

İTÜ
LİSANSÜSTÜ DERS KATALOG FORMU
(GRADUATE COURSE CATALOGUE FORM)

Dersin Adı		Course Name		
İlaç keşfi ve geliştirilmesinde bilişim uygulamaları		Informatics applications in drug discovery and development		
Kodu (Code)	Yarıyılı (Semester)	Kredisi (Local Credits)	AKTS Kredisi (ECTS Credits)	Ders Seviyesi (Course Level)
BLU607 / BLU607E	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)	İlaç keşfi ve tasarımının temelleri. Protein yapısı. İlaç etki mekanizmasının temelleri. Kemoenformatik metotlar ve veri analizi. İlaç bağlanma bölgeleri. Dizi analizi. Biyo-belirteç keşfinde Proteomik and Metabolik uygulamalar. İlaçların yeniden konumlandırılması. İlaç kombinasyonlarının tahminleri. Protein-ilaç molekülü etkileşimlerinin ağ ve yolak metotlarıyla incelenmesi. Veri entegrasyonu ve karma modelleme. İlaç toksisitesi tahmini. Fundamentals of drug development and discovery. Protein structure. Fundamentals of drug actions. Basics of Cheminformatics and data analysis. Drug binding sites. Sequence analysis. Proteomics and Metabolics Approaches for Biomarker Discovery. Drug repositioning/Repurposing. Prediction of Drug Combinations. Network and Pathway Analysis of Compound-Protein Interactions. Data integration and mixture modeling. Proteochemometrics modeling. Computational Toxicology analysis. Proteochemometric modelleme.			
Dersin Amacı (Course Objectives)	1) İlaç keşfi ve geliştirilmesinin temellerinin kavratılması. 2) Protein yapısının ve protein-ilaç etkileşiminin temellerinin öğretilmesi. 3) İlaç geliştirilmesinde biyolojik ve kimyasal verilerin entegrasyonu ve modellenmesinin öğretilmesi. 4) İlaç toksisitesinin kimyasal ve biyolojik temellerinin öğretilmesi. 1) Teaching fundamentals of drug discovery and development 2) Teaching protein structure and basics of protein-drug interactions. 3) Teaching integration and modeling of biological and chemical data for drug discovery studies. 4) Teaching chemical and biological basis of drug toxicity			
Dersin Öğrenme Çıktıları (Course Learning Outcomes)	Bu dersi başarıyla tamamlayan öğrenciler; 1) İlaç keşfi ve geliştirilmesinin temelleri 2) Protein yapısı ve ilaç etki mekanizmaları 3) İlaç bağlanma bölgeleri 4) İlaç geliştirilmesinde omiks ve kimyasal verilerin kullanımı 5) Kimyasal ve biyolojik verilerin çoklu seviyede entegrasyonu ve modellenmesi 6) İlaç toksisitesi hakkında bilgi sahibi olacaklardır. Students who pass the course will have knowledge on: 1) Fundamentals of drug discovery and development 2) Protein structure and drug mechanism of actions 3) Drug binding sites 4) The use of omics data and chemical data for drug discovery 5) Multi-level data integration and modeling of biological and chemical data 6) Drug toxicity			

Kaynaklar (References)	1) Michael Lutz and Terry Kenakin, <i>Quantitative Molecular Pharmacology and Informatics in Drug Discovery</i> , Wiley, 1999. 2) Marechal, E; Roy, S; Lafanechere, L; <i>Chemogenomics and Chemical Genetics: A User's Introduction for Biologists, Chemists and Informaticians</i> , Springer, 2001. 3) Reisfeld, B; Mayeno, A; <i>Computational Toxicology</i> , Humana Press, 2009. 4) Richard Larson, <i>Bioinformatics and Drug Discovery</i> , Springer, 2006. 5) Edgar Jacoby, <i>Chemogenomics Methods and Applications</i> , Springer, 2009.		
Ödevler ve Projeler (Homework & Projects)	1 Dönem Ödevi ve 1 Proje		
	1 Term Project and 1 Project		
Laboratuvar Uygulamaları (Laboratory Work)	--		
	--		
Bilgisayar Kullanımı (Computer Use)	--		
	--		
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)	-	-
	Projeler (Projects)	1	20
	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	İlaç keşfi ve tasarımının temelleri	1
2	Protein yapısı	2
3	İlaç etki mekanizmasının temelleri	2,3
4	Kemoinformatik metotlar ve veri analizi	4,5
5	İlaç bağlanma bölgelerinin tahmini	2,3
6	Bağlanma bölgelerinin benzerliği	2,3
7	Dizi analizi	4,5
8	Biyo-belirteç keşfinde Proteomik and Metabolik uygulamalar	4,5
9	İlaçların yeniden konumlandırılması	3,4,5
10	İlaç kombinasyonlarının tahminleri	3,4,5
11	Protein-ilaç molekülü etkileşimlerinin ağ ve yolak metotlarıyla incelenmesi	3,4,5
12	Veri entegrasyonu ve karma modelleme	3,4,5
13	Proteokemometrik modelleme	3,4,5
14	İlaç toksisitesi tahmini	4,5,6

COURSE PLAN

Weeks	Topics	Course Outcomes
1	Fundamentals of drug development and discovery	1
2	Protein structure	2
3	Fundamentals of drug actions	2,3
4	Basics of Cheminformatics and data analysis	4,5
5	Binding site prediction	2,3
6	Binding site similarity search	2,3
7	Sequence analysis	4,5
8	Proteomics and Metabolics Approaches for Biomarker Discovery	4,5
9	Drug repositioning/Repurposing	3,4,5
10	Prediction of Drug Combinations	3,4,5
11	Network and Pathway Analysis of Compound-Protein Interactions	3,4,5
12	Data integration and mixture modeling	3,4,5
13	Proteochemometrics modeling	3,4,5
14	Computational Toxicology analysis	4,5,6

Dersin Bilişim Uygulamaları Yüksek Lisans 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 derinleştirebilme (yeterli bilgi birikimi) (bilgi).			X
ii.	Bilişim Uygulamaları alanının ilişkili olduğu disiplinler arası etkileşimi kavrayabilme (bilgi).			
iii.	Bilişim Uygulamaları alanında edindiği uzmanlık düzeyindeki kuramsal ve uygulamalı bilgileri kullanabilme (beceri).			
iv.	Bilişim Uygulamaları alanında edindiği bilgileri farklı disiplin alanlarından gelen bilgilerle bütünleştirerek yorumlayabilme ve yeni bilgiler oluşturabilme (beceri).			X
v.	Bilişim Uygulamaları alanı ile ilgili karşılaşılan sorunları araştırma yöntemlerini kullanarak çözümlenebilir (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 öngörülemeyen 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 yapabileceği (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 özümledikleri 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).			

1: Az, 2. Kısmi, 3. Tam

Relationship between the Course and Applied Informatics Graduate (MS) 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).			
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).			X
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).			

1: Little, 2. Partial, 3. Full

<u><i>Düzenleyen (Prepared by)</i></u>	<u><i>Tarih (Date)</i></u>	<u><i>İmza (Signature)</i></u>
	29.04.2016	