

2023 - 2024 Eğitim Öğretim Yılı
HESAPLAMALI BİYOFİZİĞE GİRİŞ
Syllabus

Dersin Tanımı					
Adı	Kodu	Yarıyıl	T+U Saat	Kredi	AKTS
HESAPLAMALI BİYOFİZİĞE GİRİŞ	BME3249570	Bahar Dönemi	3+0	3	6
Ön Koşul Dersleri					
Önerilen Seçmeli Dersler					
Dersin Dili	İngilizce				
Dersin Seviyesi	Lisans				
Dersin Türü	Programa Bağlı Seçmeli				
Dersin Koordinatörü	Doç.Dr. Özge ŞENSOY				
Dersi Verenler	Doç.Dr. Özge ŞENSOY				
Dersin Yardımcıları					
Dersin Amacı	Bu dersin amacı, moleküler modelleme, moleküler doklama, moleküler dinamik simülasyon tekniklerini kullanarak, ilgili biyolojik problemleri çözebilmesini kazandırmaktır.				
Dersin İçeriği	Bu ders; Kuantum Kimyasına Giriş ,Kuantum Kimyasal Hesaplamalarda Kullanılan Metotlara Genel Bakış,İstatistiksel Mekaniğe Giriş ,Moleküler Dinamik ,Kuvvet Alanları ,Moleküler Dinamikte Kullanılan Su Modelleri,Elektrostatik Kuvvetlerin Modellenmesi ,Serbest Enerji Hesapları ,Kuvvetlendirilmiş Örnekleme teknikleri ,Hibrid Simülasyon Metotları: QM/MM Hesaplamalar ,Coarse-grained potansiyeller ,Moleküler Doklama ,Yukardaki tekniklerin biyolojik problemlere uygulanması - I ,Yukardaki tekniklerin biyolojik problemlere uygulanması –II ; konularını içermektedir.				
Dersin Öğrenme Kazanımları			Öğretim Yöntemleri	Ölçme Yöntemleri	
Öğrenci, moleküler mekanik ve kuantum mekaniği yöntemlerini karşılaştırmalı olarak tanımlar.			10, 12, 13, 20, 21, 3, 4	F	
Moleküler dinamik simülasyonlarında kullanılan kuvvet alanları, su modellerini karşılaştırmalı olarak analiz eder.			10, 12, 13, 14, 21, 3, 4		
Yüksek başarımlı hesaplama kaynaklarını kullanarak simülasyon yapar.			21, 6		
Moleküler dinamik simülasyonu yapar ve sonuçlarını analiz eder.			11, 13, 21		
Öğretim Yöntemleri	10: Tartışma Yöntemi, 11: Gösterip Yapma Yöntemi, 12: Problem Çözme Yöntemi, 13: Örnek Olay Yöntemi, 14: Bireysel Çalışma Yöntemi, 20: Tersine Beyin Fırtınası Tekniği, 21: Benzetim/Simülasyon Tekniği, 3: Probleme Dayalı Öğrenme Modeli, 4: Sorgulama Temelli Öğrenme Modeli, 6: Deneyimle Öğrenme Modeli				
Ölçme Yöntemleri	F: Proje Görevi				
Ders Akışı					
Sıra	Konular	Ön Hazırlık			
1	Kuantum Kimyasına Giriş				
2	Kuantum Kimyasal Hesaplamalarda Kullanılan Metotlara Genel Bakış				
3	İstatistiksel Mekaniğe Giriş				
4	Moleküler Dinamik				
5	Kuvvet Alanları				
6	Moleküler Dinamikte Kullanılan Su Modelleri				
7	Elektrostatik Kuvvetlerin Modellenmesi				
8	Serbest Enerji Hesapları				
9	Kuvvetlendirilmiş Örnekleme teknikleri				
10	Hibrid Simülasyon Metotları: QM/MM Hesaplamalar				
11	Coarse-grained potansiyeller				
12	Moleküler Doklama				
13	Yukardaki tekniklerin biyolojik problemlere uygulanması -I				
14	Yukardaki tekniklerin biyolojik problemlere uygulanması –II				
Değerlendirme Yöntemleri		Sınava Katkısı			
Ara Sınav		30			
Genel Sınav		70			
Kaynaklar					
Frenkel and Smit, Understanding Molecular Simulation : From Algorithms to Applications, , Academic Press, Computational Science Series Sunum					