

**T.C.**  
**GEBZE TEKNİK ÜNİVERSİTESİ**  
**FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**ELEKTROOKSİDASYON PROSESİ İLE İLAÇ ENDÜSTRİSİ**  
**ATIK SULARINDAN FARMASÖTİK MİKRO KİRLETİCİLERİN**  
**GİDERİMİNİN YAPAY SİNİR AĞI YAKLAŞIMIYLA**  
**MODELLENMESİ**

**DORUKAN UĞUR YILMAZKULAŞ**  
**YÜKSEK LİSANS TEZİ**  
**ÇEVRE MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI**

**GEBZE**  
**2017**

**T.C.  
GEBZE TEKNİK ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**ELEKTROOKSİDASYON PROSESİ  
İLE İLAÇ ENDÜSTRİSİ ATIK  
SULARINDAN FARMASÖTİK  
MİKRO KİRLETİCİLERİN GİDERİMİNİN  
YAPAY SİNİR AĞI YAKLAŞIMIYLA  
MODELLENMESİ**

**DORUKAN UĞUR YILMAZKULAŞ  
YÜKSEK LİSANS TEZİ  
ÇEVRE MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI**

**DANIŞMANI  
PROF. DR. ANATOLİ DİMOGLO**

**GEBZE**

**2017**

**T.R.**  
**GEBZE TECHNICAL UNIVERSITY**  
**GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES**

**THE ARTIFICIAL NEURAL NETWORK  
MODELING OF PHARMACEUTIC MICRO  
CONTAMINANTS REMOVAL FROM  
PHARMACEUTICAL INDUSTRY  
WASTEWATER WITH  
ELECTROOXIDATION PROCESS**

**DORUKAN UĞUR YILMAZKULAŞ**  
**A THESIS SUBMITTED FOR THE DEGREE OF  
MASTER OF SCIENCE**  
**DEPARTMENT OF ENVIRONMENTAL ENGINEERING**

**THESIS SUPERVISOR**  
**PROF. DR. ANATOLI DIMOGLO**

**GEBZE**

**2017**



## YÜKSEK LİSANS JÜRİ ONAY FORMU

GTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun  
....07..../...06...../2017..... tarih ve .....2017...../.....30..... sayılı kararıyla  
oluşturulan jüri tarafından ...19...../...06...../2017.... tarihinde tez savunma sınavı  
yapılan Dorukan Uğur YILMAZKULAŞ'ın tez çalışması Çevre Mühendisliği  
Anabilim Dalında YÜKSEK LİSANS tezi olarak kabul edilmiştir.

### JÜRİ

ÜYE

(TEZ DANIŞMANI) : PROF. DR. Anatoli DİMOGLO

ÜYE

: YRD. DOÇ. DR. Bülent HEKİMBAŞI

ÜYE

: YRD. DOÇ. DR. Pınar Sevim ELİBOL

### ONAY

Gebze Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun  
...../...../..... tarih ve ...../..... sayılı kararı.

### İMZA/MÜHÜR

Doç. Dr. Arif Çağdaş AYDINOĞLU  
Gebze Teknik Üniversitesi  
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

## ÖZET

Farmasötik mikro kirleticilerin, düşük konsantrasyonda dahi çevre üzerinde olumsuz baskıları vardır. Bu baskılar çevreyi ciddi anlamda tehdit eder duruma gelmiştir. Mikro kirleticilerin gideriminde, alternatif artırma prosesleri arayışı gündeme gelmiştir. Elektro-oksidasyon yöntemi, arıtma maliyetini ve sistem boyutunu önemli ölçüde azalttığından arıtım konusunda ileri çıkmaktadır. Ancak laboratuvar ölçekli yapılan çalışmaların, ilaç endüstrisinin atık sularındaki davranış biçiminin konvansiyonel modelleme teknikleri ile anlaşılabilmesi pek mümkün değildir.

Bu çalışmada, beş farklı kanser ilaç etken maddesi için farklı zamanlarda, akım yoğunluklarında, pH'larda, elektrolit konsantrasyonlarında, düzenekler hazırlanılıp elektrooksidasyon arıtma yöntemi uygulanmıştır ve atık suların içindeki mikro kirleticilerin giderim oranı incelenmiştir. Yapılan deneylerdeki tüm veriler yapay sinir ağı yaklaşımıyla modellenip, sonuçlar incelenmiştir. Bu sonuçlar doğrultusunda ilaç endüstrisi atık sularında bulunan etken maddelerin giderimi hakkında yorum yapılabileceği anlaşılmıştır.

**Anahtar Kelimeler: Elektrooksidasyon, Yapay Sinir Ağı (YSA).**

## SUMMARY

Pharmaceutical micro-pollutants have negative environmental impacts even at low concentrations. These pressures have become a serious threat to the environment. In the elimination of micro-pollutants, the search for alternative treatment processes has come to an end. The electrooxidation method is advancing in the field of purification also it reduces the cost of purification and system size considerably. However, it is unlikely that laboratory-scale studies will understand the behavior of the pharmaceutical industry in wastewater by conventional modeling techniques.

In this study, electro-oxidation treatment method was applied to five different cancer drug substances at different times, current densities, pHs, electrolyte concentrations, and the removal rate of the micro contaminants in wastewater was investigated in the laboratory environment. All data in the experiments were modeled with artificial neural network approach and the results were examined. As a result of these results, it has been understood that comments on the treatments of the active substances in the pharmaceutical wastewater can be made.

**Key Words: Electrooxidation, Artificial Neural Network (ANN).**

## TEŞEKKÜR

Başta, yüksek lisans eğitimimde ve akademik hayatımda desteğini ve yardımlarını hiçbir zaman esirgemeyip bilgisi ile bu çalışmanın oluşmasının yolunu açan danışmanım Ar. Gör. Özge Türkay'a, bütün çalışmam boyunca yanımda olan bilgi ve tecrübelerini benimle paylaşan değerli hocam Dr. Sibel Barışçı'ya, ayrıca göstermiş olduğu desteklerinden dolayı danışmanım Prof Dr. Anatoli Dimogla'ya, son olarak ise her zaman yanımda olan aileme en içten teşekkürlerimi sunarım.

# İÇİNDEKİLER

|                                                            | <b><u>Sayfa</u></b> |
|------------------------------------------------------------|---------------------|
| ÖZET                                                       | v                   |
| TEŞEKKÜR                                                   | vii                 |
| İÇİNDEKİLER                                                | viii                |
| SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ                             | x                   |
| ŞEKİLLER DİZİNİ                                            | xi                  |
| TABLolar DİZİNİ                                            | xiv                 |
| <br>                                                       |                     |
| 1. GİRİŞ                                                   | 1                   |
| 1.1. Tezin Amacı, Katkısı ve İçeriği                       | 1                   |
| 2. GENEL BİLGİLER                                          | 3                   |
| 2.1. İlaç Endüstrisi                                       | 3                   |
| 2.2. İlaç Endüstrileri Atık Suları                         | 4                   |
| 2.2.1. İlaç Endüstrisi Atıksularının Özellikleri           | 4                   |
| 2.2.2. İlaç Endüstrisi Atıksularının Arıtım Yöntemleri     | 5                   |
| 2.3. Onkoloji İlaçları                                     | 6                   |
| 2.4. Elektrooksidasyon Prosesi                             | 7                   |
| 2.4.1. Elektrooksidasyon Teorisi                           | 8                   |
| 2.5. Yapay Sinir Ağları                                    | 9                   |
| 2.5.1. Yapay Sinir Hücresinin Temel Bileşenleri            | 10                  |
| 2.5.2. Yapay Sinir Ağının Yapısı                           | 12                  |
| 2.5.3. Yapay Sinir Ağlarında Öğrenme                       | 13                  |
| 3. MATERYAL ve METODLAR                                    | 15                  |
| 3.1. Yapay Sinir Ağının Modellenmesi                       | 15                  |
| 3.1.1. Metotreksat Etken Maddesinin Model Tercih Seçimleri | 21                  |
| 3.1.2. İmatinib Etken Maddesinin Model Tercih Seçimleri    | 32                  |
| 3.1.3. Karboplatin Etken Maddesinin Model Tercih Seçimleri | 43                  |
| 3.1.4. Kapesitabin Etken Maddesinin Model Tercih Seçimleri | 54                  |
| 3.1.5. İohexsol Etken Maddesinin Model Tercih Seçimleri    | 65                  |

|                                                |        |
|------------------------------------------------|--------|
| 3.2. Yapay Sinir Ağ Modelinin Veri Testleri    | 76     |
| 3.2.1. Metotreksat Etken Maddesinin Veri Testi | 77     |
| 3.2.2. İmatinib Etken Maddesinin Veri Testi    | 79     |
| 3.2.3. Karboplatin Etken Maddesinin Veri Testi | 80     |
| 3.2.4. Kapesitabin Etken Maddesinin Veri Testi | 81     |
| 3.2.5. İohexsol Etken Maddesinin Veri Testi    | 82     |
| 4. SONUÇLAR ve YORUMLAR                        | 83     |
| <br>KAYNAKLAR                                  | <br>85 |
| ÖZGEÇMİŞ                                       | 88     |

## SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ

### Simgeler ve Açıklamalar

#### Kısaltmalar

|            |   |                                      |
|------------|---|--------------------------------------|
| dk         | : | Dakika                               |
| mA         | : | Mili Amper                           |
| mg         | : | Miligram                             |
| L          | : | Litre                                |
| R          | : | Korelasyon Katsayısı                 |
| pH         | : | Hidrojen Potansiyeli                 |
| EPOCH      | : | Bir döngünün tam olarak tamamlanması |
| Hidden     | : | Gizli Katman                         |
| Layer      |   |                                      |
| IMT        | : | İmatinib                             |
| Input      | : | Dış Ortamdan Yapılan Veri Girişleri  |
| IOX        | : | İoheksol                             |
| KPS        | : | Kapesitabin                          |
| KRP        | : | Karboplatin                          |
| MSE        | : | En Küçük Kareler Yöntemi             |
| MTX        | : | Metotreksat                          |
| Output     | : | Veri Çıkışı                          |
| Output     | : | Çıkış Katmanı                        |
| Layer      |   |                                      |
| Ru         | : | Rutenyum                             |
| Target     | : | Yapay Sinir Ağı Hedef Verileri       |
| Test       | : | Yapay Sinir Ağı Testi                |
| Ti         | : | Titanyum                             |
| Training   | : | Yapay Sinir Ağı Eğitimi              |
| Validation | : | Yapay Sinir Ağı Validasyonu          |
| YSA        | : | Yapay Sinir Ağı                      |

## ŞEKİLLER DİZİNİ

| <b><u>Sekil No:</u></b>                                                                      | <b><u>Sayfa</u></b> |
|----------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------|
| 2.1: Yapay Sinir Hücre Yapı Mimarisi.                                                        | 11                  |
| 2.2: Aktivasyon Fonksiyon Örnekleri.                                                         | 11                  |
| 2.3: Örnek Yapay Sinir Ağ Yapısı.                                                            | 12                  |
| 2.4: İleri Beslemeli Yapay Sinir Ağ Mimarisi.                                                | 14                  |
| 2.5: Geri Beslemeli Yapay Sinir Ağ Mimarisi.                                                 | 14                  |
| 3.1: İlaç Etken Maddeleri İçin Kullanılacak Genel Yapay Sinir Ağ Modeli.                     | 18                  |
| 3.2: MTX Modeli için Trainbfg Komutunun 2. Regresyon Analiz Sonuçları.                       | 22                  |
| 3.3: MTX Modeli için Trainbfg Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2. Analiz Sonuçları.          | 23                  |
| 3.4: MTX Modeli için Traincgf Komutunun 2. Regresyon Analiz Sonuçları.                       | 24                  |
| 3.5: MTX Modeli için Traincgf Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2. Analiz Sonuçları.          | 25                  |
| 3.6: MTX Modeli için Trainscg Komutunun 2.Regresyon Analiz Sonuçları.                        | 26                  |
| 3.7: MTX Modeli için Trainscg Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2. Analiz Sonuçları.          | 27                  |
| 3.8: Metotreksat Etken Maddesinin Optimum Modelinin Regresyon Analiz Sonuçları.              | 29                  |
| 3.9: Metotreksat Etken Maddesinin Optimum Modelinin En Küçük Kareler (MSE) Analiz Sonuçları. | 30                  |
| 3.10: Metotreksat İlaç Etken Maddesi İçin Optimize Edilmiş Yapay Sinir Ağı Modeli.           | 31                  |
| 3.11: IMT Modeli için Trainbr Komutunun 2. Regresyon Analiz Sonuçları.                       | 33                  |
| 3.12: IMT Modeli için Trainbr Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2. Analiz Sonuçları.          | 34                  |
| 3.13: IMT Modeli için Traincgf Komutunun 2.Regresyon Analiz Sonuçları.                       | 35                  |

|       |                                                                                         |    |
|-------|-----------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 3.14: | IMT Modeli için Traincgf Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2. Analiz Sonuçları.          | 36 |
| 3.15: | IMT Modeli için Traincgp Komutunun 2. Regresyon Analiz Sonuçları.                       | 37 |
| 3.16: | IMT Modeli için Traincgp Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2. Analiz Sonuçları.          | 38 |
| 3.17: | İmatinib Etken Maddesinin Optimum Modelinin Regresyon Analiz Sonuçları.                 | 40 |
| 3.18: | İmatinib Etken Maddesinin Optimum Modelinin En Küçük Kareler (MSE) Analiz Sonuçları.    | 41 |
| 3.19: | İmatinib İlaç Etken Maddesi İçin Optimize Edilmiş Yapay Sinir Ağı Modeli.               | 42 |
| 3.20: | KRP Modeli İçin Trainbfg Komutunun 2.Regresyon Analiz Sonuçları.                        | 44 |
| 3.21: | KRP Modeli İçin Trainbfg Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2.Analiz Sonuçları.           | 45 |
| 3.22: | KRP Modeli İçin Traingdx Komutunun 2. Regresyon Analiz Sonuçları.                       | 46 |
| 3.23: | KRP Modeli İçin Traingdx Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2. Analiz Sonuçları.          | 47 |
| 3.24: | KRP Modeli İçin Trainlm Komutunun 2. Regresyon Analiz Sonuçları.                        | 48 |
| 3.25: | KRP Modeli İçin Trainlm Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2. Analiz Sonuçları.           | 49 |
| 3.26: | Karboplatin Etken Maddesinin Optimum Modelinin Regresyon Analiz Sonuçları.              | 51 |
| 3.27: | Karboplatin Etken Maddesinin Optimum Modelinin En Küçük Kareler (MSE) Analiz Sonuçları. | 52 |
| 3.28: | Karboplatin İlaç Etken Maddesi İçin Optimize Edilmiş Yapay Sinir Ağı Modeli.            | 53 |
| 3.29: | KPS Modeli İçin Traincgf Komutunun 2. Regresyon Analiz Sonuçları.                       | 55 |

|        |                                                                                         |    |
|--------|-----------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 3.30:  | KPS Modeli İçin Traincgf Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2.Analiz Sonuçları.           | 56 |
| 3.31:  | KPS Modeli İçin Traingdx Komutunun 2.Regresyon Analiz Sonuçları.                        | 57 |
| 3.32:  | KPS Modeli İçin Traingdx Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2. Analiz Sonuçları.          | 58 |
| 3.33:  | KPS Modeli İçin Trainlm Komutunun 2. Regresyon Analiz Sonuçları.                        | 59 |
| 3.34:  | KPS Modeli İçin Trainlm Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2.Analiz Sonuçları.            | 60 |
| 3.35:  | Kapesitabin Etken Maddesinin Optimum Modelinin Regresyon Analiz Sonuçları.              | 62 |
| 3.36:  | Kapesitabin Etken Maddesinin Optimum Modelinin En Küçük Kareler (MSE) Analiz Sonuçları. | 63 |
| 3.37:  | Kapesitabin İlaç Etken Maddesi İçin Optimize Edilmiş Yapay Sinir Ağı Modeli.            | 64 |
| 3.38:  | IOX Modeli İçin Trainbr Komutunun 2. Regresyon Analiz Sonuçları.                        | 66 |
| 3.39:  | IOX Modeli İçin Trainbr Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2.Analiz Sonuçları.            | 67 |
| 3.40:  | IOX Modeli İçin Trainlm Komutunun 2. Regresyon Analiz Sonuçları.                        | 68 |
| 3.41:  | IOX Modeli İçin Trainlm Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2. Analiz Sonuçları.           | 69 |
| 3.42:  | IOX Modeli İçin Trainoos Komutunun 2. Regresyon Analiz Sonuçları.                       | 70 |
| 3.43:  | IOX Modeli İçin Trainoos Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2. Analiz Sonuçları.          | 71 |
| 3.44:  | İoheksol Etken Maddesinin Optimum Modelinin Regresyon Analiz Sonuçları.                 | 73 |
| 3.45:  | İoheksol Etken Maddesinin Optimum Modeli için En Küçük Kareler (MSE) Analiz Sonuçları.  | 74 |
| 3.46 : | İoheksol İlaç Etken Maddesi İçin Optimize Edilmiş Yapay Sinir Ağ Modeli.                | 75 |

## TABLÖLAR DİZİNİ

| <b><u>Tablo No:</u></b>                                                          | <b><u>Sayfa</u></b> |
|----------------------------------------------------------------------------------|---------------------|
| 2.1: Reaktiflerin Oksidasyonu için Gereken Potansiyel Enerji İhtiyaçları.        | 8                   |
| 3.1: “114Y606” Numaralı Tubitak Projesi Veri Setlerinin Örneği.                  | 17                  |
| 3.2: MTX Modeli için Farklı Eğitim Algoritmalarının Regresyon Analiz Sonuçları.  | 21                  |
| 3.3: MTX Modeli için Trainbfg Komutunun 2. Analiz Sonuçları.                     | 23                  |
| 3.4: MTX Modeli için Traincgf Komutunun 2. Analiz Sonuçları.                     | 25                  |
| 3.5: MTX Modeli için Trainscg Komutunun 2. Analiz Sonuçları.                     | 27                  |
| 3.6: MTX Modeli için Nöron Sayısı Değişiminin Analiz Sonuçları.                  | 28                  |
| 3.7: MTX Modeli için Nöron Sayısı Değişiminin 2. Analiz Sonuçları.               | 29                  |
| 3.8: MTX YSA Modeli (“Matlab” arayüzü için).                                     | 31                  |
| 3.9: IMT Modeli için Farklı Eğitim Algoritmalarının Regresyon Analiz Sonuçları.  | 32                  |
| 3.10: IMT Modeli için Trainbr Komutunun 2. Analiz Sonuçları.                     | 34                  |
| 3.11: IMT Modeli için Traincgf Komutunun 2. Analiz Sonuçları.                    | 36                  |
| 3.12: IMT Modeli için Traincgp Komutunun 2. Analiz Sonuçları.                    | 38                  |
| 3.13: IMT Modeli için Nöron Sayısı Değişiminin Analiz Sonuçları.                 | 39                  |
| 3.14: IMT Modeli için Nöron Sayısı Değişiminin 2. Analiz Sonuçları.              | 40                  |
| 3.15: IMT YSA Modeli (“Matlab” arayüzü için).                                    | 42                  |
| 3.16: KRP Modeli için Farklı Eğitim Algoritmalarının Regresyon Analiz Sonuçları. | 43                  |
| 3.17: KRP Modeli için Trainbfg Komutunun 2. Analiz Sonuçları.                    | 45                  |
| 3.18: KRP Modeli için Traingdx Komutunun 2. Analiz Sonuçları.                    | 47                  |
| 3.19: KRP Modeli için Trainlm Komutunun 2. Analiz Sonuçları.                     | 49                  |
| 3.20: KRP Modeli için Nöron Sayısı Değişiminin Analiz Sonuçları.                 | 50                  |
| 3.21: KRP Modeli için Nöron Sayısı Değişiminin 2. Analiz Sonuçları.              | 51                  |
| 3.22: KRP YSA Modeli (“Matlab” arayüzü için).                                    | 53                  |
| 3.23: KPS Modeli için Farklı Eğitim Algoritmalarının Regresyon Analiz Sonuçları. | 54                  |
| 3.24: KPS Modeli için Traincgf Komutunun 2. Analiz Sonuçları.                    | 56                  |
| 3.25: KPS Modeli için Traingdx Komutunun 2. Analiz Sonuçları.                    | 58                  |

|                                                                                  |    |
|----------------------------------------------------------------------------------|----|
| 3.26: KPS Modeli için Trainlm Komutunun 2. Analiz Sonuçları.                     | 60 |
| 3.27: KPS Modeli için Nöron Sayısı Değişiminin Analiz Sonuçları.                 | 61 |
| 3.28: KPS Modeli için Nöron Sayısı Değişiminin 2. Analiz Sonuçları.              | 62 |
| 3.29: KPS YSA Modeli (“Matlab” arayüzü için).                                    | 64 |
| 3.30: IOX Modeli için Farklı Eğitim Algoritmalarının Regresyon Analiz Sonuçları. | 65 |
| 3.31: IOX Modeli için Trainbr Komutunun 2. Analiz Sonuçları.                     | 67 |
| 3.32: IOX Modeli için Trainlm Komutunun 2. Analiz Sonuçları.                     | 69 |
| 3.33: IOX Modeli için Trainoos Komutunun 2. Analiz Sonuçları.                    | 71 |
| 3.34: IOX Modeli için Nöron Sayısı Değişiminin Analiz Sonuçları.                 | 72 |
| 3.35: IOX Modeli için Nöron Sayısı Değişiminin 2. Analiz Sonuçları.              | 73 |
| 3.36 IOX YSA Modeli (“Matlab” arayüzü için).                                     | 75 |
| 3.37: Metotreksat Etken Maddesinin Veri Test Sonuçları.                          | 77 |
| 3.38: İmatinib Etken Maddesinin Veri Test Sonuçları.                             | 79 |
| 3.39: Karboplatin Etken Maddesinin Veri Test Sonuçları.                          | 80 |
| 3.40: Kapesitabin Etken Maddesinin Veri Test Sonuçları.                          | 81 |
| 3.41: İohexsol Etken Maddesinin Veri Test Sonuçları.                             | 82 |

# 1. GİRİŞ

Kanser hastalığı geçmişten bu yana çözümü bulunamayan, en önemli hastalıkların başında yer alır. Günümüzde bu hastalığın tedavisinin tam olarak bulunması bir yana, hastalığa maruz kalan insanların sayısı her geçen gün artmaktadır. Kanser hastalığının oranının artmasıyla beraber anti kanser ilaçlarının kullanım oranı da büyük bir artış göstermiştir [1]. Anti kanser ilaçlarının en önemli özelliği, kullanıldıktan sonra bir kısmının bozunmadan aynen kalıp, atık sulara karışmasıdır [2]. Genel olarak bu tip ilaçların atık sudan arıtımı biyolojik döngünün devamı açısından büyük bir önem taşır, ancak anti kanser ilaçlarının atık sudan arıtımı, laboratuvar ortamında incelenmesinden dolayı büyük ölçekli sistemlerdeki giderim tahmini hakkında tam bir yorum yapılamamaktadır. Bu durumda anti kanser ilaçlarının farklı koşullarda giderim oranları, yapay sinir ağı yaklaşımıyla modellenerek, gerçek ölçekteki sistemlerde, aynı düzeneklerin kurulması durumunda, atık sulardan giderim oranının tahmini yapılabilir olacaktır.

## 1.1. Tezin Amacı, Katkısı ve İçeriği

Farmasötik mikro kirleticilerin çevremiz etrafındaki dağılımı her geçen gün artmaktadır, bu artışlar ciddi tehditler oluşturmaya başlamıştır [2]. Birçok mikrokirleticinin oluşum nedeni, ilaçların tüketildikten sonra genellikle boşaltım yoluyla çevreye, suya karışımıdır ayrıca farmasötik ilaçlar canlı organizmalarla etki-tepki ilişkisi kurmak adına tasarlanmıştır [1]. Bu özelliklerinden dolayı farmasötik atıkların herhangi bir şekilde canlıyla temas etmesi, ciddi sonuçlar doğurur ve etkisini çok kısa bir süre içerisinde gösterir [3]. Farmasötik atıklar çok çeşitli olup, çevreye deşarj edilmeden önce kendi karakteristiğine uygun arıtmalardan geçmesi gerekmektedir [2]. Arıtım süreçlerinin maliyeti ise çok yüksektir ve maliyeti azaltacak arıtmalar her zaman ön plana çıkmaktadır. Elektrooksidasyon arıtma prosesi gerek kimyasal madde ihtiyacının azlığı, gerekse sistem boyutlarının küçük olması nedeniyle, arıtma maliyetini önemli ölçüde azaltmaktadır [4].

Tehlike anlamında farmasötik mikro kirleticilerin konsantrasyonlarının düşük olması bu sonucu değiştirmemektedir. Bu kirleticilerin etkileri kısa sürede görülebildiği gibi uzun sürede de görülebilmektedir [4]. Özellikle sudaki yaşayan

canlıların farmasötik mikrokirleticilerle etkileşime girdiği anda oluşacak olan sonuç tam olarak bilinmemektedir. Bu canlılar direnç gösterebilir, direnç gösteremeyebilir, hatta yeni canlı türleri meydana gelebilir [5]. Mikro kirleticilerin atık sulara karışmasının bir diğer boyutu ise yüzey veya yer altı sularına ulaşabilecek olmasıdır. Yüzey ve yer altı sularında durmaksızın artan kimyasal maddelerin yanı sıra, bu mikro kirleticilerin eklenme riski, tehlikeyi daha büyük boyutlara getirmektedir.

Bu tezin amacı, onkolojide kullanılan beş farklı ilaç etken maddesinin elektrooksidasyon ile belli bir oranda giderimi sağlandıktan sonra elde edilen verilerin sonuçlarını, yapay sinir ağı yaklaşımını kullanılarak modelleyip incelemektir. Böylece laboratuvar ölçeğinde yapılmış deneylerin modellenmiş sonuçlarından yararlanıp, ilaç endüstrisi atık suları için elektrooksidasyon artırımının, öngörü tahmini ile beraber ortam şartlarının optime olup olmadığının tespiti yapılabilir.

Tezin içeriği beş adet bölümden oluşmaktadır. Birinci bölümde yapılan deney sonuçları yapay sinir ağına geçirilmiştir. İkinci bölümde her bir ilaç etken maddesi için optimizasyon yapılmıştır. Optimizasyon aşamaları üç bölümden oluşmaktadır. Üçüncü bölümde yaratılan yapay sinir ağının, doğru bir şekilde çalışıp çalışmadığı, öğrenip öğrenmediğini anlamak adına kontroller ve regresyon analizi yapılmıştır. Dördüncü bölümde yapay sinir ağı modelinde simulasyon hazırlanıp, gerçek değerlerle simulasyon değerleri arasındaki fark ortaya konmuştur. En son bölümde ise genel değerlendirme ve model sonuçlarının yorumları yer almaktadır. Genel olarak araştırmanın içeriği, aşağıdaki bölümlerden oluşmaktadır.

- Deney sonuçlarının yapay sinir ağına geçirilmesi.
- Yapay sinir ağı kurulumunda katman ve nöron sayısının kontrolü.
- Sinir ağının öğrenip öğrenmediğinin kontrolü için regresyon analizi.
- Sonuçların modellenmesi.
- Genel değerlendirme.

## 2. GENEL BİLGİLER

İlaç endüstrisi atık sularından, farmasötik mikro kirleticilerin elektrooksidasyonla gideriminin modellenme süreci öncesi, ilaç endüstrisinin, onkoloji ilaçlarının ve atık suların özellikleri ayrıca elektrooksidasyon teorisi, prosesi incelenecektir.

### 2.1. İlaç Endüstrisi

İlaçlar canlı organizmasında biyolojik etkileşimler çıkarmak adına geliştirilmiştir. İnsanlarda veya hayvanlarda iyileştirmek, hastalıklarla mücadele veya etkilerini azaltmak amacıyla kullanılırlar [6]. Sinir sistemini etkileyen ilaçlar, kalp ve damar ilaçları, solunum sistemini etkileyen ilaçlar vb. olmak üzere “4000” farklı ilaç tipi kullanılmaktadır [7]. Genel olarak bakıldığında ilaç tüketim listesinin başında kalp ve damar hastalıklarında kullanılan ilaçlar yer almaktadır. Dünya üzerinde tüketimi en fazla olan beş ilaç toplam ilaç tüketiminin %70’ine denk gelmektedir. Bu durum Türkiye için %40’tır [5]. 1999 yılından itibaren Türkiye’de ilaç sektöründe, ilaçların tüketimi anlamında çok büyük artışlar yaşanmıştır [5]. Özellikle kalp ve damar hastalıkları, romatizma, sinir sistemi ilaçları bu tüketimin baş gurubunda yer almaktadır. Türkiye’de genel anlamda en çok tüketilen ilaç tipi antibiyotiklerdir [6].

İlaç bileşiklerinin yıllık tüketimi 100.000 ton civarı olarak kabul edilmektedir [5]. Yüksek tonajlı tüketime bağlı olarak ilaç bileşiklerinin büyük bir bölümünün çevreye deşarjı söz konusudur. Bu yüzden ilaç bileşiklerinin bertarafı çevre sağlığı bakımından ciddiye alınması gereken bir konudur. Genelde arıtımlarının zorluğu nedeniyle, atık su arıtma tesislerinde bulunurlar. Arıtılmadan çevreye deşarjı durumunda, organizmalar için büyük bir oranda toksisite oluşturmakla beraber bulunduğu ortamda ekolojik döngüyü bozabilmektedir [8].

## **2.2. İlaç Endüstri Atık Suları**

İlaç endüstrileri, ilaç üretim safhasında birçok farklı hammadde kullanırlar. Bu atıkların genel karakteristiği üretimin işleyişine göre ciddi farklılıklar içerir. Karbonat, azot, karbonhidratlar, asit ve bazlar başlıca kullanılan hammaddeler arasında yer alır ayrıca ilaçların yapımı esnasında, raf ömürlerinin olabildiğince uzun olmasına dikkat edilir, hareket yapısının da yüksek olması gerektiğinden genelde sıvı fazda üretilirler [8]. İlaçlar bu karakteristikleri nedeniyle, doğal ortamda hızlı bir şekilde birikebilme özelliklerine sahiptir.

### **2.2.1. İlaç Endüstrisi Atık Sularının Özellikleri**

İlaç endüstrisinde ilaç üretim sürecinde ortaya çok farklı şekillerde ve miktarlarda atık çıkar. Bu atıkların çevreye geçişi, geri dönüşü olmayan bir takım sonuçlar doğurabilir, bu nedenle kontrolünün dikkatli bir şekilde yapılması büyük bir önem taşır [9].

İlaç endüstrileri, ilaçların üretim sürecindeki farklı ihtiyaçlar nedeniyle su tüketimi yapmaktadırlar. Su tüketimi sonrası ortaya çıkan atık su, üretimdeki farklılıklar nedeniyle bir çok farklı karakteristik özelliklere sahip olur [10]. Atık sular, tehlikeli atık su, endüstriyel atık su ve evsel atık su olmak üç ana başlıkta toplanır. Tehlikeli atık sular, kullanılmış olan üretim sularını, kirli çözücüler, laboratuvar atıklarını, endüstriyel atık sular, kullanılan şişelerin, depoların temizlik sularını, evsel atık sular ise, mutfak atık sularını ve temizlenme için kullanılmış olan suları bünyesinde barındırır [10], [11]. İlaç endüstrileri ilaç üretim sürecinde ortaya çıkan atık sular, genel olarak tüm atık su tiplerini kapsar. Bu özellikler kapsamında atık suların kontrolü, gelecekte karşılaşılabilecek büyük tehlikeleri önlemek adına yapılması gereken bir zorunluluktur.

### 2.2.2. İlaç Endüstrisi Atık Su Arıtım Yöntemleri

İlaç endüstrisi atık su arıtma yöntemleri dört ana başlıkta toplanır. Genellikle arıtım sürecinde beraber kullanılırlar.

- Fizikokimyasal, adsorpsiyon, koagülasyon, flokülasyon , kimyasal çöktürme süreçleri olarak ayrılır. Adsorpsiyon yüzeyin üstüne tutunan maddelerin birikimidir. Bu süreç organiklerin ve iyonik inorganiklerin gideriminde kullanılır. Koagülasyon ve flokülasyon süreçleri özellikle endüstriyel atıksuların arıtımında çok fazla kullanılmaktadır. Koagülasyon kolloidal maddelerin çeşitli kimyasallar yardımıyla çökmesidir. Filokülasyon ise kolloidal maddeleri yumaklaştırıp flok haline gelmesini sağlayıp çökebilir forma getirmektir. Genelde bu iki proses birbirine bağlıdır, aynı anda kullanılır. Kimyasal çöktürme işlemi ise askıda kalan katı veya çözünmüş maddelere kimyasal ilave ederek yapılarının değişmesini sağlayıp, çökmesidir. Bu proses koagülasyon ve filokülasyon yöntemleri uygunlandıktan sonra kullanılır.
- Biyokimyasal, iki ana başlıkta incelenir, aerobik ve anaerobik olmak üzere. Aerobik arıtım, mikroorganizmaların oksijen kullanarak, anerobik ise oksijen kullanımının yapılmadan kirlilik gideriminin azalmasını temel alır. Ancak ilaç endüstrisi ve farmasötik atıksularının içerisinde bulunan organiklerin kimyasal yapısı biyolojik arıtım proseslerine pek uygun değildir.
- İleri Arıtım, kullanılan bir çok yöntemi vardır. Oksidasyon, iyonik değişim, membranlı sistemler gibi. İlaç endüstrisi atıksularında genelde oksidasyon prosesleri kullanılır. Amaç kirletici maddelerin organik maddelere dönüşünün sağlanmasıdır, su veya karbondioksit gibi.
- Elektrokimyasal, elektrokoagülasyon, elektrooksidasyon ve elektroflotasyon proseslerinden oluşmaktadır. Bu sistemin genel kullandığı yapı koagülasyon, flokülasyon ve kimyasal çöktürmeden farklı değildir ancak, çevreye uyumlu olması, kimyasal madde kullanımının azlığı ve düşük maliyeti ile ön plana çıkmaktadır.

## 2.3. Onkoloji İlaçları

Kanser ve tümörle ilgilenen bilim dalına onkoloji adı verilir.”Onko” kelimesi tümör anlamındayken, ”loji” kelimesi çalışmak anlamına gelmektedir. Onkoloji ilaçlarının adındanda anlaşılabilceğı gibi “kanser” hastalığınının tedavisi için kullanılmaktadır [1]. Kanser, hücrelerin yapısının bozulup, büyüme işlevini yerine getirememesinden kaynaklanır. Kanser hastalığının tam bir tedavi yöntemi olmamakla birlikte kullanılan yöntemler ise yapısı bozulan hücrenin yayılımını durdurmak adına, hücrenin yok edilmesidir [12],[13]. Radyoterapi veya kemoterapi yöntemleri, kanser hastalığı için kullanılan tedavi yöntemlerindendir [14].

Kanser hastalığının durdurulması adına kullanılan ilaçların, yapısı bozulan hücreleri yok ettiğı gibi, sağlıklı hücrelerin yapısını da bozabilmektedir, ayrıca bu ilaçların içeriğinde genlerin ve DNA’nın yapısını değıştirebilecek yan etkenlere sahiplerdir [2],[13]. Çeşitli organizmaların bu ilaçlarla teması sonunda, organizmalar üstünde, endokrin sisteminin değışimi veya mutajenik yan etkiler görülebilmektedir [3]. Bu etkilerin önlenmesi adına, kanser tedavisinde kullanılan ilaçların atık sulardan arıtımı bir zorunluluktur. Onkoloji ilaçlarının biyolojik yapıları kuvvetli olup, bozunabilme yapıları çok zordur, bu yüzden geleneksek arıtma yöntemlerinin kullanılarak bu ilaçların atık sulardan artımı söz konusu değıldir [12].Bu ilaçların en büyük özellikleri, bir kısmının yapısı bozunduğı gibi, diğerk kısmının yapısı tamamen aynı kalmakla beraber kanser ilaçları kullanıldıktan sonra vücut dışına idrar veya dışkı yolunu kullanarak çıkarlar, hastahaneler bu bileşige sahip atık suları herhangi bir ön arıtıma tabi tutmadan kanalizasyon sistemine desarj eder [2]. Kanalizasyon sistemlerinden atık su ortamına geçer ve bu ilaçların ön arıtıma tabi tutulmadan atık su arıtma tesisine girebilmesi, doğal ortama da girebilmesinin başlıca nedeni olarak görülmektedir. Bu nedenle kanser ilaçlarının atık sulardan artımı ciddi bir öncelik taşımaktadır [13].

## 2.4. Elektrooksidasyon Prosesi

Elektrooksidasyon prosesinin amacı Ti, Ru gibi paslanmaz elektrotları kullanarak, biyolojik açıdan parçalanabilirliği düşük olan maddeleri, kolay parçalanabilir bileşik formlarına getirmektir. Bu süreçte anot aktif görevi üstlenmektedir, bu yüzden anodun katalitik aktivitesi, prosesin etkinliği için büyük bir önem taşımaktadır. Akım, pH, sıcaklık gibi diğer değişkenler de bu süreçte önemli birer rol oynamaktadırlar [14].

Organik kirleticilerin gideriminde farklı oksidasyon yöntemleri olsa da, elektrooksidasyon yönteminin sağladığı avantajlar daha fazladır. Kullanılan kimyasalların azlığı, yüksek performansla birlikte düşük maliyet vb. Kullanılan genel arıtma teknikleri her türlü organik kirleticinin gideriminde başarı gösterememektedir [15]. Elektrooksidasyon bu kısımda da diğer arıtma yöntemlerine göre ileri çıkmaktadır. Organik kirleticilerin gideriminde çok yüksek bir performans göstermektedir [16].

Elektrooksidasyon sürecinde elektrotların bulunduğu koşullar, prosesin verimi açısından önem taşımaktadır. Oksidasyon süreci ise iki ana başlık altında incelenir, direkt ve indirekt oksidasyon olmak üzere. Elektrooksidasyon sürecinde genelde kullanılan elektrotlar oksidasyonun anodik sürecinde yer alır. Ancak geleneksel anotlar elektrooksidasyon sürecinde yeteri kadar yüksek bir performans gösterememesinden dolayı, farklı anotlar kullanarak daha yüksek performans almak adına çalışmalar devam etmektedir [14].

### 2.4.1. Elektrokoksidasyon Teorisi

Elektrokoksidasyon reaksiyonlar için yüksek elektrik potansiyeli, reaksiyonun oluşabilmesi açısından büyük bir önem taşır. Elektrik potansiyeli, oluşacak reaksiyonun oluşumu için gereken eşik değerinin altındaysa, reaksiyon gerçekleşmez [14]. Genel çevre uygulamalarında çokça gerçekleşen reaksiyonlar için gereken oksidasyon potansiyellerinin sayısal değerleri, aşağıdaki tabloda mevcuttur.

Tablo 2.1: Reaktiflerin Oksidasyonu için Gereken Potansiyel Enerji İhtiyaçları.

| Reaksiyon                               | Potansiyel (Volt) |
|-----------------------------------------|-------------------|
|                                         | $E^0$ (25 °C 'de) |
| $F_2 + 2e = 2F^-$                       | 2.87              |
| $OH^\bullet + H^+ + e^- = H_2O$         | 2.33              |
| $O_3 + 2H^+ + 2e = O_2 + H_2O$          | 2.07              |
| $H_2O_2 + 2H^+ + 2e = 2H_2O$ (acid)     | 1.76              |
| $MnO_4^- + 4H^+ + 3e = MnO_2 + 2H_2O$   | 1.68              |
| $HClO_2 + 3H^+ + 4e = Cl^- + 2H_2O$     | 1.57              |
| $MnO_4^- + 8H^+ + 5e = Mn^{2+} + 4H_2O$ | 1.49              |
| $HOCl + H^+ + 2e = Cl^- + H_2O$         | 1.49              |
| $Cl_2 + 2e = 2 Cl^-$                    | 1.36              |
| $HOBr + H^+ + 2e = Br^- + H_2O$         | 1.33              |
| $O_3 + H_2O + 2e = O_2 + 2 OH^-$        | 1.24              |
| $ClO_2$ (gas) + e = $ClO_2^-$           | 1.15              |
| $Br_2 + 2e = 2Br^-$                     | 1.07              |
| $HOI + H^+ + 2e = I^- + H_2O$           | 0.99              |
| $ClO_2$ (aq.) + e = $ClO_2^-$           | 0.95              |
| $ClO^- + 2H_2O + 2e = Cl^- + 2OH^-$     | 0.9               |
| $H_2O_2 + 2H_3O + 2e = 4H_2O$ (basic)   | 0.87              |
| $ClO_2^- + 2H_2O + 4e = Cl^- + 4OH^-$   | 0.78              |
| $OBr^- + H_2O + 2e = Br^- + 4OH^-$      | 0.70              |
| $I_2 + 2e = 2 I^-$                      | 0.54              |
| $I_3 + 2e = 3 I^-$                      | 0.53              |
| $OI^- + H_2O + 2e = I^- + 2OH^-$        | 0.49              |
| $O_2 + 2H_2O + 4e = 4OH^-$              | 0.40              |

## 2.5. Yapay Sinir Ağları

Günümüz teknolojinin bilimsel sonuçlarına göre , öğrenmenin tam olarak nasıl gerçekleştiğiyle ilgili kesin bir bilgi yoktur. Ancak sinir hücrelerinin yapısı ve birbirleriyle olan ilişkileri incelenerek genel bir teori ortaya konmuştur. Bu ortaya konan teorinin yapısı yeni uygulamaları beraberinde getirmiştir. Yapay sinir ağları beynin öğrenme yapısını taklit eden bilgi işleme sistemleridir [15].

Beynin öğrenme yapısı, sinirlerin birbirleriyle olan ilişkisine bağlıyken, aynı şekilde yapay sinir ağlarının öğrenme yapısı ise, kendisine verilen bilgilerin birbirleriyle olan ilişkisine bağlıdır [16]. Bu verilen bilgilerin ilişkilerinden çıkartılan sonuçlar ortaya bir öğrenme mekanizması sunar. Yeni verilen bilgiler, eski bilgilerden çıkan ilişkiler ışığında bir sonuç döndürür [17]. Böylece yapay sinir ağları kesin bir sonucu olmayan, sonucunun veri girişi yapılmadığı, farklı bilgilerin birbirleriyle olan etkileşimlerinden yararlanarak kısaca örnek alarak, ortaya kendisinde olmayan, öngörü yapılan, verilerin sonucunu döndürür, sonuçta öğrenme teorisini gerçekleştirmiş olur [18].

Yapay sinir ağları yaklaşımıyla modellemeyi diğer model tasarımlarından ayıran en büyük fark, lineer olmayan verilerden de başarılı bir sonuç çıkartabilmesidir. Yapay sinir ağlarında öğrenme, girilen bilgilerin kalitesine ve sayısına bağlıdır, aksi takdirde öğrenim gerçekleştirilemez. Her ne kadar kaliteli bilgi öğrenim için gerekliyse de, yapay sinir ağları hatalı veya eksik bilgileri belli bir oranda telafi edebilecek yapıya sahiptir [19].

Yapay sinir ağları günümüzde fiziki sistemlerin modellenmesinde bir hayli fazla kullanılmaktadır. Bu karmaşık sistemlerin modellenerek öngörü ve optimizasyon yapılabilmesinde büyük bir rol üstlenmektedir [20]. Özellikle endüstriyel tasarımlarda, hammadde üretim miktarlarında, finansal verilerde vb. değişik alanlarda kullanımı her geçen gün ciddi anlamda artmaktadır.

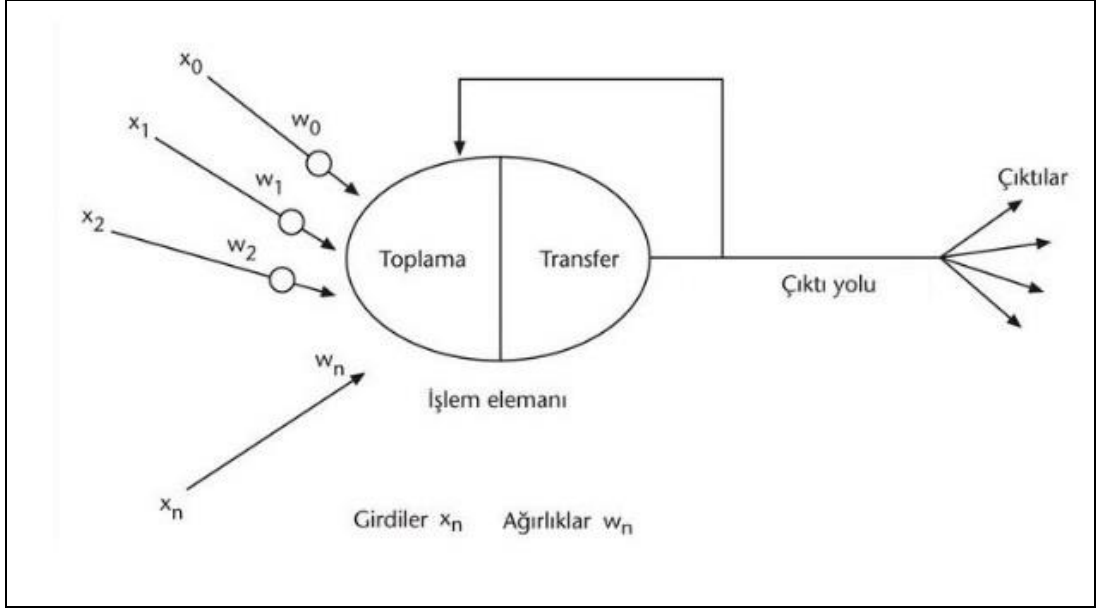
### 2.5.1. Yapay Sinir Hücresinin Temel Bileşenleri

Yapay sinir hücresinin temel bileşenleri, biyolojik bir sinir hücresinin oluşumundaki temel bileşenlerini taklit eder. Biyolojik hücrelerdeki nöronlar gibi, yapay nöronlar da kendi aralarında etkileşime girerek bir bağ kurup yapay sinir ağlarını oluşturur [21]. Yapay sinir hücresinin yapısının anlaşılabilmesi için rol model aldığı biyolojik sinir hücresinin yapısının incelenmesi gerekir.

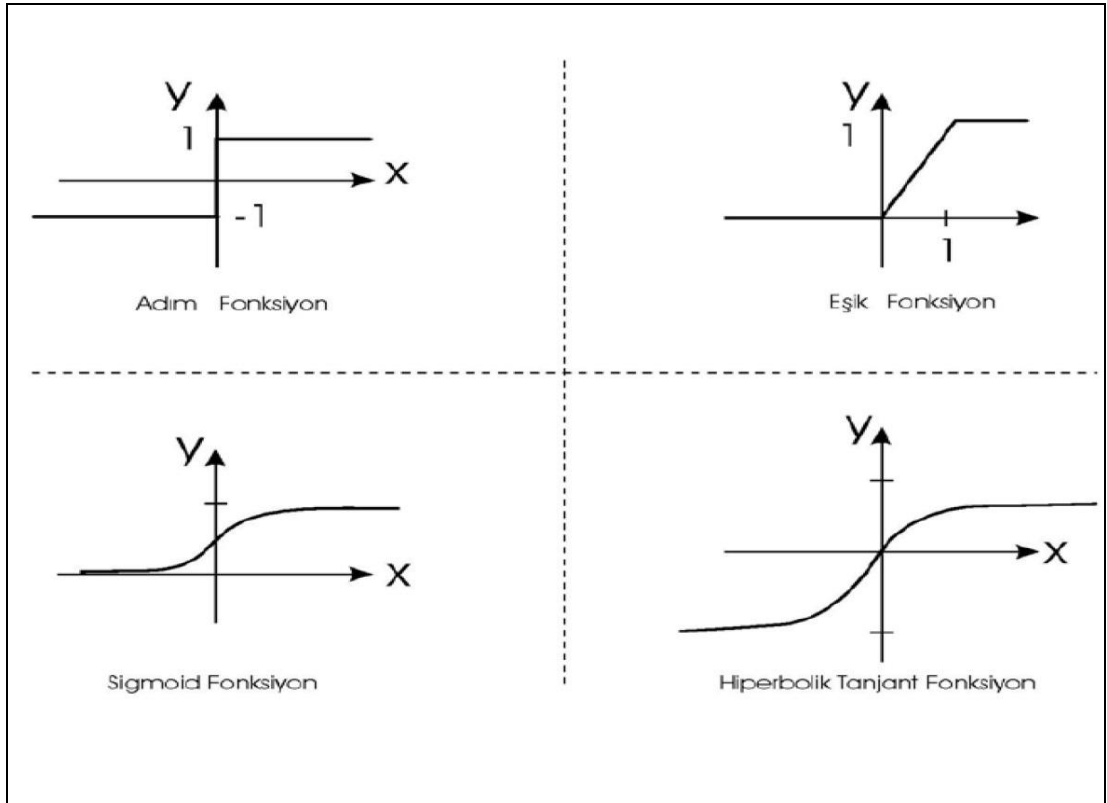
Biyolojik sinir hücrelerinin temel yapı taşı nöronlardan oluşur. Nöronlar dendrit, akson, çekirdek ve bağlantılar olmak üzere dört ana kısımdan meydana gelirler. Dendritler ağaç şeklinde sinir hücresinin ucunda yer alıp görevi, kendisine gelen sinyallerin tümünü çekirdeğe aktarmaktır [22]. Çekirdek dendrit'ten gelen sinyalleri bir bütün haline getirir ve aksona aktarır. Bu iki bölgeden gelen sinyaller işlenmek üzere aksona gönderilir. Burdan da bağlantılara gönderilerek, dendrit'ten başlayarak gelen işlenmiş sinyali diğer nöronlara transfer ederler.

Yapay sinir hücresinin, girdiler, ağırlıklar, toplama fonksiyonu, aktivasyon fonksiyonu ve çıktılar olmak üzere beş adet temel bileşeni vardır [23].

- Girdiler, yapay sinir ağının içinde bulunan nöronlara gelen bilgiler, verilerdir. Kullanıcı bu verileri gönderebileceği gibi, herhangi bir hücreden gelen bilgiler de olabilir. Girdilerin genelde herhangi bir nörona iletim sırası yoktur, düzensizdir.
- Ağırlıklar, girdilerin yapay sinir ağı üzerinde etkisinin belirlenmesine rol oynarlar, kısacası katsayılardır. Sabit veya değişken olabilirler. Negatif, pozitif veya sıfır değerini alabilir. Bir ağırlığın sıfır değerini alması o girdinin yapay sinir ağı üzerinde bir etkisinin olmadığını göstergesidir.
- Toplama fonksiyonu, girdilerle, ağırlıkların çarpımlarını toplar. Kısaca hücrenin gerçek girdi değerini hesaplar.
- Aktivasyon fonksiyonu, hücreye gelen net girdiyi işleyerek çıktının, bu işlenmiş değer için bir sonuç belirleyen fonksiyondur. Genellikle lineer olmayan problemler söz konusu olduğundan, sigmoid aktivasyon fonksiyonu kullanılır.
- Çıktılar, aktivasyon fonksiyonuna girip, çıkan değerlere denir. Ağı içinde yeniden kullanılabilir olduğu gibi, dış ortamda aktarılabilir. Her hücrenin birden fazla girdi değeri olabilir ancak, çıktı değeri tek bir [24].



Şekil 2.1: Yapay Sinir Hücresi Yapı Mimarisi.

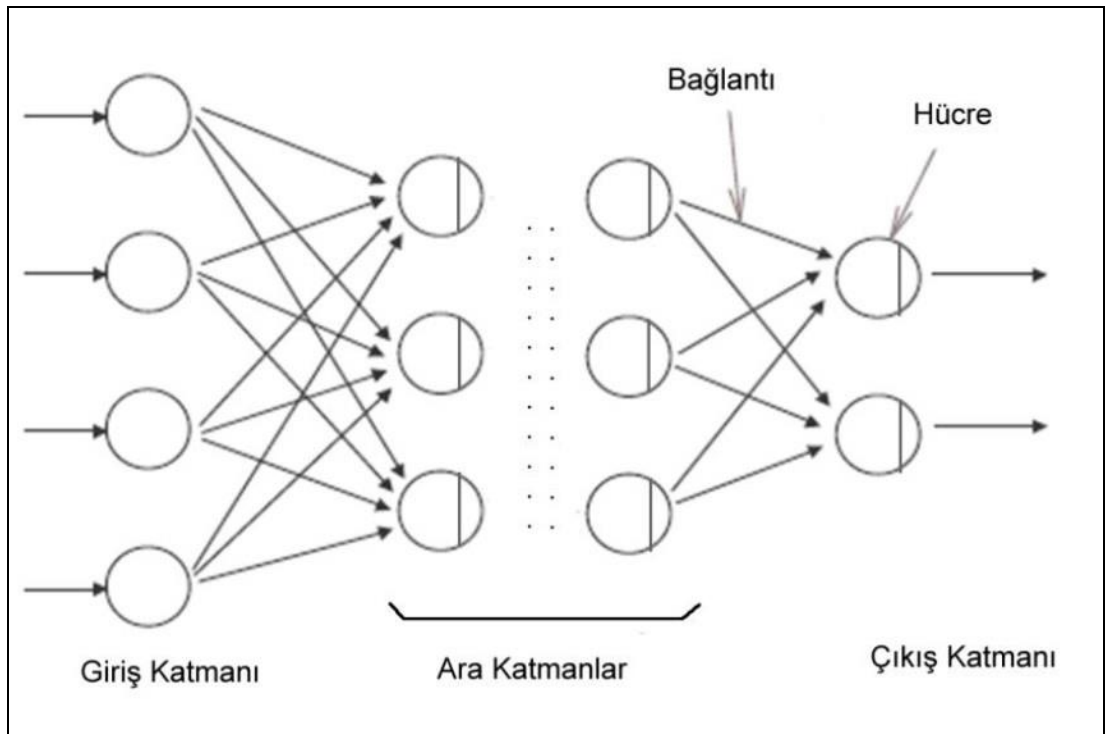


Şekil 2.2: Aktivasyon Fonksiyon Örnekleri.

### 2.5.2. Yapay Sinir Ağlarının Yapısı

Yapay sinir ağları girdi katmanı, gizli katman ve çıktı katmanı olmak üzere üç ana katmandan oluşur [26], [27].

- Girdi katmanı, kullanıcıların girdiği veriler, yapay sinir ağının öğrenmeye başlanması için kullanılacak olan bilgilerin tümüdür. Bu katmanın içindeki işlem elemanları girdi katmanından gelen bilgileri, diğer katmanlara transfer ederler. Girdi katmanında herhangi bir bilginin işleme süreci başlamaz, bu katmandaki bilgiler gizli katmana aktarıldıktan sonra, bilgi işleme görevi başlamış olur.
- Gizli katman (Ara katman), kendi içerisinde birden çok olabilir, her bir katman bilgiyi ayrıca işleyip, çıktı katmanına gönderirler.
- Çıktı katmanı, bilgiyi yeniden işledikten sonra girdi katmanından istenen çıktıyı verirler. Bu çıktı istenen sonuç olabildiği gibi, yeniden geriye dönerek işlenebilir.



Şekil 2.3: Örnek Yapay Sinir Ağ Yapısı.

### 2.5.3. Yapay Sinir Ağlarında Öğrenme

Biyolojik ortamda öğrenme doğum anından itibaren başlar. Yaşam devam ettiği sürece öğrenme hiç durmaksızın devam eder. Karşılaşılan yeni olaylar karşısında o ana kadar yaşananlardan öğrenilen tecrübeler ışığında örneklemeler yaparak çözüme ulaşılmaya çalışılır [28].

Yapay sinir ağlarında öğrenme biyolojik ortamdaki öğrenmeyle benzeşmektedir. Öğrenim için dış ortamdan alınan bilgiler kullanılır, ancak istenilen sonuçlar farklı olduğu için, bu sonuçlara uygun olarak yapay sinir ağlarının uyarlanması gerekir.

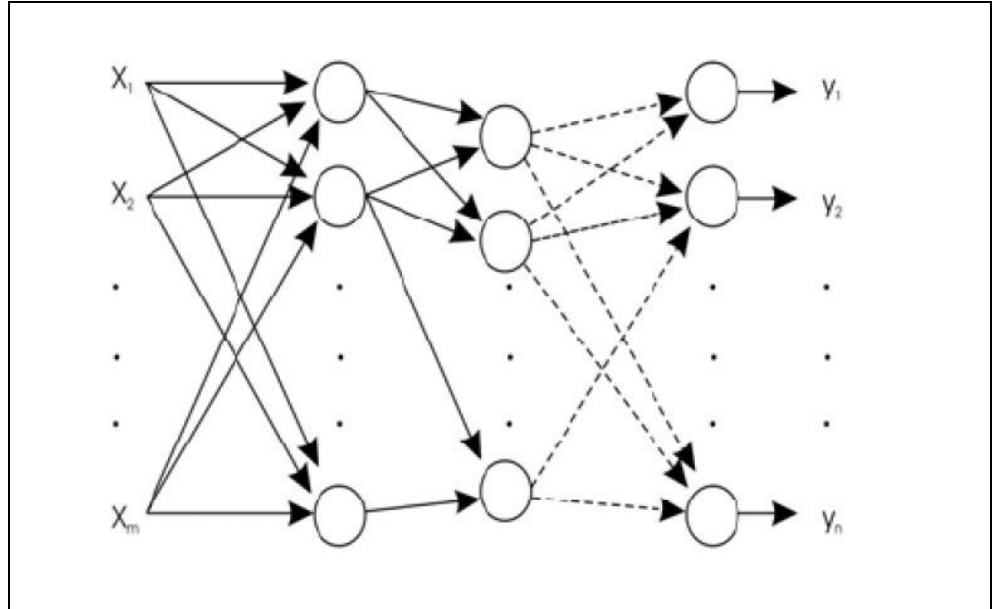
Uyarlanma esnasında yapay sinir ağına girilen bilgilerin hepsi öğrenim amaçlı kullanılmaz. Genelde girilen bilgilerin %80'i ağı eğitmek, geri kalan %20'si ise ağı çalışmasının testinde kullanılır [27]. Sonuç olarak yapay sinir ağlarını öğrenme algoritmaları, yapıları ve öğrenme zamanlarına göre üç sınıfa ayrılır.

- Öğrenme algoritmaları, yapay sinir ağında öğrenme algoritmaları üç ana başlıkta toplanır. Danışmanlı öğrenme, danışmansız öğrenme ve takviyeli öğrenme olmak üzere. Danışmanlı öğrenme, giriş değerlerinin yanında, bu giriş değerlerinin döndürmesi gereken sonuç değerleri de yapay sinir ağına tanıtılır. Böylece ağı, gösterilen sonuçları bulabilmek adına ağırlıkları günceller. Bulunan sonuçlarla gerçek sonuçlar arasında hata değeri hesaplanır. Danışmasız öğrenmede, ağı sadece giriş verileri tanıtılır, ağı döndürecek sonuçlar için kendi kurallarını oluşturur, ağırlıkların güncellemesini belirli sınıflara ayırır, buna göre bir sonuç döndürülür. Destekleyici öğrenmede, ağı her yeni bir iterasyon sonucunda verilere iyi ve kötü olmak üzere iki farklı gruba ayırır, bu bilgiler ışığında devamlı yeni sonuçlar çıkar, döngü öğrenme süresince devam eder [27].

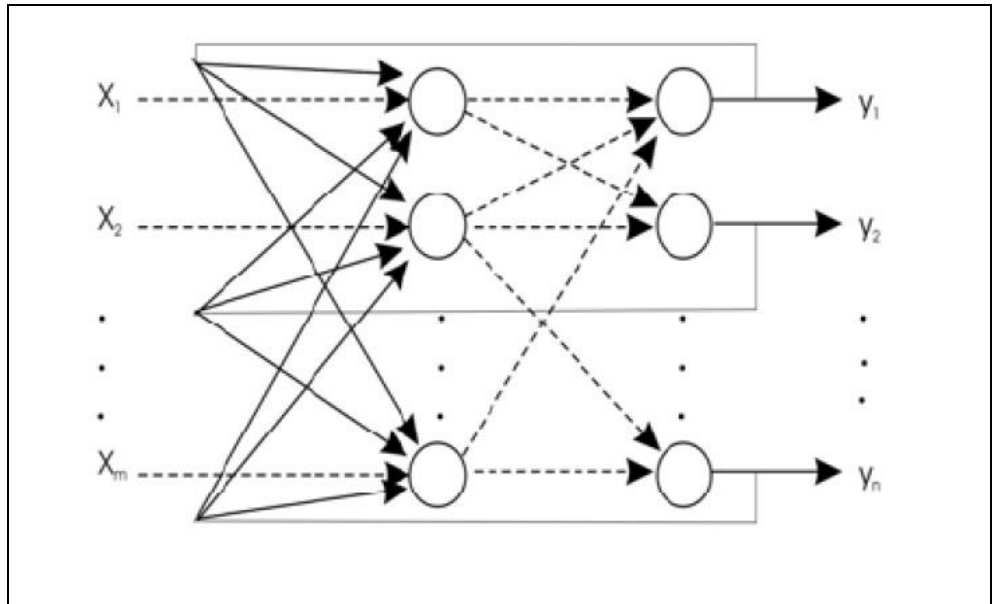
- Öğrenme yapıları, ileri beslemeli ve geri beslemeli olarak iki yapıda incelenir. İleri beslemeli yapılarda, giriş verilerinin sonuçları hızlı bir şekilde döndürülür ancak geriye doğru bir döngü yapısı oluşturulmaz. Tüm nöronlar sadece, kendisinden bir sonraki bağları kullanarak diğer katmanlara geçiş yapar. Geri beslemeli yapıda, sinir ağı içerisinde geriye doğru bir döngü söz konusudur [28]. Her bir nöronun çıktısı, katmanından önceki veya sonraki nöronun girdisi olabilir. Sonuç olarak dış ortamdan girilen girdilerin sonuç vermesi için gereken süre daha fazladır. Yapı mimarileri Şekil 2.4 ve Şekil 2.5'te mevcuttur.

- Öğrenme Zamanları , statik ve dinamik olarak iki zaman tipinde incelenir.

Statik yapıda, ağ önce eğitilir sonra kullanılmaya başlanır, ağ kullanıldıktan sonra ağın öğrenmesi biter. Dinamik yapıda, ağın eğitimi sürekli devam eder, ağ çalışmaya başladıktan sonra da kendini eğitir [29].



Şekil 2.4: İleri Beslemeli Yapay Sinir Ağ Mimarisi.



Şekil 2.5: Geri Beslemeli Yapay Sinir Ağ Mimarisi.

### 3. MATERİYAL VE METODLAR

Yapay sinir ağının kullanımında uygulanması gereken ilk adım doğru yapının bulunmasıdır. Bu çalışmada laboratuvar deneylerinde kullanımı çok popüler olan ayrıca öğrenme algoritmasının oldukça yüksek olduğu bir yapı olan geri yayımlı ileri beslemeli sinir ağı kullanılacaktır. Beş adet etken madde için yapılan “354” adet deney ile yapay sinir ağı eğitilecektir. “Kapesitabin “66” diğer ilaçlar ise “72” adet deneyden oluşmaktadır. Mevcut veriler “114Y606” numaralı Tubitak projesinden temin edilmiştir, bu verilerin %80’i yapay sinir ağının eğitimi, %10’u testi ve %10’u ise validasyonu için kullanılacaktır.

#### 3.1. Yapay Sinir Ağının Modellenmesi

Ağın içerisinde doğru yapının kurulabilmesinin yöntemi, ağda kullanılacak öğrenme fonksiyonunun, gizli katman sayısının, gizli katmanların her birinin içinde olan nöron sayılarının, ayrıca gizli katmanların içindeki ağırlıkların birbirine aktarımı esnasında kullanılacak olan transfer fonksiyonlarının doğru bir şekilde seçiminden geçer [29], [30]. Uygulanacak kesin bir seçim metodu olmamakla beraber, hangi metodun doğru olup olmadığını kısaca yaratılan yapay sinir ağının, kullanılan verilerden mantıksal bir sonuç çıkartıp, öğrenip öğrenemediğini regresyon analizi ve performans analizi ile anlayabilmek mümkündür. Kurulan her bir ağ için, bu ağın içinde değiştirilen her bir özellik için yeni analizlerin yapılması şarttır [31]. Bu analizlerin sonuçlarına göre ancak ağın öğrenip öğrenmediği tahminini yapmak mümkündür. “Matlab” programının içinde yer alan “Neural Network Toolbox” adlı arayüz kullanılarak yapay sinir ağının yapısı yaratılacak. Arayüzün yapısı bir gizli katmanlı yapay sinir ağı yapısı sunuyor, bu gizli katmanın nöron sayısı istenilen aralıkta belirlenebilir. Yapay sinir ağının içindeki nöronların bilgilerini taşıyan ağırlıkları güncelleyen, kısaca eğitim fonksiyonunun belirlenmesi için, on dört adet farklı algoritma mevcut [27]. Bu algoritmaların her biri ile, bir sonraki performans fonksiyonunun seçimi analizler yapılacaktır. Regresyon analizi için en küçük kareler yöntemi uygulanacak, içerisinde en iyi üç değer veren alınıp, yeniden detaylı bir incelemeden geçirildikten sonra bir sonraki aşama için kullanılacaktır. En küçük kareler yöntemi lineer olmayan çözümlerde diğer yöntemlere nazaran çok daha

optimal bir sonuç vermektedir. Bu yüzden öğrenme fonksiyonunda kullanılacak olan on dört algoritmanın her biri için en küçük kareler yöntemi ile regresyon analizine girecektir.

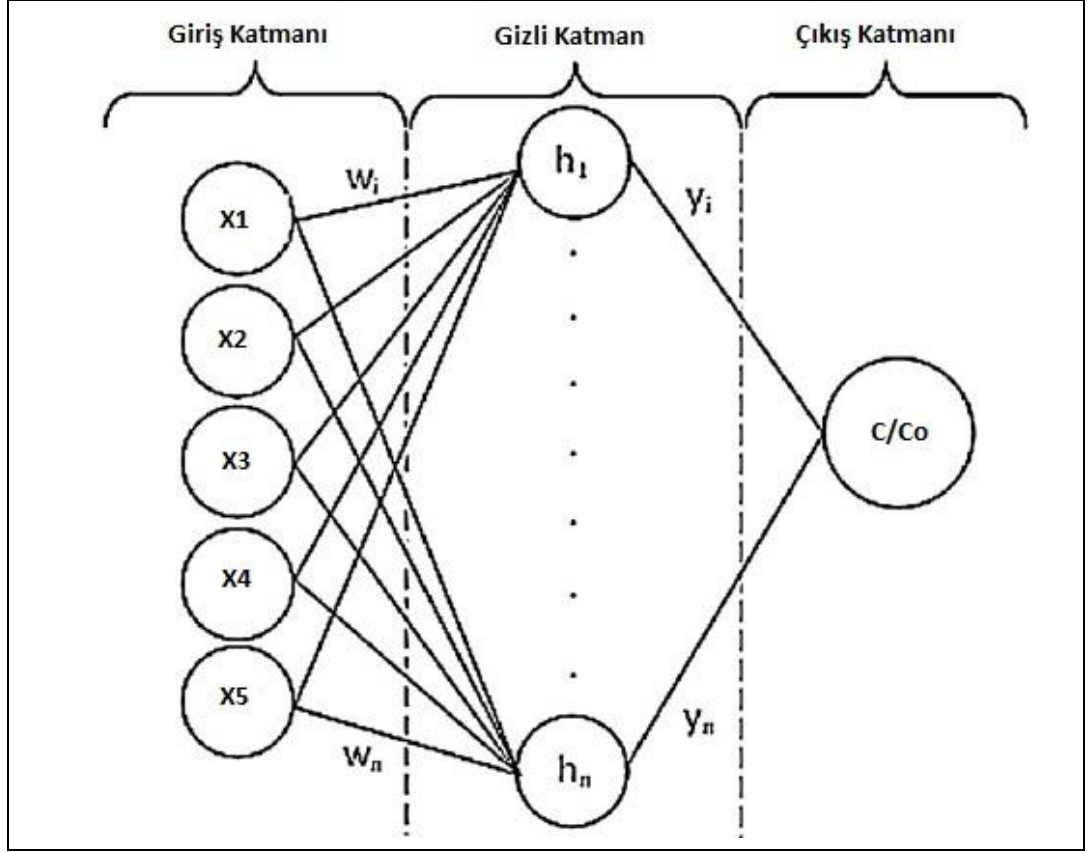
Diğer bir aşama ise, gizli katmanının içinde yer alan nöronların sayılarının doğru bulunmasıdır. Burda şu ana kadar geline aşamalarda yapılan analizlerin sonucu olan algoritmalarla beraber nöron sayısı değiştirilip yeniden analizler yapılacaktır. En yüksek değeri veren nöron sayısı yapay sinir ağının modelinde yer alacaktır. Son kısım ise transfer fonksiyonu seçimi yapmaktır [29]. Bu bölümde diğer transfer fonksiyonlarına göre ileri beslemeli yapay sinir ağlarında en fazla kullanılan, “Sigmoid” (TANSIG) transfer fonksiyonu kullanılacaktır. Yapılacaklar özet olarak aşağıda sıralanmıştır,

- Geri yayımlı ileri beslemeli yapay sinir ağ modeli kullanılacak.
- Deneylerin %80'i, ağı eğitmek, %10'u test için ve %10'u validasyon için uyarlanacaktır.
- Kurulan ağ bir gizli katmandan oluşacaktır.
- Ağırlıkların öğrenme fonksiyonu için kullanılan algoritmayı yapılan analizler belirleyecek.
- Doğru eğitim fonksiyonunu bulmak için “regresyon analizi” en küçük kareler yöntemi” (MSE) kullanılarak yapılacaktır.
- Gizli katmanda kullanılacak olan nöron sayısını analizler belirleyecek.
- Transfer fonksiyonu için “Sigmoid” (TANSIG) fonksiyonu seçimi yapılacaktır.
- Kullanılacak olan beş adet ilaç etken maddesi için tüm veri girişlerinin tipi, ve sayısı aynı olmakla beraber, kullanılacak olan gizli katman sayısı da aynı olacaktır.
- İlaç etken maddeleri için kullanılacak olan eğitim fonksiyonları ve gizli katmanlarının içindeki nöron sayıları değişiklik gösterecektir.
- Her bir ilaç etken maddesi için yapılacak olan analiz sayısı değişmeyecektir.
- Her bir ilaç etken maddesi için kullanılacak olan ağ modelinin genel yapı mimarisi değişmeyecektir.

İlaç etken maddeleri için yaratılacak olan yapay sinir ağı modelinin eğitilmesinde kullanılan örnek veri setleri Tablo 3.1’de görülebilir. Veri setlerinin hepsi “114Y606” numaralı Tubitak projesinden temin edilmiştir. Tabloda 3.1’de “Metotreksat” etken maddesi için yapılan ilk “5” deneyin ve son “5” deneyin veri setleri mevcuttur. Yapay sinir ağı eğitilmesinde kullanılan tüm veri setleri detaylı bir şekilde üçüncü bölümde sayfa 70’te incelenebilir. Her ilaç etken maddesi için ilk beş veri seti aynıdır.

Tablo 3.1: “114Y606” Numaralı Tubitak Projesi Veri Setlerinin Örneği.

| DENEY NO | Başlangıç Konsantrasyon (mg/L) | Akım Yoğunluğu (mA/cm <sup>2</sup> ) | Elektrolit Konsantrasyonu (mg/L) | İlk pH | Zaman (dk) | Konsantrasyon Oranları (C/Co) |
|----------|--------------------------------|--------------------------------------|----------------------------------|--------|------------|-------------------------------|
| 1        | 0,5                            | 15                                   | 200                              | 7      | 1          | 0,7950                        |
| 2        | 0,5                            | 15                                   | 200                              | 7      | 5          | 0,7510                        |
| 3        | 0,5                            | 15                                   | 200                              | 7      | 10         | 0,5780                        |
| 4        | 0,5                            | 15                                   | 200                              | 7      | 15         | 0,4370                        |
| 5        | 0,5                            | 15                                   | 200                              | 7      | 25         | 0,2510                        |
| .        | .                              | .                                    | .                                | .      | .          | .                             |
| .        | .                              | .                                    | .                                | .      | .          | .                             |
| .        | .                              | .                                    | .                                | .      | .          | .                             |
| .        | .                              | .                                    | .                                | .      | .          | .                             |
| .        | .                              | .                                    | .                                | .      | .          | .                             |
| .        | .                              | .                                    | .                                | .      | .          | .                             |
| DENEY NO | Başlangıç Konsantrasyon (mg/L) | Akım Yoğunluğu (mA/cm <sup>2</sup> ) | Elektrolit Konsantrasyonu (mg/L) | İlk pH | Zaman (dk) | Konsantrasyon Oranları (C/Co) |
| 68       | 10                             | 30                                   | 200                              | 7      | 5          | 0,8617                        |
| 69       | 10                             | 30                                   | 200                              | 7      | 10         | 0,8089                        |
| 70       | 10                             | 30                                   | 200                              | 7      | 15         | 0,7330                        |
| 71       | 10                             | 30                                   | 200                              | 7      | 25         | 0,6310                        |
| 72       | 10                             | 30                                   | 200                              | 7      | 30         | 0,5525                        |



Şekil 3.1: İlaç Etken Maddeleri İçin Kullanılacak Genel Yapay Sinir Ağ Modeli.

Şekil 3.1’de görüldüğü üzere, bir adet giriş katmanı, bir adet gizli katman ve bir adet de çıkış katmanı mevcuttur. Giriş katmanına beş adet veri girişi yapılacaktır. Çıkış katmanının içerisinde ise bir adet veri çıkışı gerçekleşecektir. “X” sembolü ile gösterilenler verileri (girdileri), “Wn” sembolü ağırlıkları, hn nöron sayısını, “Yi” eğitim fonksiyonlarını, “C/Co” ise veri çıktısını temsil etmektedir. “Wn” ve “Yi” yapay sinir ağının çalışma prensibinin değişkenleridir. Diğer değişkenler ise dış ortamdan yapay sinir ağının kurulması için eklenenlerdir. Şekil 3.1’deki verilerin anlamları aşağıda gösterilmiştir.

- X1 : İlaç etken maddelerinin giderim öncesi konsantrasyonları.
- X2 : Akım yoğunluğu.
- X3 : Elektrolit konsantrasyonu.
- X4 : pH.
- X5 : Reaksiyon zamanı.
- C/Co : İlaç etken maddelerinin giderim sonrası ve öncesi konsantrasyon oranları.

Yapay sinir ağının model tercih aşamasında (Bölüm 3.1.1) iki analiz model tipinden yararlanılacaktır. Birincisi “Regresyon Analiz Modeli” ikincisi “Validasyon Performans Modeli” olmak üzere. Bu iki farklı istatistik birimlerinin incelenmesi için öncelikle en temele inilmesi gereklidir.

Regresyon analizi, iki ya da daha fazla değişkenin arasındaki ilişkinin belirlenmesinde kullanılır. Asıl amaç ise bu ilişkinin sonuçlarından tahmin yapabilmektir. Regresyon analiz modeli oluşturulurken, genelde en küçük kareler yöntemi kullanılır. En küçük kareler yöntemi kabaca özetlenirse, herhangi bir tabloda verilen gözlem değerlerine olabildiğince yakın bir şekilde lineer doğru çizilmesidir. Çizilen lineer doğruyla (regresyon doğrusu), gözlem değerleri arasındaki fark ise hata ( $\epsilon$ ) olarak adlandırılır. “Matlab” programında kullanılan “Regresyon Model Terimleri” aşağıda sıralanmıştır,

- $y = m.x + n$  “Lineer Doğru Denkleminin” Matlab’daki karşılığı,  $\text{Output} = m.\text{Target} + n$ ’dir.
- Output, bağımlı değişken, modelin kullanıcıya döndüreceği, ayrıca modelin öğrenip, öngörmesi gereken veri değerini simgeler.
- Target, bağımsız değişken, modele tanıtılan veri çıkış değerini simgeler.
- m, eğim.
- n, sabit değer.
- R, korelasyon katsayısı, regresyon analizi yapılan iki değişkenin arasındaki ilişki değeridir, etki değerini (determinasyon kat sayısı) bulmak içinse karesi alınır.
- Training R, deneylerin “%80”lik kısmı için çıkartılan lineer doğru..
- Validation R, deneylerin “%10”luk kısmı için çıkartılan lineer doğru.
- Test R, deneylerin “%10”luk kısmı için çıkartılan lineer doğru.
- All R, tüm deneyler için çizilen lineer doğru.

Validasyon Performans Model grafiğinin incelenme aşaması biraz daha yoruma açıktır. Her ne kadar model kullanıcıya, parametrelerin ayarlandığı noktadaki en küçük kareler değerini, ayrıca bu değer kaçınca iterasyonda olduğunu gösterse de, bu grafikte asıl yorumlanabilecek olan modelin öğrenip öğrenmeme durumu, modelin istenileni öğrenip öğrenmediği, öngörü yapabilme özelliği vb. önemli özellikler hakkında yorum yapılabilmesinin yolunu açmasıdır. Tabiki sadece validasyon

performans grafiğindeki yorumlara bakarak genelde kesin bir sonuç çıkartılması mümkün değildir. Aşağıda validasyon performans grafiğinin genel özellikleri verilmiştir.

- Train Eğrisi (Öğrenme Eğrisi, Mavi Renk), ağın öğrenme eğrisini simgeler.

Aşağı doğru ilerlemesi ağın öğrenmesinin gerçekleştiği anlamını taşır. Eğer bu eğri yukarı doğru çıkıyor veya paralel bir şekilde sabit kalıyorsa, ağın öğrenmesinde sorun olabilir. Deney sonuçları yeniden gözden geçirilmeli veya deney verilerinde normalizasyon yapılması gerekebildiği gibi, ağın mimari yapısı veya tipinin değişmesi gerekebilir. Öğrenme eğrisindeki veriler ağın parametrelerini belirler. (Şekil 3.1,  $W_n$ )

- Validation Eğrisi (Validasyon Eğrisi, Yeşil Renk), ağın öğrenme esnasındaki hatalarını kontrol eder. Kısaca ağın esas problemi çözmesinden uzaklaşmasını engeller, çünkü bazı durumlarda ağ sadece kendisine verilen değerleri sonuç olarak çıkartmaya çalışır (overfitting), öğrenmeden uzaklaştığından dolayı öngörü yapamaz. Ayrıca validasyon, geri yayımlı (back propagation) yapay sinir ağ algoritmalarında döngünün durması gereken yeri belirler. Validasyon eğrisinin aşağı doğru inmesi beklense de böyle bir sonuç için ciddi sayılarda veri setine ihtiyaç vardır, buyüzden büyük atlama noktalarının olmaması validasyon eğrisi için bir öncelik denebilir. Regresyon analizinde en küçük kareler hata oranı, validasyon eğrisinin en küçük kareler olarak aldığı noktayı hedef alır. Validasyon eğrisindeki veriler ağın parametrelerini mimari olarak belirler.

- Test Eğrisi ( Kırmızı Renk), ağın performansını test etmede kullanılır. Ağın doğruluk, öngörü performanslarının, gerçek tahminlerin tümünü simgeler. Eğrinin tabloda aşağı doğru hareketi beklenebilir olsa da, bunun için çok sayıda veri setine ihtiyaç vardır. Bu özellikler göz önüne alınarak, atlama yapmadan, hafif sabitleşerek ilerlemesi tahminini yapmak mümkündür.

- MSE (En Küçük Kareler), tablodaki eğriler göz önüne alınırsa genelde Öğrenme eğrisi (Mavi Renk) aşağı doğru salınarak çok küçük “MSE” değerlerine gitse de, ağ yanırlardan kaçınmak için validasyon eğrisinin verdiği en küçük “MSE” değerini baz alır.

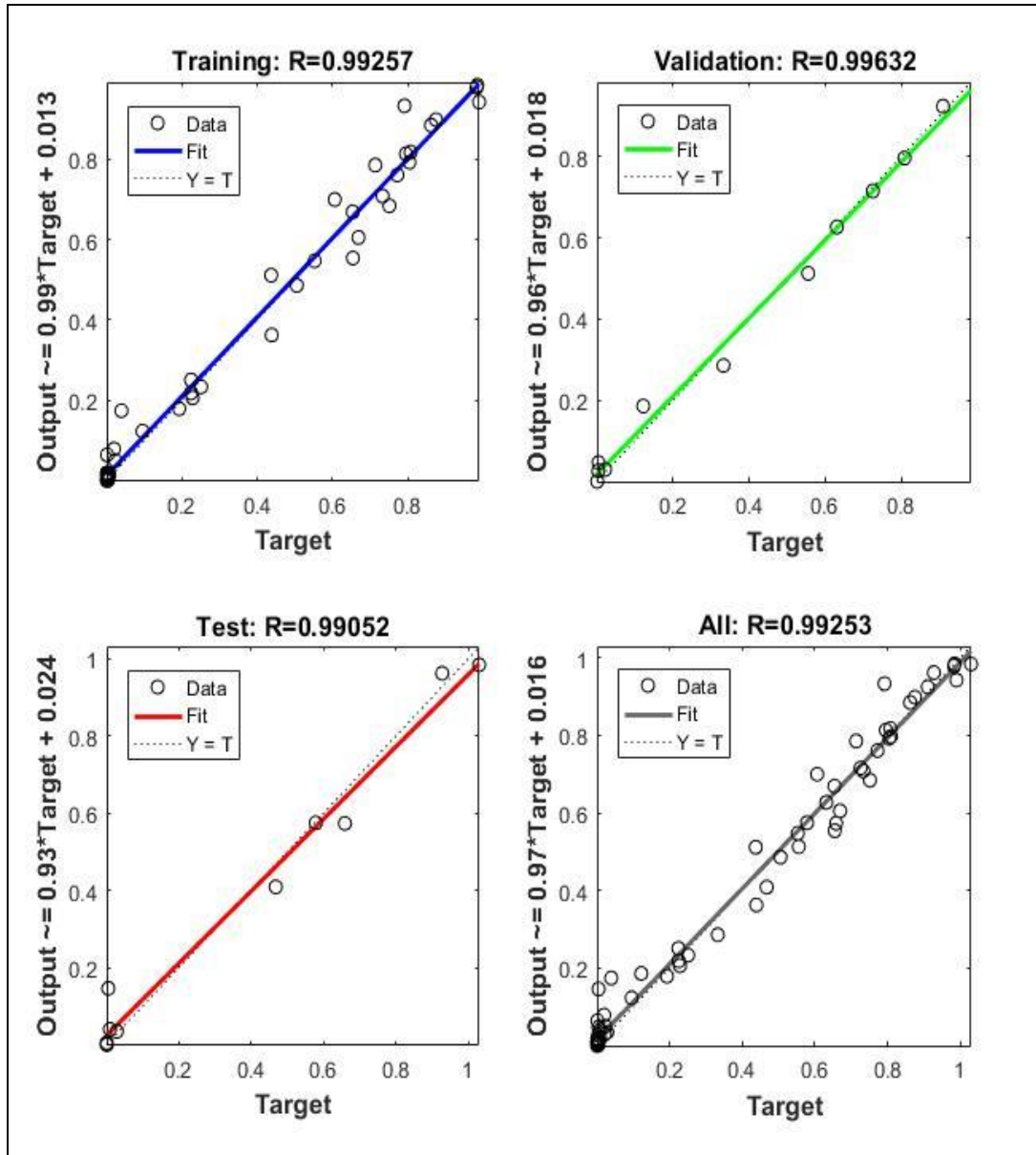
- EPOCH, ağın ağırlıklarının tam olarak kaç kere değiştiğinin sayısıdır. Geri yayımlı algoritmalarda “2” iterasyon sayısı “1” epoch’a eşittir.

### 3.1.1. Metotreksat Etken Maddesinin Model Tercih Seçimleri

Tablo 3.2: MTX Modeli için Farklı Eğitim Algoritmaların Regresyon Analiz Sonuçları.

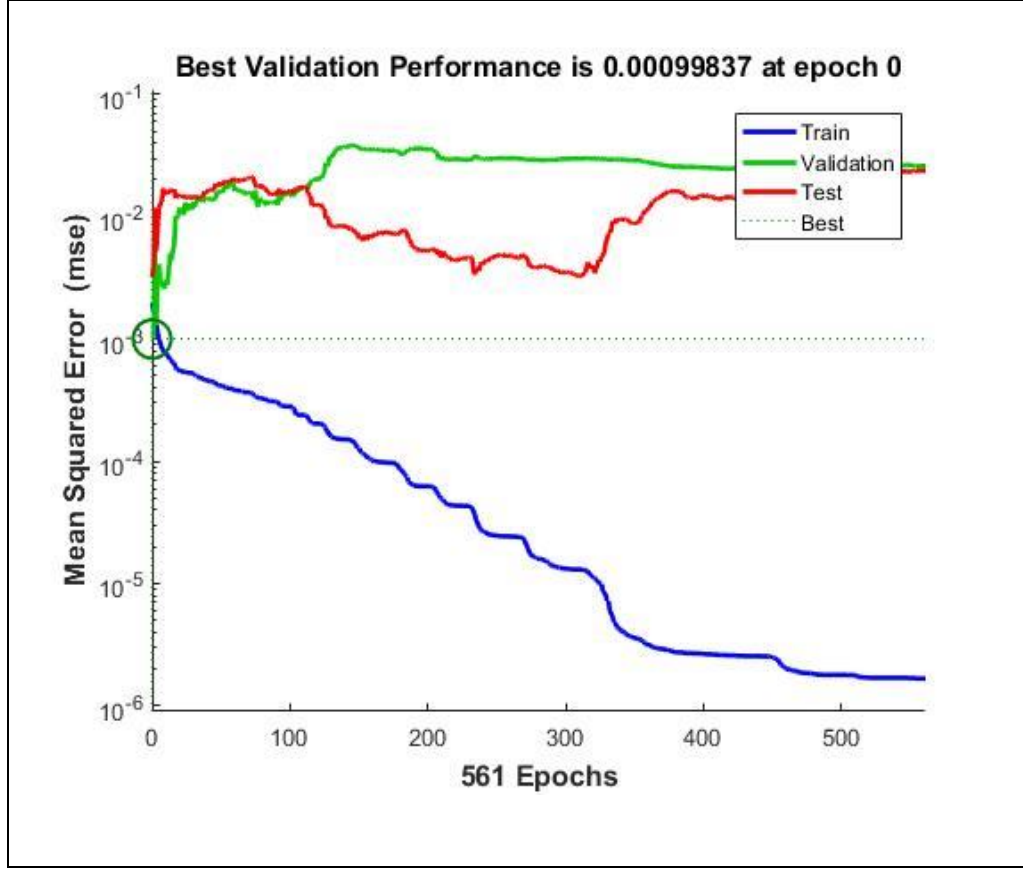
| Fonksiyon Tipi  | Regresyon Analiz Sonucu ("R") | 'MSE' SONUCU     | Lineer Çözüm (En Yakın) |
|-----------------|-------------------------------|------------------|-------------------------|
| <b>TRAINBFG</b> | <b>0.99253</b>                | <b>0.0033037</b> | <b>Y=0.97X+0.016</b>    |
| TRAINBR         | 0.94065                       | 0.051669         | Y=0.94X-0.0096          |
| TRAINCGB        | 0.98689                       | 0.0022182        | Y=1X-0.00099            |
| <b>TRAINCGF</b> | <b>0.99274</b>                | <b>0.001264</b>  | <b>Y=1X+0.00031</b>     |
| TRAINCGP        | 0.97432                       | 0.010447         | Y=1X+0.002              |
| TRAINGD         | 0.75502                       | 0.092896         | Y=0.57X+0.19            |
| TRAINGDM        | 0.80409                       | 0.37493          | Y=0.51X+0.13            |
| TRAINGDA        | 0.96115                       | 0.036223         | Y=1X+0.014              |
| TRAINGDY        | 0.97383                       | 0.027425         | Y=0.97X+0.017           |
| TRAINLM         | 0.98606                       | 0.0059703        | Y=0.95X+0.02            |
| TRAINOOS        | 0.97353                       | 0.008542         | Y=0.96X+0.006           |
| TRAINR          | 0.97604                       | 0.015241         | Y=0.92X+0.0092          |
| TRAINRP         | 0.95704                       | 0.012564         | Y=0.87X+0.055           |
| <b>TRAINSCG</b> | <b>0.99057</b>                | <b>0.0010792</b> | <b>Y=1X+0.0097</b>      |

Tablo 3.2'deki algoritmaların her biri (5:10:1) modeliyle denenmiştir. Tablo 3.2'de siyah puntıyla seçilmiş olan değerler, eğitim fonksiyonu için en iyi değerlere sahip olanlardır. Yeniden analiz yapıp incelenmeye alınması gerekir, optimal eğitim fonksiyonu bulunduğundan sonra diğer analizlere geçiş yapılacaktır.



Şekil 3.2: MTX Modeli için Trainbfg Komutunun 2. Regresyon Analiz Sonuçları.

Laboratuvarda yapılan “Metotreksat” etken maddesinin deney sonuçlarının %80’i modeli eğitmek (training) için, %10’u validasyon ve kalan %10’u ise test amacıyla kullanıldı. Şekil 3.2’de görülen, trainbfg komutuyla (BFGS Quasi-Newton) yaratılan yapay sinir ağı modelinin her bir kısmı için ayrı analiz sonuçları mevcut ayrıca tüm regresyon sonuçlarının genel değeri de son tabloda (Şekil 3.2, All : R) verilmiştir.



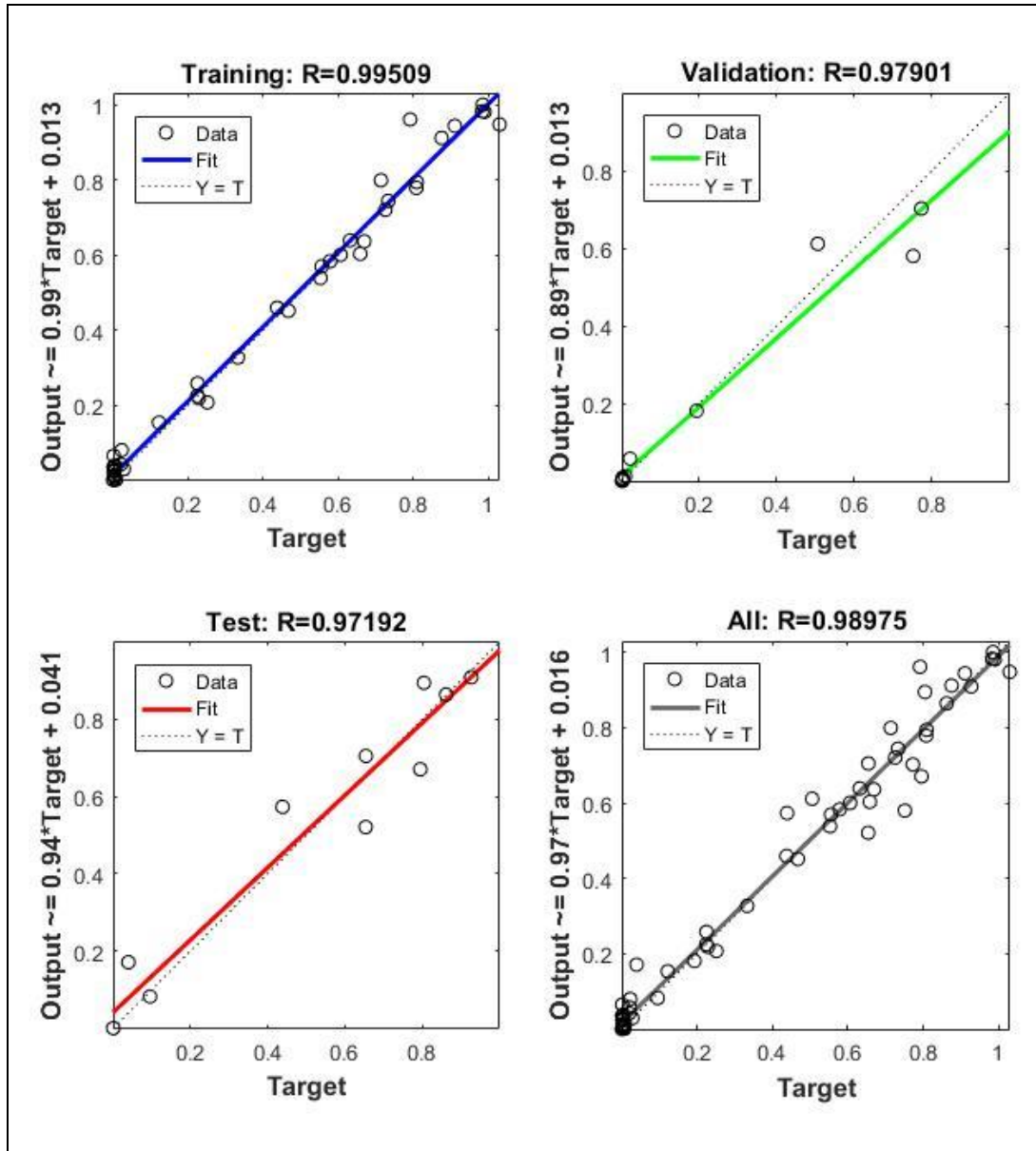
Şekil 3.3: MTX Modeli için Trainbfg Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2. Analiz Sonuçları.

Şekil 3.3'teki eğrilerden bu modelin kullanılabileceği tahminini yapmak mümkündür. Mavi eğri (öğrenme eğrisi) aşağı doğru salınım yaparak kurulan ağı öğrenildiğini, validasyon ve test eğrileri ise ilk başta atlama yapsada, sonra sabitleşerek ilerliyor, eğrilerdeki bu süreçler modelin kullanımına uygundur.

Tablo 3.3 MTX Modeli için Trainbfg Komutunun 2. Analiz Sonuçları.

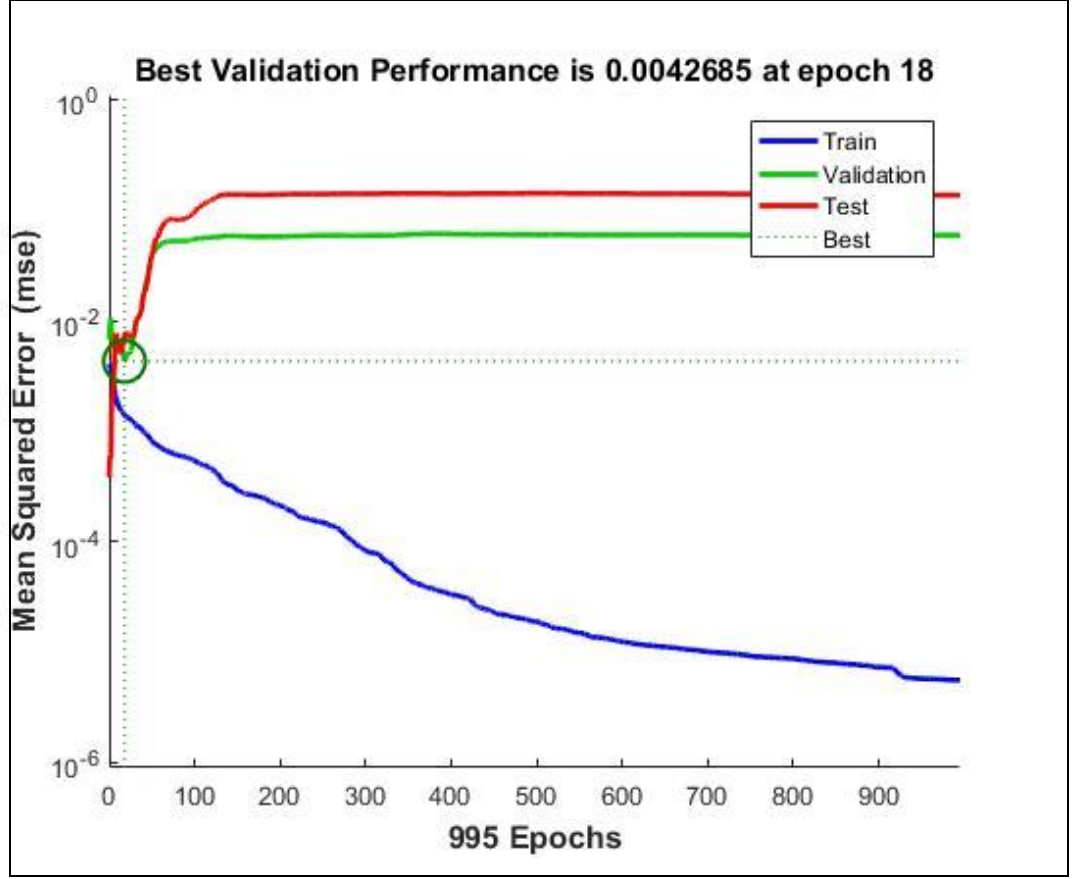
| FONKSİYON TİPİ | REGRESYON ANALİZ SONUCU | 'MSE' SONUCU |
|----------------|-------------------------|--------------|
| TRAINBFG       | 0.99253                 | 0.00099837   |

Tablo 3.3'te görülebileceği üzere kullanılan transfer fonksiyonunun genel analiz sonuçları verilmiştir.



Şekil: 3.4 MTX Modeli için Traincgf Komutunun 2. Regresyon Analiz Sonuçları.

Laboratuvarda yapılan “Metotreksat” etken maddesinin deney sonuçlarının %80’i modeli eğitmek (training) için, %10’u validasyon ve kalan %10’u ise test amacıyla kullanıldı. Şekil 3.4’te traincgf komutuyla (Conjugate Gradient Backpropagation with Fletcher-Reeves Restarts) yaratılan yapay sinir ağı modelinin her bir kısmı için ayrı tablolar mevcut ayrıca regresyon sonuçlarının genel ortalama değeri de son tabloda (Şekil 3.4, All : R) verilmiştir.



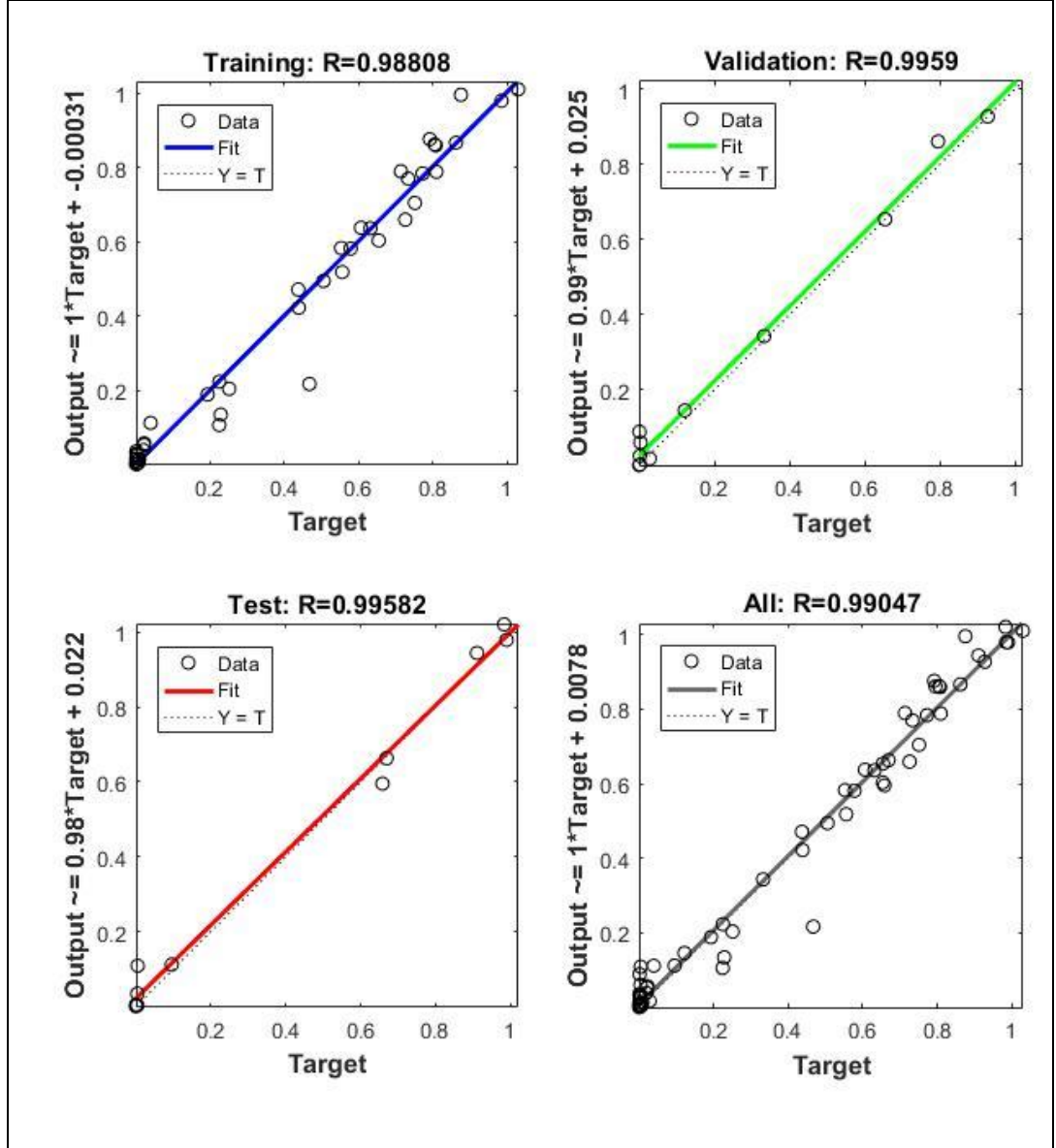
Şekil 3.5: MTX Modeli için Traincgf Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2. Analiz Sonuçları.

Şekil 3.5'teki eğrilerden bu modelin kullanılabileceği tahminini yapmak mümkündür. Mavi eğri (öğrenme eğrisi) aşağı doğru salınım yaparak kurulan ağı öğrettiğini, validasyon ve test eğrileri ise atlama yapmadan sabit bir şekilde ilerliyor, bu eğilimlerin aşağı inmesi, ancak daha fazla veri seti eklendiği takdirde mümkün olabilir.

Tablo 3.4: MTX Modeli için Traincgf Komutunun 2. Analiz Sonuçları.

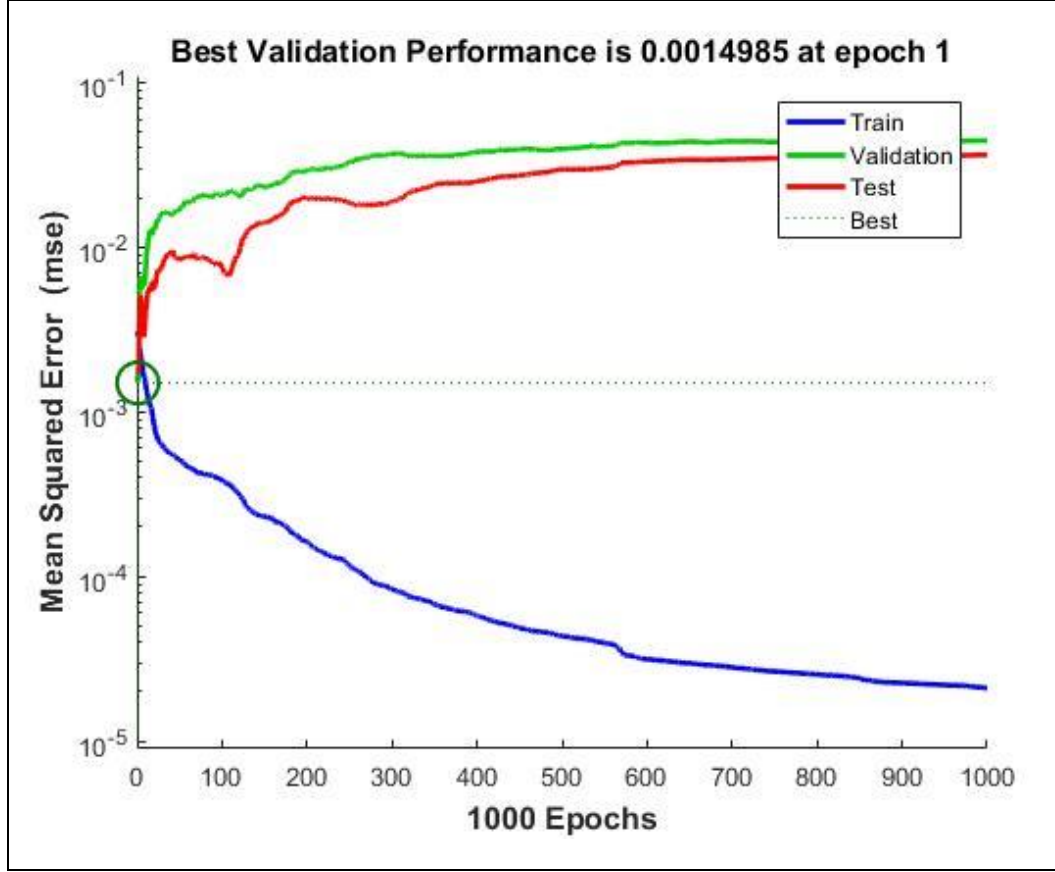
| FONKSİYON TİPİ | REGRESYON ANALİZ SONUCU | 'MSE' SONUCU |
|----------------|-------------------------|--------------|
| TRAINCGF       | 0.98975                 | 0.0042685    |

Tablo 3.4'te kullanılan transfer fonksiyonunun genel analiz sonucu verilmiştir.



Şekil 3.6: MTX Modeli için Trainscg Komutunun 2. Regresyon Analiz Sonuçları.

Laboratuvarda yapılan “Metotreksat” etken maddesinin deney sonuçlarının %80’i modeli eğitmek (training) için, %10’u validasyon ve kalan %10’u ise test amacıyla kullanıldı. Şekil 3.6’da trainscg komutuyla (Scaled Conjugate Gradient) yaratılan yapay sinir ağı modelinin her bir kısmı için ayrı şekiller mevcut ayrıca tüm regresyon sonuçlarının genel ortalama değeri de son tabloda (Şekil 3.6 All : R) verilmiştir.



Şekil 3.7: MTX Modeli için Trainscg Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2. Analiz Sonuçları.

Şekil 3.7'deki eğrilerden bu modelin kullanılabileceği tahminini yapmak mümkündür. Mavi eğri (öğrenme eğrisi) aşağı doğru salınım yaparak kurulan ağın öğrendiğini, validasyon ve test eğrilerinde ise herhangi bir büyük atlama mevcut olmadığından, Şekil 3.7'deki eğrilerin model kullanımına uygun olduğu söylenebilir.

Tablo 3.5: MTX Modeli için Trainscg Komutunun 2. Analiz Sonuçları.

| FONKSİYON TİPİ | REGRESYON ANALİZ SONUCU | 'MSE' SONUCU |
|----------------|-------------------------|--------------|
| TRAINSCG       | 0.99047                 | 0.0014985    |

Regresyon analiz sonucunun en yüksek değeri, BFGS Quasi-Newton (trainbfg) fonksiyonu vermiştir. Diğer aşamada, Quasi-Newton fonksiyonunu kullanılarak, optimal nöron sayısını bulmak adına yeniden analizler yapılacaktır.

Tablo 3.6: MTX Modeli için Nöron Sayısı Değişiminin Analiz Sonuçları.

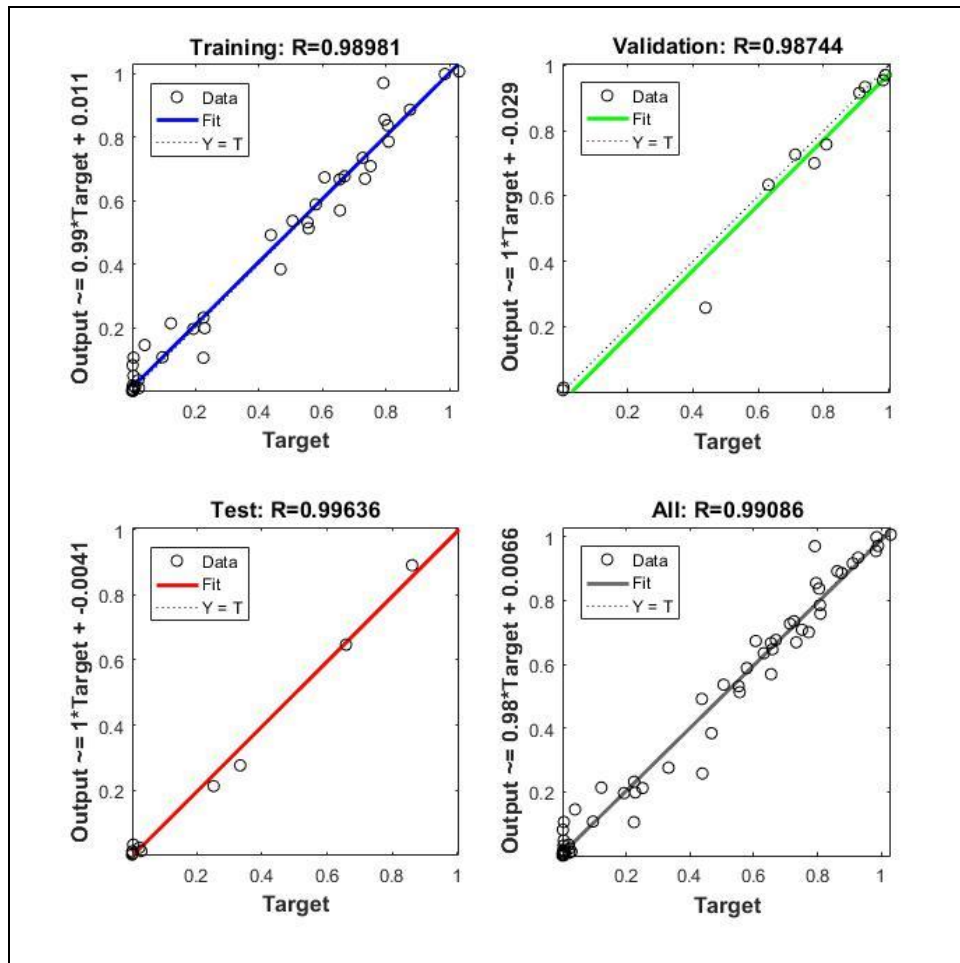
| NÖRON SAYISI | REGRESYON ANALİZ SONUCU | ‘MSE’ SONUCU     |
|--------------|-------------------------|------------------|
| 4            | 0.82894                 | 0.064351         |
| 5            | 0.95579                 | 0.0048368        |
| <b>6</b>     | <b>0.9922</b>           | <b>0.0087039</b> |
| 7            | 0.98292                 | 0.0015567        |
| <b>8</b>     | <b>0.99027</b>          | <b>0.0080579</b> |
| 9            | 0.96858                 | 0.00093412       |
| 10           | 0.98228                 | 0.0020535        |
| 11           | 0.98487                 | 0.011191         |
| 12           | 0.97508                 | 0.011375         |
| 13           | 0.92008                 | 0.08444          |
| 14           | 0.97097                 | 0.013291         |
| 15           | 0.98019                 | 0.0083317        |
| 16           | 0.92802                 | 0.0057672        |
| 17           | 0.98315                 | 0.0037089        |
| 18           | 0.98844                 | 0.0004139        |
| 19           | 0.95577                 | 0.014743         |
| 20           | 0.8444                  | 0.029644         |

Tablo 3.6’da “Metotreksat” etken maddesi için kurulacak yapay sinir ağı modelinin yapısında var olan bir adet gizli katmanının içindeki nöron sayısı değiştirilerek, kurulan yapıda en iyi sonucu alabilmek adına optimal nöron sayısı aranmıştır. Yukarıdaki sayıların seçilmesinin sebebi, bir gizli katmanda beş adet veri girişi olan bir ağ yapısı kurulurken, nöron sayısının değerini çok fazla düşürmek altkısımlarda uyumsuzluk meydana getirip, sistemin dengesini bozabilecekken, tam tersini yapıp gereğinden fazla nöron sayısı arttırmak ise üst kısımlarda dengesizlik meydana getirip, sistemin dengesini bozar.

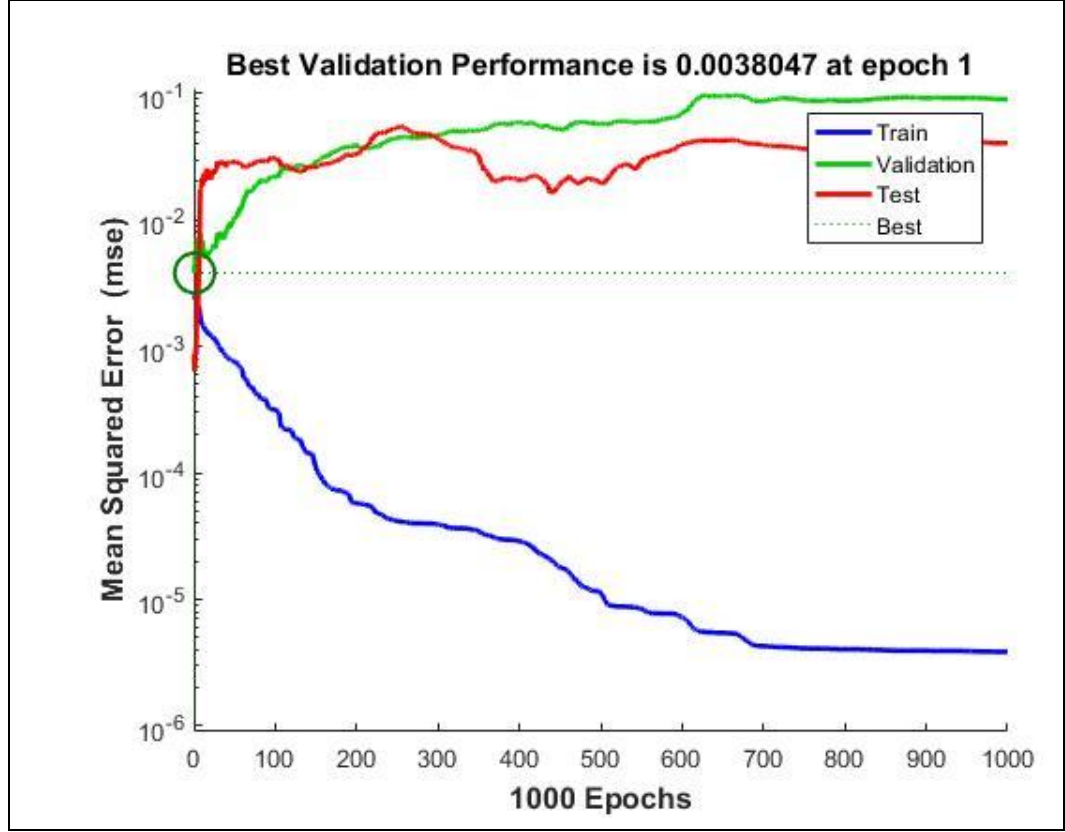
Tablo 3.6’da bulunan değerlerde siyah puntıyla belirtilmiş olanlar, en yüksek regresyon ve en düşük mse değerini verenlerdir. Bu yüzden yeniden analiz yapılmıştır. Yeniden yapılan analizin sonuçları Tablo 3.7’de mevcuttur. Son olarak ise optimize edilerek modellenmiş “Metotreksat” ilaç etken maddesinin Şekil 3.8’de Regresyon analiz grafiği ve Şekil 3.9’da En küçük kareler grafiklerinin şekilleri gösterilmiştir.

Tablo 3.7: MTX Modeli için Nöron Sayısı Değişiminin 2. Analiz Sonuçları.

| NÖRON SAYISI | REGRESYON ANALİZ SONUCU | ‘MSE’ SONUCU     |
|--------------|-------------------------|------------------|
| 6            | 0.99024                 | 0.0088047        |
| <b>8</b>     | <b>0.99086</b>          | <b>0.0038047</b> |

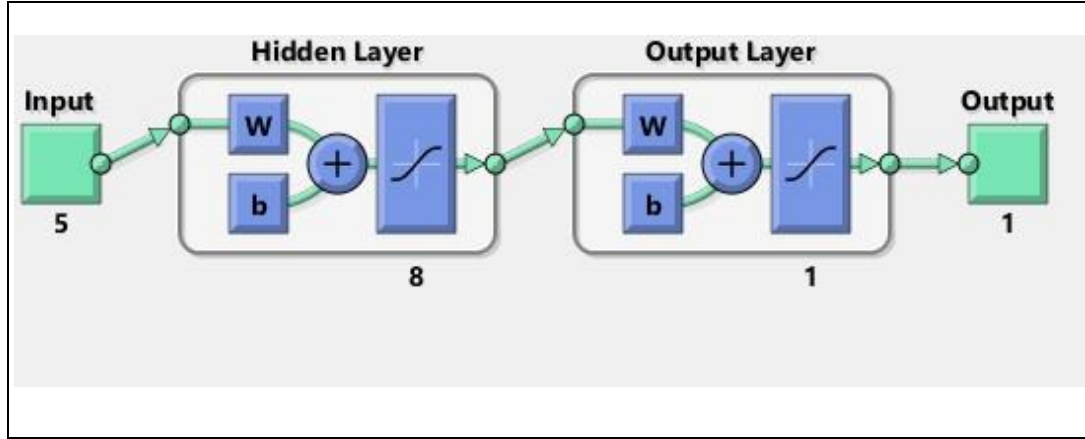


Şekil 3.8: Metotreksat Etken Maddesinin Optimum Modelinin Regresyon Analiz Sonuçları.



Şekil 3.9: Metotreksat Etken Maddesinin Optimum Modelinin En Küçük Kareler (MSE) Analiz Sonuçları.

Şekil 3.9'daki eğrilerden bu modelin kullanılabileceği tahminini yapmak mümkündür. Mavi eğri (öğrenme eğrisi) aşağı doğru salınım yaparak kurulan ağın öğrendiğini, validasyon ve test eğrilerinde ise herhangi bir büyük atlama söz konusu değil. Validasyon ve test eğrilerinde kullanılan yaklaşık “10” adet gözlem değeri mevcut, sonuç olarak bu eğrilerin birbirinden bağımsız büyük atlamalar yapmaması bu modelin kullanılabilir olduğunu onaylar. Şekil 3.10'da kullanılan modelin genel şekli görülebilir.



Şekil 3.10: Metotreksat İlaç Etken Maddesi İçin Optimize Edilmiş Yapay Sinir Ağı Modeli.

Şekil 3.10'daki model, kullanılan arayüzün “Metotreksat” ilaç etken maddesi için kullanılan yapay sinir ağ model yapısının genellenmiş şeklidir. Görüldüğü üzere yapılan analizler sonucu nöron sayısının “8” olması durumunda en optime sonuç alındığı sonuçlarda mevcuttur. Son durumda “Metotreksat” ilaç etken maddesi için kullanılacak olan yapay sinir ağı modeli (5:8:1) modelidir. Şekil 3.10'daki modelin “trainbfg” komutu ile beraber kullanıma girmesi neticesinde en optime sonuç alınmıştır.

Tablo 3.8: MTX YSA Modeli (“Matlab” arayüzü için).

| Etken Madde | Eğitim Algoritması | Nöron Sayısı | Gizli Katman Sayısı |
|-------------|--------------------|--------------|---------------------|
| Metotreksat | Trainbfg           | 8            | 1                   |

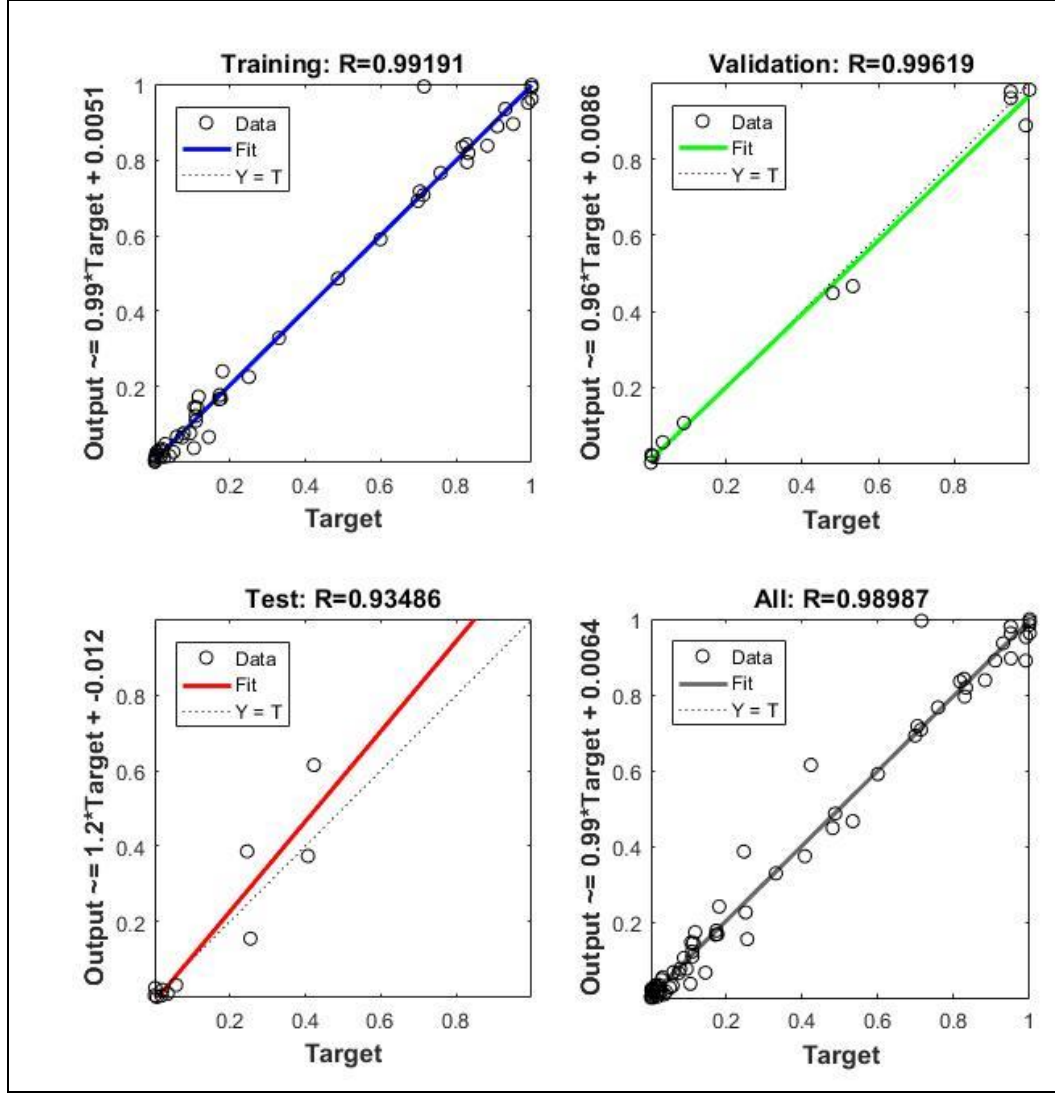
Tablo 3.8'de “MTX” etken maddesi için optime olan yapay sinir ağ modelinin sonuçları mevcuttur.

### 3.1.2. İmatinib Etken Maddesinin Model Tercih Seçimleri

Tablo 3.9: IMT Modeli için Farklı Eğitim Algoritmaların Regresyon Analiz Sonuçları.

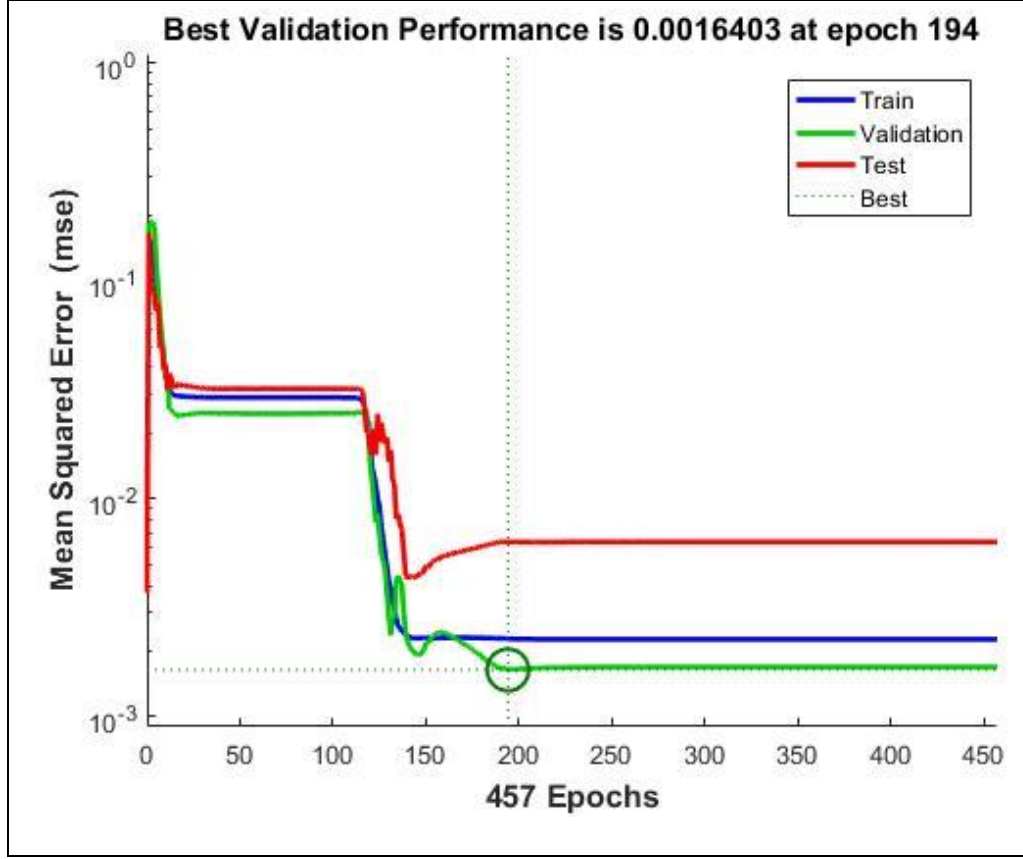
| Fonksiyon Tipi  | Regresyon Analiz Sonucu | ‘MSE’ SONUCU     | Lineer Çözüm (En Yakın)            |
|-----------------|-------------------------|------------------|------------------------------------|
| TRAINBFG        | 0.96404                 | 0.0070726        | $Y=0.97X+0.01$                     |
| <b>TRAINBR</b>  | <b>0.97156</b>          | <b>0.011161</b>  | <b><math>Y=0.91X+0.03</math></b>   |
| TRAINCGB        | 0.95221                 | 0.0091888        | $Y=0.97X+0.0058$                   |
| <b>TRAINCGF</b> | <b>0.96931</b>          | <b>0.0009399</b> | <b><math>Y=0.93X+0.0017</math></b> |
| <b>TRAINCGP</b> | <b>0.97095</b>          | <b>0.0067126</b> | <b><math>Y=1X-0.017</math></b>     |
| TRAINGD         | 0.83688                 | 0.69666          | $Y=0.59X+0.13$                     |
| TRAINGDM        | 0.7258                  | 0.15139          | $Y=0.55X+0.14$                     |
| TRAINGDA        | 0.95232                 | 0.0019632        | $Y=0.95X+0.0014$                   |
| TRAINGDY        | 0.95016                 | 0.0064338        | $Y=0.96X-0.015$                    |
| TRAINLM         | 0.95181                 | 0.064327         | $Y=0.96X+0.00061$                  |
| TRAINOOS        | 0.95147                 | 0.023318         | $Y=0.94X+0.021$                    |
| TRAINR          | 0.88398                 | 0.033378         | $Y=0.73X+0.076$                    |
| TRAINRP         | 0.94044                 | 0.033048         | $Y=0.93X+0.013$                    |
| TRAINSCG        | 0.90652                 | 0.010665         | $Y=0.8X+0.042$                     |

Tablo 3.9’deki eğitim algoritmaların her biri (5:10:1) modeliyle denenmiştir. Tablo 3.9’da siyah puntıyla seçilmiş olan değerler, eğitim fonksiyonu için en iyi değerlere sahip olanlardır. Yeniden analiz yapıp incelenmeye alınması gerekir, optimal eğitim fonksiyonu bulunduktan sonra diğer analizlere geçiş yapılacaktır.



Şekil 3.11: IMT Modeli için Trainbr Komutunun 2. Regresyon Analiz Sonuçları.

Laboratuvarda yapılan “İmatinib” etken maddesinin deney sonuçlarının %80’i modeli eğitmek (training) için, %10’u validasyon ve kalan %10’u ise test amacıyla kullanıldı. Şekil 3.11’de trainbr komutuyla (Bayesian Regularization) yaratılan yapay sinir ağı modelinin her bir kısmı için ayrı tablolar mevcut ayrıca tüm regresyon sonuçlarının genel ortalama değeri de son şekilde (Şekil 3.11, All : R) verilmiştir.



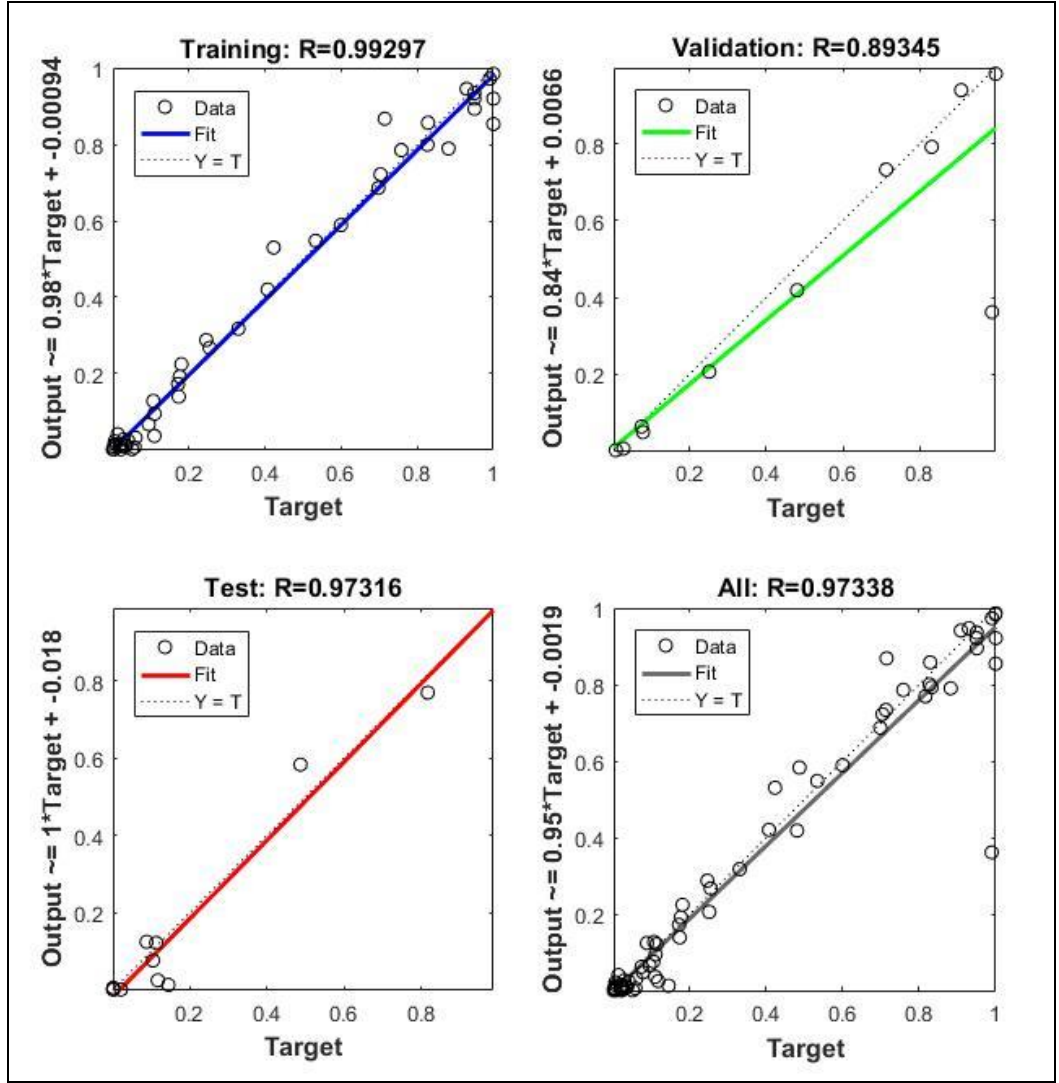
Şekil 3.12 IMT: Modeli için Trainbr Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2. Analiz Sonuçları.

Şekil 3.12'deki eğriler, aşağı bir salınım yaptıktan sonra sabit olarak ilerlemişler, ayrıca bu eğrilerin aynı anda beraberce hareket etmeleri çok sık rastlanan bir durum olmamakla beraber istenen bir durumdur. Her ne kadar bir süreden sonra doğruların sabit olması, incelenmesi gereken bir durum olsa da, bu modelin kullanılamayacağı anlamına gelmez.

Tablo 3.10: IMT Modeli için Trainbr Komutunun 2. Analiz Sonuçları.

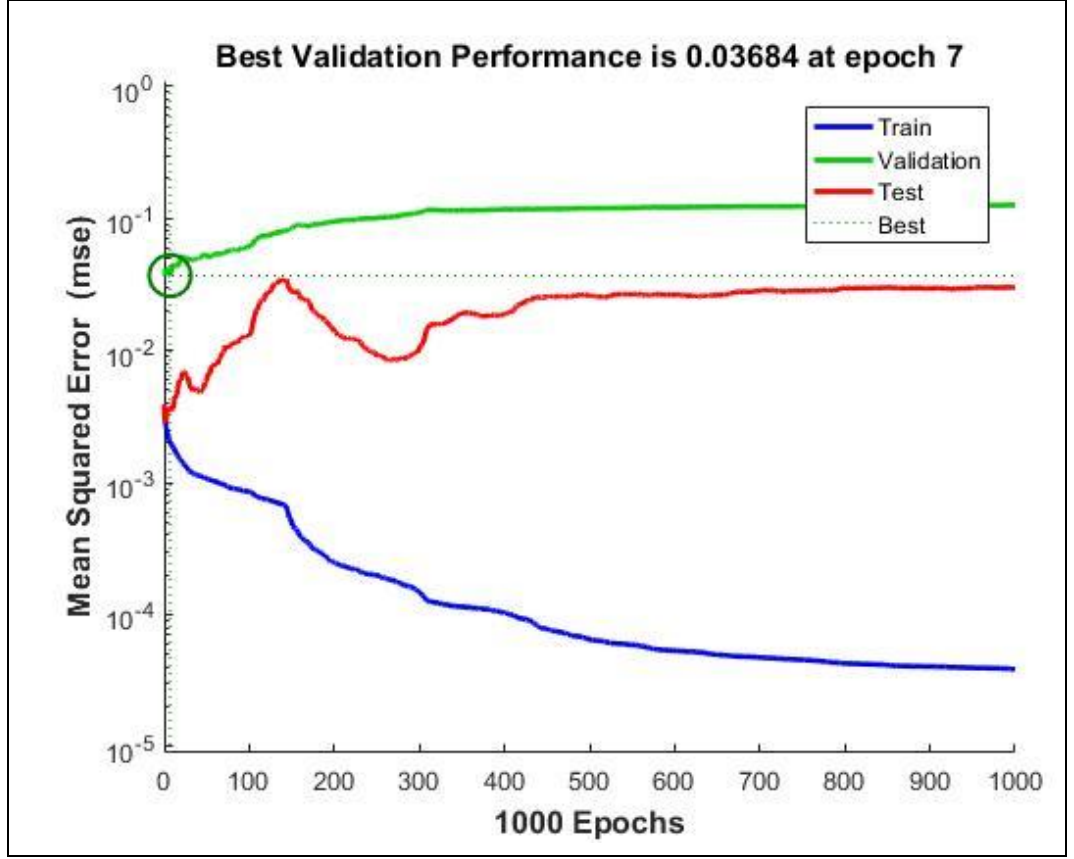
| FONKSİYON TİPİ | REGRESYON ANALİZ SONUCU | 'MSE' SONUCU |
|----------------|-------------------------|--------------|
| TRAINBR        | 0.98987                 | 0.0016403    |

Tablo 3.10'da kullanılan transfer fonksiyonunun genel analiz sonucu verilmiştir.



Şekil 3.13: IMT Modeli için Traincgf Komutunun 2. Regresyon Analiz Sonuçları.

Laboratuvarda yapılan “İmatinib” etken maddesinin deney sonuçlarının %80’i modeli eğitmek (training) için, %10’u validasyon ve kalan %10’u ise test amacıyla kullanıldı. Şekil 3.13’de traincgf komutuyla (Conjugate Gradient Backpropagation with Fletcher-Reeves Restarts) yaratılan yapay sinir ağı modelinin her bir kısmı için ayrı tablolar mevcut ayrıca tüm regresyon sonuçlarının genel ortalama değeri de son tabloda (Şekil 3.13, All : R) verilmiştir.



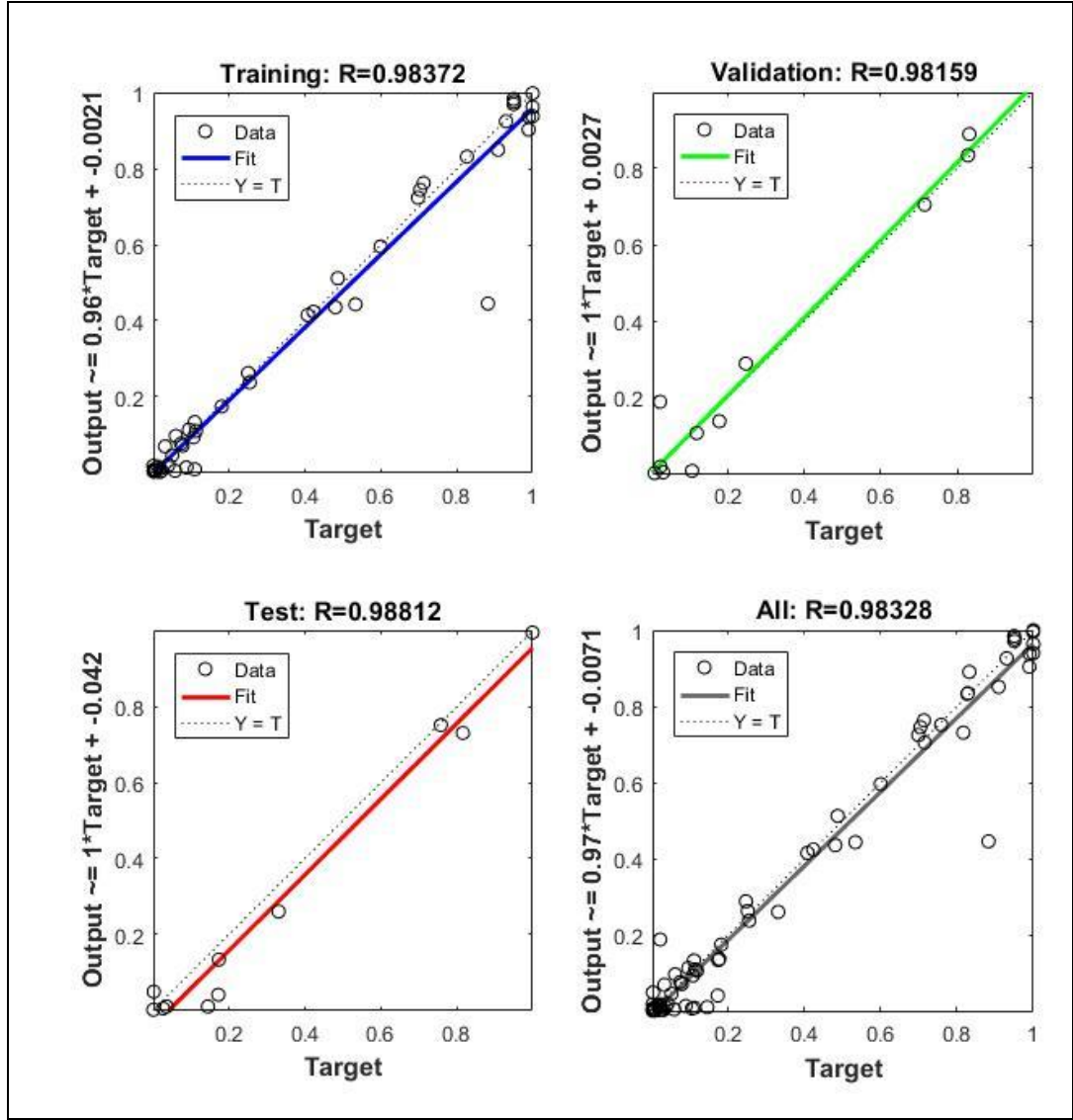
Şekil 3.14: IMT Modeli için Traincgf Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2. Analiz Sonuçları.

Şekil 3.14'teki eğrilerden bu modelin kullanılabileceği tahminini yapmak mümkündür. Mavi eğri (öğrenme eğrisi) aşağı doğru salınım yaparak kurulan ağı öğrenildiğini, validasyon ve test eğrilerinde ise herhangi bir büyük atlama mevcut değil.

Tablo 3.11: IMT Modeli için Traincgf Komutunun 2. Analiz Sonuçları.

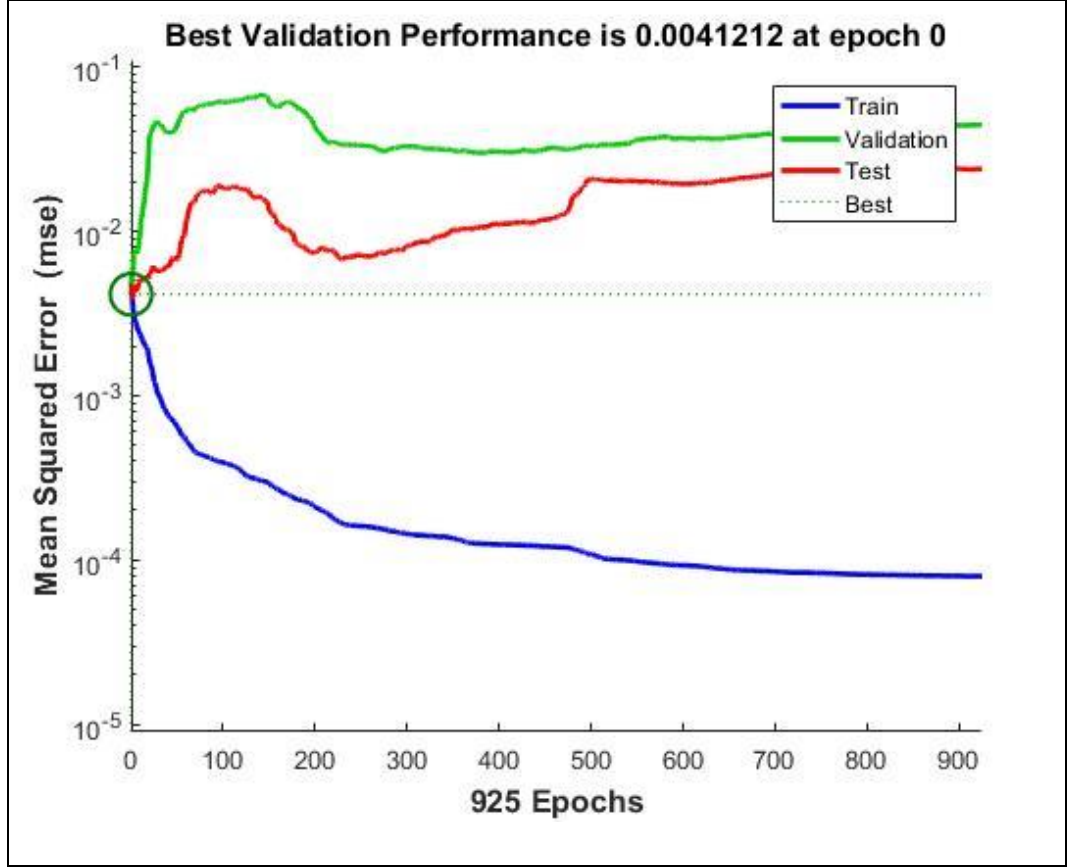
| FONKSİYON TİPİ | REGRESYON ANALİZ SONUCU | 'MSE' SONUCU |
|----------------|-------------------------|--------------|
| TRAINCGF       | 0.97338                 | 0.03684      |

Tablo 3.11'de kullanılan transfer fonksiyonunun genel analiz sonucu verilmiştir.



Şekil 3.15: IMT Modeli için Traincgp Komutunun 2. Regresyon Analiz Sonuçları.

Laboratuvarda yapılan “İmatinib” etken maddesinin deney sonuçlarının %80’i modeli eğitmek (training) için, %10’u validasyon ve kalan %10’u ise test amacıyla kullanıldı. Şekil 3.15’te traincgp komutuyla (Conjugate Gradient Backpropagation with Polak-Ribiere Restarts) yaratılan yapay sinir ağı modelinin her bir kısmı için ayrı tablolar mevcut ayrıca regresyon sonuçlarının genel ortalama değeri de son tabloda (Şekil 3.15 All : R) verilmiştir.



Şekil 3.16: IMT Modeli için Traincgp Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2. Analiz Sonuçları.

Şekil 3.16'daki eğrilerden bu modelin kullanılabileceği tahminini yapmak mümkündür. Mavi eğri (öğrenme eğrisi) aşağı doğru salınım yaparak kurulan ağı öğrenildiğini, validasyon ve test eğrilerinde ise herhangi bir büyük atlama mevcut değil.

Tablo 3.12: IMT Modeli için Traincgp Komutunun 2. Analiz Sonuçları.

| FONKSİYON TİPİ | REGRESYON ANALİZ SONUCU | 'MSE' SONUCU |
|----------------|-------------------------|--------------|
| TRAINCGP       | 0.98328                 | 0.0041212    |

Regresyon analiz sonucunun en yüksek değeri ve "MSE" değerinin en küçük sonucunu Bayesian Regularization (trainbr) fonksiyonu vermiştir, optimal nöron sayısını bulmak adına gizli katmanın içerisindeki nöron sayısı değiştirilerek sistemde yeniden regresyon ve mse analizleri yapılacaktır.

Tablo 3.13: IMT Modeli için Nöron Sayısı Değişiminin Analiz Sonuçları.

| NÖRON SAYISI | REGRESYON ANALİZ SONUCU | ‘MSE’ SONUCU      |
|--------------|-------------------------|-------------------|
| 4            | 0.9591                  | 0.0030896         |
| 5            | 0.7935                  | 0.12698           |
| <b>6</b>     | <b>0.98749</b>          | <b>0.0050889</b>  |
| 7            | 0.97401                 | 0.02462           |
| 8            | 0.88299                 | 0.02756           |
| 9            | 0.9171                  | 0.0061862         |
| 10           | 0.92505                 | 0.012894          |
| 11           | 0.98324                 | 0.0059086         |
| <b>12</b>    | <b>0.99108</b>          | <b>0.00080826</b> |
| 13           | 0.9895                  | 0.015771          |
| 14           | 0.95631                 | 0.0064685         |
| 15           | 0.97608                 | 0.022135          |
| 16           | 0.9542                  | 0.011788          |
| 17           | 0.86403                 | 0.053829          |
| 18           | 0.88817                 | 0.015695          |
| 19           | 0.97225                 | 0.012173          |
| 20           | 0.81119                 | 0.084662          |

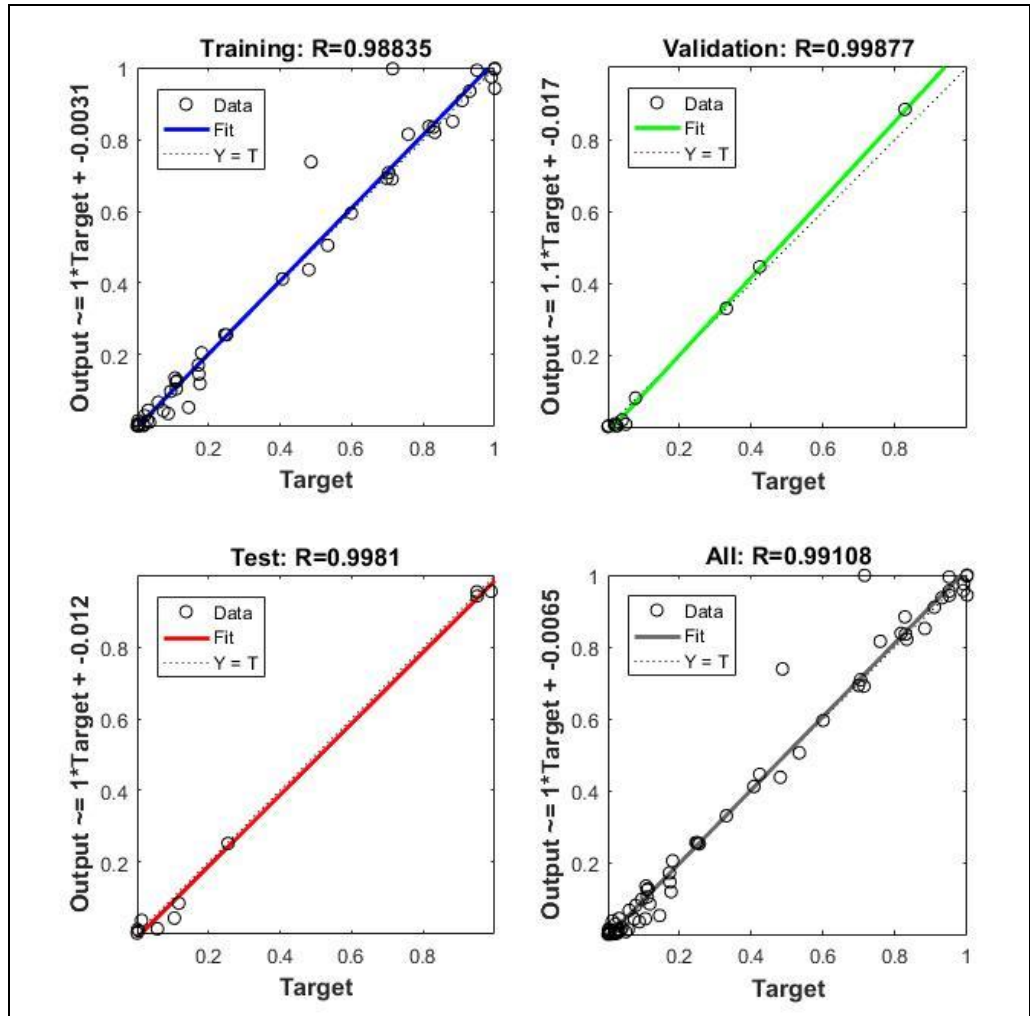
Tablo 3.13’te, “İmatinib” etken maddesi için kurulacak yapay sinir ağı modelinin yapısında var olan bir adet gizli katmanın içindeki nöron sayısı değiştirilerek, kurulan yapıda en iyi sonucu alabilmek adına optimal nöron sayısı aranmıştır. Yukarıdaki sayıların seçilmesinin sebebi, bir gizli katmanda beş veri girişi olan bir ağ yapısı kurulurken, nöron sayısının değerini çok fazla düşürmek alt kısımlarda uyumsuzluk meydana getirip, sistemin dengesini bozabilecekken, tamtersini yapıp gereğinden fazla nöron sayısı arttırmak ise üst kısımlarda dengesizlik meydana getirip, sistemin dengesini bozar.

Tablo 3.13’te bulunan değerlerde siyah puntıyla belirtilmiş olanlar, en yüksek regresyon ve en düşük mse değerini verenlerdir. Buyüzden yeniden analiz yapılmıştır. Yeniden yapılan analizin sonuçları Tablo 3.14’te mevcuttur. Son olarak ise optimize

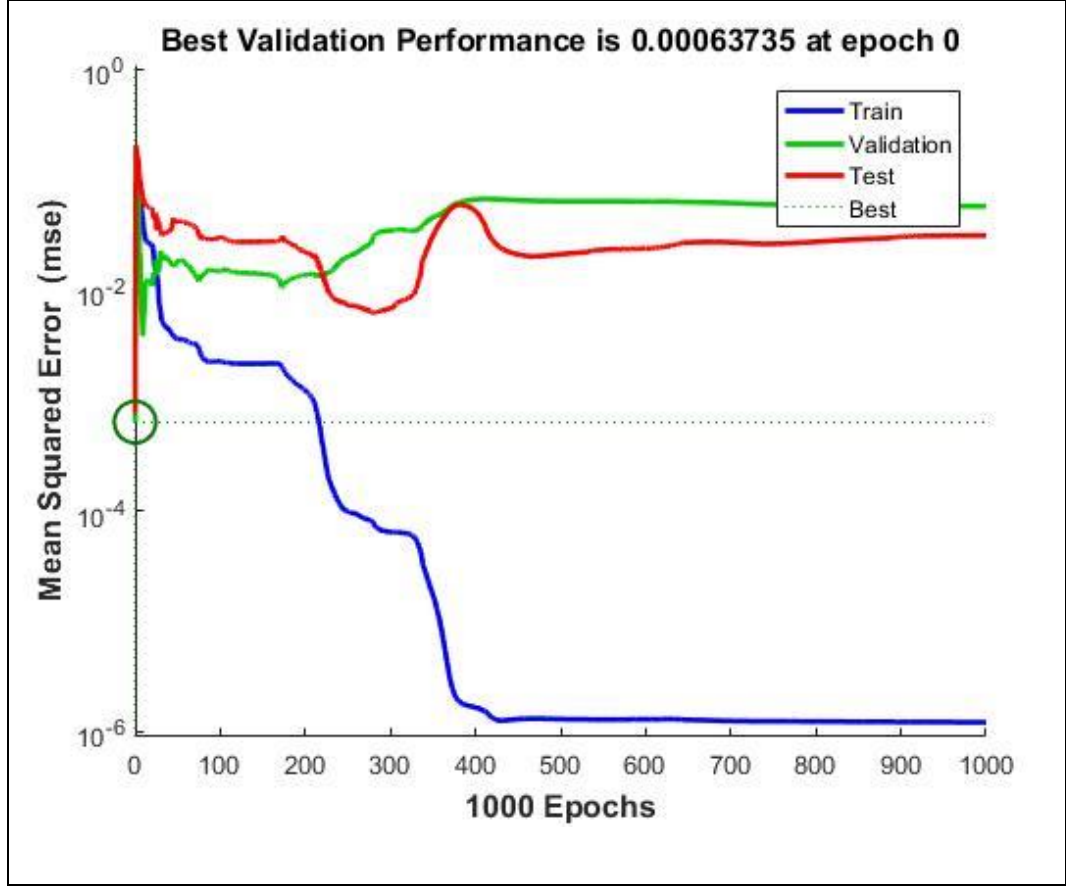
edilerek modellenmiş “İmatinib” ilaç etken maddesinin Şekil 3.17 ve Şekil 3.18 ‘de regresyon analiz ve en küçük kareler grafiklerinin şekilleri gösterilmiştir.

Tablo 3.14: IMT Modeli için Nöron Sayısı Değişiminin 2. Analiz Sonuçları.

| NÖRON SAYISI | REGRESYON ANALİZ SONUCU | ‘MSE’ SONUCU      |
|--------------|-------------------------|-------------------|
| 6            | 0.98749                 | 0.002097          |
| <b>12</b>    | <b>0.99108</b>          | <b>0.00063735</b> |

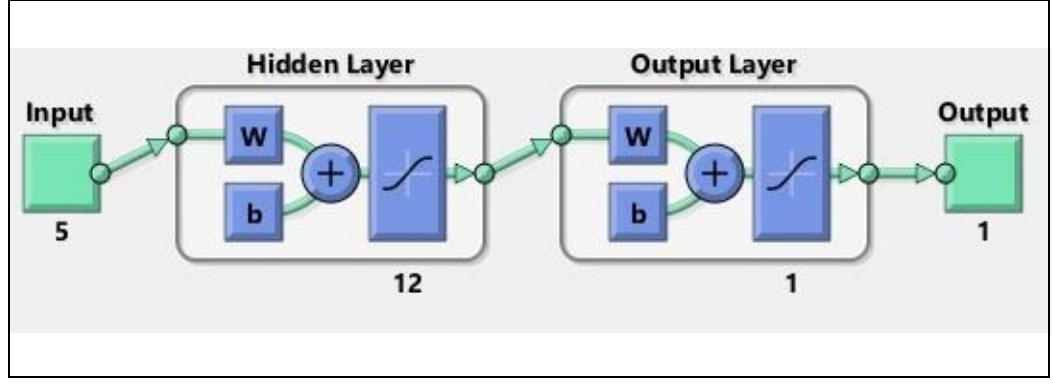


Şekil 3.17: İmatinib Etken Maddesinin Optimum Modelinin Regresyon Analiz Sonuçları.



Şekil 3.18: İmatinib Etken Maddesinin Optimum Modelinin En Küçük Kareler (MSE) Analiz Sonuçları.

Şekil 3.18'deki eğrilerden bu modelin kullanılabileceği tahminini yapmak mümkündür. Mavi eğri (öğrenme eğrisi) aşağı doğru çok ciddi bir salınım yapmıştır, burdan yola çıkarak kurulan ağı önemli bir şekilde öğrendiğini, validasyon ve test eğrilerinde ise herhangi bir büyük atlamanın söz konusu değildir. Validasyon ve test eğrilerinde kullanılan yaklaşık “10” adet gözlem değeri mevcut, sonuç olarak bu eğrilerin birbirinden bağımsız büyük atlamalar yapmaması bu modelin kullanılabilir olduğunu onaylar. Şekil 3.19'da kullanılan modelin genel şekli görülebilir.



Şekil 3.19: İmatinib İlaç Etken Maddesi İçin Optimize Edilmiş Yapay Sinir Ağ Modeli.

Şekil 3.19'daki model, kullanılan arayüzün “İmatinib” ilaç etken maddesi için kullanılan yapay sinir ağ model yapısının genellenmiş şeklidir. Görüldüğü üzere yapılan analizler sonucu nöron sayısının “12” olması durumunda en optime sonuç alındığı sonuçlarda mevcuttur. Son durumda “İmatinib” ilaç etken maddesi için kullanılacak olan yapay sinir ağı modeli (5:12:1) modelidir. Şekil 3.19'daki modelin “trainbr” komutu ile beraber kullanıma girmesi neticesinde en optime sonuç alınmıştır.

Tablo 3.15: IMT YSA Modeli (“Matlab” arayüzü için).

| Etken Madde | Eğitim Algoritması | Nöron Sayısı | Gizli Katman Sayısı |
|-------------|--------------------|--------------|---------------------|
| Imatinib    | Trainbr            | 12           | 1                   |

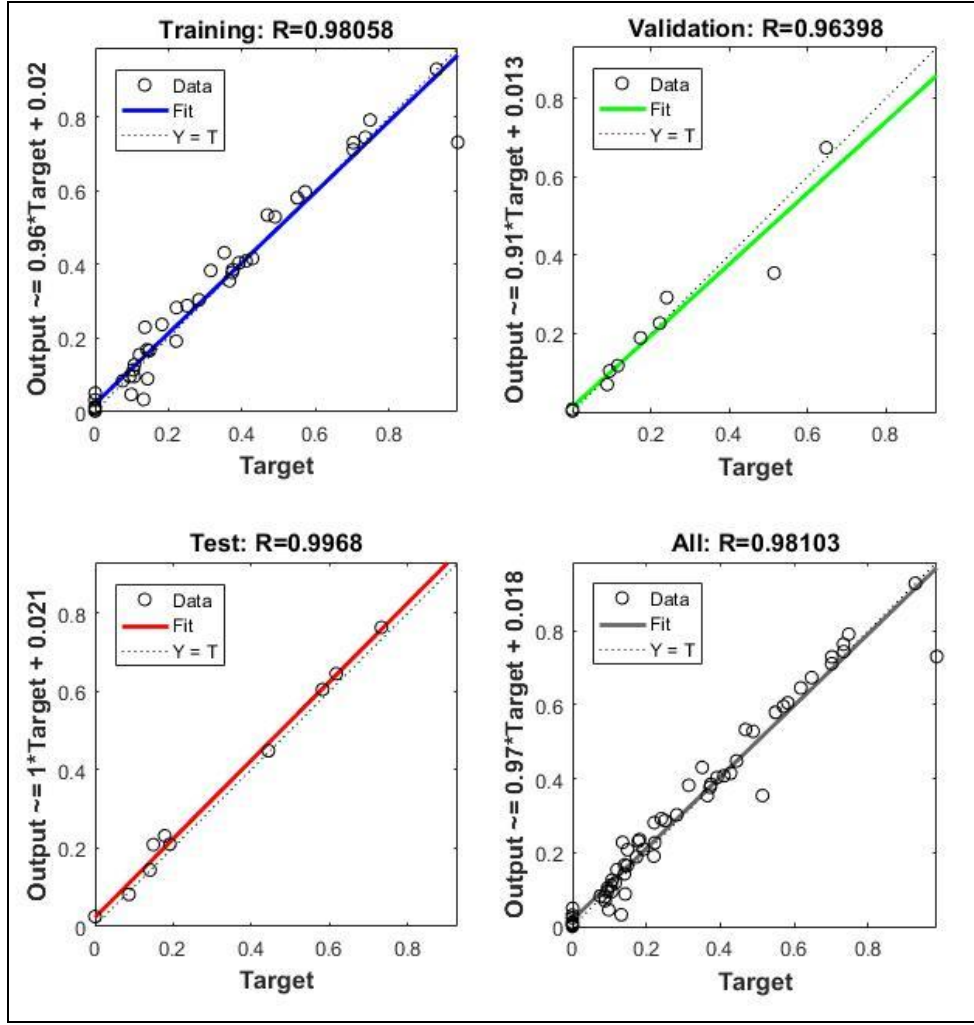
Tablo 3.15'te “İmatinib” etken maddesi için optime olan yapay sinir ağ modelinin sonuçları mevcuttur.

### 3.1.3. Karboplatin Etken Maddesinin Model Tercih Seçimleri

Tablo 3.16: KRP Modeli İçin Farklı Eğitim Algoritmaların Regresyon Analiz Sonuçları.

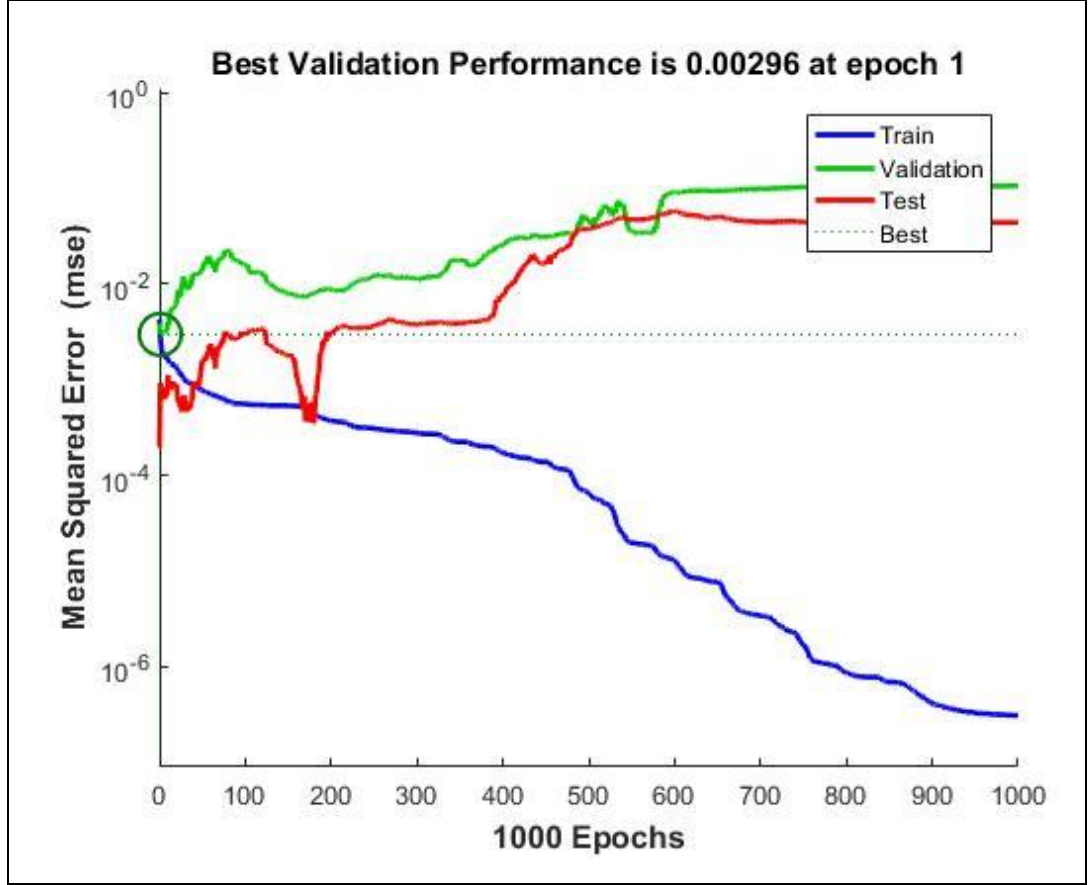
| Fonksiyon Tipi  | Regresyon Analiz<br>Sonucu | 'MSE'<br>SONUCU  | Lineer Çözüm<br>(En Yakın) |
|-----------------|----------------------------|------------------|----------------------------|
| <b>TRAINBFG</b> | <b>0.97289</b>             | <b>0.0011872</b> | <b>Y=0.92X+0.012</b>       |
| TRAINBR         | 0.79998                    | 0.015605         | Y=0.57X+0.012              |
| TRAINCGB        | 0.9228                     | 0.00635          | Y=0.90X+0.031              |
| TRAINCGF        | 0.94048                    | 0.0077429        | Y=0.99X+0.014              |
| TRAINCGP        | 0.93662                    | 0.0051983        | Y=0.94X+0.02               |
| TRAINGD         | 0.56776                    | 0.061305         | Y=0.29X+0.19               |
| TRAINGDM        | 0.78645                    | 0.017456         | Y=0.59X+0.11               |
| TRAINGDA        | 0.62375                    | 0.036611         | Y=0.41X+0.13               |
| <b>TRAINGDY</b> | <b>0.98309</b>             | <b>0.0034131</b> | <b>Y=0.96X+0.0055</b>      |
| <b>TRAINLM</b>  | <b>0.96788</b>             | <b>0.0055013</b> | <b>Y=0.85X+0.039</b>       |
| TRAINOOS        | 0.91496                    | 0.055678         | Y=0.81X+0.044              |
| TRAINR          | 0.83056                    | 0.034273         | Y=0.65X+0.054              |
| TRAINRP         | 0.82815                    | 0.029596         | Y=0.67X+0.028              |
| TRAINSCG        | 0.77801                    | 0.020883         | Y=0.66X+0.069              |

Tablo 3.16'daki eğitim algoritmaların her biri (5:10:1) modeliyle denenmiştir. Tablo 3.16'da siyah puntoyla seçilmiş olan değerler, eğitim fonksiyonu için en iyi değerlere sahip olanlardır. Yeniden analiz yapıp incelenmeye alınması gerekir, optimal eğitim fonksiyonu bulunduktan sonra diğer analizlere geçiş yapılacaktır.



Şekil 3.20: KRP Modeli İçin Trainbfg Komutunun 2. Regresyon Analiz Sonuçları.

Laboratuvarda yapılan “Karboplatin” etken maddesinin deney sonuçlarının %80’i modeli eğitmek (training) için, %10’u validasyon ve kalan %10’u ise test amacıyla kullanıldı. Şekil 3.20’de trainbfg komutuyla (BFGS Quasi - Newton) yaratılan yapay sinir ağı modelinin her bir kısmı için ayrı tablolar mevcut ayrıca tüm regresyon sonuçlarının genel ortalama değeri de son tabloda (Şekil 3.20, All : R) verilmiştir.



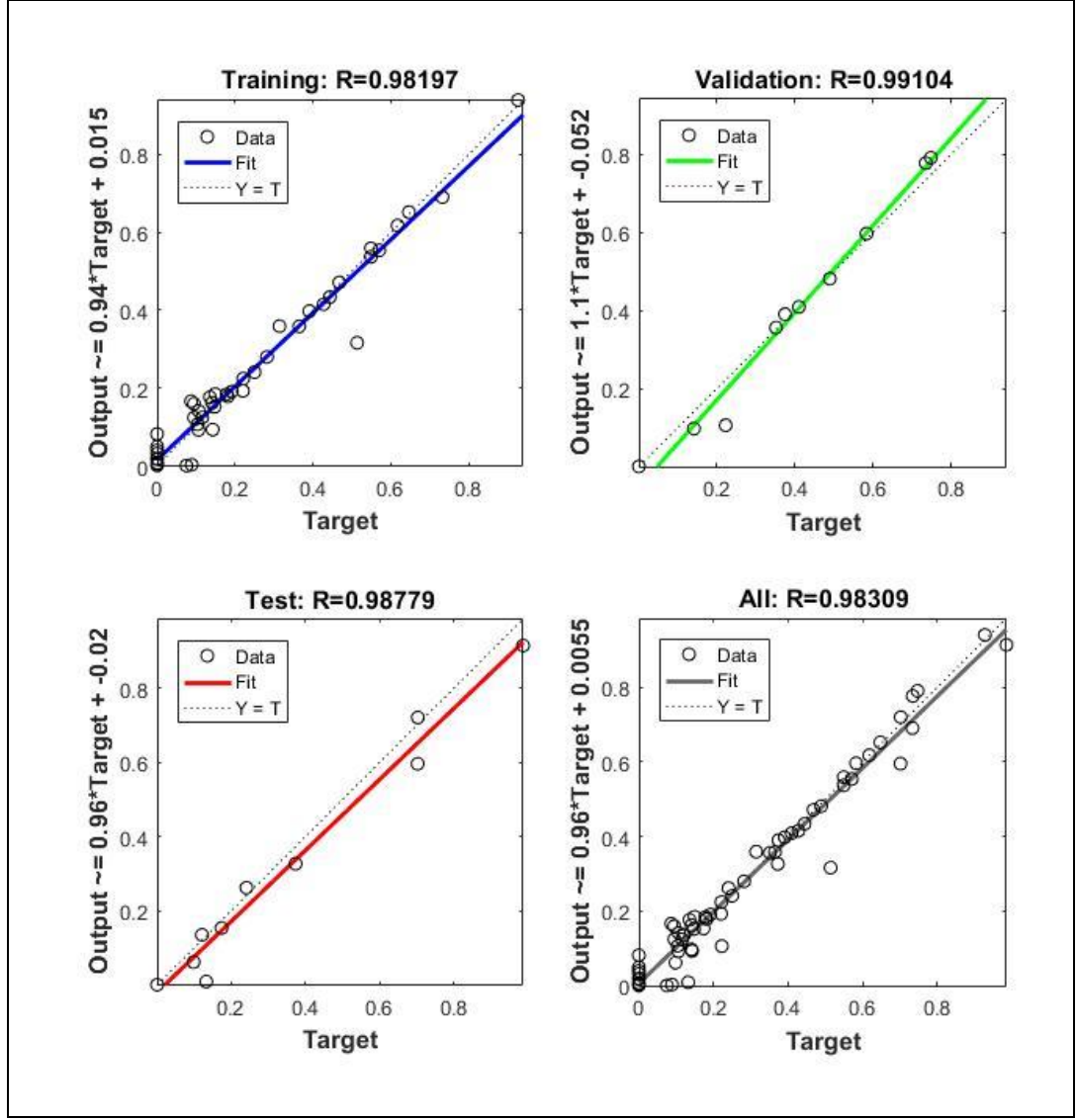
Şekil 3.21: KRP Modeli İçin Trainbfg Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2. Analiz Sonuçları.

Şekil 3.21'deki eğrilerden bu modelin kullanılabileceği tahminini yapmak mümkündür. Mavi eğri (öğrenme eğrisi) aşağı doğru salınım yaparak kurulan ağı öğrenildiğini, validasyon ve test eğrilerinde ise herhangi bir büyük atlama mevcut değil. Ayrıca test eğrisi ile validasyon eğrisinin belli bir noktada olması bu modelin yapısını güçlendiriyor.

Tablo 3.17 KRP Modeli İçin Trainbfg Komutunun 2. Analiz Sonuçları.

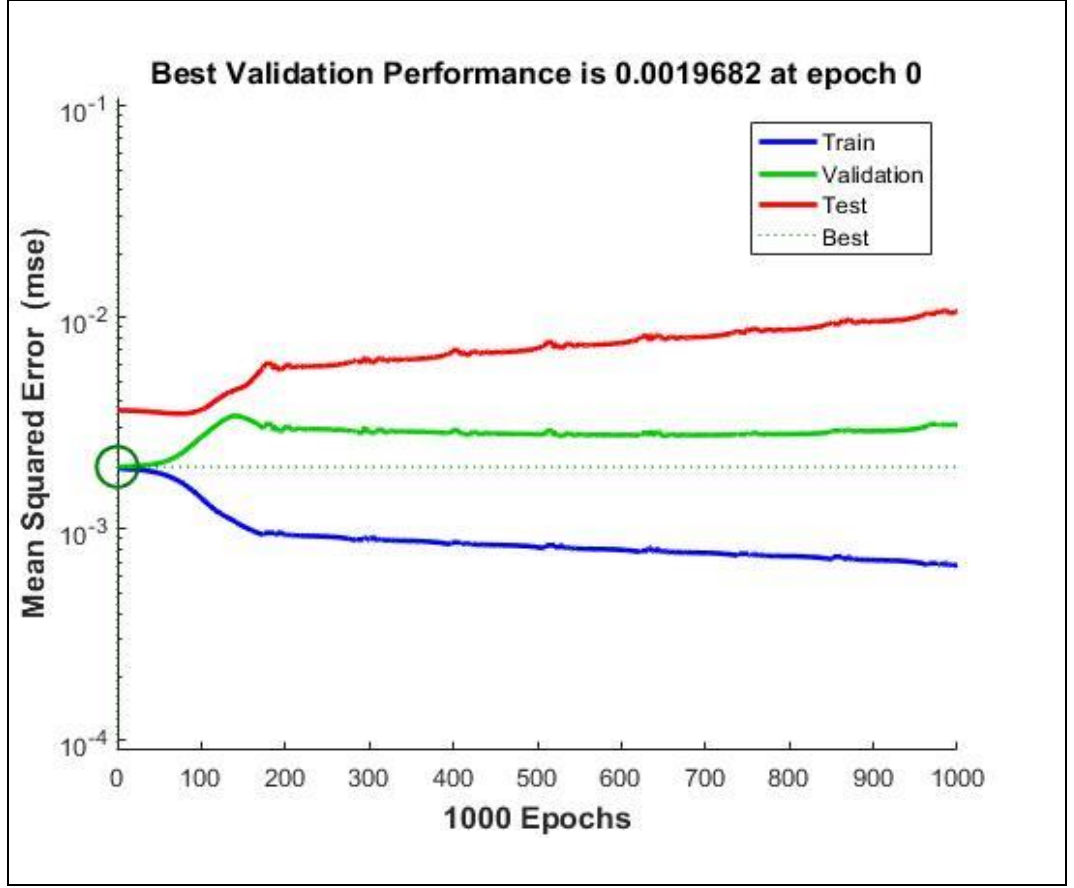
| FONKSİYON TİPİ | REGRESYON ANALİZ SONUCU | 'MSE' SONUCU |
|----------------|-------------------------|--------------|
| TRAINBFG       | 0.98058                 | 0.00296      |

Tablo 3.17'de kullanılan transfer fonksiyonunun genel analiz sonucu verilmiştir



Şekil 3.22: KRP Modeli İçin Traingdx Komutunun 2. Regresyon Analiz Sonuçları.

Laboratuvarda yapılan “Karboplatin” etken maddesinin deney sonuçlarının %80’i modeli eğitmek (training) için, %10’u validasyon ve kalan %10’u ise test amacıyla kullanıldı. Şekil 3.22’de traingdx komutuyla (Gradient Descent with Momentum & Adaptive LR) yaratılan yapay sinir ağı modelinin her bir kısmı için ayrı tablolar mevcut ayrıca tüm regresyon sonuçlarının genel ortalama değeri de son tabloda ( Şekil 3.22, All : R) verilmiştir.



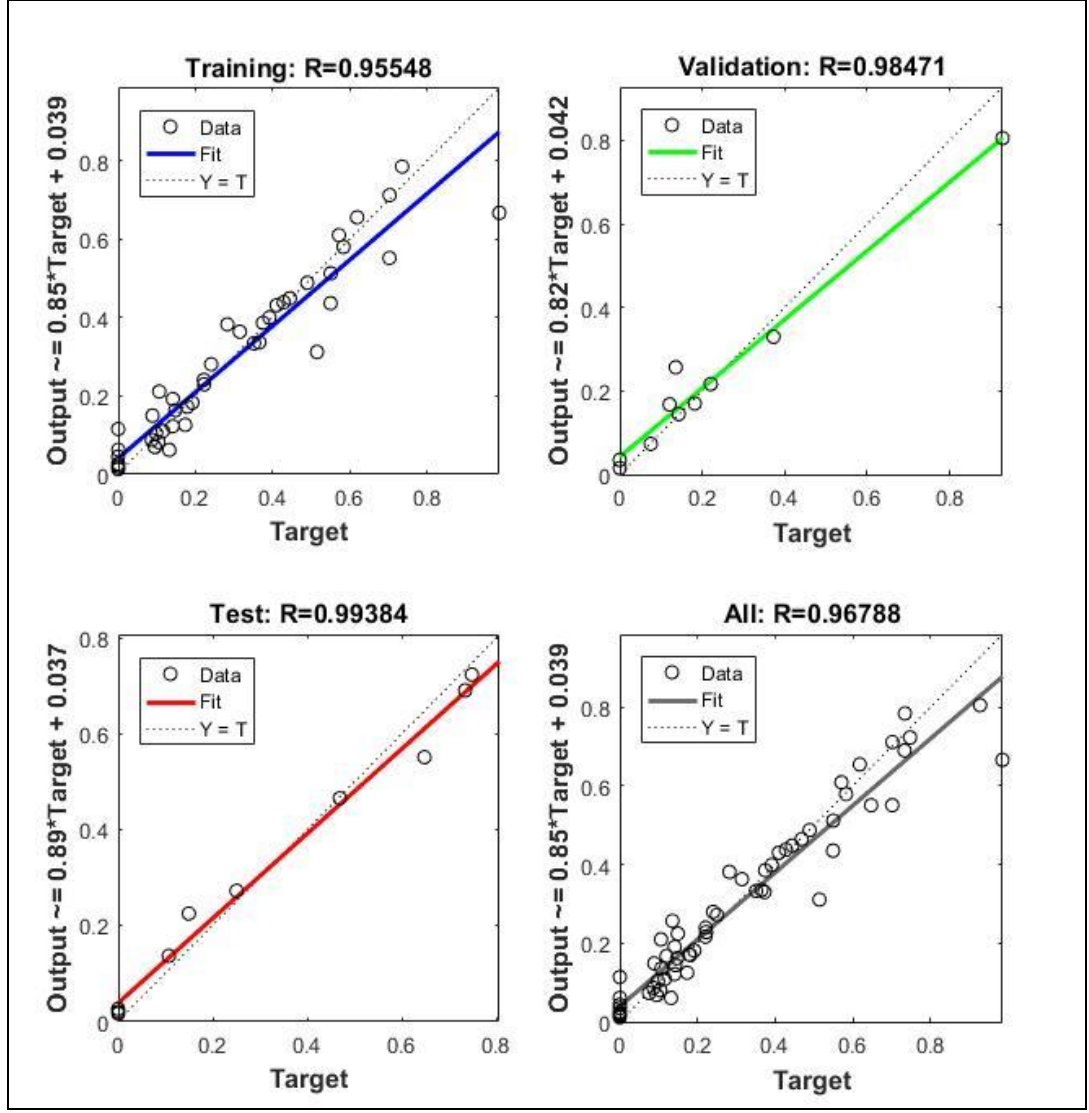
Şekil 3.23: KRP Modeli İçin Traingdx Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2. Analiz Sonuçları.

Şekil 3.7'deki eğrilerden bu modelin kullanılabileceği tahminini yapmak mümkündür. Mavi eğri (öğrenme eğrisi) aşağı doğru salınım yaparak kurulan ağıın öğrendiğini, ayrıca üç eğrinde aynı şekillerde hareket etmesi model tanımı için iyi olsa da, test eğrisinin yukarı doğru artışının incelenmesi gerekebilir. Ancak artış çok büyük bir derecede olmadığından tehlike arz etmemektedir.

Tablo 3.18 KRP: Modeli İçin Traingdx Komutunun 2. Analiz Sonuçları.

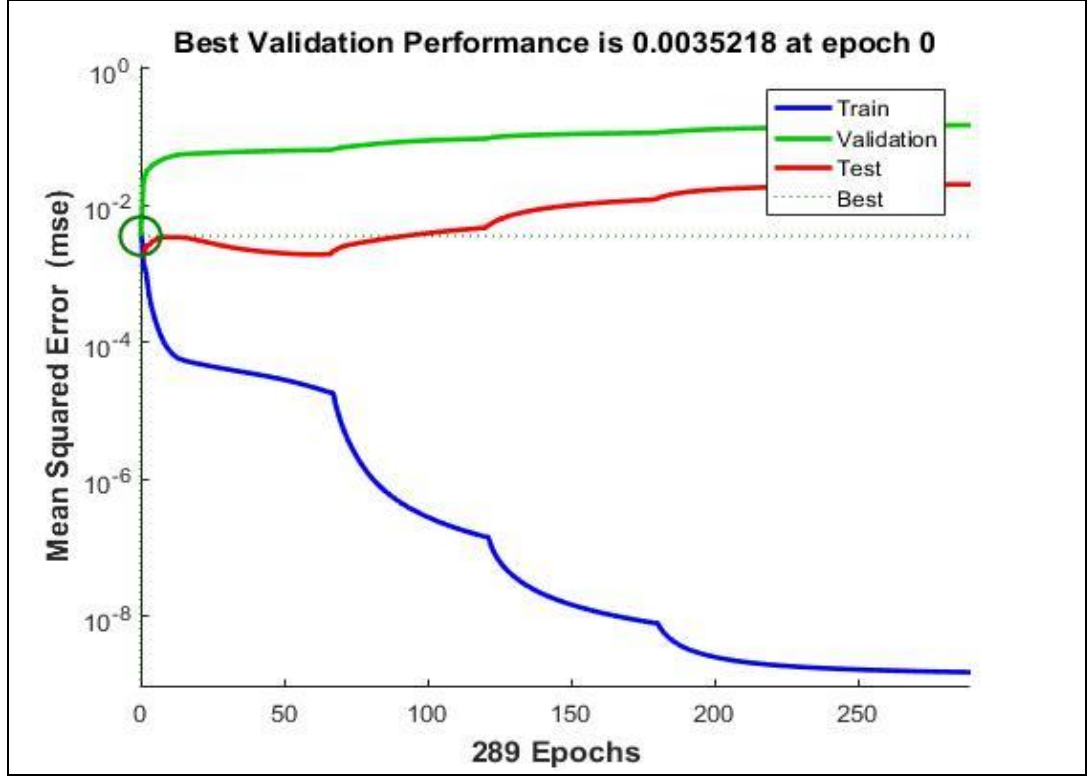
| FONKSİYON TİPİ | REGRESYON ANALİZ SONUCU | 'MSE' SONUCU |
|----------------|-------------------------|--------------|
| TRAININGDX     | 0.98197                 | 0.0019682    |

Tablo 3.18'de kullanılan transfer fonksiyonunun genel analiz sonucu verilmiştir.



Şekil 3.24: KRP Modeli İçin Trainlm Komutunun 2. Regresyon Analiz Sonuçları.

Laboratuvarda yapılan “Karboplatin” etken maddesinin deney sonuçlarının %80’i modeli eğitmek (training) için, %10’u validasyon ve kalan %10’u ise test amacıyla kullanıldı. Şekil 3.24’te trainlm komutuyla (Levenberg-Marquardt) yaratılan yapay sinir ağı modelinin her bir kısmı için ayrı tablolar mevcut ayrıca tüm regresyon sonuçlarının genel ortalama değeri de son tabloda ( Şekil 3.24, All : R) verilmiştir.



Şekil 3.25: KRP Modeli İçin Trainlm Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2. Analiz Sonuçları.

Şekil 3.25'teki eğrilerden bu modelin kullanılabileceği tahminini yapmak mümkündür. Mavi eğri (öğrenme eğrisi) aşağı doğru bir salınım yaparak kurulan ağıın öğrendiğini varsayabiliriz. Validasyon ve test eğrileri ise büyük bir atlama yapmadan sabitleşerek ilerliyor.

Tablo 3.19: KRP Modeli İçin Trainlm Komutunun 2. Analiz Sonuçları.

| FONKSİYON TİPİ | REGRESYON ANALİZ SONUCU | 'MSE' SONUCU |
|----------------|-------------------------|--------------|
| TRAINLM        | 0.95548                 | 0.0035218    |

Regresyon analiz sonucunun en yüksek değeri ve "MSE" değerinin en küçük sonucunu Gradient Descent with Momentum & Adaptive LR (traingdx) fonksiyonu vermiştir. Diğer aşamada, optimal nöron sayısını bulmak adına gizli katmanın içerisindeki nöron sayısı değiştirilerek sistemde yeniden regresyon ve mse analizleri yapılacaktır.

Tablo 3.20: KRP Modeli İçin Nöron Sayısı Değişiminin Analiz Sonuçları.

| NÖRON SAYISI | REGRESYON ANALİZ SONUCU | ‘MSE’ SONUCU     |
|--------------|-------------------------|------------------|
| 4            | 0.92804                 | 0.010128         |
| 5            | 0.91817                 | 0.0067673        |
| 6            | 0.93294                 | 0.0022414        |
| 7            | 0.8884                  | 0.010805         |
| 8            | 0.93126                 | 0.017275         |
| 9            | 0.9458                  | 0.0023724        |
| <b>10</b>    | <b>0.97202</b>          | <b>0.0030811</b> |
| 11           | 0.96261                 | 0.0016304        |
| 12           | 0.93237                 | 0.0206           |
| 13           | 0.97037                 | 0.017986         |
| 14           | 0.90675                 | 0.011504         |
| 15           | 0.93857                 | 0.01334          |
| 16           | 0.91546                 | 0.010476         |
| <b>17</b>    | <b>0.97788</b>          | <b>0.0084266</b> |
| 18           | 0.90837                 | 0.0026684        |
| 19           | 0.9393                  | 0.023592         |
| 20           | 0.95176                 | 0.010119         |

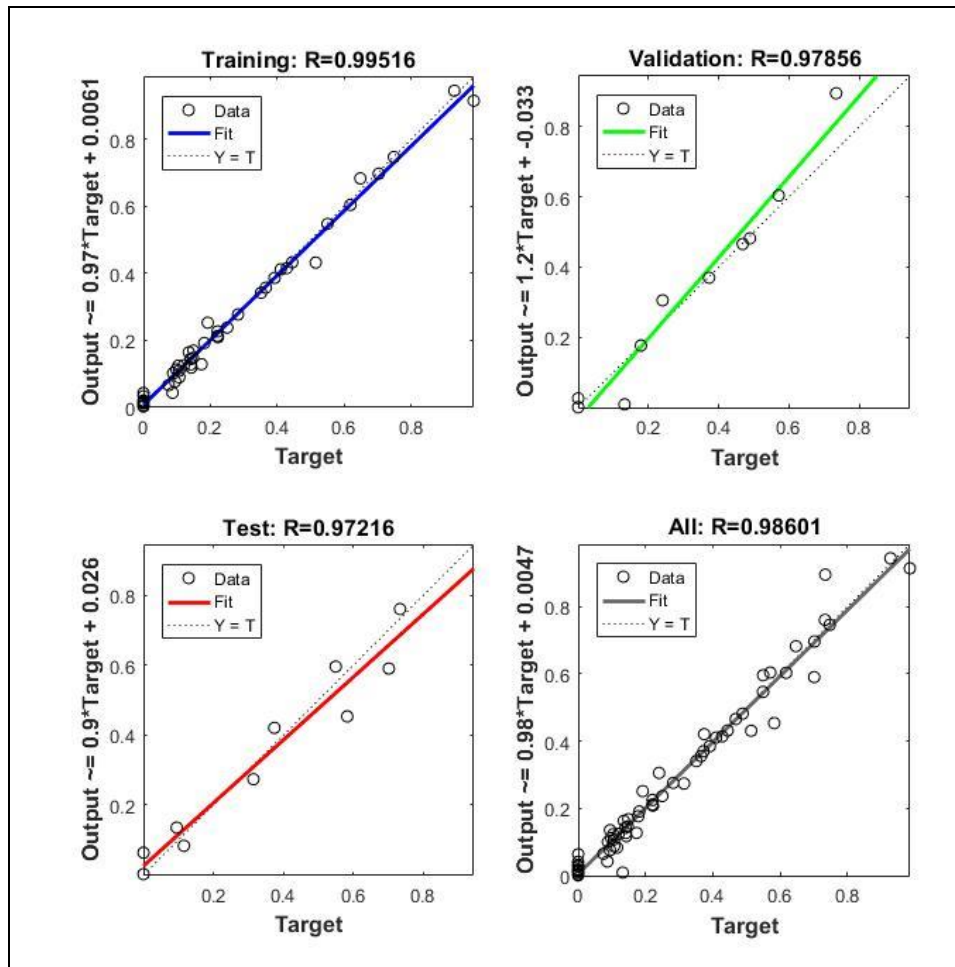
Tablo 3.20’de, “Karboplatin” etken maddesi için kurulacak yapay sinir ağı modelinin yapısında var olan bir adet gizli katmanın içindeki nöron sayısı değiştirilerek, kurulan yapıda en iyi sonucu alabilmek adına optimal nöron sayısı aranmıştır. Yukarıdaki sayıların seçilmesinin sebebi, bir gizli katmanda beş veri girişi olan bir ağ yapısı kurulurken, nöron sayısının değerini çok fazla düşürmek alt kısımlarda uyumsuzluk meydana getirip, sistemin dengesini bozabilecekken, tam tersini yapıp gereğinden fazla nöron sayısı arttırmak ise üst kısımlarda dengesizlik meydana getirip, sistemin dengesini bozar.

Tablo 3.20’de bulunan değerlerde siyah puntıyla belirtilmiş olanlar, en yüksek regresyon ve en düşük mse değerini verenlerdir. Buyüzden yeniden analiz yapılmıştır. Yeniden yapılan analizin sonuçları Tablo 3.21’de mevcuttur. Son olarak ise optimize

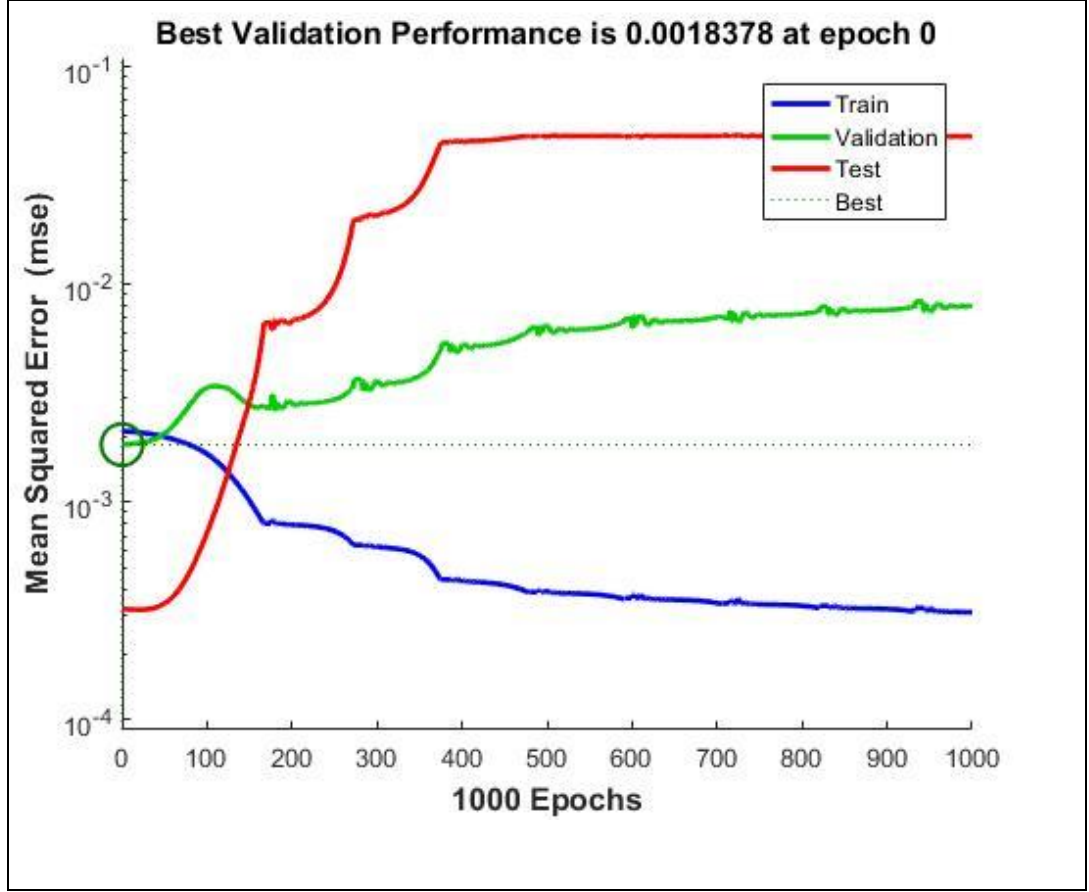
edilerek modellenmiş “Karboplatin” ilaç etken maddesinin regresyon analiz ve en küçük kareler grafiklerinin şekilleri gösterilmiştir.

Tablo 3.21: KRP Modeli İçin Nöron Sayısı Değişiminin 2.Analiz Sonuçları.

| NÖRON SAYISI | REGRESYON ANALİZ SONUCU | ‘MSE’ SONUCU     |
|--------------|-------------------------|------------------|
| 10           | 0.97198                 | 0.0020641        |
| <b>17</b>    | <b>0.98601</b>          | <b>0.0018378</b> |

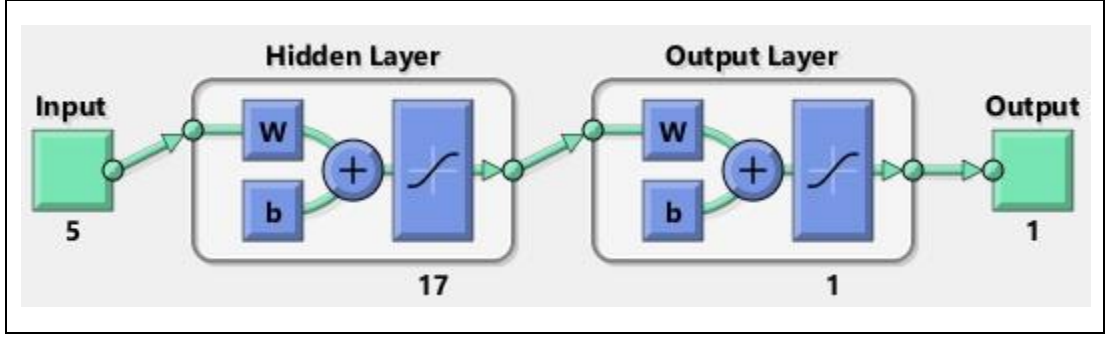


Şekil 3.26: Karboplatin Etken Maddesinin Optimum Modelinin Regresyon Analiz Sonuçları.



Şekil 3.27: Karboplatin Etken Maddesinin Optimum Modelinin En Küçük Kareler (MSE) Analiz Sonuçları.

Şekil 3.27'deki eğrilerden bu modelin kullanılabileceği tahminini yapmak mümkündür. Mavi eğri (öğrenme eğrisi) aşağı doğru salınım yaptığından öğrenmenin gerçekleştiği söylenebilir, validasyon eğrisi (yeşil eğri) her ne kadar yukarı çıksa da “MSE” değeri az olan yerde sabitleşerek devam ettiği için sorun yoktur, ancak test eğrisi ciddi salınımlar yaparak yukarı doğru çıkıyor,sonlara doğru yukarı çıkışı sonlanıyor, eğer sonlanmayıp “MSE” değeri yüksek olan noktalara çıkmış olsaydı bu modelin kullanılabilirliğinin sorgulanması gerekebilirdi. Şekil 3.28'de kullanılan modelin genel şekli görülebilir.



Şekil 3.28: Karboplatin İlaç Etken Maddesi İçin Optimize Edilmiş Yapay Sinir Ağ Modeli.

Şekil 3.28’deki model, kullanılan arayüzün “Karboplatin” ilaç etken maddesi için kullanılan yapay sinir ağ model yapısının genellenmiş şeklidir. Görüldüğü üzere yapılan analizler sonucu nöron sayısının “17” olması durumunda en optime sonuç alındığı sonuçlarda mevcuttur. Son durumda “Karboplatin” ilaç etken maddesi için kullanılacak olan yapay sinir ağı modeli (5:17:1) modelidir. Şekil 3.28’deki modelin “traingdx” komutu ile beraber kullanıma girmesi neticesinde en optime sonuç alınmıştır.

Tablo 3.22: KRP YSA Modeli (“Matlab” arayüzü için).

| Etken Madde | Eğitim Algoritması | Nöron Sayısı | Gizli Katman Sayısı |
|-------------|--------------------|--------------|---------------------|
| Karboplatin | Traingdx           | 17           | 1                   |

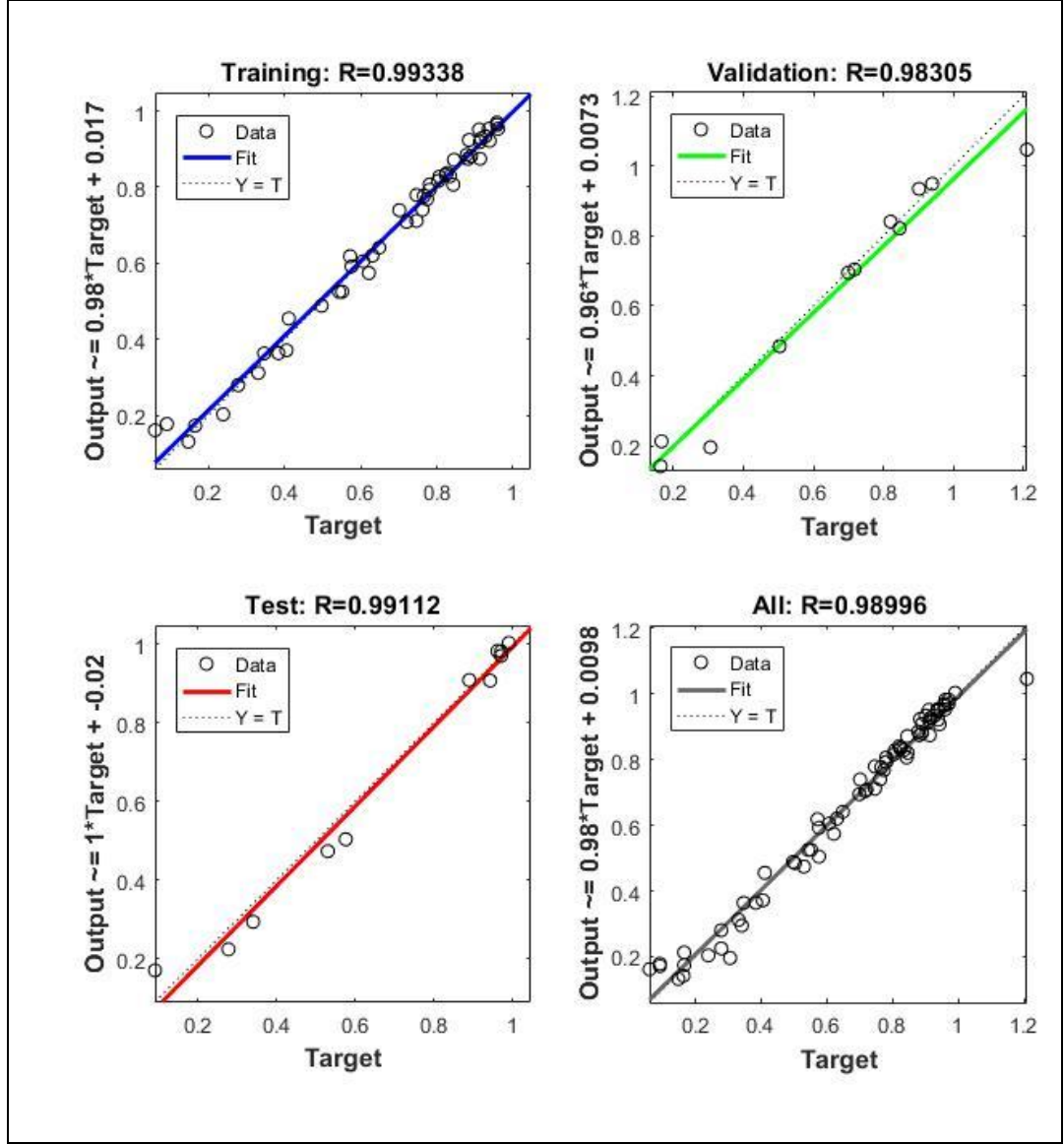
Tablo 3.22’de “Karboplatin” etken maddesi için optime olan yapay sinir ağ modelinin sonuçları mevcuttur.

### 3.1.4. Kapesitabin Etken Maddesinin Model Tercih Seçimleri

Tablo 3.23: KPS Modeli İçin Farklı Eğitim Algoritmaların Regresyon Analiz Sonuçları.

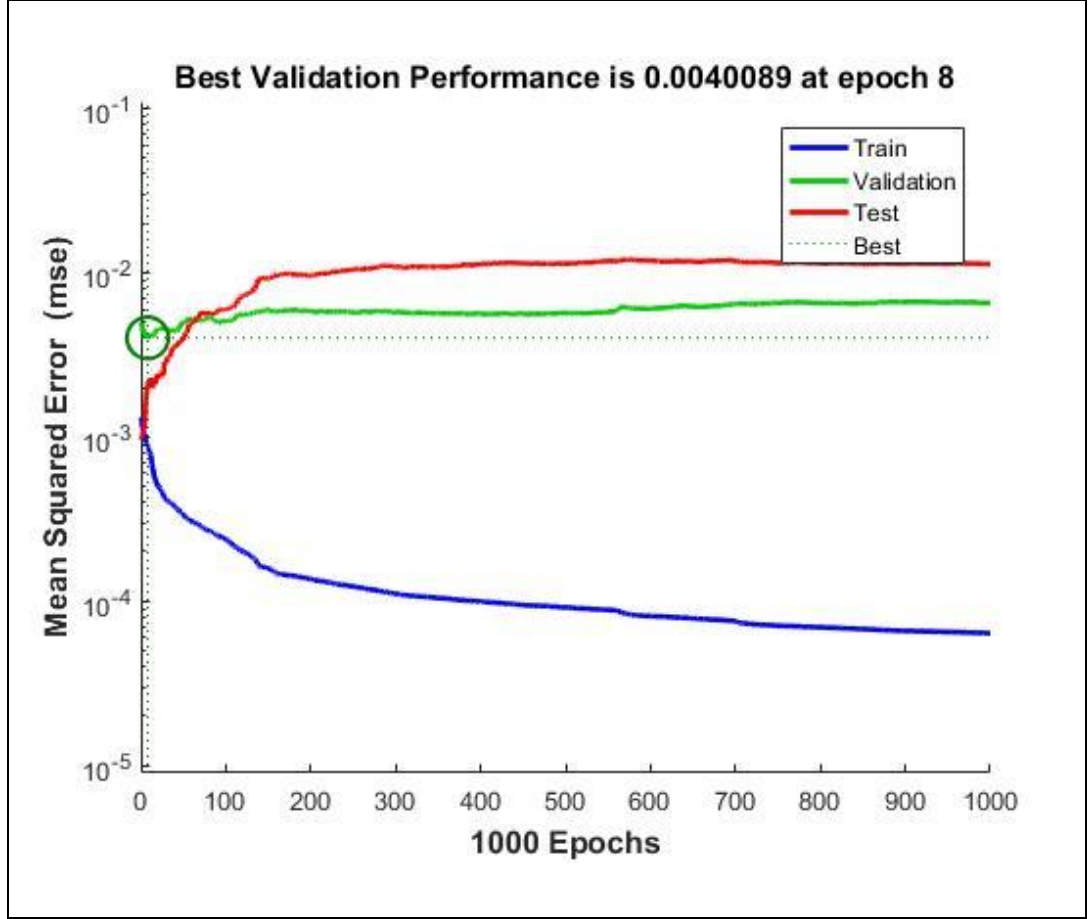
| Fonksiyon Tipi  | Regresyon Analiz Sonucu | ‘MSE’ SONUCU     | Lineer Çözüm (En Yakın)           |
|-----------------|-------------------------|------------------|-----------------------------------|
| TRAINBFG        | 0.81328                 | 0.0082465        | $Y=0.91X+0.08$                    |
| TRAINBR         | 0.9701                  | 0.0055311        | $Y=0.96X+0.038$                   |
| TRAINCGB        | 0.9803                  | 0.002746         | $Y=0.96X+0.029$                   |
| <b>TRAINCGF</b> | <b>0.98905</b>          | <b>0.0050158</b> | <b><math>Y=0.94X+0.045</math></b> |
| TRAINCGP        | 0.96673                 | 0.0061595        | $Y=0.87X+0.097$                   |
| TRAINGD         | 0.56799                 | 0.072461         | $Y=0.37X+0.041$                   |
| TRAINGDM        | 0.46371                 | 0.061034         | $Y=0.41X+0.4$                     |
| TRAINGDA        | 0.97402                 | 0.010761         | $Y=0.93X+0.042$                   |
| <b>TRAINGDX</b> | <b>0.98212</b>          | <b>0.0019756</b> | <b><math>Y=0.97X+0.015</math></b> |
| <b>TRAINLM</b>  | <b>0.99278</b>          | <b>0.001364</b>  | <b><math>Y=0.96X+0.025</math></b> |
| TRAINOOS        | 0.931                   | 0.010924         | $Y=0.8X+0.014$                    |
| TRAINR          | 0.91645                 | 0.021513         | $Y=0.85X+0.1$                     |
| TRAINRP         | 0.9544                  | 0.0090411        | $Y=0.90X+0.063$                   |
| TRAINSCG        | 0.97195                 | 0.0096975        | $Y=0.95X+0.024$                   |

Tablo 3.23’teki eğitim algoritmaların her biri (5:10:1) modeliyle denenmiştir, ayrıca siyah puntıyla seçilmiş olan değerler, eğitim fonksiyonu için en iyi değerlere sahip olanlardır. Yeniden analiz yapıp incelenmeye alınması gerekir.



Şekil 3.29: KPS Modeli İçin Traincgf Komutunun 2. Regresyon Analiz Sonuçları.

Laboratuvarda yapılan “Kapesitabin” etken maddesinin deney sonuçlarının %80’i modeli eğitmek (training) için, %10’u validasyon ve kalan %10’u ise test amacıyla kullanıldı. Şekil 3.29’da traincgf komutuyla (Conjugate Gradient Backpropagation with Fletcher-Reeves Restarts) yaratılan yapay sinir ağı modelinin her bir kısmı için ayrı tablolar mevcut ayrıca tüm regresyon sonuçlarının genel ortalama değeri de son tabloda ( Şekil 3.29 All : R) verilmiştir.



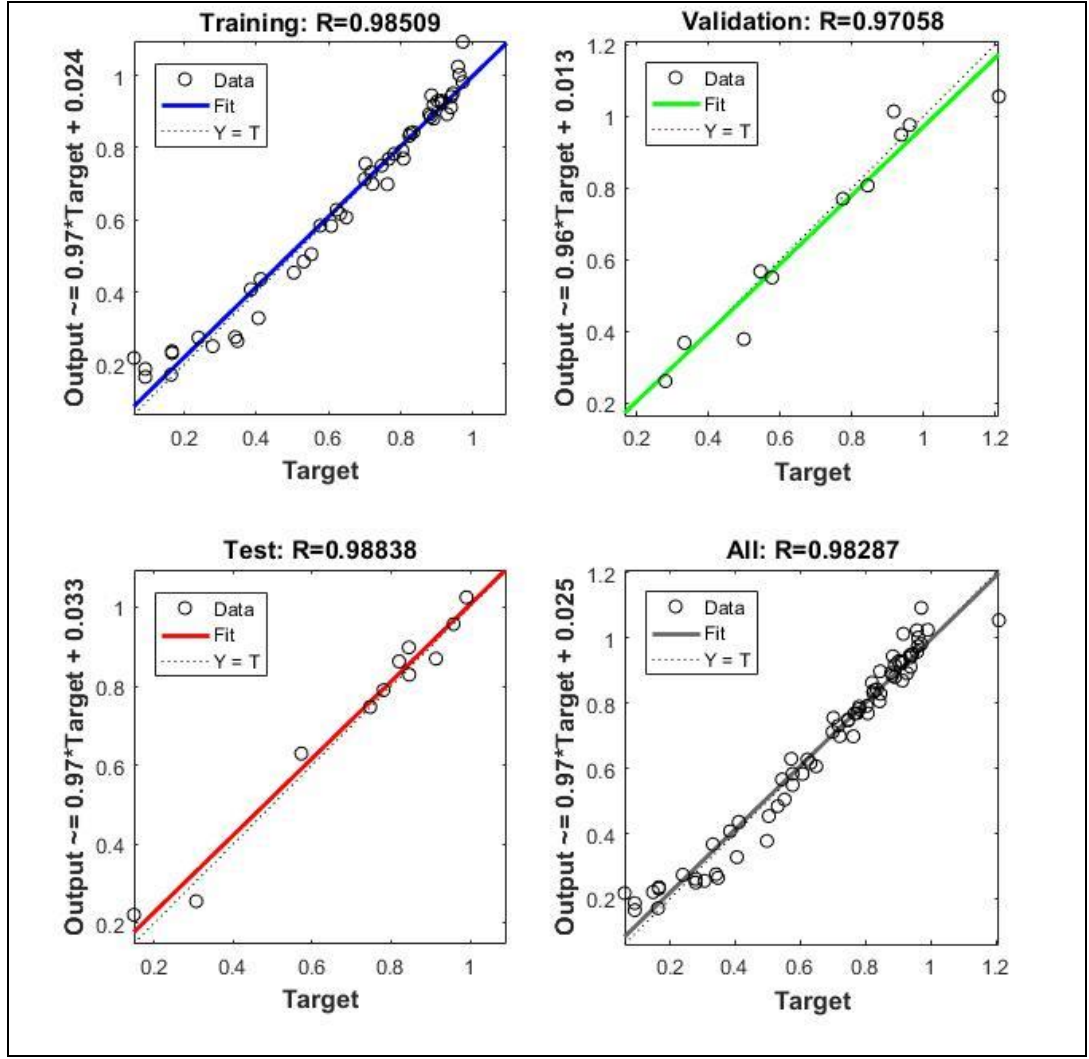
Şekil 3.30: KPS Modeli İçin Traincgf Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2. Analiz Sonuçları.

Şekil 3.25'teki eğrilerden bu modelin kullanılabileceği tahminini yapmak mümkündür. Mavi eğri (öğrenme eğrisi) aşağı doğru salınım yaparak kurulan ağı öğrenildiğini, validasyon ve test eğrileri ise büyük bir atlama yapmadan sabitleşerek ilerliyor bunlar eğriler adına normal süreçlerdir.

Tablo 3.24: KPS Modeli İçin Traincgf Komutunun 2. Analiz Sonuçları.

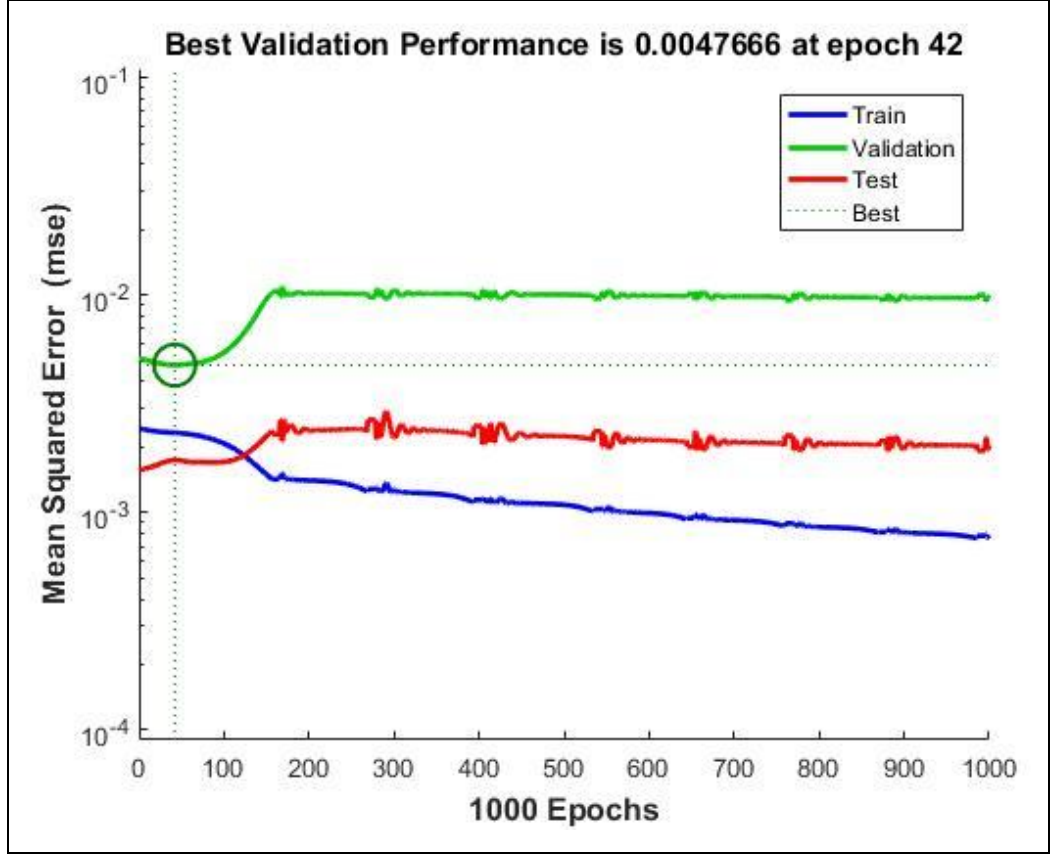
| FONKSİYON TİPİ | REGRESYON ANALİZ SONUCU | 'MSE' SONUCU |
|----------------|-------------------------|--------------|
| TRAINCGF       | 0.98996                 | 0.0040089    |

Tablo 3.24'te kullanılan transfer fonksiyonunun genel analiz sonucu verilmiştir.



Şekil 3.31: KPS Modeli İçin Traingdx Komutunun 2. Regresyon Analiz Sonuçları.

Laboratuvarda yapılan “Kapesitabin” etken maddesinin deney sonuçlarının %80’i modeli eğitmek (training) için, %10’u validasyon ve kalan %10’u ise test amacıyla kullanıldı. Şekil 3.31’de traingdx komutuyla (Gradient Descent with Momentum & Adaptive LR) yaratılan yapay sinir ağı modelinin her bir kısmı için ayrı tablolar mevcut ayrıca regresyon sonuçlarının genel ortalama değeri de son tabloda (Şekil 3.31, All : R) verilmiştir.



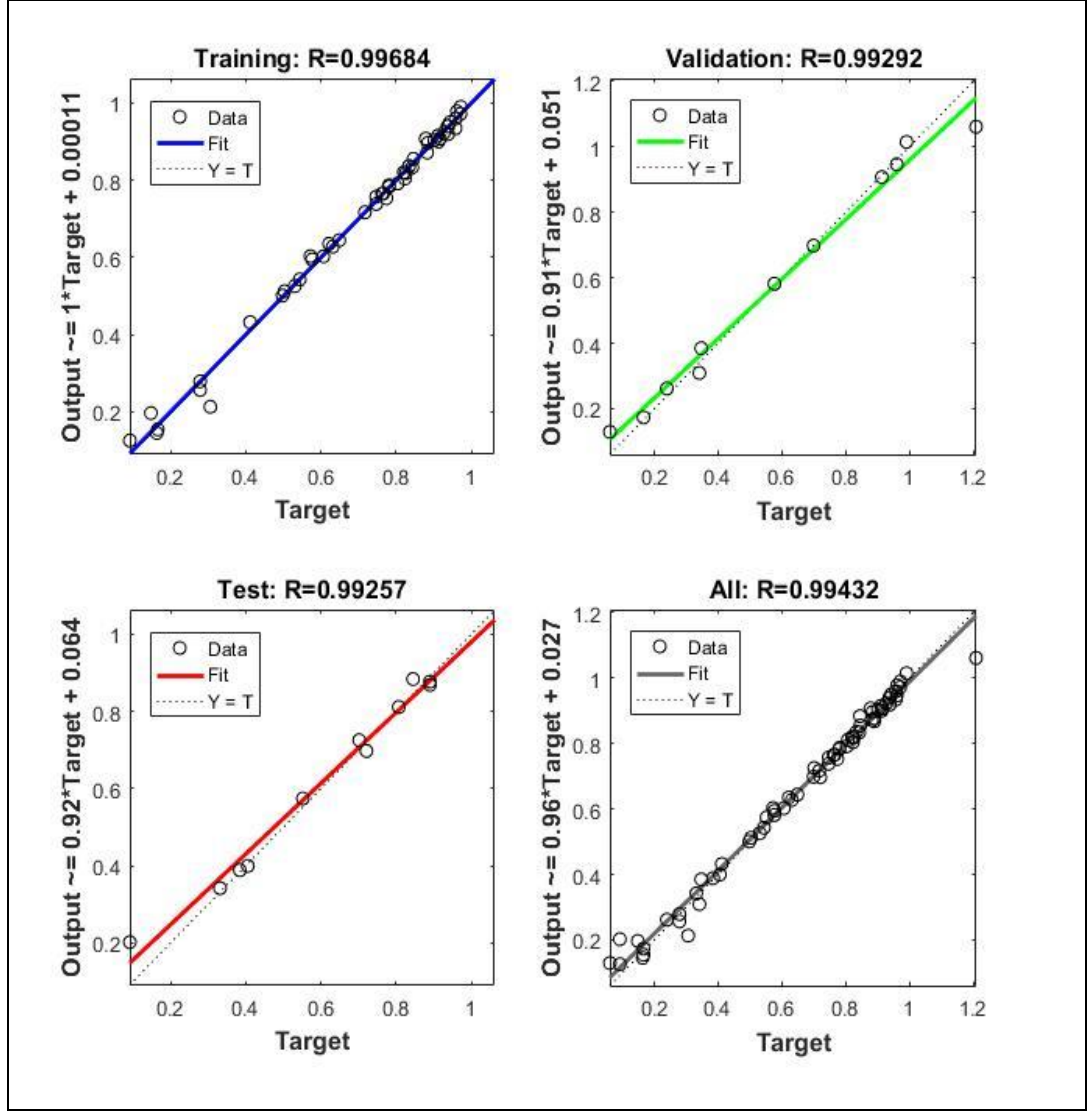
Şekil 3.32 KPS: Modeli İçin Traingdx Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2. Analiz Sonuçları.

Şekil 3.32'deki eğrilerden bu modelin kullanılabileceği tahminini yapmak mümkündür. Mavi eğri (öğrenme eğrisi) aşağı doğru salınım yaparak kurulan ağın öğrendiğini, validasyon ve test eğrileri ise büyük bir atlama yapmadan sabitleşerek ilerliyor bunlar eğriler adına normal süreçlerdir.

Tablo 3.25: Traingdx Komutunun 2. Analiz Sonuçları.

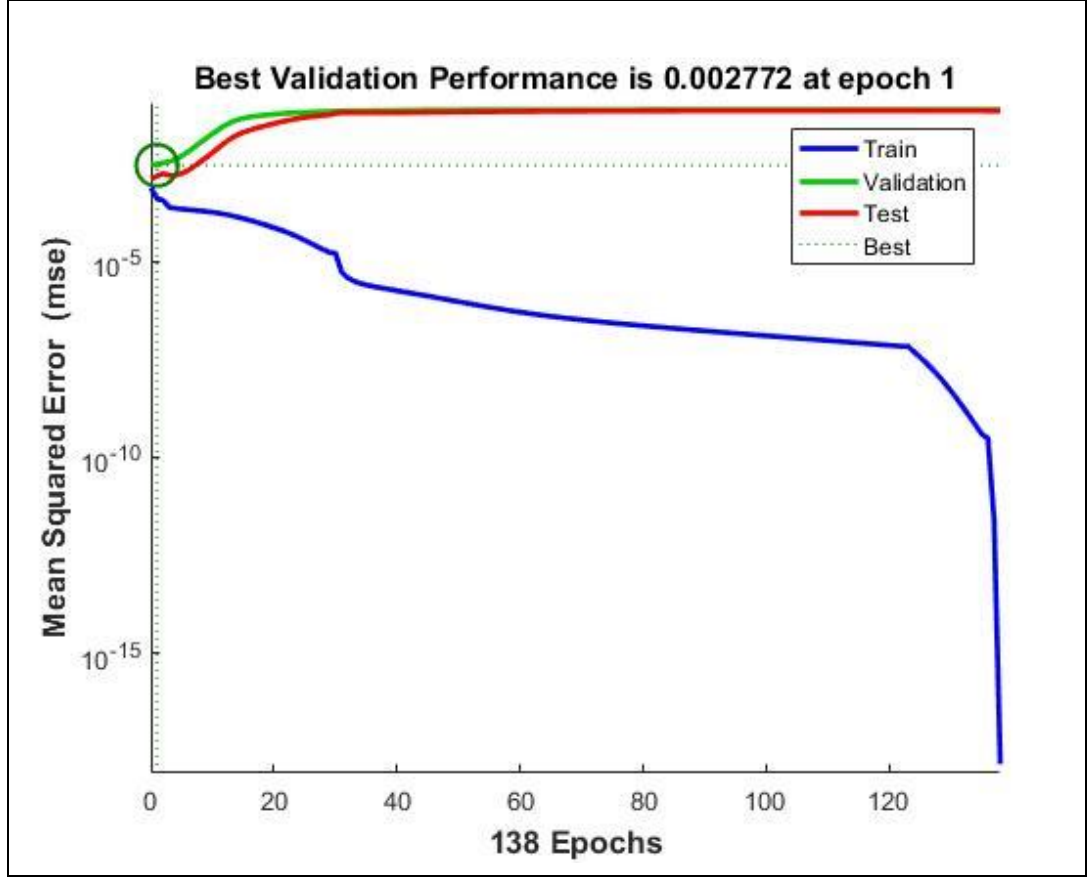
| FONKSİYON TİPİ | REGRESYON ANALİZ SONUCU | 'MSE' SONUCU |
|----------------|-------------------------|--------------|
| TRAININGDX     | 0.98287                 | 0.0047666    |

Tablo 3.25'te kullanılan transfer fonksiyonunun genel analiz sonucu verilmiştir.



Şekil 3.33: KPS Modeli İçin Trainlm Komutunun 2. Regresyon Analiz Sonuçları.

Laboratuvarda yapılan “Kapesitabin” etken maddesinin deney sonuçlarının %80’i modeli eğitmek (training) için, %10’u validasyon ve kalan %10’u ise test amacıyla kullanıldı. Şekil 3.33’te trainlm komutuyla (Levenberg-Marquardt) yaratılan yapay sinir ağı modelinin her bir kısmı için ayrı şekiller mevcut ayrıca tüm regresyon sonuçlarının genel ortalama değeri de son tabloda ( Şekil 3.33, All : R) verilmiştir.



Şekil 3.34: KPS Modeli İçin Trainlm Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2. Analiz Sonuçları.

Şekil 3.34’teki eğrilerden Mavi eğri (öğrenme eğrisi) aşağı doğru çok ciddi bir salınım yaparak kurulan ağı önemli bir biçimde öğrendiğini gösterir. Ayrıca validasyonla test eğrisinin aynı hareketi göstermesi, model adına olumlu bir süreçtir.

Tablo 3.26: KPS Modeli İçin Trainlm Komutunun 2. Analiz Sonuçları.

| FONKSİYON TİPİ | REGRESYON ANALİZ SONUCU | ‘MSE’ SONUCU |
|----------------|-------------------------|--------------|
| TRAINLM        | 0.99432                 | 0.002772     |

Regresyon analiz sonucunun en yüksek değeri ve “MSE” değerinin en küçük sonucunu Levenberg - Marquardt (trainlm) fonksiyonu vermiştir. Levenberg Marquardt fonksiyonu kullanılarak, optimal nöron sayısını bulmak adına gizli katmanın içerisindeki nöron sayısı değiştirilerek analizler tekrarlanacaktır.

Tablo 3.27: KPS Modeli İçin Nöron Sayısı Değişiminin Analiz Sonuçları.

| NÖRON SAYISI | REGRESYON ANALİZ SONUCU | ‘MSE’ SONUCU     |
|--------------|-------------------------|------------------|
| 4            | 0.98702                 | 0.0040771        |
| 5            | 0.98193                 | 0.0098432        |
| 6            | 0.97024                 | 0.014474         |
| 7            | 0.95245                 | 0.010793         |
| 8            | 0.9257                  | 0.0037269        |
| 9            | 0.96543                 | 0.0069199        |
| 10           | 0.97909                 | 0.0028216        |
| 11           | 0.99007                 | 0.0040391        |
| 12           | 0.95286                 | 0.019259         |
| 13           | 0.98767                 | 0.0028623        |
| <b>14</b>    | <b>0.99181</b>          | <b>0.0040008</b> |
| 15           | 0.98722                 | 0.0045396        |
| 16           | 0.98763                 | 0.000589         |
| 17           | 0.99139                 | 0.0039131        |
| 18           | 0.98387                 | 0.0020255        |
| <b>19</b>    | <b>0.99189</b>          | <b>0.0014561</b> |
| 20           | 0.95325                 | 0.017612         |

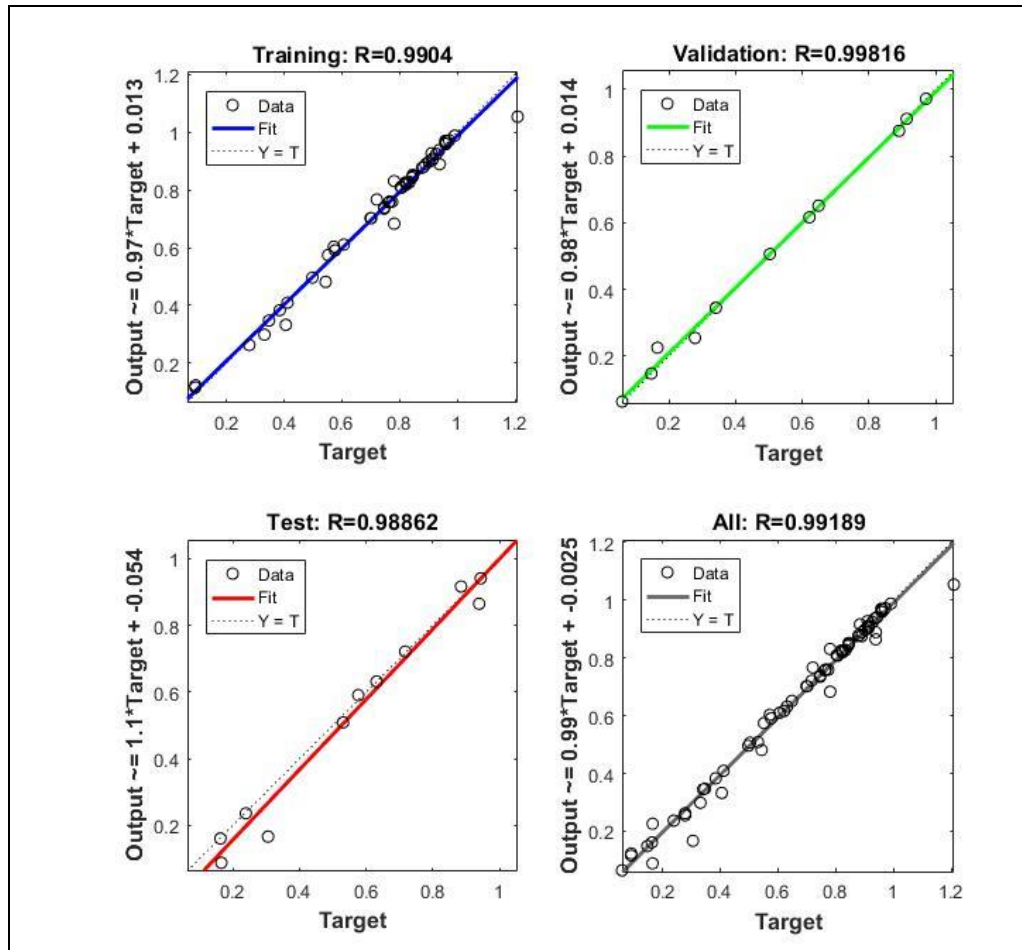
Tablo 3.27’de görülebileceği üzere, “Kapesitabin” etken maddesi için kurulacak yapay sinir ağı modelinin yapısında var olan bir adet gizli katmanın içindeki nöron sayısı değiştirilerek, kurulan yapıda en iyi sonucu alabilmek adına optimal nöron sayısı aranmıştır. Yukarıdaki sayıların seçilmesinin sebebi, bir gizli katmanda beş veri girişi olan bir ağ yapısı kurulurken, nöron sayısının değerini çok fazla düşürmek alt kısımlarda uyumsuzluk meydana getirip, sistemin dengesini bozabilecekken, tam tersini yapıp gereğinden fazla nöron sayısı arttırmak ise üst kısımlarda dengesizlik meydana getirip, sistemin dengesini bozar.

Tablo 3.27’de bulunan değerlerde siyah puntoyla belirtilmiş olanlar, en yüksek regresyon ve en düşük mse değerini verenlerdir. Buyüzden yeniden analiz yapılmıştır. Yeniden yapılan analizin sonuçları Tablo 3.28’de mevcuttur. Son olarak ise optimize

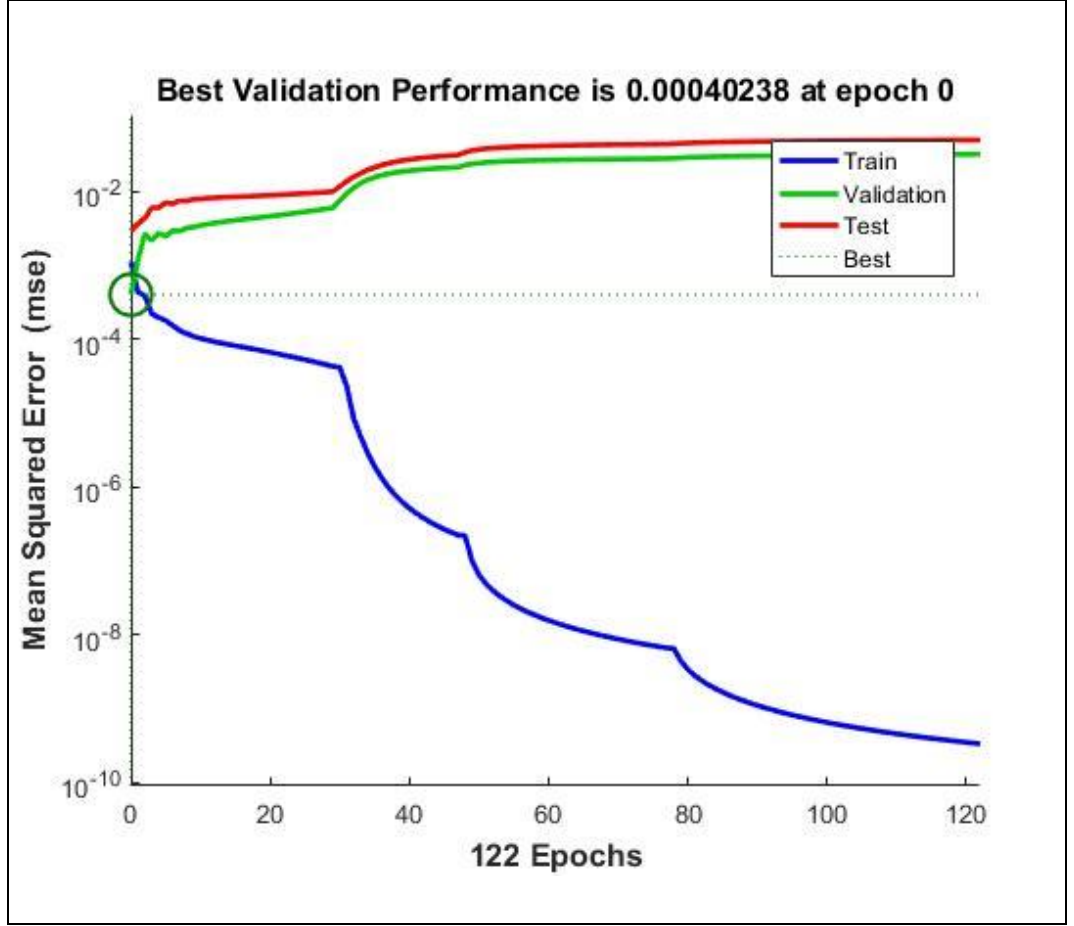
edilerek modellenmiş “Kapesitabin” ilaç etken maddesinin regresyon analiz ve en küçük kareler grafiklerinin şekilleri gösterilmiştir.

Tablo 3.28: KPS Modeli İçin Nöron Sayısı Değişiminin 2. Analiz Sonuçları.

| NÖRON SAYISI | REGRESYON ANALİZ SONUCU | ‘MSE’ SONUCU      |
|--------------|-------------------------|-------------------|
| 14           | 0.99181                 | 0.00065036        |
| <b>19</b>    | <b>0.99189</b>          | <b>0.00040238</b> |

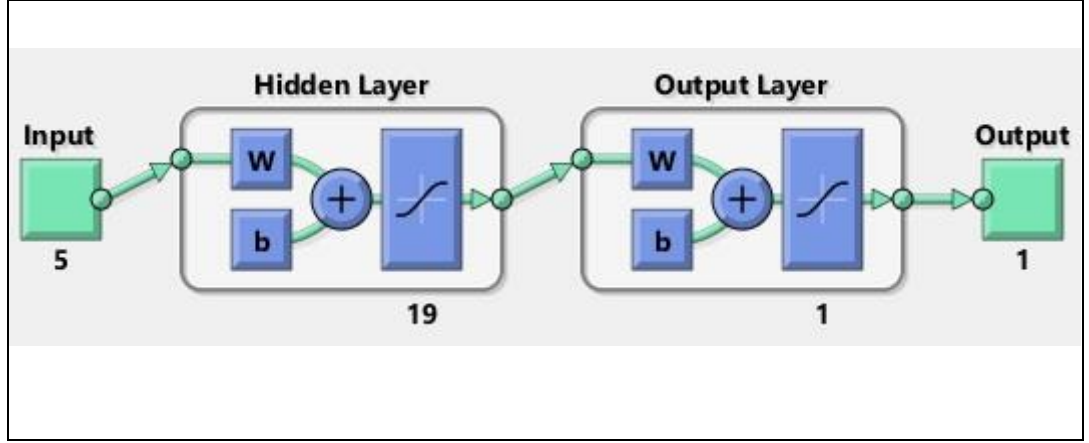


Şekil 3.35: Kapesitabin Etken Maddesinin Optimum Modelinin Regresyon Analiz Sonuçları.



Şekil 3.36: Kapesitabin Etken Maddesinin Optimum Modelinin En Küçük Kareler (MSE) Analiz Sonuçları.

Şekil 3.36'daki eğrilerden bu modelin kullanılabileceği tahminini yapmak mümkündür. Mavi eğri (öğrenme eğrisi) aşağı doğru logaritmik şekilde azalmaktadır, öğrenme eğrisi için istenen en ideal durumlardan birisidir. Ayrıca validasyonla test eğrisinin aynı hareketi göstermesi, model adına olumlu bir süreçtir. Şekil 3.37'de kullanılan modelin genellenmiş şekli görülebilir.



Şekil 3.37: Kapesitabin İlaç Etken Maddesi İçin Optimize Edilmiş Yapay Sinir Ağ Modeli.

Şekil 3.37’deki model, kullanılan arayüzün “Kapesitabin” ilaç etken maddesi için kullanılan yapay sinir ağ model yapısının genellenmiş şeklidir. Görüldüğü üzere yapılan analizler sonucu nöron sayısının “19” olması durumunda en optime sonuç alındığı sonuçlarda mevcuttur. Son durumda “Karboplatin” ilaç etken maddesi için kullanılacak olan yapay sinir ağı modeli (5:19:1) modelidir. Şekil 3.37’deki modelin “trainlm” komutu ile beraber kullanıma girmesi neticesinde en optime sonuç alınmıştır.

Tablo 3.29: KPS YSA Modeli (“Matlab” arayüzü için).

| Etken Madde | Eğitim Algoritması | Nöron Sayısı | Gizli Katman Sayısı |
|-------------|--------------------|--------------|---------------------|
| Kapesitabin | Trainlm            | 19           | 1                   |

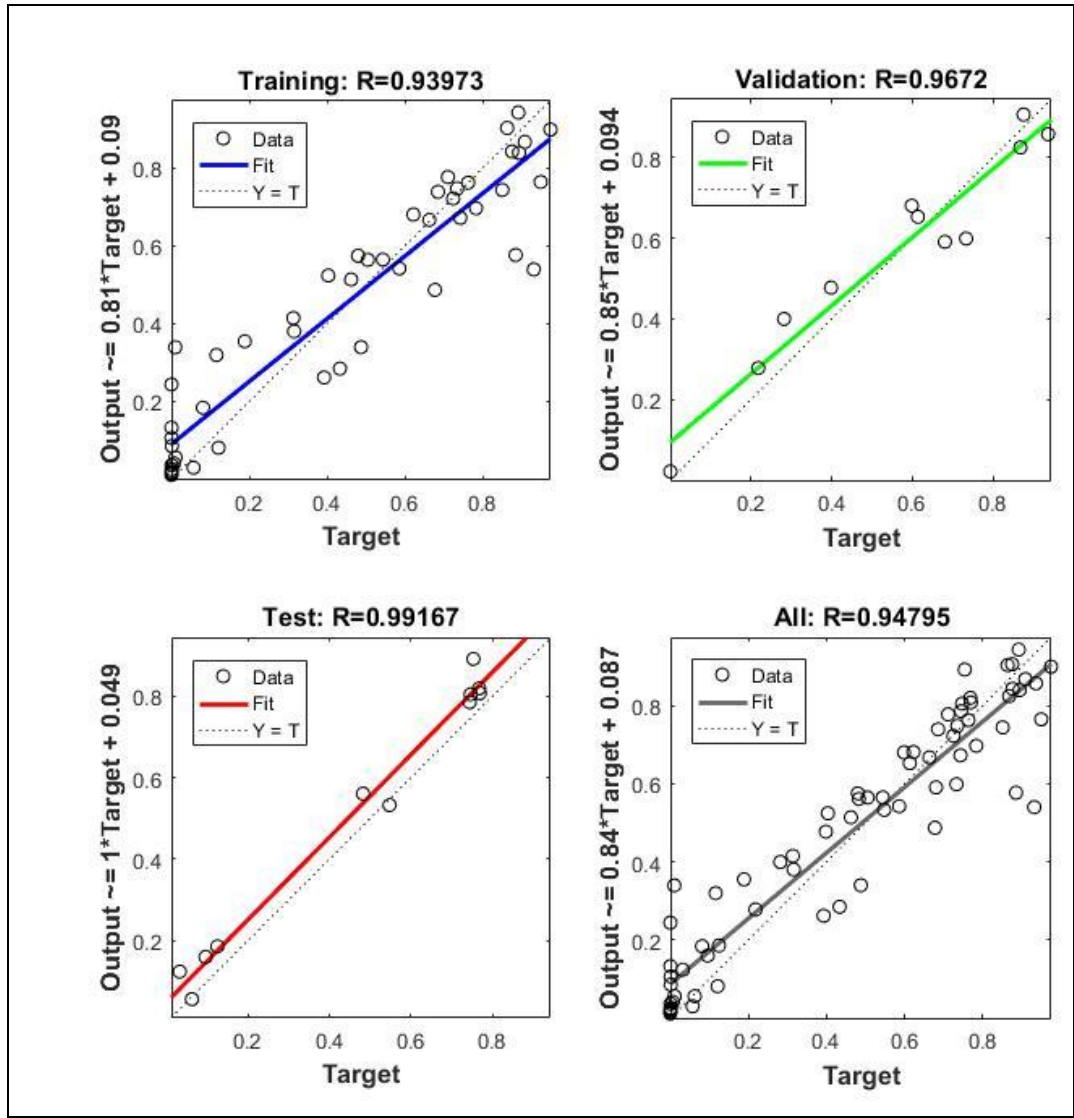
Tablo 3.29’da “Karboplatin” etken maddesi için optime olan yapay sinir ağ modelinin sonuçları mevcuttur.

### 3.1.5. İohexsol Etken Maddesinin Model Tercih Seçimleri

Tablo 3.30: IOX Modeli İçin Farklı Eğitim Algoritmaların Regresyon Analiz Sonuçları.

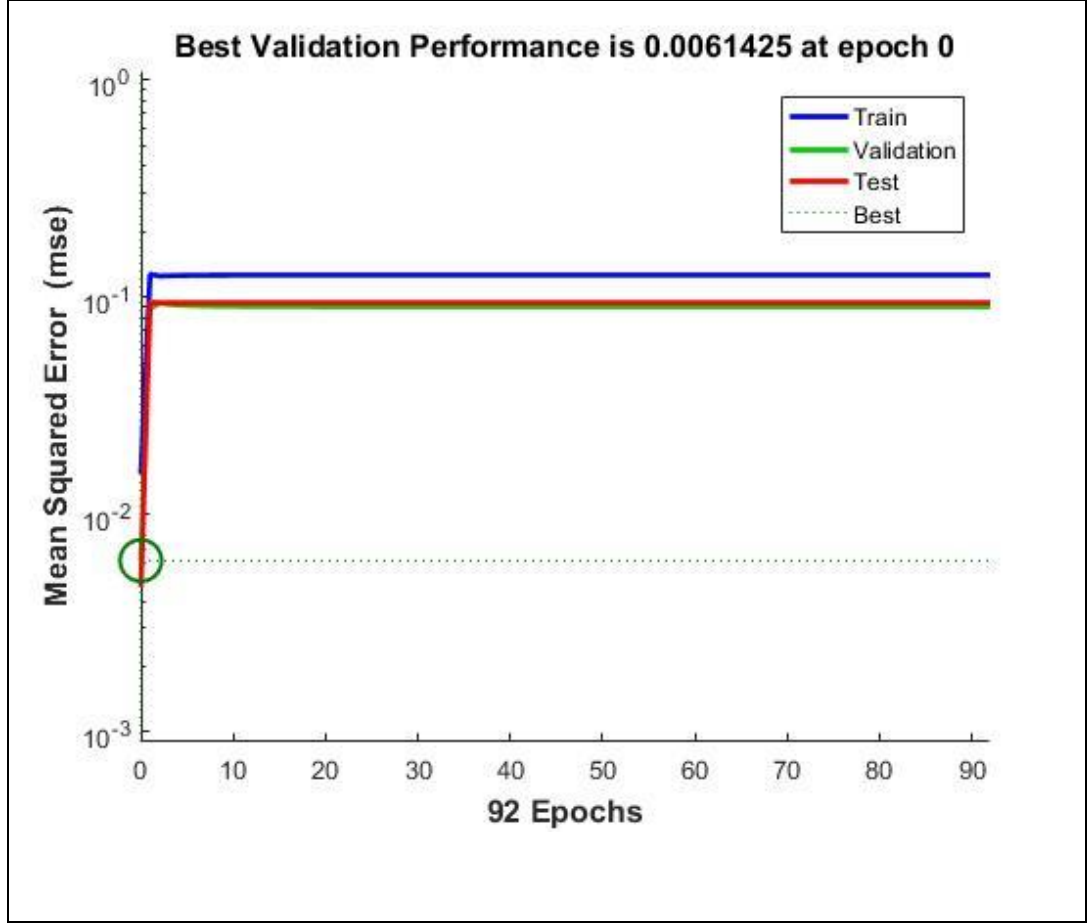
| Fonksiyon<br>Tipi | Regresyon Analiz<br>Sonucu | ‘MSE’<br>SONUCU  | Lineer Çözüm<br>(En Yakın)        |
|-------------------|----------------------------|------------------|-----------------------------------|
| TRAINBFG          | 0.93748                    | 0.018283         | $Y=0.92X+0.0079$                  |
| <b>TRAINBR</b>    | <b>0.94795</b>             | <b>0.0091611</b> | <b><math>Y=0.84X+0.087</math></b> |
| TRAINCGB          | 0.872                      | 0.0040334        | $Y=0.84X+0.047$                   |
| TRAINCGF          | 0.94318                    | 0.022744         | $Y=0.94X+0.022$                   |
| TRAINCGP          | 0.93853                    | 0.037451         | $Y=0.94X+0.051$                   |
| TRAINGD           | 0.60612                    | 0.078265         | $Y=0.5X+0.041$                    |
| TRAINGDM          | 0.75178                    | 0.041374         | $Y=0.57X+0.19$                    |
| TRAINGDA          | 0.78154                    | 0.014511         | $Y=0.62X+0.19$                    |
| TRAINGDX          | 0.92056                    | 0.025238         | $Y=0.81X+0.088$                   |
| <b>TRAINLM</b>    | <b>0.98024</b>             | <b>0.0027271</b> | <b><math>Y=0.97X+0.014</math></b> |
| <b>TRAINOOS</b>   | <b>0.95052</b>             | <b>0.045532</b>  | <b><math>Y=0.94X+0.029</math></b> |
| TRAINR            | 0.87242                    | 0.028129         | $Y=0.76X+0.11$                    |
| TRAINRP           | 0.79151                    | 0.032375         | $Y=0.73X+0.17$                    |
| TRAINSCG          | 0.92985                    | 0.038333         | $Y=0.85X+0.044$                   |

Bu eğitim algoritmaların her biri (5:10:1) modeliyle denenmiştir. Tablo 3.30’da siyah puntıyla seçilmiş olan değerler, eğitim fonksiyonu için en iyi değerlere sahip olanlardır. Yeniden analiz yapıp incelenmeye alınması gerekir, optimal eğitim fonksiyonu bulunduktan sonra diğer analizlere geçiş yapılacaktır.



Şekil 3.38: IOX Modeli İçin Trainbr Komutunun 2. Regresyon Analiz Sonuçları.

Laboratuvarda yapılan “İohexsol” etken maddesinin deney sonuçlarının %80’i modeli eğitmek (training) için, %10’u validasyon ve kalan %10’u ise test amacıyla kullanıldı. Şekil 3.38’de trainbr komutuyla (Bayesian Regularization) yaratılan yapay sinir ağı modelinin her bir kısmı için farklı tablolar mevcut ayrıca tüm regresyon sonuçlarının genel ortalama değeri de son tabloda ( Şekil 3.38, All : R) verilmiştir.



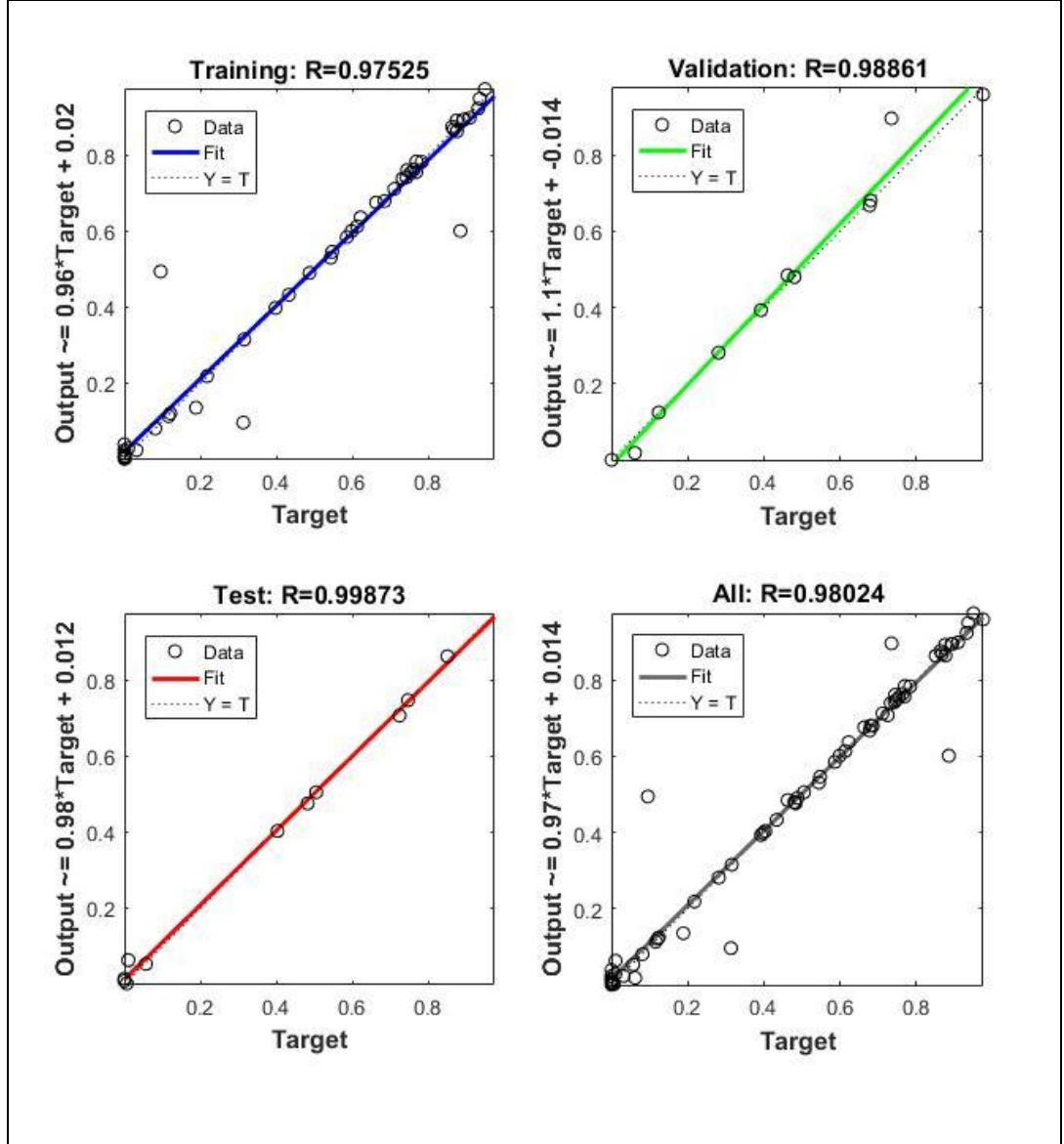
Şekil 3.39: IOX Modeli İçin Trainbr Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2. Analiz Sonuçları.

Şekil 3.39'daki eğrilere sahip bir model kullanılamaz. Öğrenme eğrisi (mavi eğri) aşağı bir salınım göstermediği gibi sabit bir şekilde ilerlemektedir, test ve validasyon eğrileride her ne kadar aynı şekilde hareket etse de bu modelin kullanımı kesinlikle doğru olmaz. Regresyon analiz değerleri yüksek dahi olsa, bu modelin elenmesi gerekir.

Tablo 3.31: IOX Modeli için Trainbr Komutunun 2. Analiz Sonuçları.

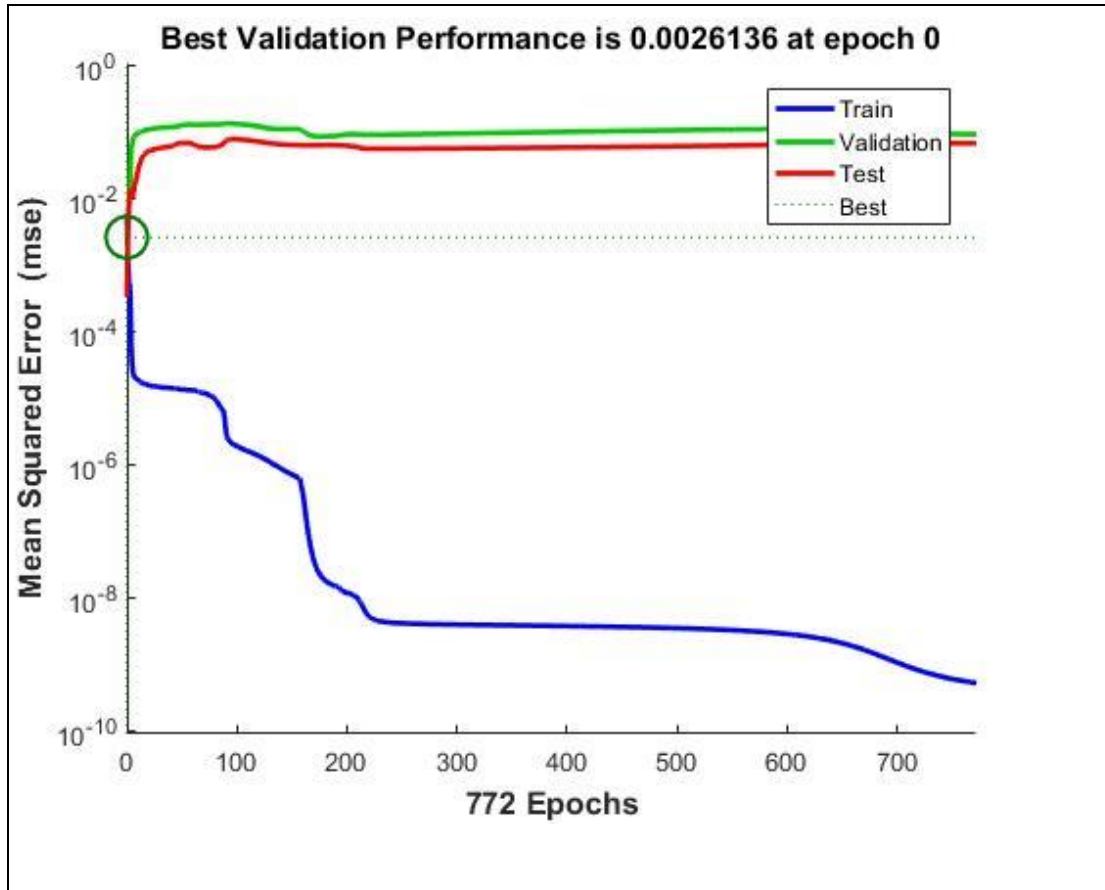
| FONKSİYON TİPİ | REGRESYON ANALİZ SONUCU | 'MSE' SONUCU |
|----------------|-------------------------|--------------|
| TRAINBR        | 0.94795                 | 0.0061425    |

Tablo 3.31'de kullanılan transfer fonksiyonunun genel analiz sonucu verilmiştir.



Şekil 3.40: IOX Modeli İçin Trainlm Komutunun 2. Regresyon Analiz Sonuçları.

Laboratuvarda yapılan “İoheksol” etken maddesinin deney sonuçlarının %80’i modeli eğitmek (training) için, %10’u validasyon ve kalan %10’u ise test amacıyla kullanıldı. Şekil 3.40’ta trainlm komutuyla (Levenberg-Marquardt) yaratılan yapay sinir ağı modelinin her bir kısmı için farklı tablolar mevcut ayrıca tüm regresyon sonuçlarının genel ortalama değeri de son tabloda ( Şekil 3.40, All : R) verilmiştir.



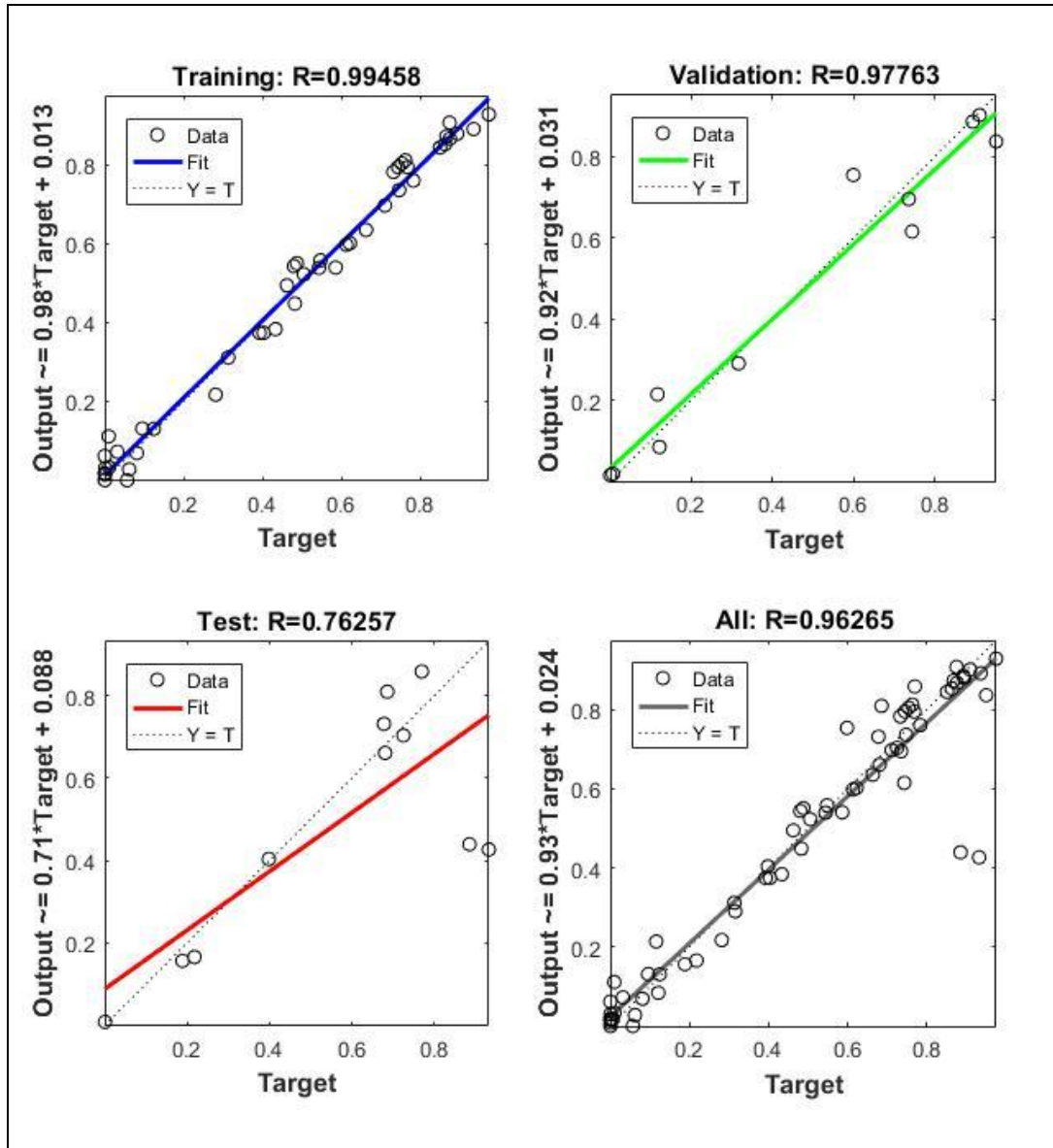
Şekil 3.41: IOX Modeli İçin Trainlm Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2. Analiz Sonuçları.

Şekil 3.41'deki eğrilerden bu modelin kullanılabileceği tahminini yapmak mümkündür. Mavi eğri (öğrenme eğrisi) aşağı doğru salınım yaparak kurulan ağın öğrendiğini, validasyon ve test eğrileri ise büyük bir atlama yapmadan sabitleşerek ilerliyor bunlar eğriler adına normal süreçlerdir. Özellikle test ve validasyon eğrisinin aynı şekilde hareket etmeler, model adına olumlu bir durumdur.

Tablo 3.32: Trainlm Komutunun 2. Analiz Sonuçları.

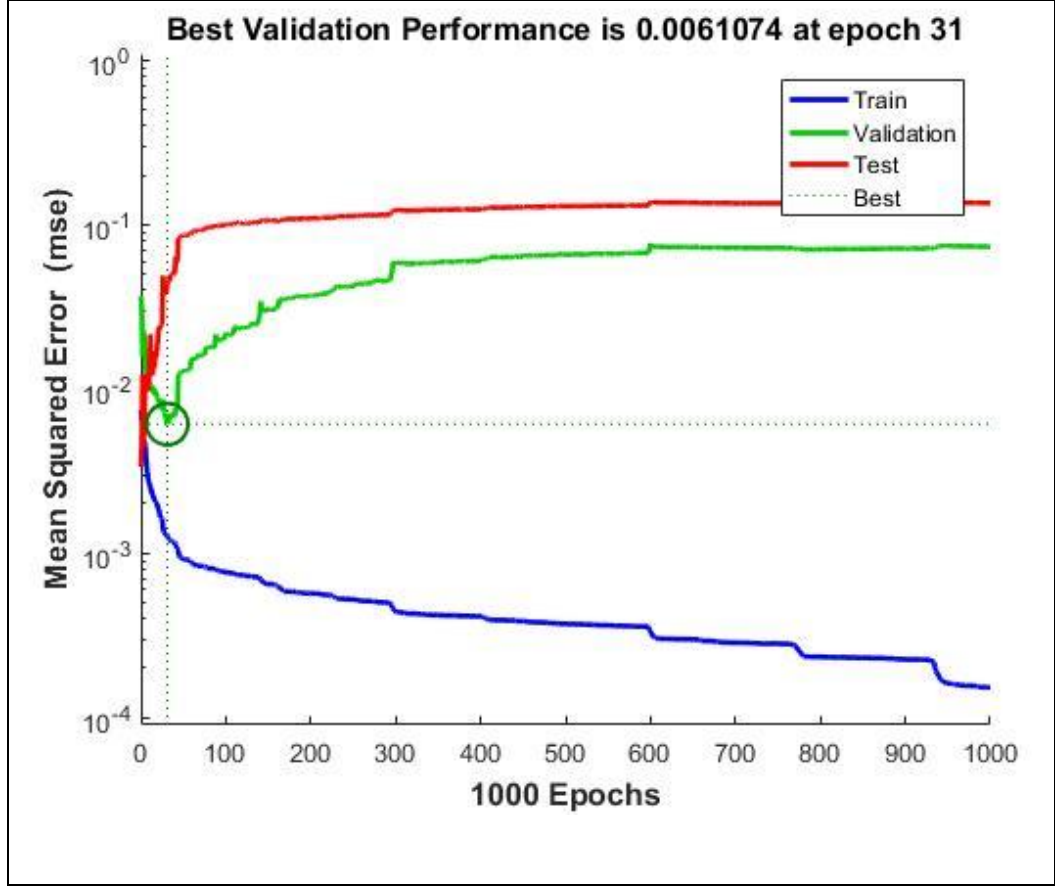
| FONKSİYON TİPİ | REGRESYON ANALİZ SONUCU | 'MSE' SONUCU |
|----------------|-------------------------|--------------|
| TRAINLM        | 0.98024                 | 0.0026136    |

Tablo 3.32'de kullanılan transfer fonksiyonunun genel analiz sonucu verilmiştir.



Şekil 3.42: IOX Modeli İçin Trainoos Komutunun 2. Regresyon Analiz Sonuçları.

Laboratuvarda yapılan “İoheksol” etken maddesinin deney sonuçlarının %80’i modeli eğitmek (training) için, %10’u validasyon ve kalan %10’u ise test amacıyla kullanıldı. Şekil 3.42’de trainoos komutuyla (One Step Secant) yaratılan yapay sinir ağı modelinin her bir kısmı için farklı tablolar mevcut ayrıca tüm regresyon sonuçlarının genel ortalama değeri de son tabloda (Şekil 3.42, All : R) verilmiştir.



Şekil 3.43: IOX Modeli İçin Trainoos Komutunun En Küçük Kareler (MSE) 2. Analiz Sonuçları.

Şekil 3.43'teki eğrilerden Mavi eğri (öğrenme eğrisi) aşağı doğru salınım yaparak kurulan ağı önemli bir biçimde öğrendiğini gösterir. Ayrıca validasyonla test eğrisinin aynı hareketi göstermesi, model adına olumlu bir süreçtir.

Tablo 3.33 IOX Modeli İçin Trainoos Komutunun 2. Analiz Sonuçları.

| FONKSİYON TİPİ | REGRESYON ANALİZ SONUCU | 'MSE' SONUCU |
|----------------|-------------------------|--------------|
| TRAINOOS       | 0.96265                 | 0.0061074    |

Tablo 3.33'te görüldüğü üzere, regresyon analiz sonucunun en yüksek değeri, ve "MSE" değerinin en küçük sonucunu Levenberg-Marquardt (trainlm) fonksiyonu vermiştir. Diğer aşamada, optimal nöron sayısını bulmak adına analizler yapılacaktır.

Tablo 3.34: IOX Modeli İçin Nöron Sayısı Değişiminin Analiz Sonuçları.

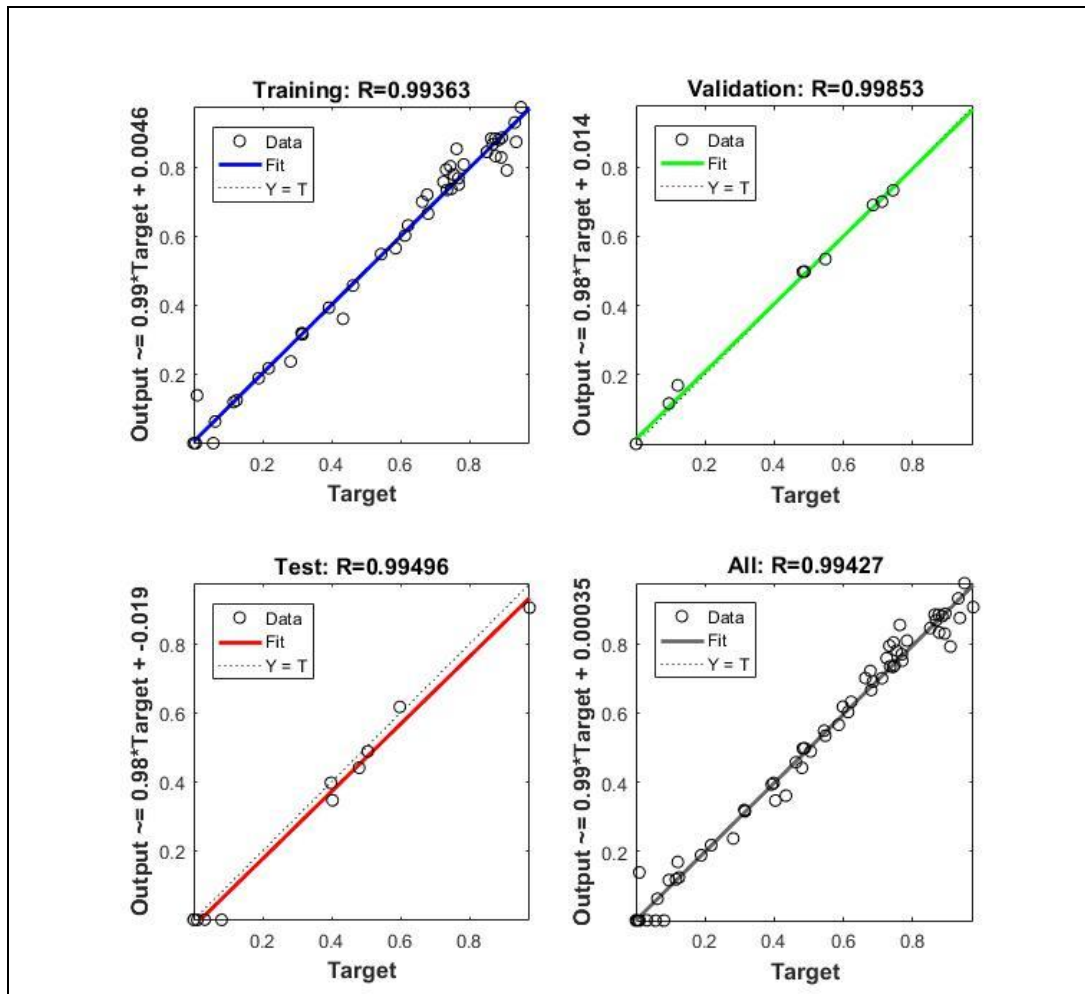
| NÖRON SAYISI | REGRESYON ANALİZ SONUCU | ‘MSE’ SONUCU    |
|--------------|-------------------------|-----------------|
| <b>4</b>     | <b>0.99313</b>          | <b>0.004926</b> |
| 5            | 0.88596                 | 0.050029        |
| 6            | 0.9813                  | 0.0046963       |
| 7            | 0.96635                 | 0.0030745       |
| 8            | 0.98696                 | 0.0067275       |
| 9            | 0.9263                  | 0.0086574       |
| 10           | 0.8913                  | 0.028548        |
| 11           | 0.92233                 | 0.0044021       |
| 12           | 0.95611                 | 0.017539        |
| <b>13</b>    | <b>0.99083</b>          | <b>0.001757</b> |
| 14           | 0.95889                 | 0.088389        |
| 15           | 0.94541                 | 0.042298        |
| 16           | 0.93941                 | 0.01334         |
| 17           | 0.9616                  | 0.013911        |
| 18           | 0.87781                 | 0.055051        |
| 19           | 0.97475                 | 0.0015172       |
| 20           | 0.95584                 | 0.0028186       |

Tablo 3.34’te görüldüğü üzere, “İoheksol” etken maddesi için kurulacak yapay sinir ağı modelinin yapısında var olan bir adet gizli katmanının içindeki nöron sayısı değiştirilerek, kurulan yapıda en iyi sonucu alabilmek adına optimal nöron sayısı aranmıştır. Yukarıdaki sayıların seçilmesinin sebebi, bir gizli katmanda beş veri girişi olan bir ağ yapısı kurulurken, nöron sayısının değerini çok fazla düşürmek alt kısımlarda uyumsuzluk meydana getirip, sistemin dengesini bozabilecekken, tam tersini yapıp gereğinden fazla nöron sayısı arttırmak ise üst kısımlarda dengesizlik meydana getirip, sistemin dengesini bozar.

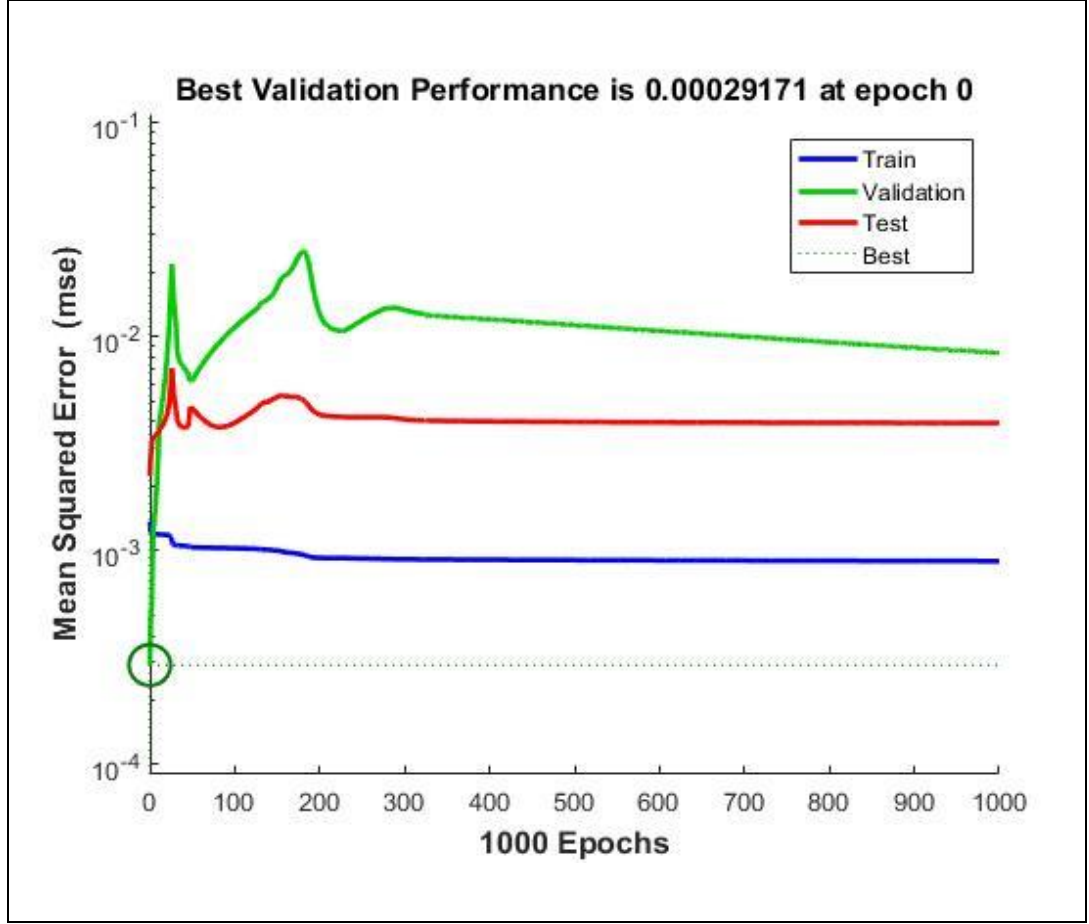
Tablo 3.34’te bulunan değerlerde siyah puntıyla belirtilmiş olanlar, en yüksek regresyon ve en düşük mse değerini verenlerdir. Buyüzden yeniden analiz yapılmıştır. Yeniden yapılan analizin sonuçları Tablo 3.35’te mevcuttur. Son olarak ise optimize edilerek modellenmiş “İohexsol” ilaç etken maddesinin regresyon analiz ve en küçük kareler grafiklerinin şekilleri gösterilmiştir.

Tablo 3.35: IOX Modeli İçin Nöron Sayısı Değişiminin 2. Analiz Sonuçları.

| NÖRON SAYISI | REGRESYON ANALİZ SONUCU | ‘MSE’ SONUCU      |
|--------------|-------------------------|-------------------|
| <b>4</b>     | <b>0.99427</b>          | <b>0.00029171</b> |
| 13           | 0.99083                 | 0.001019          |

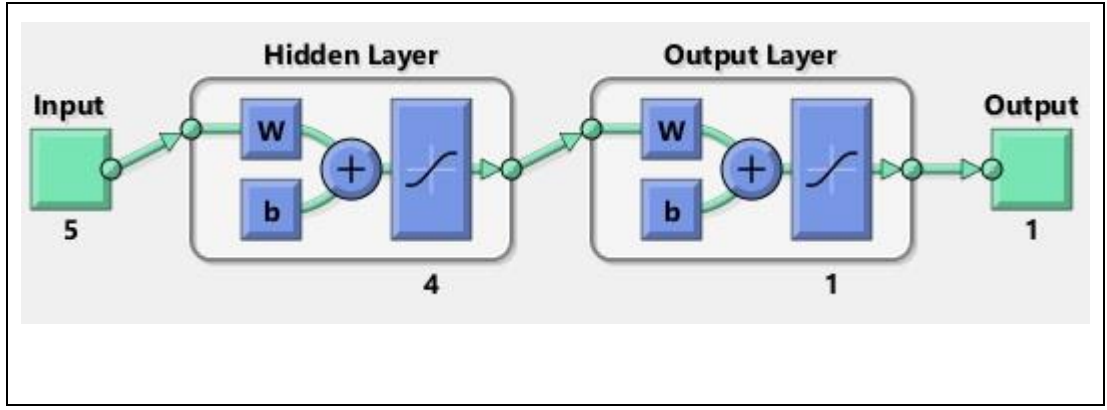


Şekil 3.44: İohexsol Etken Maddesinin Optimum Modelinin Regresyon Analiz Sonuçları.



Şekil 3.45: İohexsol Etken Maddesinin Optimum Modeli için En Küçük Kareler (MSE) Analiz Sonuçları.

Şekil 3.45'teki eğrilerden bu modelin kullanılabileceği tahminini yapmak mümkündür. Mavi eğri (öğrenme eğrisi) aşağı doğru bir miktar azalarak sabit kalmıştır. Her ne kadar aşağı doğru inmesi gerekirken, bulunduğu sabit yerdeki “MSE” oranı ciddi anlamda küçük olduğu için, bu eğri model adına kabul edilebilir. Validasyon ve test eğrilerinin hata oranı küçük ve aynı şekillerde hareket etmesi model adına olumlu birer sonuç olarak görülebilir.



Şekil 3.46: İohexsol İlaç Etken Maddesi İçin Optimize Edilmiş Yapay Sinir Ağ Modeli.

Şekil 3.46'daki model, kullanılan arayüzün "İohexsol" ilaç etken maddesi için kullanılan yapay sinir ağ model yapısının genellenmiş şeklidir. Görüldüğü üzere yapılan analizler sonucu nöron sayısının "4" olması durumunda en optime sonuç alındığı sonuçlarda mevcuttur. Son durumda "Karboplatin" ilaç etken maddesi için kullanılacak olan yapay sinir ağı modeli (5:4:1) modelidir. Şekil 3.46'daki modelin "trainlm" komutu ile beraber kullanıma girmesi neticesinde en optime sonuç alınmıştır.

Tablo 3.36: IOX YSA Modeli ("Matlab" arayüzü için).

| Etken Madde | Eğitim Algoritması | Nöron Sayısı | Gizli Katman Sayısı |
|-------------|--------------------|--------------|---------------------|
| İohexsol    | Trainlm            | 4            | 1                   |

Tablo 3.36'da "İohexsol" etken maddesi için optime olan yapay sinir ağ modelinin sonuçları mevcuttur.

### 3.2. YAPAY SİNİR AĞ MODELİNİN VERİ TESTLERİ

Bu bölümde, yapay sinir ağ modelinin eğitilmesinde kullanılan deneylerin sonuçları, her bir ilaç etken maddesi için farklı şekillerde optimize edilen modellerin, geri döndürdüğü sonuçlar ile karşılaştırılacaktır. Birinci kolonda kullanılan ilaç etken maddelerinin elektrooksidasyon öncesi konsantrasyonu verilmiştir. İkinci kolonda, elektrooksidasyon işlemi esnasında kullanılan akım yoğunluğu verilmiştir. Üçüncü kolonda ortamın pH derecesi verilmiştir. Dördüncü kolonda ilaç etken maddelerinin elektrooksidasyon prosesiyle ne kadarlık bir süre için giderim yapıldığının sonuçlarını yazmaktadır. Beşinci kolonda elektrooksidasyon prosesi sonrası ve öncesi konsantrasyon oranları verilmiştir. Son kolonda, elektrooksidasyon prosesi sonrası ve öncesi konsantrasyon oranlarını, yapay sinir ağ modelinin kullanılarak döndürdüğü sonuçlar verilmiştir. İlk beş kolon yapılan deney ortamlarını kısaca modelimiz için veri girişimizi temsil ediyor, beşinci kolon yapay sinir ağının eğitilmesinde kullanılan veri çıkışı, son kolon ise yapay sinir ağ modelinin öğrendiği tüm sonuçlardan döndürdüğü veri çıkışı, sonuçtur. Bu tablolarda kıyaslanması gereken yer, altıncı kolonla, son kolondur. Kıyaslanacak olan kolonların sonuçları birbirine yakınsa, yaratılan yapay sinir ağ modelinin, giriş yapılan verilerden düzgün bir sonuç çıkarttığı, öğrendiği anlamına gelir. Sonuçların birbirine yakın değilse, daha fazla veri girişi, hatta yeni bir model tercih seçiminin yapılması gerekebilmektedir.

Kıyaslanan sonuçlarda, ciddi bir fark olmadığı zaman (regresyon analiz sonuçlarından yola çıkılır) daha iyi sonuçlar alabilmek adına, genelde modele daha fazla veri girişi yapılır. Modele ne kadar fazla giriş yapılırsa, modelin öğrenmesi o denli fazla olacaktır. Ancak bu öğrenme doğru orantılı bir şekilde artış göstermez. Bir sonraki sayfalarda gösterilecek olan tablolarda, kıyaslanacak olan değerler arasında ciddi bir benzerlik söz konusudur (tüm değerler  $10^{-4}$ 'e yuvarlanmıştır) . Bu benzerlik kullanılan modelin öğrendiğinin ve daha da iyi eğitilebileceğinin göstergesidir. Her bir ilaç etken maddesi için ayrı bir tablo mevcuttur ayrıca her bir ilaç etken maddesi için veri giriş tipleri ve veri çıkış tipi değişmemektedir.

Veri test sonuçlarından sonra, her bir ilaç etken maddelerinin deneyler sonrası, gerçek konsantrasyon değeri (C/Co) ile YSA model simülasyonunun öngördüğü değerler arasındaki sonuçlar incelenip yorumlar sonuç kısmına eklenmiştir.

### 3.2.1. Metotreksat Etken Maddesinin Veri Testi

Tablo 3.37’de “Metotreksat” etken maddesi için yapılan tüm deneylerin veri setleri detaylı bir şekilde verilmiştir, ayrıca yapay sinir ağı yaklaşımı kullanılarak yaratılan model sonuçları da son kolonda mevcuttur. Sonuçlardan görülebileceği üzere, konsantrasyon oranları ile yapay sinir ağıının döndürdüğü konsantrasyon oranlarının sonuçlarında ciddi bir benzerlik söz konusudur.

Tablo 3.37: Metotreksat Etken Maddesinin Veri Test Sonuçları.

| Deney No | Başlangıç Konst. (mg/L) | Akım Yoğunluğu (mA/cm <sup>2</sup> ) | Elektrolit Konst. (mg/L) | İlk pH | Zaman (dk) | Konst. Oranları (C/Co) | YSA Model Konst. Oranları (C/Co) |
|----------|-------------------------|--------------------------------------|--------------------------|--------|------------|------------------------|----------------------------------|
| 1        | 0,5                     | 15                                   | 200                      | 7      | 1          | 0,7950                 | 0,8380                           |
| 2        | 0,5                     | 15                                   | 200                      | 7      | 5          | 0,7510                 | 0,7320                           |
| 3        | 0,5                     | 15                                   | 200                      | 7      | 10         | 0,5780                 | 0,5938                           |
| 4        | 0,5                     | 15                                   | 200                      | 7      | 15         | 0,4370                 | 0,4499                           |
| 5        | 0,5                     | 15                                   | 200                      | 7      | 25         | 0,2510                 | 0,1653                           |
| 6        | 0,5                     | 15                                   | 200                      | 7      | 30         | 0,0015                 | 0,0545                           |
| 7        | 0,5                     | 15                                   | 200                      | 4      | 1          | 0,5554                 | 0,5287                           |
| 8        | 0,5                     | 15                                   | 200                      | 4      | 5          | 0,0400                 | 0,0410                           |
| 9        | 0,5                     | 15                                   | 200                      | 4      | 10         | 0,0037                 | 0,0037                           |
| 10       | 0,5                     | 15                                   | 200                      | 4      | 15         | 0,0032                 | 0,0004                           |
| 11       | 0,5                     | 15                                   | 200                      | 4      | 25         | 0,0018                 | 0,0001                           |
| 12       | 0,5                     | 15                                   | 200                      | 4      | 30         | 0,0012                 | 0,0001                           |
| 13       | 0,5                     | 15                                   | 200                      | 9      | 1          | 0,8043                 | 0,8176                           |
| 14       | 0,5                     | 15                                   | 200                      | 9      | 5          | 0,6542                 | 0,6171                           |
| 15       | 0,5                     | 15                                   | 200                      | 9      | 10         | 0,3327                 | 0,3367                           |
| 16       | 0,5                     | 15                                   | 200                      | 9      | 15         | 0,0955                 | 0,1282                           |
| 17       | 0,5                     | 15                                   | 200                      | 9      | 25         | 0,0073                 | 0,0110                           |
| 18       | 0,5                     | 15                                   | 200                      | 9      | 30         | 0,0008                 | 0,0041                           |
| 19       | 0,5                     | 30                                   | 200                      | 7      | 1          | 0,6536                 | 0,6216                           |
| 20       | 0,5                     | 30                                   | 200                      | 7      | 5          | 0,0046                 | 0,1108                           |
| 21       | 0,5                     | 30                                   | 200                      | 7      | 10         | 0,0007                 | 0,0133                           |
| 22       | 0,5                     | 30                                   | 200                      | 7      | 15         | 0,0004                 | 0,0038                           |
| 23       | 0,5                     | 30                                   | 200                      | 7      | 25         | 0,0002                 | 0,0014                           |
| 24       | 0,5                     | 30                                   | 200                      | 7      | 30         | 0,0002                 | 0,0012                           |
| 25       | 0,5                     | 30                                   | 200                      | 4      | 1          | 0,9900                 | 0,9673                           |
| 26       | 0,5                     | 30                                   | 200                      | 4      | 5          | 0,7134                 | 0,7634                           |
| 27       | 0,5                     | 30                                   | 200                      | 4      | 10         | 0,2243                 | 0,2048                           |
| 28       | 0,5                     | 30                                   | 200                      | 4      | 15         | 0,0283                 | 0,0108                           |

Tablo 3.37'nin Devamı.

|    |     |    |     |   |    |        |        |
|----|-----|----|-----|---|----|--------|--------|
| 29 | 0,5 | 30 | 200 | 4 | 25 | 0,0040 | 0,0001 |
| 30 | 0,5 | 30 | 200 | 4 | 30 | 0,0021 | 0,0001 |
| 31 | 0,5 | 30 | 200 | 9 | 1  | 0,5051 | 0,5512 |
| 32 | 0,5 | 30 | 200 | 9 | 5  | 0,2284 | 0,1556 |
| 33 | 0,5 | 30 | 200 | 9 | 10 | 0,0197 | 0,0220 |
| 34 | 0,5 | 30 | 200 | 9 | 15 | 0,0091 | 0,0053 |
| 35 | 0,5 | 30 | 200 | 9 | 25 | 0,0025 | 0,0015 |
| 36 | 0,5 | 30 | 200 | 9 | 30 | 0,0006 | 0,0013 |
| 37 | 0,5 | 45 | 200 | 7 | 1  | 0,9270 | 0,9521 |
| 38 | 0,5 | 45 | 200 | 7 | 5  | 0,7720 | 0,7786 |
| 39 | 0,5 | 45 | 200 | 7 | 10 | 0,1930 | 0,2960 |
| 40 | 0,5 | 45 | 200 | 7 | 15 | 0,0025 | 0,0457 |
| 41 | 0,5 | 45 | 200 | 7 | 25 | 0,0013 | 0,0030 |
| 42 | 0,5 | 45 | 200 | 7 | 30 | 0,0009 | 0,0018 |
| 43 | 0,5 | 45 | 200 | 4 | 1  | 0,7911 | 0,9376 |
| 44 | 0,5 | 45 | 200 | 4 | 5  | 0,6582 | 0,6139 |
| 45 | 0,5 | 45 | 200 | 4 | 10 | 0,0042 | 0,0963 |
| 46 | 0,5 | 45 | 200 | 4 | 15 | 0,0025 | 0,0083 |
| 47 | 0,5 | 45 | 200 | 4 | 25 | 0,0013 | 0,0002 |
| 48 | 0,5 | 45 | 200 | 4 | 30 | 0,0008 | 0,0001 |
| 49 | 0,5 | 45 | 200 | 9 | 1  | 0,9827 | 0,9582 |
| 50 | 0,5 | 45 | 200 | 9 | 5  | 0,8748 | 0,8813 |
| 51 | 0,5 | 45 | 200 | 9 | 10 | 0,6689 | 0,6446 |
| 52 | 0,5 | 45 | 200 | 9 | 15 | 0,2248 | 0,2373 |
| 53 | 0,5 | 45 | 200 | 9 | 25 | 0,0215 | 0,0081 |
| 54 | 0,5 | 45 | 200 | 9 | 30 | 0,0022 | 0,0030 |
| 55 | 0,5 | 30 | 100 | 7 | 1  | 0,9844 | 0,9960 |
| 56 | 0,5 | 30 | 100 | 7 | 5  | 0,9101 | 0,9274 |
| 57 | 0,5 | 30 | 100 | 7 | 10 | 0,8074 | 0,7658 |
| 58 | 0,5 | 30 | 100 | 7 | 15 | 0,6058 | 0,5857 |
| 59 | 0,5 | 30 | 100 | 7 | 25 | 0,4672 | 0,2804 |
| 60 | 0,5 | 30 | 100 | 7 | 30 | 0,1219 | 0,1461 |
| 61 | 0,5 | 30 | 300 | 7 | 1  | 0,7254 | 0,7198 |
| 62 | 0,5 | 30 | 300 | 7 | 5  | 0,4385 | 0,3411 |
| 63 | 0,5 | 30 | 300 | 7 | 10 | 0,0227 | 0,0584 |
| 64 | 0,5 | 30 | 300 | 7 | 15 | 0,0044 | 0,0106 |
| 65 | 0,5 | 30 | 300 | 7 | 25 | 0,0001 | 0,0017 |
| 66 | 0,5 | 30 | 300 | 7 | 30 | 0,0005 | 0,0010 |
| 67 | 10  | 30 | 200 | 7 | 1  | 0,9893 | 0,9838 |
| 68 | 10  | 30 | 200 | 7 | 5  | 0,8617 | 0,8942 |
| 69 | 10  | 30 | 200 | 7 | 10 | 0,8089 | 0,7833 |
| 70 | 10  | 30 | 200 | 7 | 15 | 0,7330 | 0,7180 |
| 71 | 10  | 30 | 200 | 7 | 25 | 0,6310 | 0,6334 |
| 72 | 10  | 30 | 200 | 7 | 30 | 0,5525 | 0,5601 |

### 3.2.2. İmatinib Etken Maddesinin Veri Testi

Tablo 3.38’de “İmatinib” etken maddesi için, yapay sinir ağı yaklaşımı kullanılarak yaratılan modelin sonuçları mevcuttur. Tüm ilaç etken maddelerinin veri setlerinin girişi aynı olduğundan, veri setlerinin ve sonuçlarının daha iyi görülebilmesi adına, Tablo 3.38’de sadece “Konsantrasyon oranları” ile “Yapay sinir Ağı’nın Döndürdüğü Konsantrasyon” oranları verilmiştir. Tablo 3.38’de görülebileceği üzere sonuçlarda önemli bir benzerlik söz konusudur.

Tablo 3.38: İmatinib Etken Maddesinin Veri Test Sonuçları.

| Deney No | Konst. Oranları (C/Co) | YSA Model Konst. Oranları (C/Co) | Deney No | Konst. Oranları (C/Co) | YSA Model Konst. Oranları (C/Co) | Deney No | Konst. Oranları (C/Co) | YSA Model Konst. Oranları (C/Co) |
|----------|------------------------|----------------------------------|----------|------------------------|----------------------------------|----------|------------------------|----------------------------------|
| 1        | 0,9900                 | 0,9357                           | 25       | 1,0000                 | 0,9277                           | 49       | 0,8163                 | 0,9254                           |
| 2        | 0,7130                 | 0,7406                           | 26       | 0,7146                 | 0,7693                           | 50       | 0,5332                 | 0,8051                           |
| 3        | 0,1760                 | 0,1887                           | 27       | 0,8823                 | 0,5372                           | 51       | 0,2504                 | 0,3592                           |
| 4        | 0,0736                 | 0,0143                           | 28       | 0,4069                 | 0,3585                           | 52       | 0,1095                 | 0,1009                           |
| 5        | 0,0203                 | 0,0012                           | 29       | 0,0773                 | 0,1065                           | 53       | 0,0211                 | 0,0354                           |
| 6        | 0,0015                 | 0,0009                           | 30       | 0,0129                 | 0,0473                           | 54       | 0,0033                 | 0,0277                           |
| 7        | 0,6980                 | 0,6976                           | 31       | 0,4864                 | 0,5189                           | 55       | 0,9993                 | 0,8838                           |
| 8        | 0,1126                 | 0,1304                           | 32       | 0,2544                 | 0,2255                           | 56       | 0,8320                 | 0,7366                           |
| 9        | 0,0190                 | 0,0161                           | 33       | 0,0944                 | 0,0492                           | 57       | 0,1065                 | 0,1394                           |
| 10       | 0,0012                 | 0,0076                           | 34       | 0,0316                 | 0,0073                           | 58       | 0,1045                 | 0,0672                           |
| 11       | 0,0062                 | 0,0144                           | 35       | 0,0502                 | 0,0023                           | 59       | 0,0052                 | 0,0030                           |
| 12       | 0,0004                 | 0,0270                           | 36       | 0,0201                 | 0,0035                           | 60       | 0,0026                 | 0,0016                           |
| 13       | 0,9903                 | 0,9091                           | 37       | 1,0000                 | 0,9167                           | 61       | 0,9895                 | 0,9177                           |
| 14       | 0,7036                 | 0,7683                           | 38       | 0,4237                 | 0,4908                           | 62       | 0,2456                 | 0,2911                           |
| 15       | 0,4802                 | 0,4449                           | 39       | 0,1731                 | 0,1252                           | 63       | 0,0874                 | 0,0161                           |
| 16       | 0,3302                 | 0,0939                           | 40       | 0,0596                 | 0,0550                           | 64       | 0,0286                 | 0,0026                           |
| 17       | 0,1715                 | 0,0007                           | 41       | 0,0400                 | 0,0250                           | 65       | 0,0181                 | 0,0007                           |
| 18       | 0,1098                 | 0,0004                           | 42       | 0,0354                 | 0,0187                           | 66       | 0,0260                 | 0,0006                           |
| 19       | 0,8285                 | 0,8578                           | 43       | 1,0000                 | 0,9394                           | 67       | 0,9500                 | 0,9636                           |
| 20       | 0,1169                 | 0,2003                           | 44       | 0,9507                 | 0,6824                           | 68       | 0,9300                 | 0,9342                           |
| 21       | 0,0018                 | 0,0498                           | 45       | 0,1805                 | 0,2385                           | 69       | 0,9090                 | 0,8344                           |
| 22       | 0,0015                 | 0,0142                           | 46       | 0,1442                 | 0,0775                           | 70       | 0,8270                 | 0,6568                           |
| 23       | 0,0007                 | 0,0104                           | 47       | 0,0573                 | 0,0183                           | 71       | 0,7582                 | 0,5871                           |
| 24       | 0,0005                 | 0,0101                           | 48       | 0,0060                 | 0,0114                           | 72       | 0,5994                 | 0,5498                           |

### 3.2.3. Karboplatin Etken Maddesinin Veri Testi

Tablo 3.39’da “Karboplatin” etken maddesi için, yapay sinir ağı yaklaşımı kullanılarak yaratılan modelin sonuçları mevcuttur. Tüm ilaç etken maddelerinin veri setlerinin girişi aynı olduğundan, veri setlerinin ve sonuçlarının daha iyi görünebilmesi adına, Tablo 3.39’da sadece “Konsantrasyon oranları” ile “Yapay sinir Ağı’nın Döndürdüğü Konsantrasyon” oranları verilmiştir. Tablo 3.39’da görülebileceği üzere sonuçlarda önemli bir benzerlik söz konusudur.

Tablo 3.39: Karboplatin Etken Maddesinin Veri Test Sonuçları.

| Deney No | Konst. Oranları (C/Co) | YSA Model Konst. Oranları (C/Co) | Deney No | Konst. Oranları (C/Co) | YSA Model Konst. Oranları (C/Co) | Deney No | Konst. Oranları (C/Co) | YSA Model Konst. Oranları (C/Co) |
|----------|------------------------|----------------------------------|----------|------------------------|----------------------------------|----------|------------------------|----------------------------------|
| 1        | 0,9853                 | 0,8610                           | 25       | 0,6471                 | 0,6761                           | 49       | 0,7018                 | 0,6094                           |
| 2        | 0,1356                 | 0,2030                           | 26       | 0,5140                 | 0,4533                           | 50       | 0,4888                 | 0,4621                           |
| 3        | 0,1321                 | 0,0131                           | 27       | 0,1917                 | 0,2960                           | 51       | 0,3725                 | 0,3531                           |
| 4        | 0,0001                 | 0,0031                           | 28       | 0,1475                 | 0,1745                           | 52       | 0,2403                 | 0,2828                           |
| 5        | 0,0000                 | 0,0009                           | 29       | 0,1427                 | 0,0170                           | 53       | 0,2205                 | 0,1824                           |
| 6        | 0,0000                 | 0,0004                           | 30       | 0,0981                 | 0,0059                           | 54       | 0,1206                 | 0,1130                           |
| 7        | 0,9276                 | 0,9159                           | 31       | 0,5824                 | 0,5850                           | 55       | 0,3144                 | 0,2976                           |
| 8        | 0,7472                 | 0,7601                           | 32       | 0,2821                 | 0,2500                           | 56       | 0,2212                 | 0,2106                           |
| 9        | 0,6177                 | 0,6023                           | 33       | 0,1060                 | 0,0690                           | 57       | 0,1816                 | 0,1928                           |
| 10       | 0,5707                 | 0,5605                           | 34       | 0,0000                 | 0,0190                           | 58       | 0,1734                 | 0,1524                           |
| 11       | 0,5493                 | 0,5504                           | 35       | 0,0000                 | 0,0032                           | 59       | 0,0208                 | 0,0246                           |
| 12       | 0,5491                 | 0,5348                           | 36       | 0,0000                 | 0,0027                           | 60       | 0,0000                 | 0,0054                           |
| 13       | 0,1785                 | 0,1836                           | 37       | 0,4683                 | 0,4573                           | 61       | 0,7341                 | 0,7721                           |
| 14       | 0,0003                 | 0,0370                           | 38       | 0,4439                 | 0,4411                           | 62       | 0,7331                 | 0,7311                           |
| 15       | 0,0002                 | 0,0090                           | 39       | 0,4279                 | 0,4403                           | 63       | 0,7013                 | 0,7036                           |
| 16       | 0,0002                 | 0,0032                           | 40       | 0,4097                 | 0,3966                           | 64       | 0,3911                 | 0,5989                           |
| 17       | 0,0001                 | 0,0007                           | 41       | 0,3743                 | 0,3724                           | 65       | 0,0886                 | 0,0726                           |
| 18       | 0,0001                 | 0,0006                           | 42       | 0,3651                 | 0,3499                           | 66       | 0,0751                 | 0,0412                           |
| 19       | 0,3510                 | 0,3448                           | 43       | 0,2222                 | 0,1484                           | 67       | -                      | -                                |
| 20       | 0,2500                 | 0,2102                           | 44       | 0,1409                 | 0,1154                           | 68       | -                      | -                                |
| 21       | 0,1492                 | 0,1438                           | 45       | 0,1041                 | 0,1170                           | 69       | -                      | -                                |
| 22       | 0,1413                 | 0,1248                           | 46       | 0,0950                 | 0,1403                           | 70       | -                      | -                                |
| 23       | 0,1070                 | 0,1299                           | 47       | 0,0943                 | 0,1133                           | 71       | -                      | -                                |
| 24       | 0,1156                 | 0,1125                           | 48       | 0,0869                 | 0,0707                           | 72       | -                      | -                                |

### 3.2.4. Kapesitabin Etken Maddesinin Veri Testi

Tablo 3.40'ta "Kapesitabin" etken maddesi için, yapay sinir ağı yaklaşımı kullanılarak yaratılan modelin sonuçları mevcuttur. Tüm ilaç etken maddelerinin veri setlerinin girişi aynı olduğundan, veri setlerinin ve sonuçlarının daha iyi görünebilmesi adına, Tablo 3.40'ta sadece "Konsantrasyon oranları" ile "Yapay sinir Ağı'nın Döndürdüğü Konsantrasyon" oranları verilmiştir. Tablo 3.40'ta görülebileceği üzere sonuçlarda çok ciddi bir benzerlik söz konusudur.

Tablo 3.40: Kapesitabin Etken Maddesinin Veri Test Sonuçları.

| Deney No | Konst. Oranları (C/Co) | YSA Model Konst. Oranları (C/Co) | Deney No | Konst. Oranları (C/Co) | YSA Model Konst. Oranları (C/Co) | Deney No | Konst. Oranları (C/Co) | YSA Model Konst. Oranları (C/Co) |
|----------|------------------------|----------------------------------|----------|------------------------|----------------------------------|----------|------------------------|----------------------------------|
| 1        | 0,9131                 | 0,9059                           | 25       | 0,9618                 | 0,9600                           | 49       | 0,9435                 | 0,9406                           |
| 2        | 0,8451                 | 0,8656                           | 26       | 0,9016                 | 0,9509                           | 50       | 0,8432                 | 0,8251                           |
| 3        | 0,8345                 | 0,8209                           | 27       | 0,8234                 | 0,8225                           | 51       | 0,6488                 | 0,6298                           |
| 4        | 0,7808                 | 0,7844                           | 28       | 0,7171                 | 0,7170                           | 52       | 0,4114                 | 0,4142                           |
| 5        | 0,7210                 | 0,7208                           | 29       | 0,5518                 | 0,5511                           | 53       | 0,3058                 | 0,1393                           |
| 6        | 0,6313                 | 0,6262                           | 30       | 0,4978                 | 0,4083                           | 54       | 0,1480                 | 0,0925                           |
| 7        | 0,9900                 | 0,9876                           | 31       | 0,9136                 | 0,8580                           | 55       | 0,9581                 | 0,9560                           |
| 8        | 0,9368                 | 0,9336                           | 32       | 0,7742                 | 0,7748                           | 56       | 0,8902                 | 0,8824                           |
| 9        | 0,7017                 | 0,7088                           | 33       | 0,5722                 | 0,6522                           | 57       | 0,7469                 | 0,7449                           |
| 10       | 0,5438                 | 0,5383                           | 34       | 0,5308                 | 0,5215                           | 58       | 0,5765                 | 0,5808                           |
| 11       | 0,4055                 | 0,4047                           | 35       | 0,3413                 | 0,3302                           | 59       | 0,2787                 | 0,2509                           |
| 12       | 0,3469                 | 0,3446                           | 36       | 0,1660                 | 0,2945                           | 60       | 0,0918                 | 0,1361                           |
| 13       | 0,9606                 | 0,9514                           | 37       | 0,9715                 | 0,9730                           | 61       | 0,9581                 | 0,9670                           |
| 14       | 0,8844                 | 0,8725                           | 38       | 0,9163                 | 0,9132                           | 62       | 0,8902                 | 0,8823                           |
| 15       | 0,8824                 | 0,7888                           | 39       | 0,8202                 | 0,8405                           | 63       | 0,7469                 | 0,7391                           |
| 16       | 0,8459                 | 0,7521                           | 40       | 0,7626                 | 0,7582                           | 64       | 0,5765                 | 0,5881                           |
| 17       | 0,7661                 | 0,7598                           | 41       | 0,5033                 | 0,5020                           | 65       | 0,2787                 | 0,2715                           |
| 18       | 0,6994                 | 0,7002                           | 42       | 0,3316                 | 0,3160                           | 66       | 0,0918                 | 0,1211                           |
| 19       | 0,9910                 | 0,9842                           | 43       | 0,9277                 | 0,9261                           | 67       | 0,9710                 | 0,9712                           |
| 20       | 0,9110                 | 0,9215                           | 44       | 0,8071                 | 0,8076                           | 68       | 0,9389                 | 0,9381                           |
| 21       | 0,8039                 | 0,8020                           | 45       | 0,6068                 | 0,6074                           | 69       | 0,9387                 | 0,9302                           |
| 22       | 0,6217                 | 0,6179                           | 46       | 0,3843                 | 0,3833                           | 70       | 0,8784                 | 0,9169                           |
| 23       | 0,2394                 | 0,2498                           | 47       | 0,1658                 | 0,1141                           | 71       | 0,8261                 | 0,8254                           |
| 24       | 0,1633                 | 0,1694                           | 48       | 0,0604                 | 0,0742                           | 72       | 0,7812                 | 0,7389                           |

### 3.2.5. İohexsol Etken Maddesinin Veri Testi

Tablo 3.41’de “İohexsol” etken maddesi için, yapay sinir ağı yaklaşımı kullanılarak yaratılan modelin sonuçları mevcuttur. Tüm ilaç etken maddelerinin veri setlerinin girişi aynı olduğundan, veri setlerinin ve sonuçlarının daha iyi görülebilmesi adına, Tablo 3.41’de sadece “Konsantrasyon oranları” ile “Yapay sinir Ağı’nın Döndürdüğü Konsantrasyon” oranları verilmiştir. Tablo 3.41’de görülebileceği üzere sonuçlarda ciddi bir benzerlik söz konusudur.

Tablo 3.41: İohexsol Etken Maddesinin Veri Test Sonuçları.

| Deney No | Konst. Oranları (C/Co) | YSA Model Konst. Oranları (C/Co) | Deney No | Konst. Oranları (C/Co) | YSA Model Konst. Oranları (C/Co) | Deney No | Konst. Oranları (C/Co) | YSA Model Konst. Oranları (C/Co) |
|----------|------------------------|----------------------------------|----------|------------------------|----------------------------------|----------|------------------------|----------------------------------|
| 1        | 0,9090                 | 0,9104                           | 25       | 0,8922                 | 0,8919                           | 49       | 0,8850                 | 0,8355                           |
| 2        | 0,7694                 | 0,8372                           | 26       | 0,7537                 | 0,8383                           | 50       | 0,1160                 | 0,1121                           |
| 3        | 0,6854                 | 0,7077                           | 27       | 0,7111                 | 0,7350                           | 51       | 0,0319                 | 0,0001                           |
| 4        | 0,5982                 | 0,5672                           | 28       | 0,6132                 | 0,6078                           | 52       | 0,0107                 | 0,0001                           |
| 5        | 0,4801                 | 0,3491                           | 29       | 0,3981                 | 0,4043                           | 53       | 0,0001                 | 0,0001                           |
| 6        | 0,4032                 | 0,2779                           | 30       | 0,3135                 | 0,3281                           | 54       | 0,0001                 | 0,0001                           |
| 7        | 0,9748                 | 0,9243                           | 31       | 0,9360                 | 0,8744                           | 55       | 0,0813                 | 0,0689                           |
| 8        | 0,8941                 | 0,8999                           | 32       | 0,8508                 | 0,8256                           | 56       | 0,0011                 | 0,0284                           |
| 9        | 0,7628                 | 0,8590                           | 33       | 0,7327                 | 0,7494                           | 57       | 0,0063                 | 0,0107                           |
| 10       | 0,7834                 | 0,8084                           | 34       | 0,6775                 | 0,6612                           | 58       | 0,0013                 | 0,0047                           |
| 11       | 0,6802                 | 0,6540                           | 35       | 0,4877                 | 0,4798                           | 59       | 0,0006                 | 0,0014                           |
| 12       | 0,5860                 | 0,5266                           | 36       | 0,4334                 | 0,3972                           | 60       | 0,0000                 | 0,0011                           |
| 13       | 0,8761                 | 0,9045                           | 37       | 0,9496                 | 0,8669                           | 61       | 0,7348                 | 0,7375                           |
| 14       | 0,7446                 | 0,8662                           | 38       | 0,9318                 | 0,7623                           | 62       | 0,5052                 | 0,5328                           |
| 15       | 0,7247                 | 0,8024                           | 39       | 0,0008                 | 0,02154                          | 63       | 0,3156                 | 0,3193                           |
| 16       | 0,6633                 | 0,7230                           | 40       | 0,0007                 | 0,0002                           | 64       | 0,2177                 | 0,1974                           |
| 17       | 0,5439                 | 0,5424                           | 41       | 0,0003                 | 0,0000                           | 65       | 0,1245                 | 0,1013                           |
| 18       | 0,4623                 | 0,4560                           | 42       | 0,0001                 | 0,0000                           | 66       | 0,0955                 | 0,0821                           |
| 19       | 0,8752                 | 0,8905                           | 43       | 0,8634                 | 0,8544                           | 67       | 0,8674                 | 0,8661                           |
| 20       | 0,7683                 | 0,8018                           | 44       | 0,7472                 | 0,7649                           | 68       | 0,7429                 | 0,6998                           |
| 21       | 0,6223                 | 0,6567                           | 45       | 0,5476                 | 0,5860                           | 69       | 0,1886                 | 0,1503                           |
| 22       | 0,4826                 | 0,5124                           | 46       | 0,3926                 | 0,3549                           | 70       | 0,0569                 | 0,0001                           |
| 23       | 0,2815                 | 0,3080                           | 47       | 0,1212                 | 0,0010                           | 71       | 0,0001                 | 0,0001                           |
| 24       | 0,0100                 | 0,2452                           | 48       | 0,0622                 | 0,0000                           | 72       | 0,0000                 | 0,0001                           |

## 4. SONUÇLAR VE YORUMLAR

İlaç endüstri atık sularından farmasötik mikro kirleticilerin giderimi, çevre sağlığı bakımından büyük bir önem taşır. Tedbir alınmadığı müddetçe, önüne geçilemez durumlara, ciddi anlamda felaketlere yol açabilir. Atık suların arıtım süreci öncesinde arıtımla ilgili yorum yapabilmek adına, bu sürecin modellenmesi gereklidir. Laboratuvar ölçeğinde yapılan deneylerin sonuçları, gerçek sistemlerde çıkan sonuçlarla her zaman aynı olmaz, çünkü gerçek sisteme farklı değişkenler eklenirken ölçek boyutları da farklı olur. Bu durumda geleneksel modelleme tekniklerinden yola çıkılarak yorum yapılması zorlaşır. Yapay sinir ağı yaklaşımı insan beyninin öğrenme yapısını taklit ederek yenilikçi bir çözüm sunar. Yapay sinir ağı yaklaşımıyla modelleme kullanmak özellikle lineer olmayan sistemlerin incelenmesinde büyük bir başarı sağlamıştır.

Bu çalışmada ilaç endüstrisi atık sularında bulunan beş adet ilaç etken maddesi için elektrokidasyon ile arıtım sonrası giderim oran verileri alınıp, bu veriler yapay sinir ağı yaklaşımıyla modellenmiştir. Modelleme süreci bittikten sonra, modellemenin çıkaracağı sonuçları karşılaştırmak adına, aynı koşulları ve değişkenleri kullanarak yapay sinir ağında bir simulasyon hazırlanmıştır. Yapay sinir ağının simulasyonu sürecinde kullanılan yapay sinir ağ yapısı ileri beslemeli olup toplam üç katmandan ve bir gizli katmandan oluşmaktadır, kullanılacak transfer fonksiyonu “Sigmoid” fonksiyonudur, mimaride kullanılan eğitim fonksiyonları ve gizli tabakadaki nöron sayıları farklıdır. Metotresat ilaç etken maddesi için (5:8:1) ağ mimarisi, Quasi-Newton (trainbfg) eğitim fonksiyonu seçilerek regresyon analiz sonucu %0.99086 çıkmıştır. İmatinib ilaç etken maddesi için (5:12:1) ağ mimarisi, Bayesian Regularization (trainbr) eğitim fonksiyonu seçilerek regresyon analiz sonucu %0.99108 çıkmıştır. Karboplatin ilaç etken maddesi için (5:17:1) ağ mimarisi, Gradient Descent with Momentum & Adaptive LR (traingdx) eğitim fonksiyonu seçilerek regresyon analiz sonucu %0.98601 çıkmıştır. Kapesitabin ilaç etken maddesi için (5:19:1) ağ mimarisi, Levenberg-Marquardt (trainlm) eğitim fonksiyonu seçilerek regresyon analiz sonucu %0.99189 çıkmıştır. İohexsol ilaç etken maddesi için (5:4:1) ağ mimarisi, Levenberg-Marquardt (trainlm) eğitim fonksiyonu seçilerek regresyon analiz sonucu %0.99427 çıkmıştır. Model sonuçlarından sonra hata analizi yapıldığı takdirde, her bir ilaç etken maddesi için ayrı birer hata analizinin yapılması gereklidir.

Ancak, genel olarak bakıldığında, YSA'nın öngördüğü sonuçlarla, gerçek sonuçlar arasında uyuşmayan kısımların büyük bir çoğunluğu  $10^{-3}$ 'ten küçük değerler aralığında görülmektedir. Kurulan YSA modellerinin başarılı öngörülerinin deney sayıları ise, (Bağıl hata yüzdesi %10'dan aşağı olanlar başarılı olarak ifade edilmiştir. Konsantrasyon değerlerinin  $10^{-3}$ 'ten küçük yerlerde ise başarısızlık değerleri ihmal edilmiştir, Örnek Tablo 3.36 Metotreksat Deney No : 36.)

- Metotreksat başarılı öngörü deney sayısı : 60/72 (%83.3)
- İmatinib başarılı öngörü deney sayısı : 53/72 (%73.6)
- Karboplatin başarılı öngörü deney sayısı : 44/66 (%66.6)
- Kapesitabin başarılı öngörü deney sayısı : 61/72 (%84.7)
- İohexsol başarılı öngörü deney sayısı : 55/72 (%76.3)

Sonuçlar yorumlandığında, deneylerde de % 5-10'luk bir hata payı bırakıldığı zaman, YSA modellerinin başarılı sonuçlar ortaya koyduğu söylenebilir. Deney sayısına yeni değişkenler ekleyerek artış yapılması, yapay sinir ağında hazırlanan simülasyonlar için daha iyi sonuçlar verecektir. Ancak sonuçlardaki iyileşmenin değeri, deney sayısına kıyasla lineer bir şekilde artış göstermez, ayrıca farklı yapay sinir ağ modelleri kullanılarak da sonuçların iyileştirilebilmesi olasıdır.

## KAYNAKLAR

- [1] Nussbaumer S., Bonnabry P., Veuthey J. L., Fleury-Souverain S., (2011), “Analysis of anticancer drugs: a review”, *Talanta*, 85 (5), 2265-2289.
- [2] Isidori M., Lavorgna M., Russo C., Kundi M., Zegura B., Novak M., Filipic M., Misik M., Knasmueller S., de Alda M. L., Barcelo D., Zonja B., Cesen M., Scancar J., Kosjek T., Heath E., (2016), “Chemical and toxicological characterisation of anticancer drugs in hospital and municipal wastewaters from Slovenia and Spain”, *Environ Pollut*, 219, 275-287.
- [3] Santana-Viera S., Montesdeoca-Esponda S., Sosa-Ferrera Z., Santana-Rodríguez J. J., (2016), “Cytostatic drugs in environmental samples: An update on the extraction and determination procedures”, *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 80, 373-386.
- [4] Olcay D., (2014), “İlaç Endüstrisi Atıksuları için Karakterizasyon ve Aktif Çamur Prosesinin Modellenmesi”, Yüksek Lisans Tezi, İstanbul Teknik Üniversitesi
- [5] İEİS, (2016), “Türkiye İlaç Sektörü 2015”, İlaç Endüstrisi İşverenler Sendikası.
- [6] TOBB, (2008), “Türkiye İlaç Sanayi Sektör Raporu”, Türkiye Odalar ve Borsalar Birliği Türkiye İlaç Sanayi Meclisi.
- [7] TWBG, (1999), “Pollution Prevention and Abatement Handbook Toward Cleaner Production”, The World Bank Group.
- [8] ÇSB, (2013), “Sektörel Tehlikeli Atık Rehberleri İlaç Sanayi”, Çevre ve Şehircilik Bakanlığı.
- [9] Gadipelly C., Pérez-González A., Yadav G. D., Ortiz I., Ibáñez R., Rathod V. K., Marathe K. V., (2014), “Pharmaceutical Industry Wastewater: Review of the Technologies for Water Treatment and Reuse”, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 53 (29), 11571-11592.
- [10] ResGaz1, (2004), Su Kirliliği Kontrolü Yönetmeliği, 31 Aralık 2004 tarih ve 25687 sayılı Resmi Gazete.
- [11] Li S. W., Lin A. Y., (2015), “Increased acute toxicity to fish caused by pharmaceuticals in hospital effluents in a pharmaceutical mixture and after solar irradiation”, *Chemosphere*, 139, 190-196.
- [12] Dökmeci A. H., (2009), “Bazı Farmasötik İlaç Kalıntılarının Sulardaki Toksik Etkileri”, Doktora Tezi, Trakya Üniversitesi.

- [13] Tiwari B., Sellamuthu B., Ouarda Y., Drogui P., Tyagi R. D., Buelna G., (2016), "Review on fate and mechanism of removal of pharmaceutical pollutants from wastewater using biological approach", *Bioresour Technol.*
- [14] Ulusoy E., (2017), "Metotreksatın Hibrit Elektrotlar Kullanılarak Elektrokoksasyon Prosesi İle Parçalanması ve Yan Ürünlerinin Tespiti", Yüksek Lisans Tezi, Gebze Teknik Üniversitesi
- [15] Daneshvar, N., Khataee, A. R., & Djafarzadeh, N. (2006), "The use of artificial neural networks (ANN) for modeling of decolorization of textile dye solution containing CI Basic Yellow 28 by electrocoagulation process", *Journal of hazardous materials*, 137(3), 1788-1795.
- [16] Onkal-Engin, G., Demir, I., & Engin, S. N. (2005), "Determination of the relationship between sewage odour and BOD by neural networks. *Environmental Modelling & Software*", 20(7), 843-850.
- [17] Aber, S., Amani-Ghadim, A. R., & Mirzajani, V. (2009), "Removal of Cr (VI) from polluted solutions by electrocoagulation: Modeling of experimental results using artificial neural network", *Journal of Hazardous Materials*, 171(1), 484-490.
- [18] Sadrzadeh, M., Mohammadi, T., Ivakpour, J., & Kasiri, N. (2009). "Neural network modeling of Pb 2+ removal from wastewater using electrodialysis. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*", 48(8), 1371-1381.
- [19] Basha, C. A., Soloman, P. A., Velan, M., Miranda, L. R., Balasubramanian, N., & Siva, R. (2010), "Electrochemical degradation of specialty chemical industry effluent. *Journal of hazardous materials*", 176(1), 154-164.
- [20] Sadrzadeh, M., Ghadimi, A., & Mohammadi, T. (2009), "Coupling a mathematical and a fuzzy logic-based model for prediction of zinc ions separation from wastewater using electrodialysis", *Chemical Engineering Journal*, 151(1), 262-274.
- [21] Yetilmezsoy, K., Ozkaya, B., & Cakmakci, M. (2011), "Artificial intelligence-based prediction models for environmental engineering, *Neural Network World*", 21(3), 193.
- [22] Zade, M. J. G., & Noori, R. (2007), "Prediction of municipal solid waste generation by use of artificial neural network", A case study of Mashhad.
- [23] Jahandideh, S., Jahandideh, S. Asadabadi, E. B., Askarian, M., Movahedi, M. M., Hosseini, S., & Jahandideh, M. (2009), "The use of artificial neural networks and multiple linear regression to predict rate of medical waste generation", *Waste management*, 29(11), 2874-2879.

- [24] Yabunaka, K. I., Hosomi, M., & Murakami, A. (1997), "Novel application of a back-propagation artificial neural network model formulated to predict algal bloom", *Water Science and Technology*, 36(5), 89-97.
- [25] Tang W. Z., (2004), "Physicochemical Treatment of Hazardous Wastes", CRC Press.
- [26] Hamed, M. M., Khalafallah, M. G., & Hassanien, E. A. (2004), "Prediction of wastewater treatment plant performance using artificial neural networks", *Environmental Modelling & Software*, 19(10), 919-928.
- [27] Piuleac, C. G., Curteanu, S., Rodrigo, M. A., Sáez, C., & Fernández, F. J. (2013), "Optimization methodology based on neural networks and genetic algorithms applied to electro-coagulation processes", *Central European Journal of Chemistry*, 11(7), 1213-1224.
- [28] Subaşı H., (2010), "Yapay Sinir Ağı İle Atıksu Arıtma Performansının Modellenmesi", Yüksek Lisans Tezi, Çukurova Üniversitesi.
- [29] Temizel İ., (2012), "Melas Atık Sularının Arıtımında Yukarı Akışlı Havasız Çamur Yataklı Reaktör (YAHÇYR) Sisteminden Elde Edilen Biyogaz ve Metan Üretimlerinin Yapay Sinir Ağları İle Modellenmesi", Yüksek Lisans Tezi, Yıldız Teknik Üniversitesi.
- [30] Körbahti B. K., Körbahti B., (2010), "Adaptif Bulanık Yapay Sinir Ağı Tasarımı İle Elektrokimyasal Atıksu Arıtım Prosesinin Öngörü Modelinin Geliştirilmesi", Tubitak Proje No:106M35.
- [31] İlhan, F., Kurt, U., Apaydin, Ö., Arslankaya, E., & Gönüllü, M. T. Elektrokimyasal arıtım ve uygulamaları: Kati Atık Sızıntı Suyu Çalışması. Türkiye-2007.
- [32] Barışçı S., Türkay Ö., Ulusoy E., Dimoglo A., ( 2015). "Degradation of the cytostatic methotrexate by electrosynthesized ferrate (VI): Identification of oxidation by-products", *The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies*, 15-20 December, Honolulu, Hawaii, USA.
- [33] Ferrando-Climent L., Rodriguez-Mozaz S., Barcelo D., (2014), "Incidence of anticancer drugs in an aquatic urban system: from hospital effluents through urban wastewater to natural environment", *Environ Pollution*, 193, 216-223.
- [34] Olvera-Vargas H., Oturan N., Brillas E., Buisson D., Esposito G., Oturan M. A., (2014), "Electrochemical advanced oxidation for cold incineration of the pharmaceutical ranitidine: mineralization pathway and toxicity evolution", *Chemosphere*, 117, 644-651.

## ÖZGEÇMİŞ

30 Haziran 1986 İstanbul Kadıköy’de doğdu. Lise eğitimini, Gökdil Koleji’nde tamamladıktan sonra, Işık Üniversitesi Matematik Mühendisliği bölümünde lisans eğitimini tamamladı. Lisans eğitimi sırasında, yarı zamanlı olarak dershanelerde matematik öğretmeni olarak çalışmaya başladı. Eğitiminin son döneminde yabancı dilini geliştirebilmek için, Work and Travel Programına başvurup beş ay boyunca Amerika’nın Ocean City şehrinde Can Kurtaran olarak görev yaptı. Geri döndüğünde öğretmenliğe devam edip ayrıca, Gebze Teknik Üniversitesinde Çevre Mühendisliği Anabilim dalında yüksek lisans eğitimine başladı. Eğitiminde modelleme üzerine araştırma yapmaya başlayıp, araştırmasını yazılım boyutuna ilerletebilmek adına Microsoft Yazılım Uzmanlığı’nı tamamladı. Şu an yapay zeka teknolojileri alanında araştırmaları devam etmektedir.