

İTÜ
LİSANSÜSTÜ DERS KATALOG FORMU
(GRADUATE COURSE CATALOGUE FORM)

Dersin Adı				Course Name	
Bilgisayar Yardımlı İlaç Tasarımı: Temelleri ve Uygulamalar				Computer Assisted Drug Design: Fundamentals and Applications	
Kodu (Code)	Yarıyıl (Semester)	Kredisi (Local Credits)	AKTS Kredisi (ECTS Credits)	Ders Seviyesi (Course Level)	
HBM6XXE	Güz (Fall)	3	7,5	Doktora (Ph.D)	
Lisansüstü Program (Graduate Program)	Hesaplamalı Bilim ve Mühendislik Yüksek Lisans Programı (Computational Science and Engineering Masters Programme)				
Dersin Türü (Course Type)	Seçmeli (Elective)		Dersin Dili (Course Language)	İngilizce (English)	
Dersin İçeriği (Course Description) <i>30-60 kelime arası</i>	İlaç Tasarımı, Konformasyonel Analiz ve Moleküler Yüzeyle, İstatistiksel Regresyon ve Kısmi En Küçük Kareler Analizi, Lipofilisite ve Partisyon Katsayısı (Log P), Veritabanları, 2D Nicel Yapı Aktivite İlişkileri, 3D-QSAR Karşılaştırmalı Moleküler Alan Analizi (CoMFA), 3D-QSAR: Karşılaştırmalı Moleküler Benzerlik Analizi (CoMSIA), Sanal Tarama, Homoloji Model Yapılanması, Farmakofor Modellemesi, Biçim Bazlı Yöntemler, Kenetlenme Yöntemleri: Arama Algoritmaları, Puanlama, Sonuçların Doğrulanması, Protein-Ligant Kenetlenmesi Drug Design, Conformational analysis, Molecular Surfaces, Statistical Basis of Regression and Partial Least-Squares Analysis, Databases, Lipophilicity and Partition Coefficient (Log P), 2D-Quantitative Structure-Activity Relationships, 3D-QSAR: Comparative Molecular Field Analysis (CoMFA), 3D-QSAR: Comparative Molecular Similarity Analysis (CoMSIA), Virtual Screening, Homology Model Building Pharmacophore Modelling, Shape Based Methods, Docking Methods: Search Algorithms, Scoring, Validation of Results, Protein-Ligand Docking				
Dersin Amacı (Course Objectives) <i>Maddeler halinde 2-5 adet</i>	<ol style="list-style-type: none">1. Proteinlerin homoloji modellemesinin öğretilmesi2. Yapısal ve kimyasal verilerin sunumunun anlatılması3. Bilgisayar destekli farkofor sentez, ve yeni ilaç tasarımının öğretilmesi4. Kimyasal yapının tanımlanması için 2-Boyutlu formata indirgenme yönteminin kullanımının tanıtılması5. 3D QSAR arkasındaki kavramların tanıtılması <ol style="list-style-type: none">1. To teach homology modelling of proteins2. To describe the representation of structural and chemical data3. To teach computer assisted synthesis of pharmacophores and the design of new drugs4. To introduce the use of 2-dimensional reduction method for specifying chemical structures5. To introduce the concepts behind 3D QSAR				
Dersin Öğrenme Çıktıları (Course Learning Outcomes) <i>Maddeler halinde 4-9 adet</i>	Bu dersi başarıyla tamamlayan öğrenciler aşağıdaki bilgi, beceri ve yetkinlikleri kazanırlar; <ol style="list-style-type: none">1. Bilgisayar Destekli İlaç Tasarımında kullanılan en gelişmiş yöntemler hakkında bilgi,2. Verilen ilaç tasarımı probleminin çözümü için uygun yöntemin belirlenmesi ve uygulanabilmesi,3. Endüstriyel alanda gerçekleşen modern ilaç tasarım teknolojilerini anlayabilme4. İlişkili veritabanlarının doğasını anlar ve kimyasal verinin ilişkili veritabanlarında nasıl ifade dilediğini bilir,5. Kimyasal madde ile QSAR analizinin nasıl gerçekleştirileceğini bilme6. 3 boyutlu yapının 2 boyutlu formata indirgenmesini gerçekleştirme <p>Students who successfully pass this course gain knowledge, skills and competency in the following subjects;</p> <ol style="list-style-type: none">1. be able to have an knowledge about the state-of-the art methods and techniques applied in CADD.2. be able to choose and apply the appropriate method for a given in CADD problem3. be able to understand the industrial practices of modern drug design technologies4. have an understanding of the nature of a relational database and how chemical data can be represented in a relational database5. have an understanding of how to carry out QSAR analysis on chemical compounds6. be able to reduce a 3-dimensional structure to a 2-D format				

Kaynaklar (References) <i>En önemli 5 adedini belirtiniz</i>	1) David Young (2009), Computational Drug Design: A Guide for Computational and Medicinal Chemists, Wiley. 2) Kenneth M. Merz, Jr., Dagmar Ringe, Charles H. Reynolds (2010), Drug Design: Structure- and Ligand-Based Approaches, Cambridge University Press. 3) Matthias Dehmer, Kurt Varmuza, Danail Bonchev, Frank Emmert-Streib. (2012), Statistical Modelling of Molecular Descriptors in QSAR/QSPR, Wiley-Blackwell.		
Ödevler ve Projeler (Homework & Projects)	6 Ödev 6 Homeworks		
Laboratuvar Uygulamaları (Laboratory Work)			
Bilgisayar Kullanımı (Computer Use) <i>Dersinizde kullnadiğiniz yazılım ve simulasyon programları yazılabilir.</i>	Autodock Autodock		
Diğer Uygulamalar (Other Activities)			
Başarı Değerlendirme Sistemi (Assessment Criteria)	Faaliyetler (Activities)	Adedi* (Quantity)	Değerlendirmedeki Katkısı, % (Effects on Grading, %)
	Yıl İçi Sınavları (Midterm Exams)	1	20
	Kısa Sınavlar (Quizzes)		
	Ödevler (Homework)	6	30
	Projeler (Projects)	1	10
	Dönem Ödevi/Projesi (Term Paper/Project)		
	Laboratuvar Uygulaması (Laboratory Work)		
	Diğer Uygulamalar (Other Activities)		
	Final Sınavı (Final Exam)	1	40

*Yukarıda Belirtilen Sayılar Minimum Olup Yerine Getirilmesi Zorunludur.

DERS PLANI

Hafta	Konular	Dersin Çıktıları
1	İlaç Keşfi ve İlaç Tasarımı	1,3
2	İstatistiksel Regresyon ve Kısmi En Küçük Kareler Analizi	1
3	Konformasyonel Analiz ve Moleküler Yüzeyler	1,2
4	Lipofilisite ve Partisyon Katsayısı (Log P)	1,2
5	İlaç Tasarımında Kullanılan Hesaplama Yöntemleri	1,2
6	Veritabanları	1,4
7	2D Nicel Yapı Aktivite İlişkileri	1,2,4,5
8	3D-QSAR Karşılaştırmalı Moleküler Alan Analizi (CoMFA)	1,3,4,5,6
9	3D-QSAR: Karşılaştırmalı Moleküler Benzerlik Analizi (CoMSIA)	1,3,4,5,6
10	Kenetlenme Yöntemleri: Arama Algoritmaları, Puanlama, Sonuçların Doğrulanması	1,2,3,4
11	Sanal Tarama	1,2,3,4
12	Homoloji Model Yapılanması	1,2,3,4
13	Farmakofor Modellemesi, Biçim Bazlı Yöntemler	1,2,3,4
14	AUTODOCK ile Protein-Ligant Kenetlenmesi	1,2,3,4

COURSE PLAN

Weeks	Topics	Course Outcomes
1	Drug Discovery and Drug Design	1,3
2	Statistical Basis of Regression and Partial Least-Squares Analysis	1
3	Conformational analysis, Molecular Surfaces	1,2
4	Lipophilicity and Partition Coefficient (Log P)	1,2
5	Computational Methods used in Drug Design	1,2
6	Databases	1,4
7	2D-Quantitative Structure-Activity Relationships (2D-QSAR)	1,2,4,5,6
8	3D-QSAR: Comparative Molecular Field Analysis (CoMFA)	1,3,4,5,6
9	3D-QSAR: Comparative Molecular Similarity Analysis (CoMSIA)	1,3,4,5,6
10	Docking Methods: Search Algorithms, Scoring, Validation of Results	1,2,3,4
11	Virtual Screening	1,2,3,4
12	Homology Model Building	1,2,3,4
13	Pharmacophore Modelling, Shape Based Methods	1,2,3,4
14	Protein-Ligand Docking with AUTODOCK	1,2,3,4

NOT-1: Ders planı, sadece hafta bazında işlenen ders konularını içermeli, ara ve kısa sınavlar ders planlarına yazılmamalıdır.

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>).			
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 çözümünü 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>).		x	
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
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>).		x	
xii.	Alanı ile ilgili konularda strateji, politika ve uygulama planları geliştirebilme ve elde edilen sonuçları, kalite süreçleri çerçevesinde değerlendirebilme (<i>Alana Özgü Yetkinlik</i>).			
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>).			
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>).		x	
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
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>).		x	
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>).			
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-2: Ders ile ilgisi olmayan çıktıların boş bırakılması gerekmektedir.

<u>Düzenleyen (Prepared by)</u>		<u>İmza (Signature)</u>
---------------------------------	--	-------------------------