Biyomoleküllerin Moleküler Dinamik Simülasyonları: Gromacs ile Pratik Bir Yaklaşım

Doç. Dr. Mustafa TEKPINAR

2025-09-08

Table of contents

1	Moleküler Dinamik Simülasyonları	3
2	Hoşgeldiniz	4
3	Moleküler Dinamik Simülasyonlarına Giriş 3.1 Basit bir Python örneği	5
4	MD Simülasyonları	6
5	Kod Örnekleri	7
6	Kaynaklar	8

1 Moleküler Dinamik Simülasyonları

2 Hoşgeldiniz

Bu kitapta proteinlerin moleküler dinamik (MD) simülasyonlarını ele alacağız.

Kitabı PDF olarak indir: Moleküler Dinamik Simülasyonları (PDF)

Başlamak için Giriş bölümüne göz atın.

3 Moleküler Dinamik Simülasyonlarına Giriş

Bu kitapta moleküler dinamik (MD) simülasyonlarını **Türkçe** olarak anlatacağız.

3.1 Basit bir Python örneği

```
import numpy as np
v = np.random.normal(0, 1, size=1000)
print("Ortalama hiz:", np.mean(v))
```

Ortalama hiz: -0.02255003776577129

4 MD Simülasyonları

Bu bölümde moleküler dinamik simülasyonlarının temel kavramlarını ele alacağız.

5 Kod Örnekleri

Bu bölümde Python ve Bash kod örnekleri yer alacak.

6 Kaynaklar

- Frenkel, D., & Smit, B. (2001). Understanding Molecular Simulation.
- Rapaport, D. C. (2004). The Art of Molecular Dynamics Simulation.