

## 강의개요

# 인공지능 신약개발 AI 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 인공지능 (AI) 신약개발 모델이 개발되고 있으며, 이 모델들을 활용하여 신약개발의 효율을 획기적으로 증대하고자 하는 노력들이 계속되고 있다. 이 강의에서는 이 과정에 필수적인 기초 지식인 화학정보학(Cheminformatics) 및 기초 프로그래밍(RDKit)에 대해서 학습한 후, 인공지능 분야에서 널리 사용되는 다양한 모델들을 이용하여 신약개발에 사용되는 다양한 예측 모델 개발 방법에 대해 실습한다. 특히, 최근 그 중요성이 대두되고 있는 Deep learning 기술을 이용한 AI 신약개발 모델 개발에 대해 학습한다.

강의는 다음의 내용을 포함한다:

- 화학정보학 기초 (Introduction to cheminformatics)
- AI 신약개발을 위한 Databases
- AI 신약개발을 위한 Programming (RDKit)
- AI 신약개발을 위한 기계학습법 및 QSAR 모델링 기초
- AI 신약개발을 위한 딥러닝 모델

\*참고 강의교재: 강의자료

\*교육생 준비물: 노트북

\*선수 지식: 기초 수준의 python programming

\*강의 난이도: 초급

\*강의: 김동섭 교수 (카이스트 바이오및뇌공학과)

# 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. D. Yang, T. Chung, D. Kim, "DeepLUCIA: predicting tissue-specific chromatin loops using Deep Learning-based Universal Chromatin Interaction Annotator", *Bioinformatics*, 38:3501-3512 (2022)
2. H.Y. Kim, W. Jeon, D. Kim, "An enhanced variant effect predictor based on a deep generative model and the Born-Again Networks", *Scientific Reports*, 19127(2021)
3. H. Kim, D. Kim, "Prediction of mutation effects using a deep temporal convolutional network", *Bioinformatics*, 36:2047-2052 (2020)
4. A. Lee, D. Kim, "CRDS: Consensus Reverse Docking System for target fishing", *Bioinformatics*, 36:959-960 (2020)
5. W. Jeon, D. Kim, "FP2VEC: a new molecular featurizer for learning molecular properties", *Bioinformatics*, 35:4979-4985 (2019)

## 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)	<ul style="list-style-type: none"> <li>● 화학정보학 기초(Cheminformatics)</li> <li>● 약물특성 및 약물다움(druglikeness)</li> <li>● Molecular Notations &amp; Descriptors</li> <li>● AI 신약개발을 위한 Databases</li> <li>● AI 신약개발을 위한 Programming 기초</li> </ul>	김동섭 교수
10:50-11:00(10)	휴 식	
11:00-12:10(70)	<ul style="list-style-type: none"> <li>● Google Colab에 RDKit 설치</li> <li>● 화합물 정보 읽기 실습</li> <li>● Bioactivity database 검색 및 정보 읽기 실습</li> <li>● Molecular descriptor (fingerprint) 생성 및 similarity 계산 실습</li> </ul>	조교
12:10-13:40(90)	점 심	
13:40-15:10(90)	<ul style="list-style-type: none"> <li>● AI 신약개발을 위한 기계학습법 기초</li> <li>● QSAR 모델링 기초</li> <li>● AI 신약개발을 위한 딥러닝 모델</li> <li>● Virtual screening (ligand-based, structure-based) 및 de novo design</li> </ul>	김동섭 교수
15:10-15:20(10)	휴 식	
15:20-16:50(90)	<ul style="list-style-type: none"> <li>● QSAR modeling 전체 과정 실습</li> <li>● 화합물의 Bioactivity 예측 모델 개발</li> <li>● Virtual screening 과정을 통한 신약후보물질 발굴 실습</li> </ul>	조교