



"שורת קוד אחת בפורטרן במקום נוסחאות ארוכות"

כך אומר בראיון פרופ' אריה ורשל, אחד מזוכי פרס נובל לכימיה

לזה בלי מחשב, ובשנת 1965 הוא החל לנסות לחשב את המבנה וההתנהגות של מולקולות אורגניות במחשב, אומר פרופ' ורשל, שמספר שהגיע לפרופ' ליפסון, שהיה אז נשיא המכון, לאחר שקרא במעריב על כך שהוא הגיע מקיבוץ תל-עמל (היום ניר דוד), השוכן כשלושה קילומטרים מקיבוצו של ורשל - שדה נחום, ושכנע אותו לקבלו.

"כשבאתי החלטנו שאנסה למצוא תיאור נכון למולקולות המכונות לקטמים, שהן תרכובות בעלות טבעת מרובעת, הכוללת בתוכה קשר פפטידי יחיד - מולקולה קטנה שיש בה אותם כוחות כמו בחלבון. תוך כדי עבודתי ראיתי שאי אפשר להשתמש בתיאור המקובל של מולקולות באותה תקופה בתור קשרים וזוויות, כי תוכנית המחשב נעשית מסובכת מדי. אם יש לך טבעת, כל קשר תלוי בקשרים האחרים, תמיד תהיה טעות בדיוק היה שם מחשב הגולם, והחלטתי לבדוק אם אפשר לחשב את הכוחות רק בהסתכלות על מערכת הצירים הקרטזית (X,Y,Z). ההחלטה התגלתה כטובה, משום שבמקום אלפי שורות קוד מסובכות ניתן להסתפק בשורה אחת. הכל נעשה מאוד פשוט, ויכולתי לבדוק את זה בעזרת נגזרת נומרית - לקחתי את האטום והזזתי אותו קצת ימינה וקצת שמאלה ויכולתי לבדוק אם הנוסחאות שבדקתי נכונות מאוד עזר לזה מחשב הגולם, שבזכות **חיים פקריס** הפיק תוצאות בדיוק של 18 ספרות.

"פעם אחת הגשתי הצעת מחקר, שבה הראיתי כיצד ניתן לצמצם את הבעיות של ויברציות של מולקולות לכדי שורה אחת במקום ספר שלם. ליפסון לא האמין בזה, אבל המחשב היה השופט, ובדיוק פרצה מלחמת

ששת הימים. היות שחשכתי זמן בזכות הפיתוח הזה, הספקתי לסיים את המאסטר בחצי שנה, ואז הופיע מייק לויט, וביחד כתבנו תוכנית שמתבססת על הקואורדינטות הקרטזיות, שאפשרה לחשב מבנה חלבונים. כל הקשיים שנבעו מכך שהחלבונים מכילים טבעות וקשרים התלויים אחד בשני - נעלמו. מכאן והלאה ניתן היה לשאול את המחשב כל שאלה - להתחיל רק מהנוסחה הראשונה בספר, ואת היתר ללמד את המחשב ולא לנסות לכתוב נוסחאות מסובכות שהיו נחוצות כשלא היה מחשב. הניסיון הזה עיצב את המחשבה המדעית שלי."

גם את השותף השלישי לפרס, פרופ' **מרטין קרפלוס** הוא פגש במכון וייצמן, כשבא לחצי שנת שבתון ולאחר מכן הוא הצטרף לפוסט דוקטורט במעבדתו בהרווארד. גם במחקר המשותף איתו השתמש פרופ' ורשל בתוכנה שכתב, והפעם הוא שכלל אותה כך שניתן יהיה להשתמש בה לתיאור תהליכים דינמיים, המצריכים שימוש במשוואות מהפיסיקה הקוונטית. השאר כתוב, כמובן, בתולדות פרס נובל.

בהמשך הראיון אמר לי פרופ' ורשל, שהתמזל מזלו לפעול בדיוק בתחילת עידן המיחשוב, ולממש את הרעיון שלו לתיאור תהליכים בכימיה אורגנית בשלב כזה בקריירה שלו, כשלא היה תפוס כבר במחקר אחר.

היכרות של חתן פרס נובל, פרופ' **אריה ורשל**, עם המיחשוב החלה בהיותו סטודנט לתואר ראשון בטכניון. באחת מעבודות הקיץ שלו הוא התבקש לסייע לפרופ' **רפי מוקדי** בהנדסת קרקע (פרופ' מוקדי נהרג מאוחר יותר במלחמת ששת הימים). ושל החוקרים במעבדתו (הם היו מומחים לממברנות חצי חדירות להשקיה). בראיון איתי הוא מספר: "נתנו לי לחשב דינאית את קבוע הדיפוזיה - כלומר, כמה מהר המים עוברים דרך הממברנה שניסו לבנות. לקחנו חומר, שמנו על זה משהו שמכסה את החומר ומדדנו בתא לחץ את מהירות הזרימה. היו לי אלפי מספרים, ואחרי חיבור במחשבון במשך שמונה שעות יצא מספר שהוא התוצאה. זו הייתה עבודת הקיץ

"מכאן והלאה ניתן היה לשאול את המחשב כל שאלה - להתחיל רק מהנוסחה הראשונה בספר, ואת היתר ללמד את המחשב ולא לנסות לכתוב נוסחאות מסובכות שהיו נחוצות כשלא היה מחשב. הניסיון הזה עיצב את המחשבה המדעית שלי"



פרופ' אריה ורשל

הכי טובה שהייתה לי בטכניון, בוודאי לעומת עבודה בפניציה. באותו זמן התחלתי לדבר עם מומחים למחשבים. באותה תקופה כבר היו מחשבים שקיבלו קלט באמצעות סרט, ועלה לי הרעיון שמחשב יוכל לעזור במשימה הזאת, וכך עשיתי."

באיזו שפה תכנתת?

"לא למדתי אף שפה פרט לפורטרן, והחבר'ה במרכז המחשבים במכון, כולל **אמיר פנואלי** ז"ל, תמיד אמרו שפורטרן זה פאסה. יש PL1 ואחרים. עדיין אני מתכנת בפורטרן, גם כאשר עמיתים באים ורוצים לכתוב ב-C++ אבל מתרשמים מכך שפורטרן היא שפה טובה ובזכות כך השתמרה. "באותו זמן החליט פרופ' **שניאור ליפסון** במכון וייצמן שהוא עובר למחשבים. הוא עבד בצורה אנליטית על תחום המכניקה הסטטיסטית - מעברים בין צורות הסלילים השונות של החלבונים. הוא פיתח נוסחאות