

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	5
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 moleküler dinamik (MD) simülasyonlarını Türkçe olarak anlatacağız. 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 hız:", np.mean(v))
```

Ortalama hız: 0.030833317604948833

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*.