience**

1989 B.S., Seoul National University

1991 M.S., Seoul National University

1998 Ph.D., Brown University, USA

**Professional Experience**

1998-2000 Post-doc research fellow, University of Pennsylvania

2001-2002 Post-doc research fellow, Oak Ridge National Lab

2003- Professor, Department of Bio and Brain Engineering, KAIST

**Selected Publications (5 maximum)**

1. Hong S, Kim D, "Computational characterization of chromatin domain boundary-associated genomic elements", Nucleic Acids Res. 2017 Oct 13;45(18):10403-10414.

2. Lee A, Lee K, Kim D, "Using reverse docking for target identification and its applications for drug discovery", Expert Opin Drug Discov. 2016 Jun 1:1-9.

3. Hong S, Kim D, "Library of binding protein scaffolds (LibBP): a computational platform for selection of binding protein scaffolds", Bioinformatics. 2016 Jun 1;32(11):1709-15.

4. Jung I, Kim SK, Kim M, Han YM, Kim YS, Kim D\*, Lee D\*, "H2B monoubiquitylation is a 5'-enriched active transcription mark and correlates with exon-intron structure in human cells", Genome Res. 2012 Jun;22(6):1026-35.

5. Lee SC, Park K, Han J, Lee JJ, Kim HJ, Hong S, Heu W, Kim YJ, Ha JS, Lee SG, Cheong HK, Jeon YH, Kim D\*, Kim HS\*, "Design of a binding scaffold based on variable lymphocyte receptors of jawless vertebrates by module engineering", PNAS. 2012 Feb 28;109(9):3299-304.