

İTÜ
LİSANSÜSTÜ DERS KATALOG FORMU
(GRADUATE COURSE CATALOGUE FORM)

Dersin Adı		Course Name		
Biyoloji ve Kimyada Serbest Enerji Hesapları		Free Energy Calculations in Chemistry and Biology		
Kodu (Code)	Yarıyıl (Semester)	Kredisi (Local Credits)	AKTS Kredisi (ECTS Credits)	Ders Seviyesi (Course Level)
BLU6** / BLU6**E	Güz/Bahar (Fall/Spring)	3	7,5	Doktora (PhD)
Lisansüstü Program (Graduate Program)	Bilişim Uygulamaları (Applied Informatics)			
Dersin Türü (Course Type)	Seçmeli (Elective)	Dersin Dili (Course Language)	İngilizce/Türkçe (English/Turkish)	
Dersin İçeriği (Course Description)	<p>Biyolojide serbest enerji hesapları. İlaç keşfinde serbest enerji hesapları. Moleküler Dinamik ve Monte Carlo Simülasyonları. Uyarlanabilir dengeleyici kuvvet simülasyonları. Yönlendirilmiş moleküler dinamik simülasyonları. Çoğaltma değişimi moleküler dinamik simülasyonları. Serbest enerji pertürbasyon hesapları. Şemsiye örnekleme metodu. Ligand bağlanma afiniteleri için saklı çözücü metotlar: MM/PBSA and MM/GBSA:Lineer etkileşim enerjisi: metod ve ilaç tasarımında uygulamaları. Serbest enerji hesaplarının analizleri. Metadinamik. Geçiş yolu örnekleme. Serbest enerji hesaplarında en iyi uygulamalar</p> <p>Applications of free energy calculations in biology. Applications of free energy calculations in drug discovery. Molecular Dynamics and Monte Carlo Simulations. Adaptive Biasing Force (ABF) simulations. Steered Molecular Dynamics Simulations. Replica exchange molecular dynamics simulations. Free energy perturbation calculations. Umbrella Sampling. implicit solvent methods for ligand binding affinities: MM/PBSA and MM/GBSA. Linear interaction energy: method and applications in drug design. Analysis of free energy calculations. Metadynamics. Transition Path Sampling. Best practices in Free Energy calculations</p>			
Dersin Amacı (Course Objectives)	<p>1) Serbest enerji hesapları teorilerin öğretilmesi. 2) Serbest enerji hesaplarının uygulama alanlarının öğretilmesi. 3) Serbest enerji hesaplarının nasıl gerçekleştirilebileceğinin öğretilmesi 4) Serbest enerji hesaplarının analizleri ve en iyi uygulamalarının öğretilmesi</p> <p>1) Teaching theories of free energy calculations 2) Teaching applications of free energy calculations. 3) Teaching how to perform free energy calculations 4) Teaching analysis and best practices of free energy calculations</p>			
Dersin Öğrenme Çıktıları (Course Learning Outcomes)	<p>Bu dersi başarıyla tamamlayan öğrenciler;</p> <p>1) Serbest enerji hesaplarının uygulama alanları 2) Moleküler dinamik ve Monte Carlo simülasyonları 3) Serbest enerji hesap metotları 4) Serbest enerji hesapları analizleri 5) Serbest enerji hesaplarında en iyi uygulamalar hakkında bilgi sahibi olacaklardır.</p> <p>Students who pass the course will have knowledge on:</p> <p>1) Applications free energy calculations 2) Molecular dynamics and Monte Carlo Simulations 3) Free energy calculation methods 4) Analysis of free energy calculations 5) Best practices in Free energy calculations</p>			

Kaynaklar (References)	1) Christophe Chipot and Andrew Pohorille. <i>Free Energy Calculations</i> , Springer, 2007 2) Luca Monticelli and Emppu Salonen. <i>Biomolecular simulations</i> , Humana Press, 2013 ^[1] _[SEP] 3) Daan Frenkel and Berend Smit. <i>Understanding Molecular Simulations</i> . Academic Press.2002		
Ödevler ve Projeler (Homework & Projects)	2 Ödev ve 1 Dönem Proje		
	2 Homework and 1 Term Project		
Laboratuvar Uygulamaları (Laboratory Work)	--		
	--		
Bilgisayar Kullanımı (Computer Use)	VMD, NAMD		
	--		
Diğer Uygulamalar (Other Activities)	--		
	--		
Başarı Değerlendirme Sistemi (Assessment Criteria)	Faaliyetler (Activities)	Adedi* (Quantity)	Değerlendirmedeki Katkısı, % (Effects on Grading, %)
	Yıl İçi Sınavları (Midterm Exams)	1	30
	Kısa Sınavlar (Quizzes)	-	-
	Ödevler (Homework)	2	20
	Projeler (Projects)	-	-
	Dönem Ödevi/Projesi (Term Paper/Project)	1	10
	Laboratuvar Uygulaması (Laboratory Work)	-	-
	Diğer Uygulamalar (Other Activities)	-	-
	Final Sınavı (Final Exam)	1	40

DERS PLANI

Hafta	Konular	Dersin Çıktıları
1	Biyolojide serbest enerji hesapları	1
2	İlaç keşfinde serbest enerji hesapları	1
3	Moleküler Dinamik ve Monte Carlo Simülasyonları	2
4	Uyarlanabilir dengeleyici kuvvet simülasyonları	3
5	Yönlendirilmiş moleküler dinamik simülasyonları	3
6	Çoğaltma değişimi moleküler dinamik simülasyonları	3
7	Serbest enerji pertürbasyon hesapları	3
8	Şemsiye örnekleme metodu	3
9	Ligand bağlanma eğilimi için saklı çözücü metotlar: MM/PBSA and MM/GBSA:	3
10	Lineer etkileşim enerjisi: metot ve ilaç tasarımında uygulamaları	3
11	Serbest enerji hesaplarının analizleri	4
12	Metadinamik	3
13	Geçiş yolu örnekleme	3
14	Serbest enerji hesaplarında en iyi uygulamalar	5

COURSE PLAN

Weeks	Topics	Course Outcomes
1	Applications of free energy calculations in biology	1
2	Applications of free energy calculations in drug discovery	1
3	Molecular Dynamics and Monte Carlo Simulations	2
4	Adaptive Biasing Force (ABF) simulations	3
5	Steered Molecular Dynamics Simulations	3
6	Replica exchange molecular dynamics simulations	3
7	Free energy perturbation calculations	3
8	Umbrella Sampling	3
9	Implicit solvent methods for ligand binding affinities: MM/PBSA and MM/GBSA	3
10	Linear interaction energy: method and applications in drug design.	3
11	Analysis of free energy calculations	4
12	Metadynamics	3
13	Transition Path Sampling	3
14	Best practices in Free Energy calculations	5

Dersin Bilişim Uygulamaları Doktora Programıyla İlişkisi

	Programın mezuna kazandıracığı bilgi, beceri ve yetkinlikler (programa ait çıktılar)	Katkı Seviyesi		
		1	2	3
i.	Lisans düzeyi yeterliliklerine dayalı olarak, Bilişim Uygulamaları alanında bilgilerini uzmanlık düzeyinde geliştirebilme ve derinleştirilme (yeterli bilgi birikimi) (bilgi).			X
ii.	Bilişim Uygulamaları alanının ilişkili olduğu disiplinler arası etkileşimi kavrayabilme (bilgi).		X	
iii.	Bilişim Uygulamaları alanında edindiği uzmanlık düzeyindeki kuramsal ve uygulamalı bilgileri kullanabilme (beceri).			
iv.	Bilişim Uygulamaları alanında edindiği bilgileri farklı disiplin alanlarından gelen bilgilerle bütünleştirilerek yorumlayabilme ve yeni bilgiler oluşturabilme (beceri).			
v.	Bilişim Uygulamaları alanı ile ilgili karşılaşılan sorunları araştırma yöntemlerini kullanarak çözümlenebilme (beceri).			
vi.	Bilişim Uygulamaları alanı ile ilgili uzmanlık gerektiren bir çalışmayı bağımsız olarak yürütebilme (Bağımsız Çalışabilme ve Sorumluluk Alabilme Yetkinliği).		X	
vii.	Bilişim Uygulamaları alanı ile ilgili uygulamalarda karşılaşılan ve öngörülemez karmaşık sorunların çözümü için yeni stratejik yaklaşımlar geliştirebilme ve sorumluluk alarak çözüm üretebilme (Bağımsız Çalışabilme ve Sorumluluk Alabilme Yetkinliği).			
viii.	Bilişim Uygulamaları alanı ile ilgili sorunların çözümlenmesini gerektiren ortamlarda liderlik yapabilme (Bağımsız Çalışabilme ve Sorumluluk Alabilme Yetkinliği).			
ix.	Bilişim Uygulamaları alanında edindiği uzmanlık düzeyindeki bilgi ve becerileri eleştirel bir yaklaşımla değerlendirebilme ve öğrenmesini yönlendirebilme (Öğrenme Yetkinliği).		X	
x.	Bilişim Uygulamaları alanındaki güncel gelişmeleri ve kendi çalışmalarını, nicel ve nitel veriler ile destekleyerek, alanındaki ve alan dışındaki gruplara, yazılı, sözlü ve görsel olarak sistemli biçimde Türkçe ve/veya İngilizce olarak aktarabilme (İletişim ve Sosyal Yetkinlik).			
xi.	Sosyal ilişkileri ve bu ilişkileri yönlendiren normları eleştirel bir bakış açısı ile inceleyebilme, geliştirebilme ve gerektiğinde değiştirmek üzere harekete geçebilme (İletişim ve Sosyal Yetkinlik).			
xii.	Bilişim Uygulamaları alanının gerektirdiği düzeyde bilgisayar yazılımı ile birlikte bilişim ve iletişim teknolojilerini ileri düzeyde kullanabilme (İletişim ve Sosyal Yetkinlik).			X
xiii.	Bilişim Uygulamaları alanı ile ilgili verilerin toplanması, yorumlanması, uygulanması ve duyurulması aşamalarında toplumsal, bilimsel, kültürel ve etik değerleri gözeterek denetleyebilme ve bu değerleri öğretebilme (Alana Özgü Yetkinlik).			
xiv.	Bilişim Uygulamaları alanı ile ilgili konularda strateji, politika ve uygulama planları geliştirebilme ve elde edilen sonuçları, kalite süreçleri çerçevesinde değerlendirebilme (Alana Özgü Yetkinlik).			
xv.	Bilişim Uygulamaları alanında özümstedikleri bilgiyi, problem çözme ve/veya uygulama becerilerini, disiplinler arası çalışmalarda kullanabilme (Alana Özgü Yetkinlik).			
xvi.	Kendi çalışmalarını, Bilişim Uygulamaları alanındaki uluslararası platformlarda, yazılı, sözlü ve/veya görsel olarak aktarabilme (Alana özgü yetkinlik).		X	

1: Az, 2. Kısmi, 3. Tam

Relationship between the Course and Applied Informatics Doctorate (PhD) Curriculum

	Program Outcomes	Level of Contribution		
		1	2	3
i.	Developing and intensifying knowledge in Applied Informatics area, based upon the competency in the undergraduate level (sufficient knowledge) (knowledge).			X
ii.	Grasping the inter-disciplinary interaction related to Applied Informatics area (knowledge).		X	
iii.	The ability to use the expert-level theoretical and practical knowledge acquired in Applied Informatics area (skill).			
iv.	Interpreting and forming new types of knowledge by combining the knowledge from Applied Informatics area and the knowledge from various other disciplines (skill).			
v.	Solving the problems faced in Applied Informatics area by making use of the research methods (skill).			
vi.	The ability to carry out a specialist study related to Applied Informatics area independently (Competence to work independently and take responsibility).		X	
vii.	Developing new strategic approaches to solve the unforeseen and complex problems arising in the practical processes of Applied Informatics area and coming up with solutions while taking responsibility (Competence to work independently and take responsibility).			
viii.	Fulfilling the leader role in the environments where solutions are sought for the problems related to Applied Informatics area (Competence to work independently and take responsibility)			
ix.	Assessing the specialist knowledge and skill gained through the study with a critical view and directing one's own learning process (Learning Competence).		X	
x.	Systematically transferring the current developments in Applied Informatics area and one's own work to other groups in and out of Applied Informatics area; in written, oral and visual forms in Turkish and/or English (Communication and Social Competency).			
xi.	Ability to see and develop social relationships and the norms directing these relationships with a critical look and the ability to take action to change these when necessary. (Communication and Social Competency).			
xii.	Using the computer software together with the information and communication technologies efficiently and according to the needs of Applied Informatics area (Communication and Social Competency).			X
xiii.	Paying regard to social, scientific, cultural and ethical values while collecting, interpreting, practicing and announcing processes of Applied Informatics area related data and the ability to teach these values to others (Area Specific Competency).			
xiv.	Developing strategy, policy and application plans concerning the subjects related to Applied Informatics area and the ability to evaluate the end results of these plans within the frame of quality processes (Area Specific Competency).			
xv.	Using the knowledge and the skills for problem solving and/or application (which are processed within the area) in inter-disciplinary studies (Area Specific Competency).			
xvi.	The ability to present one's own work within the international Applied Informatics environments orally, visually and in written forms (Area Specific Competency).		X	

1: Little, 2. Partial, 3. Full

<u>Düzenleyen (Prepared by)</u>	<u>Tarih (Date)</u>	<u>İmza (Signature)</u>
	14.03.2017	