

# Biyolojik Sistemlerde



# Bilgisayar Simülasyonları



**ÇOCUKLAR  
İÇİN BİLİM**  
**NOBEL ÖDÜLLÜLER  
ANLATIYOR**

Michael Levitt

Nobel Kimya Ödülü Sahibi, 2013

Soyut bilgisayar simülasyonu, günümüz bilim dünyasında önemli bir araştırma aracıdır. Bilgisayarlar, karmaşık biyolojik sistemlerin davranışını başka türlü başaramayacağımız şekillerde taklit eden hesaplamalar yapmamızı sağlar. Bu simülasyonları, belirli (örneğin fiziksel) kurallara göre çalışan sanal bir dünyanın yaratıldığı bir bilgisayar oyunu olarak düşünebilirsiniz. Oyunu oynarken, bu sanal dünyayı ve çevresini yöneten kuralları ve ayrıca bu dünyayı oyuncular olarak nasıl etkilediğimizi öğreniyoruz. Bu yazıda, moleküllerin yapısını ve işlevini incelemek için yapısal biyoloji dünyasında bilgisayar simülasyonlarını nasıl kullandığımızı açıklayacağım. Ayrıca, içinde yaşadığımız toplumu ilerletmek için biyoloji ve bilgisayar simülasyonları dünyasından gelen bilgileri nasıl kullanabileceğimizi düşündüğümü de anlatacağım.

Profesör Levitt, karmaşık kimyasal sistemlerde çok ölçekli modellerin geliştirilmesi için 2013 yılında Kimya alanında Nobel ödülünü kazandı.

## Bilgisayar Simülasyonu Nedir?

Bunu anlamının basit bir yolu bilgisayar oyunları hakkında düşünmektir. Örneğin, karakterinizin çeşitli eylemler gerçekleştirerek bir çevrede dolaştığı bir macera oyunu düşünün. Oyunun gerçekçi görünmesi için bilgisayarın gerçek dünya gibi davranan sanal bir alem oluşturması gerekir. Örneğin, oyun sırasında bir top atarsanız, bilgisayar topun hareketini hesaplamak ve topun fiziksel yolunun gerçekçi bir simülasyonunu oluşturmak için uygun fiziksel denklemi (bu durumda Newton'un hareket denklemi) kullanmalıdır (Şekil 1). Aynı prensibe göre, onları yöneten fiziksel yasaları bildiğimizi varsayarsak, bilgisayar diğer gerçek yaşam süreçlerini simüle edebilir. Başka bir deyişle, yukarıdaki örnekte gördüğümüz gibi, yalnızca nesnelerin hareketini yöneten yasalar değil, aynı zamanda hava duru-



**Şekil 1** - Bilgisayar oyunlarında uygulanan bir bilgisayar simülasyonu örneği. Görüntü "Fortnite" adlı çevrimiçi oyundan alınmıştır.

mu, kimyasal reaksiyonlar gibi daha karmaşık süreçler ve ayrıca çeşitli biyolojik süreçleri simüle edebilir.

Buradaki zorluk, topu yere düşmeden önce odadaki nesnelere 15 kez vuracak şekilde fırlatmaktır. Bu oyun aslında yasaların bir simülasyonudur. Oyunda topun hareketini görsel olarak gerçekçi bir şekilde sunmak için, bilgisayarın topun fiziksel yolunu fiziksel denklemlere (Newton'un hareket denklemleri) dayalı olarak hesaplaması gerekir. Başka bir deyişle, bilgisayar fiziksel yasaları simüle eder ve sonucu ekranda sunar. Bilgisayar aynı prensibi benimseyerek, onları daha iyi anlamamıza yardımcı olmak için hava durumu veya biyolojik süreçler gibi doğadaki farklı süreçleri simüle edebilir.

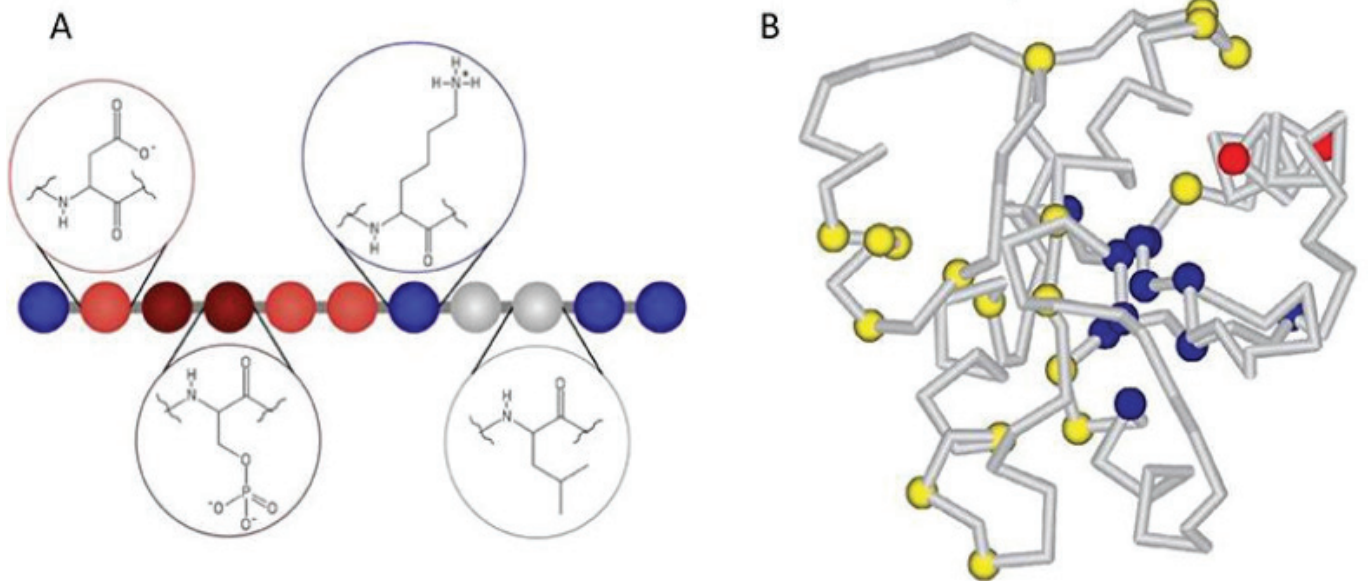
## Bilgisayar Simülasyonlarından Ne Öğrenebiliriz?

Assassin's Creed gibi bir macera oyunu düşünelim. Görevinizin İtalya, Floransa'da gerçekleştiğini varsayarsak, Floransa sokaklarının bilgisayar simülasyonunu kullanarak bu şehirde dolaşıyorsunuz. Yürürken, Duomo adı verilen güzel katedral gibi çeşitli evler ve tarihi yerler görürsünüz. Bu oyunu saatlerce oynadıktan sonra, Floransa'nın coğrafyası hakkında çok şey öğreneceksiniz. Bu bilgiyle,

gerçek Floransa şehrinde dolaşabilir, ona aşina olabilir ve bilgisayar oyununda karşılaştığınız farklı yerleri tanımlayabilirsiniz. Bu, şehri hiç ziyaret etmemiş olsanız bile, oyunun size şehrin kendisi hakkında gerçek bilgiler sağladığı anlamına gelir. Bilgisayar simülasyonları yoluyla bu tür öğrenmeler güvenli bir süreçtir. Oyunu oynarken incinmekten korkmazsınız, böylece gerçek hayatta yapmaya cesaret edemeyeceğiniz eylemleri oyunda gerçekleştirmenize izin verebilirsiniz. Oyuna bağlı olarak bazen gerçek hayatta yapılamayan ama bilgisayar oyununda yapılabilen eylemler bile olabiliyor (uçma gücüne sahip olmanız ya da hayali yaratıklarla karşılaşmanız gibi).

Bilgisayar simülasyonları yoluyla bilgi edinme ilkesi bilim dünyasında da kullanılır. Üzerinde çalıştığımız fiziksel veya kimyasal bir sürecin bir modelini oluşturur ve ardından bir bilgisayar kullanarak onu simüle ederiz. Model, süreci tanımlayan matematiksel denklemlere dayanmaktadır (modelin Newton yasalarını tanımlayan ve bir topun fiziksel davranışını yöneten denklemleri kullandığı Şekil 1'deki gibi). Bilgisayar, sürecin zamanla nasıl geliştiğini görmemizi sağlar, böylece simülasyon sonuçlarının gerçek dünya sürecine uyup uymadığını inceleyebiliriz. Sonuçlar uygunsa, modelin iyi olduğu ve araştırdığımız fenomeni daha iyi anlamak için kullanılabileceği sonucuna varırız. Bil-

gisayar sonuçları gerçek dünya sonuçlarına uymuyorsa, modelin revize edilmesi gerektiği sonucuna varırız. Modeli değiştirmek, üzerinde çalıştığımız süreci anlamamızdaki hataları belirlememize yardımcı olabilir. Bir simülasyon tehlikeli olmadığı için, gerçek yaşamda keşfedilmesi imkansız olabilecek her türlü modeli ve olasılığı bile deneyebiliriz. Bazen bu tür bilgisayar simülasyonları sırasında sürprizler olabilir ve incelediğimiz "vahşi" bir modelin aslında araştırılan fenomeni en iyi şekilde tanımladığını görebiliriz. Bilgisayar modelleri bize yaratıcı olma ve aksi halde bulunması zor olan gerçekliğin açıklamalarını bulma özgürlüğü verir. Bilimde bilgisayar simülasyonlarını kullanırken en önemli ilkelere biri benim "tam doğru" dediğim ilkedir. Bu prensibe göre çok basit ve çok karmaşık olmayan bir model oluşturmamız gerekiyor. Model çok basitse, araştırmak istediğimiz olguyu yeterince ayrıntılı olarak açıklamayacaktır. Buna karşılık, eğer model çok karmaşıksa, anlamamıza katkıda bulunacak bilgileri almak için onu kullanamayız. Her araştırmacının ne yaptığını basit ve temel düzeyde anlaması gerektiğini düşünüyorum ki araştırmalarını başkalarına anlatabilsinler. Birisi harika bir şey keşettiğini ama açıklayamayacak kadar karmaşık olduğunu söylerse, şüphelenirim ve okuduklarını gerçekten anladıklarından emin olamam. Bu nedenle, her zaman yeterince iyi olan en basit modeli ararım (proteinlerin katlan-



**Şekil 2 - Proteinlerin katlanması.** (A) Bir proteini bilgisayar kullanarak simüle etmek için basit bir model. Protein, farklı özelliklere sahip boncuklardan oluşan bir kolye olarak tanımlanıyor. Her renk farklı bir boncuk türünü tanımlar ve her boncuk bir atom koleksiyonunu ve bunların etkileşimlerini tanımlar (boncukların üstündeki veya altındaki dairelerde görebileceğiniz gibi). (B) Belirli renkteki boncuklar arasındaki etkileşimleri tanımlayan matematiksel denklemleri de içeren, boncuklardan oluşan bir kolye olarak basit bir protein modeli. Bu model, proteinlerin kararlı 3B şekillere katlanmasını tanımlamak için yeterlidir.

## HER ZAMAN ANLAMAYA ÇALIŞTIĞINIZ ŞEYİ NETLEŞTİREN EN BASİT AÇIKLAMAYI ARAMANIZI TAVSİYE EDERİM.

ması hakkında aşağıdaki Şekil 2'de göreceğiniz gibi). Bunun yaşam için çok genel bir fikir olduğuna inanıyorum, her açıklamanın kendi "tam doğru" düzeyi vardır. Bu nedenle, her zaman anlamaya çalıştığınız şeyi netleştiren en basit açıklamayı aramanızı tavsiye ederim, ne fazla ne de az.

Şimdi size biyolojide çok önemli bir fenomeni, yani proteinlerin katlanmasını anlamak için bilgisayar simülasyonlarını ve "tam doğru" ilkesini nasıl kullandığımızı göstereceğim. Proteinlerin yapısıyla ilgili araştırmalar, yapısal biyoloji adı verilen alanın parçasıdır. Canlı organizmaların nasıl çalıştığını düşünelim. Vücudun içinde protein adı verilen birçok ip benzeri yapı vardır. Bu proteinler üç boyutlu şekiller oluşturmak için katlanır. Her proteinin, her canlı vücudun içinde aynı olan kendine özgü bir şekli vardır. Şaşırtıcı olan şey, bu 3B şekilli proteinlerin yaşamın tüm işlevlerini yerine getirmesidir; vücudu inşa etmek, kimyasal reaksiyonlara girmek, kasları hareket ettirmek ve yiyecekleri sindirmek. Bu nedenle, bir proteinin son şeklini belirleyen katlanma sürecini anlamak son derece önemlidir. Proteinler, aralarında birçok etkileşim bulunan binlerce atomdan oluşan büyük moleküllerdir. Tüm bu atomlarla ve bir protein içindeki etkileşimleriyle başa çıkmak için bir bilgisayar simülasyonu yapmak istersek, bu çok karmaşık hale gelir. 1970'lerin başında Arieh Warshel ile bu problem üzerinde çalıştım ve 1975'te bulgularımızı önemli bir bilimsel dergide yayınladık. Her bir boncuk türünün diğer boncuklardan biraz farklı özelliklere sahip olduğu, farklı boncuk türlerinden oluşan bir kolye olarak sunulan basit bir protein modeli yapabileceğimizi bulduk (Şekil 2A). Her boncuk bir

(10 diyelim) atom koleksiyonunu ve bunların etkileşimlerini temsil eder. Belirli boncuklar (örneğin kırmızı boncuklar) diğer özel boncuklar (örneğin mavi boncuklar) tarafından çekilir. Bu basit model, proteinlerin katlanması için yeterli ve faydalı bir açıklama sağlamayı başardı (Şekil 2B) ve diğer birçok moleküler hesaplama için bir model olarak kabul edildi. Bu simülasyonlar, farklı proteinlerin üç boyutlu yapılarını anlamamızı ve hatta tahmin etmemizi ve biyolojik aktivitelerini daha iyi anlamamızı sağlar. Bilgisayarı, ilaç olarak kullanılabilen molekülleri tasarlamak için de kullanabiliriz.

### Biyolojinin Ötesinde Bilgisayar Simülasyonları- Geleceğin Vizyonu Çeşitlilik

Biyolojik sistemler benzersiz bir zorlukla karşı karşıyadır, gelecekte bir gün meydana gelebilecek beklenmedik durumlarla başa çıkmak için hazırlıklı olmaları gerekir. Herhangi bir sistem daha önce hiç yaşanmamış senaryolara nasıl hazırlanabilir?

Cevap basit: çeşitlilik yoluyla. Doğa, sistemin öngörülemeyen zorluklarla başa çıkmak için süreçlerini adapte edebilmesi ve değiştirebilmesi için bir sistem içinde çok çeşitli varyasyonlar yaratmaya çalışır. Örneğin hayvanlarda her yavru, ebeveynlerinin her birinin genetik bilgisinin (DNA) rastgele bir yarısını alır, bu nedenle her yavru benzersizdir ve türlerin çeşitliliğini artırır. Bu şekilde, bütün hayvan grupları için olası gelecek senaryolarına cevap verme hazırlığı artar ve bu da türün beklenmedik durumlara karşı kolektif direncini artırır. Biyolojinin bize öğrettiği bu çeşitlilik ilkesinin hayatın birçok alanında da geçerli olduğunu düşünüyorum. Örneğin, güçlü bir toplum, farklı sosyal geçmişlere, cinsiyetlere ve eğitimlere sahip farklı insanların birlikte yaşamayı, birbirlerini anlamayı ve kabul etmeyi öğrenmesi gereken çeşitlilik içeren bir toplumdur. Aslında okulda veya evde her zaman etrafımızdaki insanlarla müzakere etmenin yollarını bulmalıyız. Bazen zor ve karmaşık sosyal durumlarla

uğraşmak zorunda kalırız ve elbette bazılarımız karşılaştığımız çatışmaları çözümede diğerlerinden daha iyidir. Dahası, hayatımızın kendisi inişler ve çıkışlar ve beklenmedik durumlarla çeşitlenir. Daha iyi bir geleceğin ve istikrarlı bir toplumun anahtarı, yaşamın çeşitliliklerini başarılı bir şekilde ele alma yeteneklerimize dayanır. Çok çeşitli sosyal ve kişisel durumlarla başa çıkmak, iyi gelişmiş bir duygusal zekâ gerektirir. Duygusal zekâmızı geliştirmemize yardımcı olması için bilgisayar simülasyonlarını kullanabileceğimize inanıyorum.

## Duygusal Zekânın Gelişimi için Bilgisayar Simülasyonları

Duygusal zekâyı geliştirmeye yönelik bir bilgisayar simülasyonu, zor bir sosyal durumu simüle eden ve sorunu çözmek için farklı stratejiler izlemenize izin veren etkileşimli bir oyun şeklinde olabilir (Şekil

3). Örneğin sınıfta biri size hakaret ediyor. O kişiyle işbirliği içinde çalışma olasılığını tamamen yok etmemek için nasıl tepki vermelisiniz? Bir bilgisayar simülasyonu kullanarak, gerçekleştirebileceğiniz çok çeşitli farklı eylemlerin sonuçlarını görebilirsiniz. Hem bireysel olarak hem de eğitim sisteminin bir parçası olarak yapılan bu tür etkinlikler, duygusal zekânın geliştirilmesinde önemli bir rol oynayabilir.

Bilgisayar simülasyonları bize hayattaki karmaşık durumlar hakkında bilgi verebilir. Gösterilen gibi, karmaşık bir sosyal durumu deneyimlemenize ve duruma tepki vermenin farklı yollarını denemenize izin veren bir oyun hayal edin. Böyle bir oyun sizi gerçek hayattaki durumlarla ve farklı insanların farklı tepkileriyle daha iyi başa çıkmaya hazırlayabilir ve daha sofistike bir duygusal zeka geliştirmenize yardımcı olabilir.



Şekil 3 - Duygusal zekâyı geliştirmek için bilgisayar simülasyonu.



## Genç Beyinlere Öneriler

hayattan edindiğim bazı bilgileri sizinle paylaşmak istiyorum. Öncelikle sevdiğiniz işi yapmak önemlidir. Anne babanızın yapmanızı istediklerini ya da toplumun yapmanızı söylediklerini yapmayın; yapmayı gerçekten sevdiğiniz şeyi yapmayı deneyin. Yapmayı gerçekten sevdiğiniz şeyi yaptığınız bir hayattan daha iyi bir hayat yoktur. İkincisi, pes etmeyin. Kendinize inanın ve başarı ya da başarısızlık karşısında çok heyecanlanmayın. Her kötü şeyin içinde iyi bir şey olduğunu ve her iyi şeyin içinde kötü bir şey olduğunu ve her ikisinden de birçok şey öğreneceğimizi unutmayın. Kendinize inanmaya devam edin, sonunda başkaları da size inanacaktır. Üçüncüsü, orijinal olmaya çalışın. Her birimiz özel ve benzersiziz. Benzersizliğinizi ifade etmeye çalışın ve sadece başkalarını kopyalamayın. Dördüncüsü, hata yapmaya hazır olun. Her zaman söylerim, iyi bir bilim adamı zamanın %90'ında hata

yapandır ve gerçekten iyi bir bilim adamı zamanın %99'unda hata yapar. Niye peki? Çünkü alanınızda mükemmelseniz, en zor problemlerle uğraşırsınız. Hata yapmaya hazır değilseniz, daha zorlu şeylerle asla uğraşamazsınız. Beşincisi, kibar bir insan olun—cömert ve sıcak olun—bunlar beslenmesi gereken önemli niteliklerdir. Size tavsiye etmek istediğim son şey planlama ile ilgili. Bence hayatta, önceden plan yapabilmeniz gerekse de, çok fazla planlama hayal kırıklığına yol açabilir. Hayat hiçbir zaman tam olarak planladığımız gibi gitmez ve çoğu zaman planın parçası olmayan şaşırtıcı şeyler olur. Orijinal planınızla çok meşgulseniz, yeni fırsatların farkına bile varmazsınız. İdeal olan, planları takip etmek ile hayatın getirdiği sürprizlere yanıt vermeye hazır olmak arasındaki hassas dengedir.