

Proteinlerin Moleküler Dinamik Simölasyonları

Doç. Dr. Mustafa TEKPINAR

2025-09-08

Table of contents

1	Önsöz	1
2	Teorik Temeller	3
2.1	Basit bir Python örneği	3
3	MD Simülasyonları	5
4	MD Simülasyon Analizleri	7
5	Kaynaklar	9

1 Önsöz

Bu kitapta proteinlerin moleküler dinamik (MD) simülasyonlarını ele alacağız. Kitap kısa bir teorik bilgiler bölümü ile başlayacak. Kitapta ağırlıklı olarak MD simülasyonlarının açık kaynak kodlu Gromacs paketi ile yapılması hedefleniyor. Teorik temeller bölümünden sonra MS simülasyonlarına hazırlık aşamaları anlatılacaktır. Son olarak ise MD simülasyonu analiz teknikleri bir bölüm olarak sunulacaktır.

Kitabı PDF olarak indir: Moleküler Dinamik Simülasyonları (PDF)

Başlamak için Giriş bölümüne göz atın.

2 Teorik Temeller

Bu bölümde moleküler dinamik simülasyonlarının temel kavramlarını ele alacağız.

2.1 Basit bir Python örneği

```
import numpy as np

v = np.random.normal(0, 1, size=1000)
print("Ortalama hız:", np.mean(v))
```

Ortalama hız: 0.00404935919127462

3 MD Simölasyonları

Bu bölümde moleküler dinamik simölasyonlarının temel kavramlarını ele alacağız.

4 MD Simülasyon Analizleri

Bu bölümde Python ve Bash kod örnekleri yer alacak.

5 Kaynaklar

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

