

Kurs Hakkında;

Günümüzde hızlı bir gelişim gösteren yapay zekâ yöntemleriyle güç kazanan moleküler dinamik yöntemler karmaşık süreçleri keşfetmemiz ve anlamamız için fırsatlar sunmaktadır.

Kursumuz, protein yapıları ve özelliklerinin tahmini ve incelenmesi için kullanılan silico yöntemlerine ilişkin genel bir bakış sunacaktır. Bunun yanında, kurs programı yapısal verilerden fonksiyon belirlenmesine yönelik yöntemlerin yanında ligand-protein etkileşimini ve deneysel yapısal verilerle yönlendirilen moleküler dinamik tekniklerini çalışabilmek için moleküler kenetlemeyle ilgili oturumlardan oluşmaktadır. Teorik oturumlar sırasında katılımcılar, moleküler dinamiklerin temelleri ve hesaplamalı modellemenin temel ilkeleri hakkında sağlam bir temel kazanacaklardır.

Teorik dersleri destekleyen pratik oturumlar, katılımcıların edindikleri bilgileri doğrudan uygulamalarına olanak tanıyarak öğrenme deneyimini geliştirecektir. Rehber eşliğinde simülasyon ve modelleme aktiviteleri katılımcılara biyomoleküler yapıların analizi ve manipülasyonu konusundaki becerilerini geliştirme fırsatı tanıyacaktır.

Kursu tamamladıktan sonra katılımcılar hem teorik bilgiyi hem de pratik becerileri çok çeşitli araştırma alanlarına ve biyoteknolojik uygulamalara etkili bir şekilde uygulama konusunda bilgi ve beceri sahibi olacaklardır. İlaç tasarımı, protein mühendisliği veya temel biyolojik çalışmalar yanında, kurs yapısal biyoloji alanındaki karmaşık zorluklarla başa çıkmaları için katılımcılara gerekli temel becerileri kazandırmayı hedeflemektedir.

PROGRAM

- Temel Linux -Server Bilgileri (Online)
- Moleküler Modellemenin Temelleri
 - o Moleküler Teoriler -Teorik-
 - o Molekülerin Farklı Temsilleri (smile, 1D, 2D ve 3D)- Uygulama-
 - o Biyomolekül Veri bankaları -Uygulama-
 - o Yapı kalitesi doğrulama ve değerlendirme -Uygulama-
- Makine Öğrenme ile Küçük Moleküllerin Özelliklerinin (biyo-aktivite, toksisite vs.) Tahmini (QSAR)
 - o Makine Öğrenme Algoritmaları -Teorik-
 - Veri Setleri ve Moleküler Tanımlayıcıların Belirlenmesi -Uygulama-
 - Değişken seçimi -Uygulama-
 - Model Oluşturulması -Uygulama-
 - Modellerin Validasyonu ve Yorumlanması -Uygulama-
- Moleküler Kenetlenme (Docking)
 - o Moleküler Kenetlemeye Başlangıç
 - Skorum Fonksiyonları ve Docking Programları -Teorik-
 - Ligand ve Proteinlerin Hazırlanması -Uygulama-
 - Yürütme ve Sonuçların Yorumlanması -Uygulama-
- Biyomoleküllerin Moleküler Dinamik Simülasyonları
 - o Moleküler Dinamik Simülasyonların (MDS) Teorik Temelleri -Teorik-
 - o GROMACS ile MDS Uygulamaları
 - Girdi Dosyalarının Tanınması ve Hazırlanması -Uygulama-
 - Minimizasyon ve Dengeleme -Uygulama-
 - Yürütme ve Çıktı Dosyaları -Uygulama-
 - o MDS Analizleri -Teorik-
 - Temel MD Yörünge Analizleri -Uygulama-
 - İleri MD Yörünge Analizleri (Betweeness Centrality, Residue Interaction Network, Mutual Information Analysis vs.) -Uygulama-
- Genel Değerlendirme ve Tartışma

13.Kasım.2024	Öğleden Sonra
14.00-14.50	Moleküler Teoriler
15.00-15.50	Molekülerin Farklı Temsilleri (smile, 1D, 2D ve 3D)
16.00-16.50	Biyomolekül Veri Bankaları
17.00-17.50	Yapı kalitesi doğrulama ve değerlendirme
14.Kasım.2024	Sabah
09.00-09.50	Makine Öğrenme Algoritmaları
10.00-10.50	Makine Öğrenme Algoritmaları
11.00-11.50	Veri Setleri ve Moleküler Tanımlayıcıların Belirlenmesi
12.00-12.50	Veri Setleri ve Moleküler Tanımlayıcıların Belirlenmesi
14.Kasım.2024	Öğleden Sonra
14.00-14.50	Değişken seçimi ve Model Oluşturulması
15.00-15.50	Değişken seçimi ve Model Oluşturulması
16.00-16.50	Modellerin Validasyonu ve Yorumlanması
17.00-17.50	Modellerin Validasyonu ve Yorumlanması
15.Kasım.2024	Sabah
09.00-09.50	Moleküler Kenetlemeye Başlangıç
10.00-10.50	Skorlama Fonksiyonları ve Docking Programları
11.00-11.50	Ligand ve Proteinlerin Hazırlanması
12.00-12.50	Yürütme ve Sonuçların Yorumlanması
15.Kasım.2024	Öğleden Sonra
14.00-14.50	Moleküler Dinamik Simülasyonların (MDS) Temelleri
15.00-15.50	Moleküler Dinamik Simülasyonların (MDS) Temelleri
16.00-16.50	Girdi Dosyalarının Tanınması ve Hazırlanması
17.00-17.50	Girdi Dosyalarının Tanınması ve Hazırlanması
16.Kasım.2024	Sabah
09.00-09.50	Girdi Dosyalarının Tanınması ve Hazırlanması
10.00-10.50	Minimizasyon ve Dengeleme
11.00-11.50	Minimizasyon ve Dengeleme
12.00-12.50	Minimizasyon ve Dengeleme
16.Kasım.2024	Öğleden Sonra
14.00-14.50	Yürütme ve Çıktı Dosyaları
15.00-15.50	Yürütme ve Çıktı Dosyaları
16.00-16.50	Yürütme ve Çıktı Dosyaları
17.00-17.50	Yürütme ve Çıktı Dosyaları
17.Kasım.2024	Sabah
09.00-09.50	MDS Analizleri
10.00-10.50	Temel MD Yörünge Analizleri
11.00-11.50	İleri MD Yörünge Analizleri
12.00-12.50	İleri MD Yörünge Analizleri

Eğitici Kadrosu :

- Moleküler Modelleme ve QSAR
Prof. Dr. Erol EROĞLU, Dr. Öğr. Üyesi Nuri YORULMAZ, Öğr. Gör. Dr. Murat YAŞAR
- Docking ve MDS
Prof. Dr. Nazmi YARAŞ, Öğr. Gör. Dr. Murat YAŞAR, Arş. Gör. Dr. Ekrem YAŞAR
- MDS Analiz
Doç. Dr. Mustafa TEKPINAR, Arş.Gör Dr. Ekrem YAŞAR

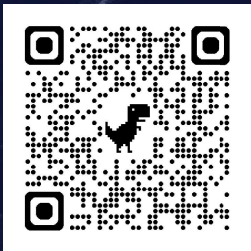
Biyomoleküler Modelleme Çalıştayı

YAPI-FONKSİYON İLİŞKİSİ VE DİNAMİK SIMULASYON

13-17 Kasım 2024, Kaleiçi-ANTALYA

KONULAR :

- Temel Linux -Server Bilgileri (Online)
- Moleküler Modellemenin Temelleri
- Makine Öğrenme ile Küçük Moleküllerin Özelliklerinin Tahmini (QSAR)
- Moleküler Kenetlenme (Docking)
- Biyomoleküllerin Moleküler Dinamik Simülasyonları



Kayıt:

<https://forms.gle/jefLmeoX8hmNzsSJ9>

Bilgi ve İletişim:

akdenizsimulasyon@gmail.com

Kontenjan 24 kişi ile sınırlıdır.

Düzenleyenler

Prof. Dr. Nazmi YARAŞ (Koordinatör)
Prof. Dr. Erol EROĞLU
Doç. Dr. Mustafa TEKPINAR
Dr. Öğr. Üyesi Nuri Yorulmaz
Dr. Öğr. Üyesi Mehmet Murat YAŞAR
Arş. Gör. Dr. Ekrem YAŞAR

Konaklama ve Kurs Yeri:

KARYATİT OTEL

[Kılınçarslan, Kadir Paşa Sk. No:7, 07100 Muratpaşa/Antalya](#)