

İTÜ
DERS KATALOG FORMU

Dersin Adı				Course Name		
Kimyada Yapay Zeka ve Makine Öğrenimi				Artificial Intelligence and Machine Learning in Chemistry		
Kodu (Code)	Yarıyılı (Semester)	Kredisi (Local Credits)	AKTS Kredisi (ECTS Credits)	Ders Uygulaması, Saat/Hafta (Course Implementation, Hours/Week)		
				Ders (Theoretical)	Uygulama (Tutorial)	Laboratuvar (Laboratory)
MYZ311E	5	3	6	3	-	-
Bölüm / Program (Department/Program)		Kimya Chemistry				
Dersin Türü (Course Type)		Seçmeli (Elective)		Dersin Dili (Course Language)		İngilizce (English)
Dersin Önkoşulları (Course Prerequisites)		BİL 100E MIN DD veya KİM 271 MIN DD				
Dersin mesleki bileşene katkısı, % (Course Category by Content, %)		Temel Bilim (Basic Sciences)	Temel Mühendislik (Engineering Science)	Mühendislik Tasarım (Engineering Design)	İnsan ve Toplum Bilim (General Education)	
		% 60	% 20	% 20		
Dersin İçeriği (Course Description)		Yapay zeka ve makine öğrenmesinin tanımlanması; makine öğrenmesindeki temel kavramların açıklanması; yapay sinir ağları ve derin öğrenme yöntemlerinin tanıtılması; istatistiksel olarak makine öğrenmesi modellerinin performanslarının değerlendirilmesi; kimyasal verilerin bilgisayarlarda işlenmesi ve tanımlanması; makine öğrenmesinin kimyasal sentezde uygulamaları; makine öğrenmesi ile materyal tasarımı; ilaç keşfi için makine öğrenmesi uygulamaları; hesaplamalı kimya ve makine öğrenmesi yöntemlerinin birleştirilmesi; python ile pratik uygulamalar Defining artificial intelligence and machine learning; explaining the basic concepts in machine learning; introducing artificial neural networks and deep learning methods; statistically evaluating the performance of machine learning models; handling and representation of chemical data on computers; applications of machine learning in chemical synthesis; material design with machine learning; machine learning applications for drug design; combining computational chemistry and machine learning methods; practical applications with python				
Dersin Amacı (Course Objectives)		- Kimyada yaygın olarak kullanılan farklı türdeki veri kümelerini kullanımı ve görselleştirilmesi - Makine öğrenmesi yöntemlerinin kimyanın farklı alanlarında nasıl kullanıldığının örneklerle açıklanması - Pratik uygulamalar ile makine öğrenmesi modellerinin kurulması, test edilmesi ve istatistiksel olarak değerlendirilmesi - Handle and visualize different types of datasets common in Chemistry - Explaining with examples applications of machine learning in different areas of chemistry - Developing, testing, and statistically evaluating machine learning models by carrying out practical applications				
Dersin Öğrenme Çıktıları		Bu dersi başarıyla tamamlayan yüksek lisans/doktora öğrencileri aşağıdaki konularda bilgi, beceri ve yetkinlik kazanırlar; - Yapay zeka, makine öğrenmesi, derin öğrenme kavramlarını ve aralarındaki ilişkileri açıklayabilmek - Geleneksel makine öğrenmesi yöntemlerinin örneklerle tanımlayabilmek - Yapay sinir ağlarının temellerini ve işleyiş prensiplerini kavramak - Makine öğrenimi yaklaşımlarında kullanılacak kimyasal verileri işleyebilmek ve molekülleri bilgisayarların anlayabileceği şekilde tanımlayabilmek - Makine öğrenmesi modellerinin performanslarını istatistiksel olarak değerlendirebilmek - Kimyasal sentezde ve malzeme tasarımında makine öğrenimi yaklaşımlarının kullanımını örneklendirebilmek - Makine öğrenmesi yaklaşımlarının ilaç tasarımındaki yeri ve önemini anlamak - Hesaplamalı kimya yöntemleri ve makine öğreniminin birlikte nasıl kullanılabileceğini örneklerle açıklayabilmek - Python programlama dilini kullanarak makine öğrenmesi modelleri kurabilme ve test edebilmek				

Course Learning Outcomes)	M.Sc./Ph.D. students who successfully pass this course gain knowledge, skill and competency in the following subjects; 1. Explain the concepts of artificial intelligence, machine learning, deep learning and the relationship between them 2. Describe the traditional machine learning methods with examples 3. Understand the basics and operating principles of artificial neural networks 4. Process chemical data to be used in machine learning approaches and represent molecules in a way that computers can understand 5. Statistically evaluate the performance of machine learning models 6. Exemplify the usage of machine learning approaches in chemical synthesis and material design 7. Comprehend the place and importance of machine learning approaches in drug design 8. Explain with examples how computational chemistry methods and machine learning can be used together 9. Have the ability to build and test machine learning models using the Python programming language
----------------------------------	---

Ders Kitabı (Textbook)	• Leach A., Gillet V., <i>An Introduction to Chemoinformatics</i>, Springer (2007) • Cartwright H., <i>Machine learning in chemistry: The impact of artificial intelligence</i>, Royal Society of Chemistry (2020) • Gasteiger J., Engel T., <i>Chemoinformatics – A Textbook</i>, Wiley-VCH (2003)		
Diğer Kaynaklar (Other References)	• Brown N., <i>In Silico Medicinal Chemistry: Computational Methods To Support Drug Design</i>, Royal Society of Chemistry (2016) TeachOpenCADD platform (https://projects.volkamerlab.org/teachopencadd/)		
Ödevler ve Projeler (Homework & Projects)	Her bir öğrenciye ayrı ayrı dönem sonuna kadar yapması için bir proje verilecektir. Each student will be given a project to complete until the end of the semester.		
Laboratuvar Uygulamaları (Laboratory Work)	- -		
Bilgisayar Kullanımı (Computer Use)	Pratik uygulamalar için öğrencilerin yanlarında kişisel bilgisayar veya tablet getirmesi gerekmektedir. Students are expected to bring a personal computer or tablet for practical applications.		
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)		
	Projeler (Projects)	1	30
	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	Yapay zeka ve makine öğrenmesine giriş	1
2	Geleneksel makine öğrenmesi yöntemleri	1,2
3	Derin öğrenme ve yapay sinir ağları yöntemleri	1,3
4	Kimyasal veri ve tanımlayıcılar	4
5	Modellerin istatistiksel olarak değerlendirilmesi	5
6	Kimyasal sentezde makine öğrenmesi uygulamaları	6
7	Makine öğrenmesi ile malzeme tasarımı	6
8	İlaç keşfi ve tasarımı için makine öğrenmesi uygulamaları	7
9	Makine öğrenmesi ile hesaplamalı kimya yöntemlerinin birleştirilmesi	8
10	Uygulama: Jupyter Notebook Kullanım Temelleri	9
11	Uygulama: Veri toplanması ve işlenmesi	4,9
12	Uygulama: RDKit ile moleküllerin temsili	4,9
13	Uygulama: Sklearn ile makine öğrenmesi modellerinin oluşturulması ve test edilmesi	5,9
14	Uygulama: Keras ile derin öğrenme modellerinin oluşturulması ve test edilmesi	5,9

COURSE PLAN

Weeks	Topics	Course Outcomes
1	Introduction to artificial intelligence and machine learning	1
2	Traditional machine learning approaches	1,2
3	Deep learning and artificial neural networks	1,3
4	Chemical data and descriptors	4
5	Statistical evaluation of models	5
6	Machine learning in chemical synthesis	6
7	Material design by machine learning	6
8	Machine learning for drug discovery and design	7
9	Combining machine learning and computational chemistry	8
10	Applications: Basics of Jupyter Notebook	9
11	Applications: Data acquisition and handling	4,9
12	Applications: Molecular representation by RDKit	4,9
13	Applications: Building and testing machine learning models with Sklearn	5,9
14	Applications: Building and testing deep neural networks with Keras	5,9

Dersin Kimya Programıyla İlişkisi

	Programın mezuna kazandıracığı bilgi ve beceriler (programa ait çıktılar)	Katkı Seviyesi		
		1	2	3
a	Kimyanın temel alanları olan inorganik, organik, fiziksel ve analitik kimyanın önemli kavramlarını, teorik esaslarını ve ilgili konulardaki deneysel bulguları kavrama becerisini edinmeleri			✓
b	Öğrencilerin edindikleri teorik ve pratik bilgileri kimya ya da kimya içeren multidisipliner alanlara veya kimya bazlı endüstrilerde uygulayabilme yeteneği edinmeleri			✓
c	Deneysel çalışmaları tasarlama, veri analizi yapma, klasik teknikleri ve modern cihazları kullanma becerisini edinmeleri			
d	Kimya ve kimya ile ilgili alanlar hakkında araştırma yapma ve bilgiye ulaşma için modern kütüphane kullanma becerisi edinmeleri			✓
e	Kimyasal simülasyon ve hesaplama, veri elde etme ve veritabanı kullanımı için bilgisayar kullanım becerisi edinmeleri			✓
f	Problemleri çözme, kritik düşünme ve analitik çözümleme için matematik, fizik ve biyoloji temel bilgilerini kimyasal sistemlere uygulama becerisi edinmeleri			✓
g	Hem sınıfta hemde laboratuvarında etkin biçimde grup çalışması yapma, liderlik ve grup üyesi olarak çalışma yeteneği edinmeleri			✓
h	Hem Türkçe hem de İngilizce dillerinde yazılı ve sözlü iletişim kurma araştırma yapma, araştırma raporu yazma, sözlü ve poster sunumu yapma becerisi edinmeleri		✓	
i	Kimyasal malzemelerin güvenli kullanımı ve uzaklaştırılmaları için modern prosedür ve düzenlemeleri bilmeleri			
j	Etik davranışın kişisel ve profesyonel yaşamın tüm alanlarındaki önemini anlayabilmeleri		✓	

1: Az, 2. Kısmi, 3. Tam

Relationship between the Course and Chemistry Curriculum

	Program Outcomes	Level of Contribution		
		1	2	3
a	An ability to understand the major concepts, theoretical principles and experimental findings in the main areas of chemistry: organic, inorganic, analytical, and physical.			✓
b	To give the students a core of theoretical and practical knowledge and the ability to apply it to further studies in Chemistry or multidisciplinary areas involving Chemistry or employment in Chemistry based industry.			✓
c	An ability to design and conduct experiments, as well as to analyze and interpret data, to use modern instrumentation and classical techniques.			
d	An ability to use modern library searching and retrieval methods to obtain information about chemistry and chemistry-related areas.			✓
e	An ability to use computers for chemical simulation and computation, data acquisition, and database usage.			✓
f	An ability to apply and integrate basic knowledge from mathematics, physics and biology to chemistry for solutions of problems, critical thinking and analytical reasoning			✓
g	An ability to work in a group, be effective leaders as well as effective team members.			✓
h	An ability to communicate effectively orally and in writing in Turkish and in English languages. An ability to research chemistry topics, write research reports, and give oral and poster presentations.		✓	
i	To train students in the aspect of modern chemical safety regulations and disposal techniques.			
j	An understanding and appreciation the importance of ethical behavior in all aspects of personal and professional life .		✓	

1: Little, 2. Partial, 3. Full

<u>Düzenleyen (Prepared by)</u> Dr. Öğr. Üyesi Berna Doğan	<u>Tarih (Date)</u> Son güncelleme 26.04.2024	<u>İmza (Signature)</u>
---	---	--------------------------------