

İTÜ
LİSANSÜSTÜ DERS KATALOG FORMU
(GRADUATE COURSE CATALOGUE FORM)

Dersin Adı		Course Name		
Kemoenformatik		Chemoinformatics		
Kodu (Code)	Yarıyıl (Semester)	Kredisi (Local Credits)	AKTS Kredisi (ECTS Credits)	Ders Seviyesi (Course Level)
HBM621E	Güz (Fall)	(3) Kredili	7.5	Doktora (Ph.D.)
Lisansüstü Program (Graduate Program)	Hesaplamalı Bilim ve Mühendislik Yüksek Lisans ve Doktora Programı (Computational Science and Engineering Masters and PhD Programme)			
Dersin Türü (Course Type)	Seçime Bağlı (Elective)	Dersin Dili (Course Language)	İngilizce (English)	
Dersin İçeriği (Course Description) <i>30-60 kelime arası</i>	Kemoenformatiğin gelişimi ve kapsamı, 2 ve 3 boyutlu moleküler yapıların simgelenmesi ve işlenmesi, Veritabanları ve veri kaynakları, Fiziksel ve kimyasal verilerin hesaplanması: moleküler mekanik ve quantum mekaniği, Veri analiz yöntemleri: kimyada özdevimli öğrenme, sinir ağları, evrimsel algoritmalar ve kümeleme teknikleri, Moleküler tanımlayıcılar, Sayısal yapı – aktivite ilişkisi, İlaç tasarımı, Benzerlik yöntemleri, Yüksek girdi-çıkıtlı tarama verilerinin analizi, Sanal tarama ve kenetlenme, Birleşimsel kimya ve kütüphane tasarımı The scope and history of chemoinformatics, Representation and manipulation of 2D and 3D molecular structures, Overview of databases/data sources, Calculation of physical and chemical data: molecular mechanics and quantum mechanics, Methods for data analysis: machine learning techniques in chemistry, neural networks, evolutionary algorithms and clustering techniques, Molecular descriptors, Quantitative Structure – Activity Relationship (QSAR), Drug design, Similarity methods, Analysis of high-throughput screening data, Virtual screening and docking, Combinatorial chemistry and library design.			
Dersin Amacı (Course Objectives) <i>Maddeler halinde 2-5 adet</i>	<ol style="list-style-type: none">Farklı kemoenformatik yöntemlerinin tanıtımıKemoenformatiğin ilaç tasarımı araştırmalarında kullanımı ile ilgili örnekler vermeKemoenformatikte kullanılan yöntemler üzerine Python ile pratik deneyim kazandırmak <ol style="list-style-type: none">Introducing different chemoinformatics methodsProviding examples on the use of chemoinformatics in drug design researchGaining practical experience with Python on the methods used in chemoinformatics			
Dersin Öğrenme Çıktıları (Course Learning Outcomes) <i>Maddeler halinde 4-9 adet</i>	Bu dersi başarıyla tamamlayan yüksek lisans/doktora öğrencileri aşağıdaki konularda bilgi, beceri ve yetkinlik kazanırlar; <ol style="list-style-type: none">Moleküler yapıları tanımlamakta kullanılan en önemli formatları yorumlamaKemoenformatikte kullanılan veritabanları hakkında bilgi edinmeVerilen bir problem için en uygun hesaplama yönteminin nasıl seçilebileceğini tartışmaKemoenformatikte en yaygın kullanılan veri analizi yöntemlerini tanımlamaQSAR hakkında iyi bir çalışma bilgisine sahip olmaSanal tarama yöntemlerini tanımaMevcut hesaplamalı ilaç tasarımı yöntemleri ve onların kullanımları hakkında bilgi edinmeÇeşitli kemoenformatik problemleri için algoritma yazma ve uygulama M.Sc./Ph.D. students who successfully pass this course gain knowledge, skill and competency in the following subjects; <ol style="list-style-type: none">Interpret the most important formats used for describing molecular structuresHave a good knowledge of databases used in chemoinformaticsArgue on how to choose the appropriate computational tools for a given problemDescribe the most widely used data analysis tools in chemoinformaticsHave a good working knowledge on QSARHave an overview of the virtual screening techniquesHave an overview of the available computational drug design techniques and their usesWrite and Implement algorithms for various chemoinformatics problems			

Kaynaklar (References) <i>En önemli 5 adedini belirtiniz</i>	1. A. R. Leach and V. J. Gillet , An Introduction to Chemoinformatics, Springer, 2007. 2. J. Gasteiger , Handbook of Chemoinformatics, Wiley, 2003. 3. T. I. Oprea , Chemoinformatics in Drug Discovery, Wiley, 2005. 4. J. Bajorath , Chemoinformatics: Concepts, Methods, and Tools for Drug Discovery, Humana Press, 2004. 5. A. Varnek and A. Tropsha , Chemoinformatics Approaches to Virtual Screening, RSC Publishing, 2008.		
Ödevler ve Projeler (Homework & Projects)	7 Ödev		
Laboratuvar Uygulamaları (Laboratory Work)	7 Homework		
Bilgisayar Kullanımı (Computer Use)	Python		
Diğer Uygulamalar (Other Activities)	Python		
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)	7	30
	Projeler (Projects)		
	Dönem Ödevi/Projesi (Term Paper/Project)		
	Laboratuvar Uygulaması (Laboratory Work)		
	Diğer Uygulamalar (Other Activities)		
	Final Sınavı (Final Exam)	1	40

DERS PLANI

Hafta	Konular	Dersin Çıktıları
1	Kemoinformatiğin geliřimi ve kapsamı	1,2,6,7
2	2 boyutlu moleküler yapıların simgelenmesi ve iřlenmesi	1
3	3 boyutlu moleküler yapıların simgelenmesi ve iřlenmesi	1
4	SMILES – Molekül ve reaksiyonlar için bir bilgisayar dili	1
5	Veritabanları ve veri kaynakları	2
6	Fiziksel ve kimyasal verilerin hesaplanması: moleküler mekanik ve quantum mekanięi	3
7	I. Veri analizi için metotlar: kimyada özdevimli öğrenme, sinir aęları, evrimsel algoritmalar ve kümeleme teknikleri	4,8
8	II. Veri analizi için metotlar: kimyada özdevimli öğrenme, sinir aęları, evrimsel algoritmalar ve kümeleme teknikleri	4,8
9	Moleküler tanımlayıcılar	3,5,6,7,8
10	Sayısal yapı – aktivite iliřkisi	3,5,6,7,8
11	Benzerlik metotları	3,5,6,7,8
12	Yüksek giripçıklı tarama verilerinin analizi	3,5,6,7
13	Sanal tarama ve kenetlenme	3,5,6,7
14	Birleřimsel kimya ve kütüphane tasarımı	3,5,6,7

COURSE PLAN

Weeks	Topics	Course Outcomes
1	The scope and history of chem(o)informatics	1,2,6,7
2	Representation and manipulation of 2D molecular structures	1
3	Representation and manipulation of 3D molecular structures	1
4	SMILES – A language for molecules and reactions	1
5	Overview of databases/data sources	2
6	Calculation of physical and chemical data: molecular mechanics and quantum mechanics	3
7	I. Methods for data analysis: machine learning techniques in chemistry, neural networks, evolutionary algorithms and clustering techniques	4,8
8	II. Methods for data analysis: machine learning techniques in chemistry, neural networks, evolutionary algorithms and clustering techniques	4,8
9	Molecular descriptors	3,5,6,7,8
10	Quantitative Structure – Activity Relationship (QSAR)	3,5,6,7,8
11	Similarity methods	3,5,6,7,8
12	Analysis of high-throughput screening data	3,5,6,7
13	Virtual screening and docking	3,5,6,7
14	Combinatorial chemistry and library design	3,5,6,7

Dersin Hesaplamalı bilim ve Mühendislik Programıyla İlişkisi

	Programın mezuna kazandıracığı bilgi, beceri ve yetkinlikler (programa ait çıktılar)	Katkı Seviyesi		
		1	2	3
i.	Yüksek lisans düzeyi yeterliliklerine dayalı olarak, Hesaplamalı Bilim ve Mühendislik Programındaki bilgilerini uzmanlık düzeyinde geliştirebilme ve derinleştirebilme (yeterli bilgi birikimi) (<i>bilgi</i>).			X
ii.	Alanının ilişkili olduğu disiplinler arası etkileşimi kavrayabilme (<i>bilgi</i>).			X
iii.	Alanında edindiği uzmanlık düzeyindeki kuramsal ve uygulamalı bilgileri kullanabilme (<i>beceri</i>).		X	
iv.	Alanında edindiği bilgileri farklı disiplin alanlarından gelen bilgilerle bütünleştirerek yorumlayabilme ve yeni bilgiler oluşturabilme (<i>beceri</i>).		X	
v.	Alanını ile ilgili karşılaşılan sorunları araştırma yöntemlerini kullanarak çözümlenebilir (<i>beceri</i>).		X	
vi.	Alanını ile ilgili uzmanlık gerektiren bir çalışmayı bağımsız olarak yürütebilme (<i>Bağımsız Çalışabilme ve Sorumluluk Alabilme Yetkinliği</i>).			
vii.	Alanı ile ilgili uygulamalarda karşılaşılan ve öngörülemez karmaşık sorunların çözümü için yeni stratejik yaklaşımlar geliştirebilme ve sorumluluk alarak çözüm üretebilme (<i>Bağımsız Çalışabilme ve Sorumluluk Alabilme Yetkinliği</i>).			
viii.	Alanındaki güncel gelişmeleri ve kendi çalışmalarını, nicel ve nitel veriler ile destekleyerek, alanındaki ve alan dışındaki gruplara, yazılı, sözlü ve görsel olarak sistemli biçimde aktarabilme (<i>İletişim ve Sosyal Yetkinlik</i>).			
ix.	Bir yabancı dili en az Avrupa Dil Portföyü B2 genel düzeyinde kullanarak sözlü ve yazılı iletişim kurabilmek (<i>İletişim ve Sosyal Yetkinlik</i>).			
x.	Alanının gerektirdiği düzeyde bilgisayar yazılımı ile birlikte bilişim ve iletişim teknolojilerini ileri düzeyde kullanabilme (<i>İletişim ve Sosyal Yetkinlik</i>).		X	
xi.	Alanı ile ilgili verilerin toplanması, yorumlanması, uygulanması ve duyurulması aşamalarında toplumsal, bilimsel, kültürel ve etik değerleri gözeten denetleyebilme ve bu değerleri öğretebilme (<i>Alana Özgü Yetkinlik</i>).			
xii.	Alanı ile ilgili konularda strateji, politika ve uygulama planları geliştirebilme ve elde edilen sonuçları, kalite süreçleri çerçevesinde değerlendirebilme (<i>Alana Özgü Yetkinlik</i>).	X		
xiii.	Alanında özümstedikleri bilgiyi, problem çözme ve/veya uygulama becerilerini, disiplinlerarası çalışmalarda kullanabilme (<i>Alana Özgü Yetkinlik</i>).	X		
xiv.	Hesaplamalı Bilim ve Mühendislik Programında, kendi çalışmalarını, alanındaki uluslararası platformlarda, yazılı, sözlü ve/veya görsel olarak aktarabilme (<i>Alana özgü yetkinlik</i>).			

1: Az, 2. Kısmi, 3. Tam

Relationship between the Course and Computational Science and Engineering Program

	Program Outcomes	Level of Contribution		
		1	2	3
i.	Developing and intensifying knowledge in the Computational Science and Engineering program's area, based upon the competency in the M.S. level (sufficient knowledge) (<i>knowledge</i>).			X
ii.	Grasping the inter-disciplinary interaction related to one's area (<i>knowledge</i>).			X
iii.	The ability to use the expert-level theoretical and practical knowledge acquired in the area (<i>skill</i>).		X	
iv.	Interpreting and forming new types of knowledge by combining the knowledge from the area and the knowledge from various other disciplines (<i>skill</i>).		X	
v.	Solving the problems faced in the area by making use of the research methods (<i>skill</i>).		X	
vi.	The ability to carry out a specialistic study related to one's area independently. (<i>Competence to work independently and take responsibility</i>).			
vii.	Developing new strategic approaches to solve the unforeseen and complex problems arising in the practical processes of one's area and coming up with solutions while taking responsibility (<i>Competence to work independently and take responsibility</i>).			
viii.	Systematically transferring the current developments in the area and one's own work to other groups in and out of the area; in written, oral and visual forms (<i>Communication and Social Competency</i>).			
ix.	Proficiency in a foreign language –at least European Language Portfolio B2 Level- and establishing written and oral communication with that language (<i>Communication and Social Competency</i>).			
x.	Using the computer software together with the information and communication technologies efficiently and according to the needs of the area (<i>Communication and Social Competency</i>).		X	
xi.	Paying regard to social, scientific, cultural and ethical values during the collecting, interpreting, practicing and announcing processes of the area related data and the ability to teach these values to others (<i>Area Specific Competency</i>).			
xii.	Developing strategy, policy and application plans concerning the subjects related to the area and the ability to evaluate the end results of these plans within the frame of quality processes (<i>Area Specific Competency</i>).	X		
xiii.	Using the knowledge and the skills for problem solving and/or application (which are processed within the area) in inter-disciplinary studies (<i>Area Specific Competency</i>).	X		
xiv.	In the Computational Science and Engineering program, the ability to present one's own work within the international environments orally, visually and in written forms (<i>Area Specific Competency</i>).			

1: Little, 2. Partial, 3. Full

NOT-1: Ders ile ilgisi olmayan çıktıların boş bırakılması gerekmektedir.
NOT-2: Yukarıdaki tabloda işaretlenen katkı seviyeleri tüm programlar için minimum seviyelerdir. Ancak ilgili programın yapısına göre katkı seviyeleri artırılabilir.

<u>Düzenleyen (Prepared by)</u> Doç. Dr. Adem Tekin	<u>Tarih (Date)</u>	<u>İmza (Signature)</u>
--	---------------------	-------------------------