

İTÜ
LİSANSÜSTÜ DERS KATALOG FORMU
(GRADUATE COURSE CATALOGUE FORM)

Dersin Adı		Course Name		
Moleküler Dinamik Simülasyonları İçin İleri Analiz Yöntemleri		Advanced Analysis Techniques for Molecular Dynamics Simulations		
Kodu (Code)	Yarıyılı (Semester)	Kredisi (Local Credits)	AKTS Kredisi (ECTS Credits)	Ders Seviyesi (Course Level)
BLU604 / BLU604E	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>MD simülasyonlarının biyomembran dinamik ve fonksiyon çalışmalarındaki uygulamaları. NAMD programı ile MD simülasyonu gerçekleştirme. VMD: Bir MD simülasyonu analiz programı. Temel özelliklerin zaman serileri analizleri: Hidrojen bağı, ikincil yapı, açı ve uzaklık. Kök ortalama kare sapması (RMSD) ve kök ortalama kare dalgalanma (RMSF) hesapları. Radyal dağılım fonksiyonu (RDF) ve dönme yarı çapı hesapları. MD simülasyon yörüngelerinin ana bileşenler analizleri. Çapraz korelasyon analizi. MD simülasyonlarının esnek ağ analizleri. Biyomembran ve membran proteinlerinin MD simülasyonlarını analiz metotları. Yoğunluk ve difüzyon hesapları. MD yörüngelerinin etkileşim enerji hesapları. Markov hal modelleri kullanarak MD simülasyon analizleri-1. Markov hal modelleri kullanarak MD simülasyon analizleri-2</p> <p>Applications of MD Simulations in biomembrane dynamics and function studies . Performing MD Simulations with NAMD program. VMD: a MD simulation analysis program. Time series analysis of basic features: Hydrogen bond, secondary structure, angle and distance. Root Mean Square Deviation (RMSD) and Root Mean Square Fluctuation (RMSF) calculations. Radial distribution function (RDF) and radius of gyration calculations. Principal component analysis of MD trajectory. Cross-correlation analysis. Elastic Network analysis of MD trajectories. Methods for analyzing simulations of Biomembranes and Membrane proteins. Density and diffusion calculations. Interaction Energy calculations of MD trajectories. MD simulation analysis using Markov State models-1. MD simulation analysis using Markov State models-2</p>			
Dersin Amacı (Course Objectives)	<p>1) MD simülasyonlarının biyomembran uygulamalarının gösterilmesi.</p> <p>2) İleri MD simülasyon yörünge analiz metotlarının öğretilmesi.</p> <p>3) MD simülasyonlarının sonuçlarının analiz etmek için geliştirilmiş program veya kodların kullanımlarının öğretilmesi.</p> <p>1) Teaching applications of MD simulation in biomembrane applications</p> <p>2) Teaching advanced methods for analyzing MD simulation trajectories</p> <p>3) Teaching usage of programs and codes developed for analyzing MD simulation results</p>			
Dersin Öğrenme Çıktıları (Course Learning Outcomes)	<p>Bu dersi başarıyla tamamlayan öğrenciler;</p> <p>1) MD simülasyonlarının biyomembran dinamik ve fonksiyon çalışmalarındaki uygulamaları</p> <p>2) MD simülasyon yörüngeleri analizi için ileri metotlar</p> <p>3) MD simülasyon sonuçlarının analizi için geliştirilmiş programların ve kodların kullanımı</p> <p>4) Biyomembran ve membran proteinleri simülasyonlarının analiz metotları</p> <p>5) Markov modelleri kullanarak MD simülasyon analizleri gerçekleştirme hakkında bilgi sahibi olacaklardır.</p> <p>Students who pass the course will have knowledge on:</p> <p>1) Applications of MD simulations in biomembrane dynamics and function studies</p> <p>2) Advance methods for analyzing MD simulation trajectories</p> <p>3) The usage of analysis programs and codes developed for MD simulation results</p> <p>4) Analysis methods for the simulations of biomembranes and Membrane proteins</p> <p>5) Performing analysis of MD simulations using Markov models</p>			

Kaynaklar (References)	<p>1) Bowman, Gregory R.; Pande, Vijay S.; Noé, Frank. <i>An Introduction to Markov State Models and Their Application to Long Timescale Molecular Simulation</i>, Springer, 2013</p> <p>2) Luca Monticelli and Emppu Salonen. <i>Biomolecular simulations</i>, Humana Press, 2013</p> <p>3) Thomas Jue, <i>Biomedical Applications of Biophysics-Handbook of Modern Biophysics</i>. Humana Press.2010</p>		
Ödevler ve Projeler (Homework & Projects)	4 Ödev ve 1 Dönem Proje		
Laboratuvar Uygulamaları (Laboratory Work)	--		
Bilgisayar Kullanımı (Computer Use)	VMD,NAMD,CPPTRAJ		
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)	4	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	MD simülasyonlarının biyomembran dinamik ve fonksiyon çalışmalarındaki uygulamaları	1
2	NAMD programı ile MD simülasyonu gerçekleştirme	1
3	VMD: Bir MD simülasyonu analiz programı	3
4	Temel özelliklerin zaman serileri analizleri: Hidrojen bağı, ikincil yapı, açı ve uzaklık	2,3
5	Kök ortalama kare sapması (RMSD) ve kök ortalama kare dalgalanma (RMSF) hesapları	2,3
6	Radyal dağılım fonksiyonu (RDF) ve dönme yarı çapı hesapları	2,3
7	MD simülasyon yörüngelerinin ana bileşenler analizleri	2,3
8	Çapraz korelasyon analizi	2,3
9	MD simülasyonlarının esnek ağ analizleri	2,3
10	Biyomembran ve membran proteinlerinin MD simülasyonlarını analiz metotları	2,3,4
11	Yoğunluk ve difüzyon hesapları	2,3
12	MD yörüngelerinin etkileşim enerji hesapları	2,3
13	Markov hal modelleri kullanarak MD simülasyon analizleri-1	2,3,5
14	Markov hal modelleri kullanarak MD simülasyon analizleri-2	2,3,5

COURSE PLAN

Weeks	Topics	Course Outcomes
1	Applications of MD Simulations in biomembrane dynamics and function studies	1
2	Performing MD Simulations with NAMD program	1
3	VMD: a MD simulation analysis program	3
4	Time series analysis of basic features: Hydrogen bond, secondary structure, angle and distance	2,3
5	Root Mean Square Deviation (RMSD) and Root Mean Square Fluctuation (RMSF) calculations	2,3
6	Radial distribution function (RDF) and radius of gyration calculations	2,3
7	Principal component analysis of MD trajectory	2,3
8	Cross-correlation analysis	2,3
9	Elastic Network analysis of MD trajectories	2,3
10	Methods for analyzing simulations of Biomembranes and Membrane proteins	2,3,4
11	Density and diffusion calculations	2,3
12	Interaction Energy calculations of MD trajectories	2,3
13	MD simulation analysis using Markov State models-1	2,3,5
14	MD simulation analysis using Markov State models-2	2,3,5

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).			
iii.	Bilişim Uygulamaları alanında edindiği uzmanlık düzeyindeki kuramsal ve uygulamalı bilgileri kullanabilme (beceri).			X
iv.	Bilişim Uygulamaları alanında edindiği bilgileri farklı disiplin alanlarından gelen bilgilerle bütünleştirerek yorumlayabilme ve yeni bilgiler oluşturabilme (beceri).			
v.	Bilişim Uygulamaları alanı ile ilgili karşılaşılan sorunları araştırma yöntemlerini kullanarak çözümleyebilme (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 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).			X
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).			

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).			
iii.	The ability to use the expert-level theoretical and practical knowledge acquired in Applied Informatics area (skill).			X
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).			X
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>
	14.03.2017	