

KİMYACILAR İÇİN BİLİŞİM TEKNOLOJİLERİ

* O. Akpolat ve F. Kartal
Muğla Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, 48000 MUĞLA
* oakpolat@mu.edu.tr

ÖZET

Bu çalışmada kimyanın anorganik kimya, organik kimya, fizikokimya, analitik kimya ve biyokimya gibi temel alanlarında ve bu alanlara ilişkin mühendislik hesaplamalarında uygulamada karşılaşılabilecek bilgi teknolojileri üzerinde durulmuş olup seçilen bazı örnek uygulamalar ile de konular daha ayrıntılı olarak incelenmiştir. Çok geniş bir alanı kapsayan bu uygulamalar temel alanlar çerçevesinde sınıflandırılarak, yazılımlar hem yapısal olarak hem de pratik kullanımları açısından ele alınmıştır.

Anahtar kelimeler: bilişim, teknoloji, kemometri, istatistik, modelleme, simulasyon, kimya, kimyacı

INFORMATION TECHNOLOGIES FOR CHEMISTS

ABSTRACT

In this work, it was reviewed information technologies encountered on basic areas of chemistry like inorganic chemistry, organic chemistry, physical chemistry, analytical chemistry and biochemistry and on engineering calculations related these areas practically, and studied on some selected applications in detailed. These applications in a wide range were classified on the basic areas and related softwares were studied on their uses both structurally and practically.

Keywords: information, technology, chemometrics, statistics, modeling, simulation, chemistry, chemist

1. GİRİŞ

Son yüzyılda yaşanan endüstri devrimini izleyen bilgi çağı, pek çok bilimin hızla gelişmesini, bilişimle girişimini ve böylece daha çok bilginin daha kısa sürede üretilmesini, teknoloji ile bütünleşmesini,

paylaşılmasını ve böylece daha etkin olarak optimum koşullarda değerlendirilmesini sağlamıştır. En önemli gelişme de bu bilgilerin kolayca ulaşılabilecek şekilde saklanması, birbiriyle ilişkilendirilerek yapıların ya da süreçlerin modellenmesi, yeniden simülasyonu ile canlandırılması ve böylece, süreçlerin kontrol edilerek denetim altına alınmasını sağlayan donanım alt yapısı ve yazılım tekniklerinin gelişmesi ile birlikte tüm dünyayı saran bu bilgi ağına ekonomik değeri olanlar dışında kısmen de olsa internet üzerinden ulaşılabilmesidir. Bu çerçevede yaşanan bilgi süreçleri bilginin deneysel, kavramsal ve tasarımsal olarak üretilmesi paylaşılması ve teknolojiye aktarılmasıdır [1]. Kimyasal üretim süreçlerine bakıldığında ise, bu alandaki yeni ürünler ve yeni konular da onun yaratıcılığının bir sonucu olup son elli yılda kimyanın yarattığı üretimler yaşamı çepeçevre sararken, yeni konularını da beraberinde yaratmıştır. Bu konular ayrı ayrı adlar alırken ancak özünde daima kimya olarak kalır. Bu çerçevede ister özgün mekanik ya da elektriksel özelliklere sahip bu yeni malzemelerin üretilmesine uygulanan kimyanın yoğunlaşacağı alan ister nano teknolojiler olsun, ister biyokimyanın alanına giren ve yaşamı büyük oranda değiştiren biyo teknolojiler olsun, maddenin özellikleri ve dönüşümleriyle uğraşan her şey, o madde ister canlı ister cansız olsun, köken itibarıyla kimyadır. Kimyada ve kimyasal üretim süreçlerinde ise bilişim ve bilişim teknolojilerinin kullanımı daha şimdiden büyük önem taşıyor ve önümüzdeki yıllarda bu önemin hızla artacağı da çok açıktır [2]. Genelde yaşanan bilgi süreçlerinde bilginin üretilmesi sürdürülebilir bir gelişmenin temelini oluştururken özelde kimya alanında da böyle olması kaçınılmazdır. Bugün dünyadaki üretim ve hizmet süreçleri bölgeler arasında farklılık gösterse de ulaşılan yaşam kalitesi açısından inşaattan makineye, elektrik-elektronikten bilişime, sağlıktan eğitime gibi her alanda sürdürülen ekonomik olan ya da olmayan tüm faaliyetler bir bilgilenme süreci ile başlamakta ve yine bilgilenme süreçleri içinde devam etmektedir. Her adımda üretilen

ve saklanan bilgi miktarı hızla artmakta ve bunların değerlendirilebilmesi de ancak yine bilgi teknolojileri ile mümkün olmaktadır. Bu teknolojinin alt yapısını da bilgisayar donanımları, yazılım paketleri ve paylaşım ağları oluşturmaktayken bu teknolojilerin verimli kullanımı da eğitimden başlayarak büyük bir önem arz etmekte ve bu konudaki çabalar her geçen gün hızla artmaktadır. Özellikle eğitimden üretime doğrudan programlamaya yönelik yazılımlarla birlikte kullanımı artan simülasyon çalışmalarının seçimine ilişkin kriterlerin belirlenmesinde yol gösterici olabilecek araştırmalarda sıkça yapılmaktadır [1, 3]. Bu çerçevede hazırlanan bu çalışmada kimya ve kimyaya dayalı üretim süreçlerinde yararlı olabilecek bilişim teknolojilerinin bir sınıflandırılması yapılmış olup bunların pratik kullanımları ele alınmıştır.

2. KİMYA VE KİMYASAL SÜREÇLER AÇISINDAN BİLİŞİM TEKNOLOJİLERİ

Kimya ve kimyasal işlemlerin yer aldığı süreçlere bakıldığında karşılaşılan temel alanlar koordinasyon kimyasını da kapsayan anorganik kimya ve organik teknolojiler, fizikokimya ve nanoteknolojiler, reaksiyon ve katalizör teknolojileri ile nükleer teknolojiler, biyokimya, biyoinformatik ve biyoteknoloji ile analitik kimya ve deneysel ölçüm ve değerlendirme teknolojileri ile analiz laboratuvarlarının bilişim yönetim teknolojileri ve tüm bu teknolojilerin üretim süreçlerine aktarıldığı kimyasal süreçlerinin optimizasyonu ile modellemesinin simülasyonunun, kontrolünün ve tasarımının gerçekleştirildiği mühendislik çözümleri olarak sınıflandırılabilir [4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19].

Bilgi ve bilgi teknolojileri açısından bakıldığında uygulamada karşılaşılabilecek yazılımları aşağıdaki gibi sınıflandırmak mümkündür.

1. Bilgisayar ve bilgisayar ağlarının aktif kullanımına imkan sağlayan DOS, WINDOWS ve LINUX gibi işletim sistemleri ile network ağ paylaşım sistemleri ve PC bilgisayar kullanıcıları ile WEB sistemleri için güvenlik yazılımları
2. Ofis, muhasebe ve pazarlama gibi hizmetler için kullanılan WORD,

EXCEL, POWER POINT gibi yazılımlar

3. Her türlü yazılımla birlikte de kullanılan ve elde edilen verilerin depolandığı My SQL ve Oracle gibi veri tabanlarına ilişkin verilerin değerlendirildiği ve veri madenciliğine ilişkin yazılımlar
4. Organik ve anorganik yapıların moleküler boyutta formülize edilip şekillendirildiği ve atomlar ya da moleküller arası reaksiyonların canlandırıldığı Chem Sketch ve Chem Axon gibi simülasyon programları
5. Kimyasal analiz süreçlerinin gerçekleştirildiği laboratuvarlarda analizlerin doğrudan yapıldığı gaz kromatografisi (GC) ya da atomik absorpsiyon (AAS) gibi cihazların kontrol programları ve kullanıcı ara yüzeyleri
6. Laboratuvarlarda veya diğer üretim süreçlerinde elde edilen verilerin veya veri gruplarının değerlendirildiği SPSS ya da Minitab gibi istatistiksel ya da biyo istatistiksel amaçlı programlar
7. Çok sayıda verinin üretildiği, depolandığı laboratuvarlarla ilgili olarak hazırlanmış 17025 yada 22001 gibi ISO standartları doğrultusunda raporların ve dökümanların hazırlandığı laboratuvar yada prosesler için kullanılan LIMS gibi laboratuvar bilgi yönetim sistemlerine ilişkin yazılımlar
8. Üretim süreçlerinde ve tesislerin optimizasyonu, modellemesi, simülasyonu ile bu sürecin sıcaklık, derişim, akış hızı gibi parametrelerinin kontrolü ile vana veya benzeri taşıyıcı sistemler gibi proses cihazlarının mekanik tasarımında ve kontrolünde kullanılacak olan kontrol üniteleri ve kullanıcı ara yüzeylerinin tasarlanmasında gerekli olan C++, MATLAB, MATHEMATICA gibi yazılımlar

Tüm bu yazılımlara bakıldığında ya doğrudan C++ gibi derleyiciler aracılığıyla yazılan ve daha profesyonel yazılımcı özellikleri isteyen yazılımlar ile, MATLAB gibi daha az profesyonellik isteyen ve ancak ara yüzeylerinde programlama yapılabilen yazılımları ya da Ofis, SPSS, Biyoinformatik,

Chem Sketch veya Chem Axon gibi doğrudan programlamaya ihtiyaç duymayan simulasyon paketleri olarak sınıflandırılabilirler [1, 17, 20, 21, 22, 23, 24].

Bu çalışmada da ağırlıklı olarak kimya ve kimyasal süreçlerde karşılaşılan istatistik, biyoinformatik, laboratuvar ölçümleri ve değerlendirmeleri, modelleme, simülasyon, optimizasyon ve tasarım aşamalarında karşılaşılabilecek pratik örnek uygulamalar üzerinde durulacaktır.

2.1. İşletim Sistemleri, Bilgisayar Ağları ve Bilişim Güvenliği

İşletim sistemleri denildiğinde ilk akla gelen DOS, WINDOWS, LİNX gibi sistemler olup WEB gibi internet ya da iç ağlar üzerinde kurulu bilgisayarların güvenliğini tehdit eden en önemli unsurlar ise başta virüsler olmak üzere solucanlar, truva atları, casus yazılımlar ve spamlardır ve başarı ancak bu unsurlara karşı yapılacak bütüncül çalışmalarla mümkündür [25, 26].

2.2. Temel Büro Yazılımları

Burada en çok karşılaşılan ürünler WORD, EXCEL ve POWER POINT gibi olup bunlar doküman yazımı, verilerin hesaplanması ve grafiklendirilmesi ile genel sunum amaçlıdır.[27].

2.3. Veri Tabanları

SQL gibi verilerin toplanıp işlendiği yazılımlar olup Excel in de pratik olarak bir veri tabanı amacıyla kullanılabilmesi unutulmamalıdır [27, 28].

2.4. Moleküler Boyutta Yapılandırılmalar Ve Reaksiyonlar

Anorganik ya da organik moleküllerin yapılarının iki yada üç boyutlu çizimlerinin yapılabildiği ara yüzeyler ile anorganik ya da organik kökenli reaksiyonlarda molekül hareketlerinin görsel olarak izlenmesini sağlayan ACD / Chem Sketch gibi moleküler simülasyon ilgili olarak hazırlanmış bazı paket programlar mevcuttur [20, 21, 29].

2.5. Laboratuvar Analiz Cihazları

Kimyasal laboratuvarlarda kullanılan çok sayıda analiz cihazlarından biride gaz kromatograflarıdır (GC) olup bu tür cihazların pratik olarak kullanımları ve analiz sonuçlarının değerlendirilmesi için oluşturulmuş kullanıcı ara yüzeyleri bulunmaktadır [30].

2.6. Kimyada Verilerin İşlenmesi Ve Değerlendirmesi

Kimyasal üretimlerin gerçekleştirildiği tesislerde ve laboratuvarlarda özellikle analitik kimya açısından bakıldığında verilerin işlenmesi ve istatistiksel değerlendirilmesi ile bu verilerin sağlandığı deney faktörlerinin araştırılması, optimize edilmesi, zaman tasarrufunun sağlanması ve kantitatif ölçümler için kalibrasyonların gerçekleştirilmesi için gerekli olan deneysel tasarımların hazırlanması kimyanın belki de en çok hesaplama ve modelleme çalışmalarına ihtiyaç duyulduğu alanlarıdır.

Temel kimya ve fizik bilgileri ile birlikte mühendislik ve hesaplama tekniklerine, matematik ve istatistik konularına ve dolaylı olarak bu çalışmaların pratiğe dönüştürülebileceği yazılımlara dayanan kimyada verilerin işlendiği ve değerlendirildiği bu alan kemometriks olarak da bilinmektedir. Verilerin istatistiksel değerlendirilmesinde SPSS, Excel ya da Minitab gibi yazılımlar kullanıcıya kısmen kolaylık sağlarken deney tasarımlarının gerçekleştirildiği MATLAB, Matematica gibi algoritma yazılımlarının kullanılması da hızla yaygınlaşmaktadır. [14, 18, 22, 31].

Biyoloji, biyokimyada, genetik ve biyoteknolojik veriler işlendiği alan ise biyoinformatik olup, yeni bir bilim dalı olarak, biyoinformatik The National Center for Biotechnology Information (NCBI)'a göre: Yaşam bilimleri (biyoloji, biyokimya, tıp), bilgisayar bilimleri, bilişim teknolojileri ile matematik ve istatistiğe dayalı interdisipliner bir bilim dalıdır. Bu yeni bilim dalının uğraş konularına bakıldığında üç önemli alan göze çarpmaktadır.

-Geniş veri tabanları arasındaki ilişkileri değerlendirmek için yeni algoritma ve istatistiklerin geliştirilmesi

-Nükleotid ve aminoasit dizilerini, protein bölgeleri ve yapılarını kapsayan farklı tipteki verilerin analizi ve yorumlanması

Veriye dayalı araştırma yaklaşımlarına paralel olarak büyük miktardaki verinin hızla işlenmesi, yeniden üretilmesi ve analizlenmesinde bu yeni yaklaşımlar güç kazanmaktadır. Bu, modele bağlı bir araştırma yaklaşımıdır ve biyolojik modelleme ve onun çalışma çerçevesini kapsamaktadır ve bu yaklaşımda biyolojik proseslerin bilgisayar simülasyonları önemli rol oynamaktadır. Modelleme ve simülasyonla bu yaklaşımın amaçları; kompleks biyolojik sistemlerin dinamik davranışlarının tahmini ve tasarımıdır [1, 15].

2.7. Laboratuarlarda Bilgi Yönetim Sistemleri

Laboratuarla üretilen çok sayıdaki bilginin saklanması, değerlendirilmesi ve raporlandırılması çok karmaşık bir iş olup, kullanılan tüm cihazların ve ofis işlemlerinin birleştirildiği bilgi yönetim sistemleri şu anda mevcuttur. Laboratuvarların işlevlerini belli standartlarda gerçekleştirirken deney ve kalibrasyon laboratuvarlarının yeterliliği için genel şartların ayrıntılı olarak verildiği ISO 17025 standardına uyarken bilgi teknolojisi, güvenlik teknikleri, bilgi güvenliği yönetim sistemleri ve gereksinimlerini ISO 27001 standardı çerçevesinde sağlarlar. Bu bağlamda hazırlanmış yazılımlardan örnek olarak seçilen LIMS programının seçilen bazı ara yüzeyleri ve işlevlerinin açıklandığı sayfalar Şekil 12 de verilmiştir [15].

2.8. Kimyasal Süreçlerde Bilişim Teknolojileri

İster kimyasal ister biyokimyasal olsun bir ürünün çoğaltılmasında yaşanan sürecin adımları bir biyoteknoloji prosesi üzerinde bilişim teknolojilerinin kullanımı açısından aşağıdaki gibi verilebilir [1].

1. Bir biyoteknolojik ürünün üretilebilmesi için gerekli sürecin (prosesin) ve donanımın (cihazların) tasarlanabilmesi için; Gerekli Pazar araştırması, fiyat analizleri, sürece ilişkin

fiziksel, kimyasal ve biyolojik ön tasarım bilgilerinin laboratuvarında araştırılması, üretimde kullanılacak biyolojik materyele (mikroorganizmaya) ait bilgilerin, yani biyoinformatik bilgilerin doğru olarak saptanması, istatistiksel olarak değerlendirilmesi ve gerekli danışmanlık hizmetlerinin alınması gereklidir. Çünkü ancak böylece yapılması planlanan proste verimlilik belirlenebilecektir. Bir pilot tesisin bu veriler ışığında modellenmesi, simülasyonu, optimizasyonu, tasarlanması ve ölçek büyütme (scale-up) ve diğer biyofizikokimyasal parametrelerinin değişimine ilişkin deneylerin gerçekleştirilmesi, ve böylece tasarım için gerekli verilerin toplanması sağlanmalıdır.

2. Ön tasarım ve ölçek büyütme verileriyle prosesin gerçek boyutlarında yeniden modellenmesi, simülasyonu, optimizasyonu, tasarlanması. Gerekli danışmanlık hizmetlerinin alınması ise tasarım aşamasının son adımıdır.

3. Üretim tesisinin kurulması ve oluşturulan çekirdek kadro ile kurucu firmadan deneme üretiminin sağlanması,

4. İlk yatırım ve üretim giderleri göz önüne alınarak maliyet muhasebesi yardımıyla birim maliyetin belirlenmesi ve

5. Sürecin birey ve toplumsal boyutu da göz önüne alınarak pazarlama stratejilerinin belirlenmesi. Hammadde ve ürün satışlarının optimizasyonu. da yatırım ve işletme aşamasıdır.

Yukarıda genel çizgileri sunulan üretim adımlarında ki bilgilenme süreçlerinde en büyük yardımcılardan biri, sürecin en etkin gerçekleştirilebilmesi, fiziksel alt yapının ve insan kaynaklarının en iyi şekilde kullanılabilmesi için tüm bu süreçlerin içerdiği adımların çok iyi kavranması ile birlikte bilişim teknolojilerinden yararlanılmasıdır.

3. Proseslerin modellenmesi, optimizasyonu ve simülasyonu

Hangi üretim alanında olursa olsun bir prosesin modellenmesi yani başka bir deyişle sürecin fizikokimyasının ya da biyofizikokimyasının ve sürecin içinde gerçekleştiği cihazların matematiksel olarak tanımlanması proses sistem mühendisliğinde esastır.

Ancak bundan sonra sistem simule edilebilir, optimum çalışma koşulları ve optimum cihaz büyüklükleri belirlenebilir ve tasarlanabilir ve özellikle üretim aşamasına geçildiğinde böylece sürecin belirlenen optimum değerlerde yürütmesi için kontrol edilebilir. Yukarıda açıklanan tüm bu adımların en iyi düzeyde gerçekleştirilebilmesi, ancak bu süreçlerin doğru anlaşılması, doğru modellenmesi ve bu modelin matematiksel çözümlenmesi için uygun çözüm tekniklerinin kullanılması ile mümkündür [1]. Matematiksel olarak modellenen sistem, üretim sürecinde izlenirken, değişen sistem parametrelerine göre (sıcaklık, konsantrasyon, pH gibi) içinde bulunulan anı göstermek için çözülür ve sistemin olması gereken parametre değerleri ile arasındaki oluşan farklar bulunur ve böylece sistemin istenen koşullarda çalışabilmesi için müdahale edilebilir. Yani sistem optimum çalışma koşullarına yönlendirilir. Bu adımların tümü ancak, sistemin simule edilebilmesiyle gerçekleştirilebilir.

3.1. Modelleme ve Simulasyon için Yazılım

Simulasyon ve tasarım amaçlı, yalnızca sistemin fizikokimyasal ya da biyofizikokimyasal özelliklerinin girilip simule edildiği ve kullanıcının hiçbir şekilde yazılım olarak müdahale etmediği paket programlar (Chem-Cad gibi) mevcuttur. Bununla birlikte, daha öncede bahsedildiği gibi C++ gibi derleyiciler kullanılarak hazırlanan MAT-LAB türü yazılımlar basit basic komutlarıyla programın hem bazı kesimlerinin yazılıp yönlendirilmesine imkan tanıyarak hem de daha önceden hazırlanan paketlerini de kullanıcının hizmetine sunarak modelleme, simulasyon ve optimizasyon problemlerinin çözümüne kullanıcı açısından kolaylıklar sağlamaktadır. Bu tür programlar not-pad, excel vs. gibi diğer veri depolarıyla da kolayca etkileşime girerek kullanılabilir. Ayrıca, özellikle simulasyon paketi yanında, bir kontrol sistem toolbox paketi ile de on-line bağlı kontrol ünitelerinden doğrudan yada off-line olarak alınan analiz sonuçlarını da alarak anlık olarak işleyebilmekte ve sistemin kontrol edilmesi açısından çözümleyebilmektedir.

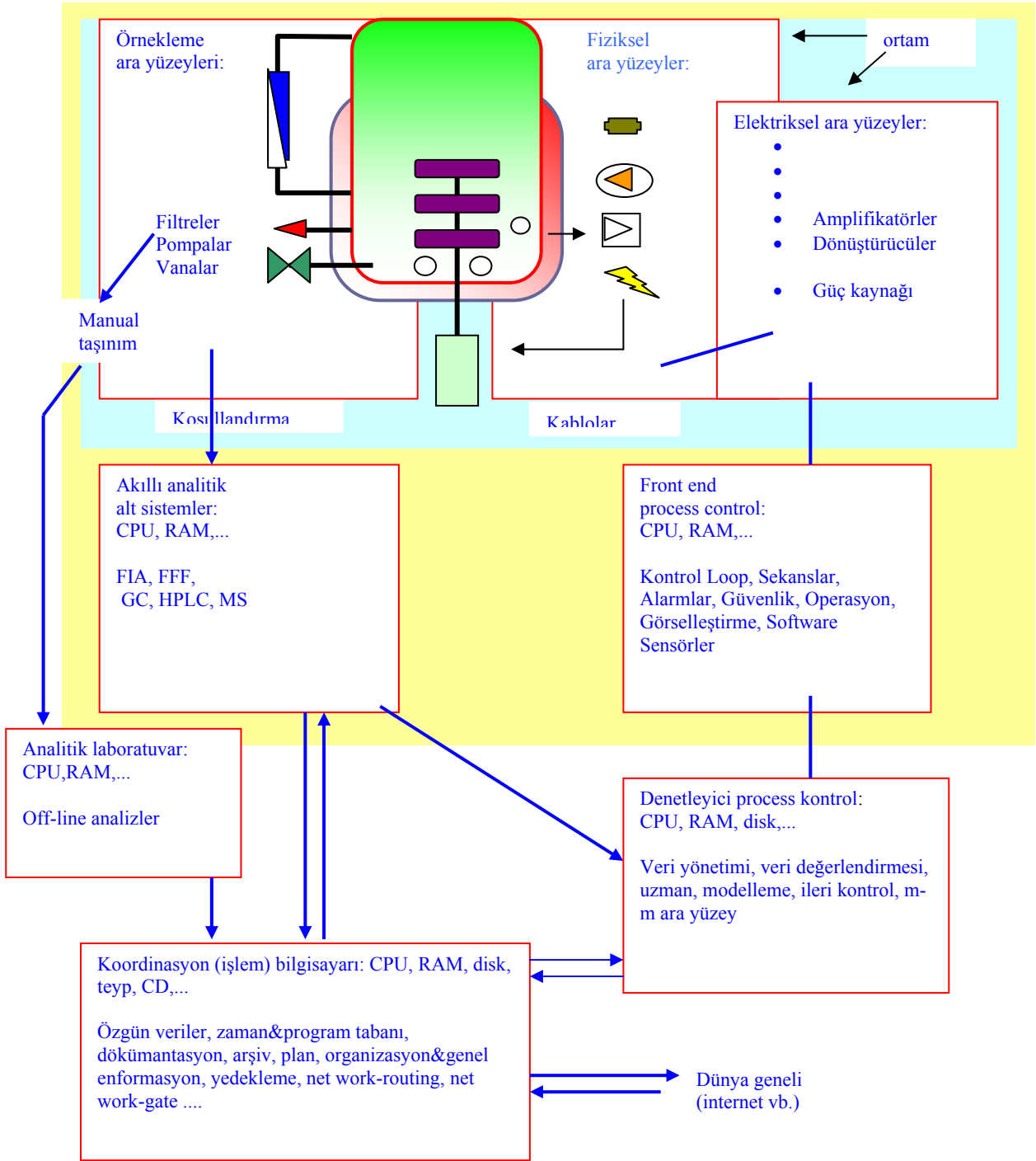
3.2. Proseslerin İzlenmesi ve Kontrolü

Çağdaş prosesler on-line sensor ve cihazlarla yada off-line (manuel) analitik metodlarla

izlenir. Burada amaç ürünün optimum koşullarda ve optimum miktarlarda üretilmesidir. Şekil 1 de hiyerarşik olarak bir biyoprosesin otomasyon sistemi şematik olarak sunulmuştur ve bu şekil incelendiğinde, fiziksel ve örnek almaya ilişkin ara elemanların biyoreaktör ile doğrudan iletişim içinde olup sistemin siteril koşullarını değiştirmeyecek şekilde tasarlandığı anlaşılmaktadır.

Bu sistem elemanları boru, kablo, tüp hatları ile birbirlerine bağlanmışlardır ve analitik alt sistemler ile amplifikatörler, dönüştürücüler ve güç kaynakları, hava besleme ünitelerinin elemanlarının birbirleri ile bağlantısında görev alırlar. Sistemde bulunan bu donanım basamağı ile ön işlem kontrol biriminin arasındaki veri alış verişi bir BUS taşıyıcı sistemi sayesinde gerçekleştirilmektedir. Ön işlem elemanı herhangi bir depolama ünitesine sahip değildir ve görselleştirme ile ilgili veriler bu nedenle denetleyici seviyesine aktarılarak grafik çalışma ortamında uygun hafıza ve depolama kapasitesinde işlenirler. Temel amaç sinyallerden gelecek veri kaybını en alt seviyelere indirerek gerekli kontrol, aktarma ve uygun veri tabanında depolanmasını sağlamaktır. Değerlendirilmiş verilerin yönetimi doğrultusunda denetleyici kontrolör on-line modellemeyi uygun kılacak kaynakları sağlamalıdır. Ancak bu sayede karmaşık kontrol algoritmaları ve uzmanlaşmış veri değerlendirilmesi gerçekleştirilebilir ve insan-makine ara yüzünün uyumu sağlanır. Bu basamak üst akım işlemleri için, alt akım işlemleri ve biyolojik dönüşümler için olmak üzere birden fazla alt katmandan oluşabilir. Pilot ölçekli veya üretim tesisleri gibi daha büyük ölçekli yapılanmalarda bir tesis koordinatörü veya bilgisayar kullanımı tercih edilir. Bu basamak bütün alt basamaklar için özgün zaman seviyesinin yanında gerekli veri tabanı organizasyonunu da sağlamalıdır.

Burada amaç analitik laboratuvarlardan veya ilgili veri tabanlarından alınan off-line verilerin doğru olarak tekrar alınması, değerlendirilmesi ve yönlendirilmesidir. Benzer durum farklı reaktör veya proseslerle ilişkisi olan analitik alt sistemlerden sağlanan veriler içinde geçerlidir. Kullanılacak olan gelişmiş bir bilgisayar ek olarak bütün network için gerekli programları, kılavuzlar, kütüphaneler, yedekleme ve arşiv gibi genel dökümanları da sağlamalıdır.



Şekil 1. Hiyerarşik olarak bir biyoprosesin otomasyon sistemi

4. Kimyasal ve Biyokimyasal Analiz ve Süreçler için Modelleme, Simulasyon ve Optimizasyon Çalışmaları

Bu alanda yapılan çalışmalar geniş bir yelpazede dağılmış olup, bu kısımda yalnızca seçilmiş bazı örnekler üzerinde durulacaktır. Bir sistemin veya sürecin simule edilebilmesi için öncelikle olayın fiziksel, kimyasal ya da biyokimyasal açıdan incelenmesi ve gerçekleşme adımlarının matematiksel denklemlerle ifadesi ya deterministik olarak ya da stokastik olarak tasarlanır. Deterministik modeller başlangıç değerlerine bağlı olarak fiziksel parametrelerin sıkı sıkıya belirlendiği, ilişkilerin bu parametreler çerçevesinde kurulduğu ve başlangıç koşullarına bağlı olarak sistemin tanımlanmasına dayanır ve bundan dolayı da sonuçlar daha kesinlik taşır. Buna karşılık stokastik modeller çok daha az deneysel veriye ihtiyaç duyarken çözümlenmeler olasılıklara dayandığından daha fazla tahmini sonuçları verir. Bu çalışmaların daha iyi anlaşılabilmesi için seçilen bazı örnek uygulamalara aşağıda kısaca değinilmiştir [1].

4.1. Yüksek Performanslı Sıvı Kromatografisinde Bilgisayar Destekli Yöntem Geliştirilmesi

Bu çalışmada bir ilaç hammaddesi ve olası yan ürünlerinin bir yüksek performanslı sıvı kromatografisinde (HPLC) optimum koşullarda analizi için bir yöntem geliştirilmesi üzerinedir. Burada optimizasyon için doğrudan program yazımı yerine DryLab adlı bir bilgisayar simulasyon yazılımı tercih edilmiştir [11].

Çalışmada asıl amaç HPLC de yeterli çözünürlüğü ve makul bir çalışma zamanına sahip gerçekçi optimal deneysel çalışma koşullarının saptanması için kromatografik bir ayırma yönteminin geliştirilmesidir. Böylece daha az sayıda çalışmayla hem zaman hem de emek tasarruf edilmiş olacaktır. Yapılan işlem iki çalışma parametresinin eşanlı olarak optimizasyonuna dayanmakta olup daha sonra da kolon çalışma koşullarının optimizasyonu tartışılmıştır. Ardından da elde edilen optimizasyon sonuçları deneysel çalışmalarla karşılaştırılmıştır. Optimizasyon için matematiksel model gerektirmeyen algoritmalarından en sık karşılaşılanı Simplex olup, burada sabit aralıklı Simplex

algoritmasından söz edilecektir. İşlemin ana adımları aşağıdaki gibidir:

4.2 Biyokimyasal Reaksiyonlarda Konsantrasyon Verilerinin Değerlendirilmesi

Bu bölüm bir fermentör de zamana bağlı olarak kaydedilen biyokütle, substrat ve asetat konsantrasyon verilerinin istatistiksel açıdan değerlendirilip grafikler halinde sunumuna ve bu verilerle çizilen konsantrasyon eğrilerinin her birinin matematiksel olarak ifade edilebilmesi ya da diğer bir deyişle regresyonu ve korelasyonuna ilişkindir [32].

4.3 Bir Nöron Hücresindeki İyonların Aksiyon Potansiyelini Oluşturmalarının Modellenmesi

Canlı bünyesinde bulunana sinir sistemindeki bir nöron hücrelerinde uyarılabilir hücreler tarafından belirli noktalara iletilmesi için üretilen elektriksel sinyallerin aktarılmasında hücre membranında bulunan iyon kanalları büyük rol oynamaktadırlar.

Bu iyon kanallarındaki akan akımların makroskobik modeli Hodgkin-Huxley tarafından geliştirilmiştir. Ancak bu modelde iyon kanallarının stokastik açılma ve kapanma özelliği göz ardı edilmiştir. Neher ve Sakman tarafından geliştirilen patch-clamp tekniği ile ise sadece bir iyon kanalı üzerinden geçen akımın ölçülmesi mümkün olmuştur. Bu deneysel teknik ile elde edilen sonuçlarda iyon kanalının temelde rast gele açılıp kapanan stokastik bir eleman olduğu anlaşılmıştır. DeFelice ve Isaac tarafından yapılan çalışmada ise grup halinde bulunan iyon kanallarının uyartım olmadığı halde dinlenme potansiyeli, aksiyon potansiyeli, ateşleme gibi bilinen makroskobik özelliklere sahip olduğu gösterilmiştir.

Bu çalışmada nöronun kendi iç yapısından dolayı oluşan kanal gürültüsünün membran gerilimi üzerindeki etkileri incelenmiştir ve ilk olarak Hodgkin-Huxley nöron modeli kanal gürültüsünü içerecek şekilde genişletilmiştir. Elde edilen model ile dışardan uyartım olmaksızın farklı membran alanının göz önüne alınması durumunda oluşan membran gerilimleri incelenmiştir [33, 34].

4.4 Deterministik Ve Stokastik Süreçlerin Modellenmesinde Karşılaşılan Diferansiyel Denklemlerin Çözümü

Bu süreçlerde rastlanan diferansiyel denklemler çoğunlukla bir başlangıç değer problemi olup çözümlenmeleri için değişik metotlar geliştirilmiştir. En sık karşılaşılan Euler metodu olup bu metotta verilen başlangıç değerleri ile seçilen adım büyüklüğüne bağlı olarak her adımın sonundaki değişim aşağıdaki gibi hesaplanır [16, 32]:

$$\begin{aligned} \text{Dif. Denklem:} & \quad dy/dx=f(y,x) \\ \text{Başlangıç Koş:} & \quad x=0; y(0)=y_0 \\ \text{Adım Aralığı:} & \quad \Delta x=h \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{n. adımdaki artış:} & \quad y_{n+1}=y_n+f(y_n,x_n) \\ & \quad x_{n+1}=x_n+\Delta x \end{aligned}$$

olarak bulunur. Yeterli doğrulukta bir sonuca ulaşmak için adım aralığı (Δx) yeterince küçük seçilmelidir. Bu hesaplamaların gerçekleştirilebilmesi için MATLAB vb. gibi uygun bir yazılım seçilerek işlemler programlanır.

4.5 Kimyasal Analiz Verilerinin Değerlendirilmesinde İki Ve Üç Boyutlu Grafiklerin Kullanımı

Kimyasal analizlere ilişkin değerlendirilmelerde verilerinin doğrudan iki veya üç boyutlu grafiklerinin çizimi ya da analiz parametrelerinin optimizasyonunda veriler yardımıyla iki veya üç boyutlu gösterimlerin oluşturulması ve deneysel sonuçlarla birlikte gösterimi ile birlikte doğru veya yüzey biçimindeki bu optimizasyon eğrilerinin ve/veya yüzeylerin en küçük kareler yöntemiyle bulunmasında MATLAB gibi yazılımlara ihtiyaç duyulur. Bu bölümde de çok kısaca üç boyutlu grafiklendirme üzerinde durulmuştur [14].

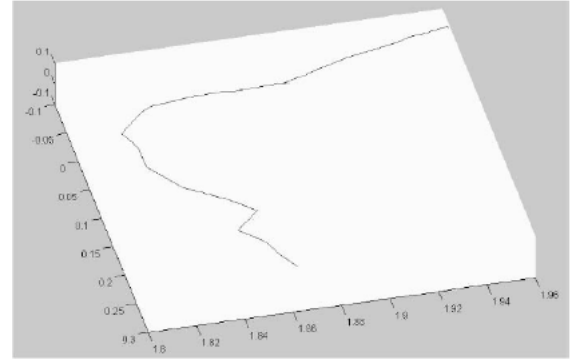
Aşağıda bir m-file editöründe yazılmış bir üç boyutlu çizim örneği sunulmuştur.

% P: Veri Matrisi

```
P=[ ... , ... , ... ;
    ... , ... , ... ;
    ..... ;
    ... , ... , ... ]
```

```
plot3(P(:,1), P(:,2), P(:,3))
```

Çizilen 3 boyutlu P grafiği ile bu grafiğin döndürülmesi ile elde edilen farklı bir görüntüsü Şekil 2'de gösterilmiştir.



Şekil 2 Çizilen 3 boyutlu P grafiği

4.6 Optimizasyon Ve Deneysel Tasarım

Yüksek performanslı sıvı kromatografisinde (HPLC) bilgisayar destekli yöntem geliştirilmesine ilişkin 4.1 bölümünde sunulan çalışma, bir ilaç hammaddesi ve olası yan ürünlerinin optimum koşullarda analizi üzerine olup optimizasyon için doğrudan programlama yerine DryLab adlı bir bilgisayar simülasyon yazılım pakedi tercih edilmişti [11]. Bu bölümde ise optimizasyon ve deneysel tasarımına ilişkin daha ayrıntılı açıklamalar üzerinde durulacaktır [35].

Genel olarak analitik kimyada bir yöntemin optimizasyonu çalışma parametreleri olarak da adlandırılan pH, kimyasallarının konsantrasyonu, sıcaklık, çözgen, karışımın bileşenleri gibi faktörlere karşı reaksiyon hızı gibi yöntemin cevabının (responsunun, çözünürlüğünün) irdelenmesine dayanır. Yapılan deneysel tasarımın değerlendirilmesi cevap yüzeyinin çizilmesi ve optimum nokta bölgesinin taranmasıyla gerçekleştirilir.

4.7 Monte Carlo Simülasyon Metodunun Nükleer Kimyadaki Uygulamaları

Monte Carlo metodu, olasılık teorisi üzerine kurulu bir sistemdir. Monte Carlo metodunda istatistiksel ve matematiksel tekniklerle bir deneyi veya çözülmesi gereken bir fiziksel olayı tesadüfi sayıları defalarca kullanarak simüle etmek esastır. Günümüzde bu metot, fizik ve matematik problemlerinin çözümünde MCNP(Monte Carlo N – Parçacık Taşınım) kodunu kullanarak özellikle nükleer transport

hesaplamalarda iyi sonuçlar vermektedir [36, 37, 38].

4.8. Üç Boyutlu Hareketlerin Modellenmesi

Bir fermentörde çoğalan mikroorganizmaların miktarlarına bağlı olarak buldukları ortamda üç boyutlu hareketlerinin modellenmesi öncelikle mikroorganizmanın büyüme kinetik esasları çerçevesinde kütle miktarlarının bulunması ile eş zamanlı olarak mikroorganizmaların fermentördeki üç boyutlu rastgele dağılım hareketlerinin akışkan moleküllerinkine benzetilerek modellenip görsel olarak izlenebilmesine dayanır. Burada büyüme kinetiğinin ifade edilmesinde en basit gösterim olan Monod büyüme kinetiği denklemi ile parçacıkların rastgele hareketlerinin modellenmesinde Brownian hareket denklemi seçilmiştir. Hazırlanan matematik modele ilişkin yazılan algoritmanın uygulanması MATLAB yazılımı kullanılarak gerçekleştirilmiş olup biçimsel olarak üç boyutlu grafikte gösterilen mikroorganizma hareketi video filmine dönüştürülmüştür [39].

4.9. Molekül Modelleme ve HyperChem kullanarak MO diagramlarını oluşturma

Kuantum teorisinin geliştirilmesinden hemen sonra, kuantum mekanik kanunları atom ve moleküllere uygulanmaya başlanmıştır. Prensipler olarak, kuantum teorisi ile bir molekülün bütün kimyasal özellikleri hesaplanabilir. Aslında bir bileşiğin yapısı ve kimyası deneysel yöntemlerle belirlenebilir, ancak hesaplama yolu ile öngörünün yapılabilmesi çok yararlıdır ve pek çok uygulama alanı bulmuştur. Örneğin farmakolojide yeni ilaçların geliştirilmesinde yaygın olarak kullanılmaktadır. Kimyacılar bilgisayar kullanarak sentezden önce ilaçların yapıları hakkında ön bilgiye sahip olurlar, ilaçta istenen özellikleri belirlerler, sonra bu özelliklere uygun sentezleri gerçekleştirirler [40, 41].

5 Sonuçlar

Bu çalışmada kimyanın temel alanlarında karşılaşılabilecek bilişim uygulamaları üzerinde durulmuş olup çok geniş bir alanı kapsayan bu uygulamalar bu temel alanlar çerçevesinde sınıflandırılarak, yazılımlar hem

yapısal olarak hem de pratik kullanımları açısından ele alınmıştır. Kimya ve kimyasal işlemlerin yer aldığı süreçlere bakıldığında karşılaşılan temel alanlar koordinasyon kimyasını da kapsayan anorganik kimya ve organik teknolojiler, fizikokimya ve nanoteknolojiler, reaksiyon ve katalizör teknolojileri ile nükleer teknolojiler, biyokimya, biyoinformatik ve biyoteknoloji ile analitik kimya ve deneysel ölçüm ve değerlendirme teknolojileri ile analiz laboratuvarlarının bilişim yönetim teknolojileri ve tüm bu teknolojilerin üretim süreçlerine aktarıldığı kimyasal süreçlerinin optimizasyonu ile modellenmesinin simülasyonunun, kontrolünün ve tasarımının gerçekleştirildiği mühendislik çözümleri olarak sınıflandırılabilir.

5. KAYNAKLAR

- [1] Akpolat, O., 2004, Information Processes in Technology for Sustainable Developments and Biotechnology, Turkish Electronic Journal of Biotechnology, 2, 11-16.
- [2] Brockman, J. (Editor-2002, The Next Fifty Years), 2007, Gelecek 50 Yıl - 21. Yüzyılın İlk Yarısında Hayat ve Bilim (Tercüme: N. Elhüseyni), NTV Yayınları.
- [3] Nikoukaran, J., Paul, R. J., 1999, Software Selection for Simulation in Manufacturing, Simulation Practice and Theory, 7(1-14).
- [4] Petrucci, R. H., Harwood, W. S., Herring, F. G., Madura, J. D., 2007, General chemistry: principles and modern applications, Pearson Education International.
- [5] Perry, R. H., Chilton, C.H., 1973, Chemical Engineers Handbook, 5 th. Edition, McGAW-HILL.
- [6]. Saltelli, A., Ratto, M., Tarantola, S., Campolongo, F., 2005, Sensitivity Analysis for Chemical Models, Chem. Rev. 105, 2811-2827.
- [7]. Bersohn, M., Esack, A., 1976, Computers and Organic Synthesis, Chemical Reviews, Vol. 76, No. 2.
- [8] Hansch, C., Hoekman, D., Leo, A., Weininger, D., Selassie, C. D., 2002, Chem-Bioinformatics: Comparative QSAR at the Interface between Chemistry and Biology, Chem. Rev. 102, 783-812.

- [9] **Klem, M. L., Lewis, L. J.**, 1990, Simulation of Dynamical Processes in Molecular Solids, Chem. Rev. 1990, 90, 459-479.
- [10] **Hlupic, V.**, 1999, Simulation Software : Users' Requirements, Computers & Industrial Engineering 37, 185-188.
- [11] **Hoang, T. H., Cuerrier, D., McClintock, S., Maso, M. D.**, 2003, Computer-assisted method development and optimization in high-performance liquid chromatography, Journal of Chromatography A, 991, 281–287.
- [12] **Akpolat, O.**, 2004, The Collectional of Data and Computational programming for Modeling and Simulation in a Model Supported Way for Batch and Fed Batch Fermentation Units, Turkish Electronic Journal of Biotechnology, 2, 1-10.
- [13] **Akpolat, O.**, 2004, Biyoteknolojide Süreçlerin Modellenmesi, Simulasyonu ve Optimizasyonunda Temel MatLab Uygulamaları (Organizasyon: **D. Kazan**), Kurs Notları, Marmara Üniv., Kim. Müh. Böl.
- [14] **Brereton, R. G.**, 2003, Chemometrics: Data Analysis for thje Laboratory and Chemical Plant, John Wiley & Sons Ltd.
- [15] **LIMS Ürün Tanıtım Broşürü**, 2002, LABWORKS Enterprise Laboratory Information Management System, BRP20215 Printed in USA © 2002 PerkinElmer, Inc.
- [16] **Jenson, V. G., Jeffreys, G. V.**, 1977, Mathematical Methods in Chemical Engineering, Academic Pres.
- [17] **Ören, T., Üney, T., Çölkesen, R., (Editörler)**, 2006, Türkiye Bilişim Ansiklopedisi, Papatya Yay. Eğit. A.Ş. ve Türkiye Bilişim Vakfı, 55, 144, 162, 200, 250, 436, 590, 1100.
- [18] **Çakır, A., Seren, N. E.**, 2006, Otomatik Kontrol Sistemleri, Akademik Bilişim Konferansı, Kütahya Üniv.
- [19] **Ertaş, H., Ertaş, F. N.**, 2001, Analitik Kimyada Veri İşleme ve Değerlendirme, Ders Notları, Ege Üniv. Fen Fak. Kim. Böl. Analitik Kim. A. B. D.
- [20] **ACD/ChemSketch 11.0 Freeware Ürün Tanıtımı**, 2008, <http://www.acdlabs.com/download/chemsk.html>, 27 May.
- [21] **ChemAxon Ürün Tanıtımı**, 2008, <http://www.chemaxon.com/products.html?gclid=CIfg8JC6xpMCFRW01QodhHZ6Bg>, 27 May.
- [22] **Arifoğlu, U.**, 2005, MATLAB 7.04, SIMULINK ve MÜHENDİSLİK UYGULAMALARI, Alfa Basım Yayın Ltd. Şti.
- [23] **TS EN ISO/IEC 17025 Türk Standardı**, 2005, Deney ve Kalibrasyon laboratuarlarının Yeterliliği İçin Genel Şartlar, T.S.E.K.
- [24] **TS EN ISO/IEC 27001 Türk Standardı**, 2006, Bilgi Teknolojisi-Güvenlik Teknikleri-Bilgi Güvenliği Yönetim Sistemleri-Gereksinimler, T.S.E.K.
- [25] **Ersoy, E.**, 2006, İnternette Güvenlik, Virüs, Spam, Bireysel Savunma, Akademik Bilişim Konferansı, Kütahya Üniv.
- [26] **Bilgi Güvenliği Ürün Tanıtım**, 2008, Güvenlik, <http://www.gentekbilgisayar.com/guvenlik.html>, 27 May.
- [27] **Uysal, M.**, 1999, Excel Word 2000 ile Etkin Cozumler, I. Baskı., Beta Basım Yayın Dagitim A.Ş.
- [28] **Günaydin, V.**, 2008, Introduction to SQL, http://www.w3schools.com/sql/sql_intro.asp, 27 May.
- [29] **Hou, T., Xu, X.**, 2001, A new molecular simulation software package – Peking University Drug Design System (PKUDDS) for structure-based drug design, Journal of Molecular Graphics and Modelling 19, 455–465.
- [30] **Gündüz, G., Akpolat, O., Gürbüz, D.**, 2000, Gaz Kromatografisi Teori ve Uygulamaları, Kurs Notları, E.Ü. Ebiltem Yayınları.
- [31] **İstatistik Ürün Tanıtımı**, 2008, SPSS 16.0, http://www.spss.com/spss/whats_new_base.htm, 27 May.
- [32] **Lübbert, A., Simutis, R., Volk, N., Galvanuskas, V.**, (2000), Biochemical Process Optimization and Control. Hands-on Course, , 2000, Martin Luther Universität-Germany.
- [33] **Star, C., McMillan, B.**, 1995, Human Biology, 5 th. Edition, Wadsworth Publishing Company.
- [34] **Ekmekçi, N. H., Özer, M.**, 2008, Nöron Modellemede Gürültü Analizi İçin Stokastik Hodgkin-Huxley Modeli, http://www.emo.org.tr/resimler/ekler/31b342_d8a83408e_ek.pdf, 30 May.
- [35] **Otto, M.**, 1999, Chemometrics: Statics and Computer Application in Analytical Chemistry, Wiley-Vch Verlag GmbH.

- [36] **Hançerlioğulları, A.**, 2006, Monte Carlo Metodu ve MCNP Kod Sistemi, Kastamonu Eğitim Dergisi, 14, 2, 545-556.
- [37] **Gültekin, A. T., Asyalı M. H.**, 2008, Pi Sayısının Monte Carlo Methodu ve Gregory/Leibniz Formülüyle Hesaplanması, <http://joy.yasar.edu.tr/arsiv/n7v2/>
- [38] **Friedlander, G., Kennedy, J. W., Macias, E. S., Miller, J. M.**, 1981, Nuclear and Radiochemistry, John Wiley & Sons Ltd.
- [39] **Akpolat, O.**, 2007, Bir Fermentörde Çoğalan Mikroorganizmaların Buldukları Ortamdaki Üç Boyutlu Hareketlerinin Modellenmesi, Akademik Bilişim Konferansı, Kütahya Üniv.
- [40] **Inorganik Lab. Ders. Not**, 2008, MOLEKÜL MODELLEME, HyperChem kullanarak MO diagramlarını oluşturma, <http://w3.gazi.edu.tr/web/nkaracan/inorglab/mm.pdf>, 27 May.
- [41] **HyperChem Ürün Tanıtım**, 2008, Computational Chemistry, <http://www.compuchem.com/index.html>, 27 May.