

T.C.
GEBZE TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

YÜZEY AKTİF MADDELERİN KRİTİK MİSEL
KONSANTRASYONU- KİMYASAL
YAPI İLİŞKİSİNİN İNCELENMESİ

MERVE ERKOÇ
YÜKSEK LİSANS TEZİ
KİMYA MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI

GEBZE
2021

T.C.
GEBZE TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

YÜZEY AKTİF MADDELERİN KRİTİK
MİSEL
KONSANTRASYONU-KİMYASAL
YAPI İLİŞKİSİNİN İNCELENMESİ

MERVE ERKOÇ
YÜKSEK LİSANS TEZİ
KİMYA MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI

DANIŞMANI
PROF. DR. MAHMUT RAHİM BAYRAMOĞLU

GEBZE
2021

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

**INVESTIGATION OF THE RELATIONSHIP
OF SURFACE ACTIVE SUBSTANCES
CRITICAL MICEL CONCENTRATION-
CHEMICAL STRUCTURE**

MERVE ERKOÇ
A THESIS SUBMITTED FOR THE DEGREE OF
MASTER OF SCIENCE
DEPARTMENT OF CHEMICAL ENGINEERING

THESIS SUPERVISOR
PROF. DR. MAHMUT RAHİM BAYRAMOĞLU

GEBZE
2021

GEBZE TEKNİK ÜNİVERSİTESİ	YÜKSEK LİSANS JÜRİ ONAY FORMU
----------------------------------	--------------------------------------

GTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun 10/06/2021 tarih ve 2021/26 sayılı kararıyla oluşturulan jüri tarafından 14/06/2021 tarihinde tez savunma sınavı yapılan Merve ERKOÇ'un tez çalışması Kimya Mühendisliği Anabilim Dalında YÜKSEK LİSANS tezi olarak kabul edilmiştir.

JÜRİ

ÜYE

(TEZ DANIŞMANI) :PROF.DR. MAHMUT RAHİM BAYRAMOĞLU

ÜYE

:DR.ÖĞR. ÜYESİ HASAN ŞILDIR

ÜYE

:DR.ÖĞR. ÜYESİ ÖMÜR ARAS

ONAY

Gebze Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun

...../...../..... tarih ve/..... sayılı kararı.

İMZA/MÜHÜR

ÖZET

Deterjanların ana maddesini oluşturan yüzey aktif maddeler tanım olarak su içerisinde veya bir çözelti içerisinde çözündüğünde genellikle yüzey gerilimini düşüren bir etkiye sahiptir. Yüzey aktif maddeler, sıvılar arasında oluşan bu gerilimi azaltarak yıkama süresince köpük oluşturma ve temizleme görevini üstlenmektedirler. Yüzey aktif maddeler ile oluşturulan sulu çözeltiler kolloidal elektrolit davranışı sergilerler. Bu davranış sulu çözelti içinde bulunan misel olarak adlandırılan az veya çok düzenli yapıya sahip elektrik yüklü moleküllerin oluşumunu sağlamaktadır.

Bu çalışmada yüzey aktif maddelerin kritik misel konsantrasyonu- kimyasal yapı ilişkisinin Yapay Sinir Ağları (YSA) yöntemi ile modellenerek tahmin edilmesi incelenmiştir. Yapay Sinir Ağları'nın görev tanımı açıklanacak olursa verilen bilgilere karşılık çıktı üretebilme olarak açıklanabilir. Bu belirtilen mekanizmanın çalışabilmesi için ise sistem belirli örnekler kullanılarak eğitilir. Sonra sistemde karar mekanizmasının çalışabilir hale gelmesi sağlanır. Son olarak da sistemde çıktı verileri üretilir. Çalışmamızda literatürde hesaplanmış toplam 127 adet deneysel veriler baz alınarak yeni bir model oluşturulması ve bu çalışmalarda kullanılan deneysel verilere karşılık oluşturulmuş model ile çalışmamızda oluşturacağımız yeni modelin karşılaştırmalı analizi yapılması amaçlanmıştır. Bu çalışmada kullanılan verilerin %70 'i eğitmek %30'u test etmek için kullanılmıştır. Kritik misel konsantrasyonunu en çok etkileyen 3 parametre (Q_{max} , dipol moment, atom sayısı) girdi verisi olarak tanımlanmıştır. Bu tanımlamanın ardından literatürdeki deneysel verilerle tanjant sigmoid transfer fonksiyonu kullanılarak oluşturulan yeni modelde hata kareler toplamı ortalamasının karekökü (RMSE), determinasyon katsayısı(R), ortalama mutlak yüzde hata (MAPE) ve ortalama karesel hata (MSE) değerleri hesaplanarak literatürdeki model ve bu çalışmada oluşturulan modelin karşılaştırmalı analizi yapılmıştır. Bu değerler yeni oluşturulan modelin mevcut modelden daha başarılı tahminleme yapabildiğini göstermektedir.

Anahtar Kelimeler: Kritik Misel Konsantrasyonu, Yapay Sinir Ağları, Modelleme.

SUMMARY

Surfactants that make up the main ingredient in detergents are chemical compounds that affect (often reduce) surface tension when dissolved in water or an aqueous solution. It reduces this tension between surfactants and liquids and provides cleaning by creating foam during washing. Aqueous solutions formed with surfactants have a colloidal electrolyte behavior. This behavior enables the formation of electrically charged molecules with a more or less regular structure called micelles in aqueous solution.

In this study, the prediction of the correlation between critical micelle concentration and chemical structure of surfactants by modeling by Artificial Neural Networks (ANN) method was investigated. If the task description of Artificial Neural Networks is explained from a technical point of view, it can be explained as being able to produce output against the given information. In order for this mechanism to work, the system is trained using specific examples. Then, it is ensured that the decision mechanism in the system becomes operable. Finally, outputs are produced in the system. In our study, the input and output values of the data were determined based on the experimental data calculated in the literature. 70% of all data was used for training and 30% for testing. The 3 parameters (Q_{cmax} , dipole moment, atomic number) that most affect the critical micelle concentration were defined as inputs. Following this definition, in the new model created by using the tangent sigmoid transfer function with experimental data in the literature, RMSE: the square root of the mean sum of error squares, R: determination coefficient, MAPE: mean absolute percentage and MSE: mean square error values are calculated and the model in the literature and the model created in this study comparative analysis has been done. These values show that the newly created model can predict more successfully than the current model.

Keywords: Neuro Fuzzy Model, Critical Micelle Concentration, Artificial Neural Network.

TEŞEKKÜR

Başta, yüksek lisans eğitimimde ve akademik hayatımda desteğini ve yardımlarını hiçbir zaman esirgemeyip bilgisi ile bu çalışmanın oluşmasının yolunu açan danışmanım Prof. Dr. Mahmut Rahim Bayramoğlu'na,

Ayrıca akademik çalışmalarında bilgi ve tecrübelerini paylaşmaktan çekinmeyen İnönü Üniversitesi Kimya Mühendisliği bölümünden Prof. Dr. Mehmet Yüceer Hocama,

Bütün çalışmam boyunca yanımda olan, bilgi ve tecrübelerini benimle paylaşan değerli yol arkadaşım Ahmet İhsan Turan'a,

Göstermiş olduğu anlayış ve desteklerinden dolayı değerli yöneticilerim Fatih Doğan ve Serhat Karaduman'a,

Her zaman yanımda olan ve beni destekleyen sevgili aileme en içten teşekkürlerimi sunarım.

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET	v
SUMMARY	vi
TEŞEKKÜR	vii
İÇİNDEKİLER	viii
SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ	x
ŞEKİLLER DİZİNİ	xi
TABLolar DİZİNİ	xii
1. GİRİŞ	1
2. KAYNAK ÖZETLERİ	2
3. DETERJANLAR	4
3.1. Deterjanların Tarihçesi	4
3.2. Deterjanların Bileşenleri	6
3.3. Deterjanların Çevresel Etkileri	7
4. YÜZEY AKTİF MADDELER	9
4.1. Yüzey Aktif Maddelerin Sınıflandırılması	10
4.1.1. Anyonik Yüzey Aktif Maddeler	10
4.1.2. Katyonik Yüzey Aktif Maddeler	12
4.1.3. Amfoterik Yüzey Aktif Maddeler	13
4.1.4. Non-İyonik Yüzey Aktif Maddeler	14
4.2. Deterjanlarda Bulunan Yüzey Aktif Maddeler	14
4.3. Kritik Misel Konsantrasyonu	15
5. YAPAY SİNİR AĞLARI	18
5.1. Tanım ve Tarihçesi	18
5.2. Yapay Sinir Ağları Kullanım Alanları	20
5.3. Yapay Sinir Ağlarının Biyolojik Yapısı	20
5.3.1. Yapay Sinir Ağlarının Genel Yapısı	21
5.3.2. Yapay Sinir Ağlarının Bileşenleri	21
5.3.3. Yapay Sinir Ağlarının Sınıflandırılması	23
5.4. Yapay Sinir Ağlarında Öğrenme Algoritmaları	24
5.4.1. Levenberg-Marquardt Metodu	25

5.5. Yapay Sinir Ağlarında Performans Ölçütleri	25
6. MATERYAL ve METOD	26
7. ARAŞTIRMA BULGULARI ve SONUÇLAR	27
8. SONUÇLAR ve TARTIŞMA	31
 KAYNAKLAR	 32
ÖZGEÇMİŞ	34
EKLER	35

SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ

<u>Simgeler ve</u> <u>Kısaltmalar</u>	<u>Açıklamalar</u>
Nt	: Toplam atom sayısı
Qc-max	: Maksimum spesifik karbon alım oranı
μ (D)	: Dipol moment
CMC	: Kritik misel konsantrasyonu
ETA	: Genişletilmiş topokimyasal atom
LMM	: Levenberg – Marquardt metodu
MAPE	: Ortalama mutlak yüzde
MSE	: Ortalama karesel hata değerleri
QSPR	: Kantitatif yapı-özellik ilişkisi
YAM	: Yüzey aktif madde
YSA	: Yapay sinir ağı

ŞEKİLLER DİZİNİ

<u>Sekil No:</u>	<u>Sayfa</u>
4.1: Amfilik molekülün şematik gösterimi.	9
4.2: Yam'lerin şematik gösterimi ve sınıflandırılması.	10
4.3: Anyonik yüzey aktif maddelerin genel formülü.	11
4.4: Lineer alkil benzin sülfonat.	11
4.5: Sls'nin yapısı.	12
4.6: Setil trimetil amonyum klorürün kimyasal yapısı.	13
4.7: Katyonik yüzey aktif maddenin genel formülü.	13
4.8: İyonik olmayan yüzey aktif maddenin genel formülü.	14
4.9: Yüzey gerilimi- bileşik derişimi grafiğı.	16
4.10: Yüzey gerilimi-yam konsantrasyon grafiğı.	17
4.11: Yüzey aktif madde derişimiyle orantılı olarak iletkenlik ve yüzey geriliminin değışimi ve grafiklerden kritik misel konstrasyonu tayini tespiti.	17
5.1: Çok katmanlı yapay sinir ağı nöronu çalışma fonksiyonu.	19
5.2: Sinir ağı yapısı.	21
5.3: Transfer fonksiyonları.	22
5.4: Geri beslemeli sinir ağı blok diyagramı.	24
7.1: Mevcut model eğitim deęerleri.	28
7.2: Yeni model eğitim deęerleri.	29
7.3: Mevcut model test deęerleri.	29
7.4: Yeni model test deęerleri.	30

TABLÖLAR DİZİNİ

<u>Tablo No:</u>	<u>Sayfa</u>
5.1: Birleştirme Fonksiyonları.	22
7.1: Performans Ölçütleri.	27
7.2: Geliştirilen modele ait karşılaştırmalı sonuçlar.	28

1.GİRİŞ

Deterjan genel tanım olarak sayıca bir ve/veya birden fazla yüzey aktif maddeyi etken ana madde olarak bünyesinde bulunduracak şekilde formülize edilmiş temizleme bileşeni olarak tanımlana bilinmektedir. Bourne ve Jennings tarafından gerçekleştirilen çalışmada araştırmacılar deterjanı temizleme ajanı ve bu süreçte kullanılan ve çözünmez tortu maddelerin çökmesini engelleyici malzeme olarak tanımlamaktadır [Bourne and Jennings, 1963]. Bu yüzey aktif maddeler genel olarak su iten ve su çeken yapılara sahiptir [Gültekin et al., 2003]. Tüm deterjanlar temizleme görevlerini yerine getirebilmeleri için bünyelerinde yüzey aktif madde içermektedir.

Yüzey aktif maddeler yapı itibariyle 2 kısma sahiptirler. Bu kısımlar suyu seven olarak adlandırılan hidrofilik kısım ve suyu sevmeyen olarak adlandırılan hidrofobik kısımdır.

Genel olarak modelleme kavramı mevcut bir sistemin baskın özelliğini veya davranışını giriş parametrelerinin fonksiyonu olarak matematiksel modellemeler ve deney veriler kapsamında hesaplamak amacıyla kullanılan yöntemlerdir [Doherty, 1999]. Yapay sinir ağları (YSA) genel olarak biyolojik sinir sistemlerinden ilham almış mevcut bilgiyi değerlendiren/işleyen sistemlerdir.

Günümüzde halen gelişim gösteren yapay sinir ağları ile modelleme yöntemleri yapay zekâ uygulamalarından biridir. Tarihi oldukça eskiye dayanan yapay zekâ çalışmalarına nörobiyolojist Warren McCulloch ve istatistikçi Walter Pitts öncülük etmiştir. McCulloch ve Pitts tarafından gerçekleştirilen bir çalışmada yapay sinir ağlarının ilke olarak mantıksal bir fonksiyonu hesaplayabilecek yetide olduğunu belirtmişlerdir [Hagan et al., 2002]. Yapay sinir ağlarını gerçekleştirebildiği öğrenme işlemi sonrasında bilinmeyenler altında öğrendikleri durumlar ile ilişki kurarak kararlar verebilmektedir [Öztemel, 2008]. Lineer olmayan çıkış sinyalleri yapay sinir ağ yapısındaki aktivasyon fonksiyonları tarafından üretilmektedir. Yapay sinir ağları ile biyolojik sinir hücrelerinde veriler farklı yapılarda saklanır. Örneğin biyolojik sinir hücrelerinde dağınık yapay sinir ağlarında ise paralel yapıda işlenmektedir. Bu paralel durum ise mevcut bilginin işlenmesini ve anlaşılmasını kolaylaştırmaktadır [Gültekin et al., 2003].

2. KAYNAK ÖZETLERİ

Tez çalışmasının bu bölümünde tez konusu ile ilgili mevcut literatürde yapılmış çalışmalar yer almaktadır.

1996 yılında Huibers ve arkadaşları “Kantitatif Yapı-Özellik İlişkisi Yaklaşımı Kullanılarak Kritik Misel Konsantrasyonunun Tahmini” isimli çalışmalarında noniyonik yüzey aktif maddelerin kritik misel konsantrasyonu (cmc) üzerinde kantitatif bir yapı-özellik ilişkisini incelemişlerdir. Sürfaktan molekülünün hidrofobik kısmı için hesaplanan topolojik tanımlayıcılar kullanılarak 77 adet noniyonik sürfaktan içeren çeşitli gruplar için genel bir üç parametrelili yapı-özellik ilişkisi geliştirmişlerdir. Önerilen üç parametrelili modelin, çeşitli kimyasal yapıya sahip noniyonik yüzey aktif maddeler için kritik misel konsantrasyonunu önemli bir güven aralığında tahmin etmek için kullanılabileceğini göstermişlerdir [Huibers et al., 1996].

1997 yılında Huibers ve arkadaşları yaptıkları çalışmada anyonik yüzey aktif maddelerin moleküler yapısı ile kritik misel konsantrasyonu (cmc) arasındaki ilişkileri, kantitatif bir yapı-özellik ilişkisi yaklaşımı kullanılarak incelemiştir. 119 anyonik yapı için ölçülen cmc değerleri incelenmiştir ve kolerasyon katsayısı olarak 0,94 değerini elde etmişlerdir. Bu regresyonlarda kullanılan tanımlayıcılardan yola çıkarak, cmc'nin öncelikle hidrofobik kısmının boyutuna (hacim veya yüzey alanı) ve daha az oranda ise yüzey aktif madde molekülünün yapısal karmaşıklığına bağlı olduğu sonucuna varılmıştır [Huibers et al., 1997].

2002 yılında Zhengwu Wang yaptıkları çalışmada sulu çözelti içindeki noniyonik yüzey aktif maddelerin kritik misel konsantrasyonunun (cmc) tahmini için bir kantitatif yapı-özellik ilişkisi (QSPR) incelenmiştir. Bu mevcut çalışma, yarı ampirik moleküler orbital yöntemi ve tanımlayıcı olarak moleküllerin hidrofobik kısmının sıfır dereceli Kier ve Hall indeksi KH0 ile hesaplanan toplam moleküler enerjisi (ET), oluşum entalpisi (H), en düşük boş moleküler yörünge (LUMO) ve yüzey aktif maddelerin dipol momenti (μ) kullanılarak gözlemlenen cmc değerlerine dayanmaktadır. Geliştirilen modelde R²'nin 0,99'dan büyük olduğu görülmüştür. Cmc'nin logaritmasının, hidrofobik segmentin sıfır dereceli Kier ve Hall indeksinin ve noniyonik yüzey aktif cisimlerinin toplam enerjisinin (veya oluşum entalpisinin) artmasıyla azaldığı görülmüştür ve dipol momentinin cmc üzerindeki etkisinin ihmal edilmesinin önemli bir hata oluşturmayacağı görülmüştür [Wang et al., 2002].

2004 yılında Li ve arkadaşları “QSPR yaklaşımı ile anyonik yüzey aktif maddelerin kritik misel konsantrasyonunun tahmini” isimli çalışmalarında bir yapısal tanımlayıcı ve iki kuantum kimyasal temel alınarak anyonik yüzey aktif maddelerin kritik misel konsantrasyonu için önemli bir kantitatif yapı-özellik ilişkisi (QSPR) modeli ve çoklu doğrusal regresyon tekniği kullanılarak tahmin edilmiştir. Anyonik yüzey aktif cisimlerinin cmc'si için önemli bir QSPR modeli, hidrofobik-hidrofilik kısımların toplam atom sayısına (NT), segmentin dipol momentine (μ) ve segmentteki maksimum spesifik karbon alım oranı (Q_C -max) dayalı olarak geliştirilmiştir. Elde edilen modelin geçerliliği veri setine dahil olmayan dokuz anyonik yüzey aktif madde ile test edilmiştir ve kolerasyon katsayısı 0,98 olarak bulunmuştur [Li et al., 2004].

Roy ve arkadaşları yaptıkları çalışmada, hesaplanmış hidrofobiklik tanımlayıcıları ile genişletilmiş topokimyasal atom (ETA) indeksleri kullanarak 37 anyonik yüzey aktif maddenin moleküler yapıları ve kritik misel konsantrasyonu (CMC) arasındaki ilişkiyi kurmak için kantitatif yapı-özellik ilişkisi (QSPR) modelleri geliştirilmiştir. Bu çalışma sonucunda hidrofobik karakterin, anyonik yüzey maddelerin CMC'si için model geliştirmede önemli bir rol oynadığı, farklı ETA parametrelerinden de kanıtlandığı üzere yüzey aktif maddelerin dallanma karakteri ve elektronik karakteristiğinin de önemli olduğu gözlemlenmiştir [Roy. et al., 2012] [Roy. et al., 2013].

3. DETERJANLAR

3.1. Deterjanların Tarihçesi

1831 yılında basit kimya aletleri olan karanlık bir laboratuvarında Firemi isimli bir Fransız, zeytinyağının üzerine sülfürik asit dökerek elde ettiği maddenin suda köpürmesi sonucu meydana gelen tepkimenin ilgisini çekmesi üzerine araştırmalarını yoğunlaştırır. Maddenin yağları da temizlediğini fark ettiği zaman bu maddenin sadece köpürmesi yönünden değil fakat fonksiyon olarak da sabuna benzediğini anladı. İşte ilk deterjan o tarihte böyle yapılmıştır. (Sentetik yıkama ve temizleme maddelerinin tarihçesi hakkında bir araştırma yapmış olan Herbert Manneck'e göre deterjanın hakiki mucidi 1831 senesinde ilk sülfonatı imal eden Runge'dir) Fakat Firemi'nin maddesi arı değildi ve sabun karakterini veren moleküle bağlı diğer başka moleküller vardı. Kendisi bu fazlalıkları esas molekülden ayıramadı. İlk icat edilen deterjanların temizleyici yönden hiçbir üstünlükleri yoktu. Fakat yüzey aktif maddeler olduğu için yani su yüzey gerilimini kırıp suyun dağılımını ve emilmesini kolay sağladıkları için ıslatma güçleri vardı ve 1830 yıllarında tekstil sanayisinde bu amaçla kullanılmaya başlandı. Örneğin koyun yünü çok yağlı bir madde olduğu için yıkamak, ıslatmak gayet güçlü. Fakat sülfatlı yağlar bunu kolaylıkla sağlayabiliyorlardı. Sülfatlı yağların diğer faydalı yönleri ise sabunlar gibi sert sudan etkilenmemeleriydi. Sülfatlı yağlar en sert suda bile fonksiyonlarını rahatlıkla yerine getirmektedirler. 19.yüzyılın sonlarına doğru nebati ve hayvani yağlarda, fazla talepten dolayı, bir kaynak kıtlığı yaşandı. Buna sebep Avrupa ve Amerika'da hızlı nüfus artışı ve bu sıralarda margarinin icadıdır. Bundan dolayı sabuna karşı talep inanılmaz derecede artmıştır. Bu şartlar altında tabii yağlara dayanmayan ve sabunun yerini alacak bir maddenin icadı elzem olmuştur. 1913 yıllarında Belçikalı bir kimyacı olan Reychler laboratuvarında ilk defa arı olarak ıslatma karakteri bakımından aynı sabuna benzeyen sentetik bir deterjan yaptı. 1916 yılında bir Alman firması naftalin, isopropil alkol ve sülfürik asidi kostik soda ile nötralize ederek alkil aril sülfonat yapmıştır. Bu deterjan ticari hayatta Nekal A adı altında satılmıştır. İşte arı sayılabilecek şekilde ticari amaçlarla yapılmış ilk deterjan bu şekilde geliştirilmiştir. Buna rağmen Nekal A fazla başarılı olmamıştır çünkü tekstil maddelerinden solid parçaları ve yağ maddelerini iyice sökmemiştir. Her şeye rağmen gayet iyi bir yüzey aktif madde olarak su ile yağı emilsiyon haline getirmiştir. Savaş biter bitmez İngiltere bütün gücünü kimya sanayiine vermiştir. Almanya'da da

İngiltere'ye paralel çalışmalar başlatılmıştır. 1920 yıllarında sentetik olarak yüzlerce yüzey aktif madde yapılabileceği anlaşılmıştır. Artık; asitli veya fazla tuz ihtiva eden ortamda görevini tam olarak yapmayan sabun yerine esaslı bir deterjanın bulunması zaman sorunu olmuştur. II. Dünya Savaşı ile tabii yağların daha kıt hale gelmesi ve sabunun karne ile satılması sentetik deterjana verilen önemi hızlandırmıştır. İlk deterjanlar genellikle pekiyi temizlemeyen zararlı maddelerdir. Fakat 1930 yıllarında petrol ürünü olan benzen veya benzen halkalı hidrokarbon sayesinde sentetik deterjanlar yapılmıştır. Bunlar hemen piyasaya yerini almış ve her gün daha fazla yayılmaktadır. Bugün sentetik deterjan sanayii çok geniş bir alana yayılmış olup üzerinde halâ gelişmeler yapılmaktadır. Son zamanlarda biyolojik parçalanabilir yumuşak deterjanlar ve enzimli deterjanlar icat edilmiştir. Türkiye'de ilk deterjan kullanılma tarihi 2. Dünya Harbinden önceki yıllara kadar dayanmaktadır. 2. Dünya Harbinden evvel İzmirli bir tüccar olan Louis Saliba'nın Almanya'dan Persil marka deterjan ithal ettiği bilinmektedir. Ancak; Türkiye'de ilk üretim 1933 yılında Lili markası altında Atom Kimya Sanayii tarafından yapılmıştır. Bu deterjan basit karıştırma, yani "kuru nötralizasyon" ile yapılmıştır. Hemen arkasından İstanbul'a aynı metot ile üretime başlanmıştır. Kule ile deterjan tozu üretimine ilk defa Puro Sabun Sanayii A.Ş. de başlanmıştır. Fakat basit metotla yapılan deterjanlar çok daha ucuz olduğu için bu kule bir müddet sonra işletilmemiştir. 1961-1963 yıllarında deneme üretimine başlayan bir başka firma bu kuleden faydalanmıştır ve üretimin devamlılığı sağlanmıştır. Halen Türkiye'de 6 adet kule vardır. Bunlar sırasıyla, Puro Sabun Sanayii A.Ş., Kimya Teknik, M.Zeki, Obdan ve Ortakları Koli, s-ti., Mintax, Tariş ve Türkiye Yağ ve Mamulâtı A.Ş. ,TURYAĞ'ın kuleleridir. Bu kulelerden faydalanılarak birçok markalarda toz deterjan üretilmektedir. 1960 yıllarında Türkiye'de deterjan yeni sayılabileceği için sıkı bir üretim ve kalite kontrolü bulunmamaktaydı. Üretilen bazı malların alkali veya sabit olmaları yüzünden deri üzerinde alerji yaptıkları tespit edilmiştir. Deterjanların tarihine bakacak olursak ilk örneklerinin M.Ö. 2200'de yapılmış olduğunu ve bu deterjan örneğinin Çin tarçını yağı ile çeşitli alkalileri içerdiği bilinmektedir. Buna ek olarak sabunun ilk defa M.Ö. 600'lü yıllarda Fenikeliler tarafından yapıldığı kabul edilmektedir. Fenikeliler tarafından kullanılan ilk sabun örneğinin Mürver ağacı, Keçi Donyağı ve Odun kökü ile yapıldığı bilinmektedir. Sabunun yaygın olarak Roma İmparatorluğu döneminde kullanıldığı görülmüştür. Romalıların sabunu Kelt'lilerden öğrendikleri varsayılmaktadır. Kelt'lilerin kullandıkları sabun örneklerinin hayvansal yağ ve bitki külleri kökenli ürünlerden

üretmişlerdir. İlk olarak sabuna "Saipo" adını verdikleri ve bu kelimenin sonradan "Soap" olarak değiştiği bilinmektedir. Sabunun milattan sonra ilk yüzyıllarda ilaç olarak kullanılmış daha sonraları şampuan gibi kullanılmaya başlanılmıştır. 73 yıl önce sunulan ilk çamaşır deterjanı ile suyun molekül yapısının değiştirebileceği keşfedilmiştir. Temizlemenin daha başarılı olabilmesinin yüzey gerilim seviyesinin azaltılması gerektiği ve bunun yüzey aktif madde kullanımı ile yapılabileceği tespit edilmiştir. [Smulders et al., 2003].

Pompeililere ait yapılan kazılarda bulunan araçlardan yola çıkarak sabun üretim yerleri bulunmuştur. Bu bulgulara ek olarak volkanik kül oluşumlarında yaklaşık 2000 yıllık sabun parçacıkları meydana çıkarılmıştır. Kimyacı Cabir İbni Hayyam'ın M.S 800'lü yıllara dayanan yazılarında da sabunun temizleyici madde olarak kullanıldığı görülmüştür. Orta çağda sabun üretimi Fransanın Marsilya kentinde üretildiği bilinmektedir. Bu bölgedeki sabun üretiminin bölgede bulunan Phocaenler tarafından getirildiği düşünülmektedir. Marsilyadan sonra İtalyanın Cenova ve Venedik ile İspanya'nın Madrid kenti yakınlarında üretimlerin yapıldığı bilinmektedir. Sabun üreticiliğinin ilerlemesinin en yoğun olduğu ülke ise orta çağda Almanya olmuştur.

3.2. Deterjan Bileşenleri

Tanım olarak deterjan bir veya birden fazla yüzey aktif maddeyi bünyesinde ana bileşen olarak barındıracak şekilde oluşturulmuş temizleme bileşeni olarak nitelendirilebilir. Genel olarak bir bileşenin deterjanlık fonksiyonları sergileyip sergilemediği birtakım kimyasal ve fiziksel süreçler ile belirlenebilir. Bu süreçler başlıca; ıslatma, nötrleşme, çözme, sabunlaştırma, emülsiyonlaştırma, dağıtma ve geri bağlanmayı durdurmak olarak nitelendirilebilir.

Islatma suyun yüzeyinde meydana gelen gerilimin yüzey aktif maddelerin etkileşimi sonucu azalması ile mevcut suyun etki ettiği yüzeyin artması sonucu kimyasal ürün ve lekenin birbiri ile etkileşiminin artması olayı olarak belirtilebilir.

Kirlerin büyük bir bölümünün asit yapı sergilemesinden dolayı temizleme amacıyla kullanılan deterjanların bazik davranış sergilemesi için alkali türde yapılar içermesi gerekmektedir. Kullanılacak olan bu alkali türlerin dozajı etki edeceği kumaş vb. tekstil ürününe hasar vermemesi için seviyesi büyük önem arz etmektedir. Alkali grupların kullanımı sonucu polyester yapıda lifler hasar görmektedir. Buna ek olarak yüksek bazik ortam yıkamanın durulama seviyesinde olumsuz etkilemektedir.

Çözünme süreci ortamın pH ve sıcaklık değerlerindeki yükseliş ile artış gösteren bir parametredir. Ortamın optimum sıcaklık ve pH değerlerine ulaşması halinde de yüzey aktif maddelerin performansı paralel olarak artacaktır.

Sabunlaşma özelliği olmayan yağların temizlenebilme özelliğine sahip olmaları için küçük parçalara ayrılmaları emülsiyonlaştırma işlemi ile olmaktadır.

Asit özellikteki lekelerin temizlenmesinde ekonomik ve leke çıkarma anlamında en iyi yöntemlerden biri de ağartıcı kullanmaktır. Genel olarak ağartıcılar rengi çıkartarak veya kiri ortamdan uzaklaştırarak etki gösterirler. Buna ek olarak düşük oranda ağartıcı kullanımı bile ortamdaki bakterileri etkisiz hale getirmeye yetmektedir. Bu parametrede göz önüne alınarak kullanılan deterjan miktarı kiri ortamdan uzaklaştırma ve tekstil ürününe en az hasar verecek düzeyde tasarlanmalıdır.

Katı halde bulunan kirlerin bağlandığı yüzeylerden ayrılması dağıtma özelliği ile sağlanmaktadır. Yüzey aktif maddelerin etkileşim sağlaması ile dağıtma özelliği sağlanmaktadır. Kirin yapıştığı yüzeyden ayrıldıktan sonra tekrar yapışmasını önlemek amacıyla yüzey aktif maddeler (anyonik) kullanılmaktadır. Diğer yüzey aktif maddeler (Katyonik, Noniyonik) bünyesinde karboksimetilselülozlar bulunan deterjanlar ise bu yapılarıyla temizleme sürecini gerçekleştirilmektedir [Arpaway, 1992].

3.3. Deterjanların Çevresel Etkileri

Deterjanların insan vücuduna ve yaşanılan çevreye zararlı etkileri 1950’li yıllarda farkına varılmıştır. Bu farkındalık deterjanlar üzerine yapılan çalışmalar sonucu deterjanlarda bulunan etken maddelerin doğada uzun süreler parçalanmadığı gerçeğini ortaya çıkarmıştır. Bu olumsuzluklardan sonra yeni üretilen deterjanlarda farklı madde arayışlarına gidilmiştir [Kumbur et al., 1989].

1986 yılı itibarıyla deterjan üretiminde Sodyum Dodesil Benzen Sülfonat (DDB) kullanılmıştır. 1986 yılından sonra deterjan üretiminde kullanılan etken maddelerin en az %50 sinin doğada parçalanabilir olması gerekliliği hükmü getirilmiştir.

1965 yıllarının başında deterjanların suda birikimini önlemek amacıyla Linear Alkikbenzen Sülfonatlar (LAS) üretilip geliştirilmiştir. LAS yapılarının moleküler yapısı bu maddelerin diğer yapılara oranla daha kolay parçalanabilmesini sağlamaktadır.

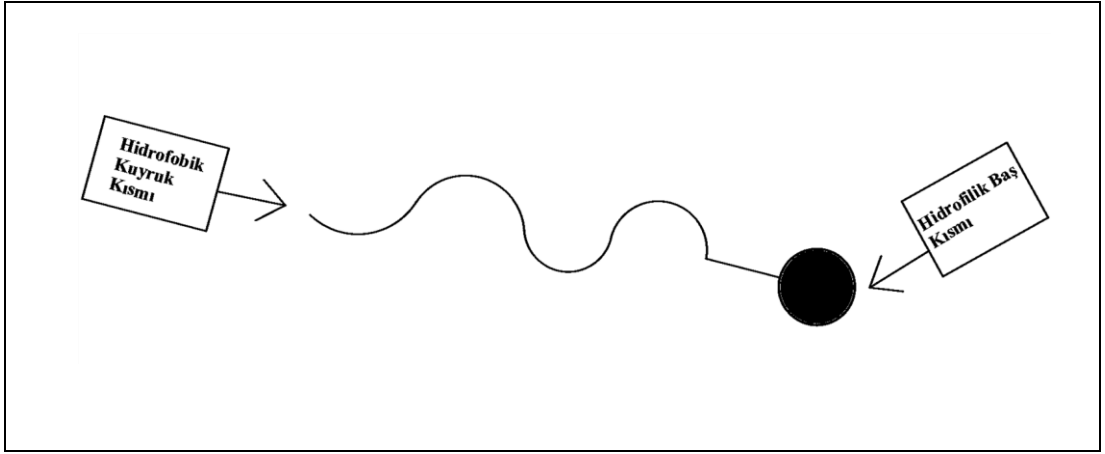
Deterjanlar içerdikleri ABS Fosfat ve farklı beyazlatıcı kimyasal ürünleri iç sular ve denizlere karışmakta, yeraltı su depolarına nüfuz etmektedir. LAS VE ABS'nin canlı yapılarda meydana getirdiği yıkımlar ekosistem için son derece önemlidir. Bu etkiler ortamda canlı tür habitat dengesini bozarak belirgin değişiklikler ortaya çıkarmakta, su bulanıklığı artmakta, sedimantasyon artışı ile mevcut su miktarı göl ve baraj yapılarında azalmakta ve H₂S oluşumu ile birlikte mevcut suların arıtmaları zorlaşmakta, suda tat ve koku problemleri oluşmaktadır. Deterjan üretiminde ağartıcı madde kullanımını %50 azaltarak sera gazı emisyon miktarından kaynaklı olan etkisini %50 azaltacağı düşünülmektedir [Büyükbay et al, 2010].

Deterjan ürünlerinin toprak ile temas etmesi sonucu ortaya çıkan olumsuz sonuçlardan en olumsuzunu toprağın tuz oranını artırmasıdır. Deterjan ürünlerinin toprağa etkisini etkileyen başlıca parametreler; toprağın geçirgenlik seviyesi, bünyesindeki organik madde miktarı, yeraltı suyu derinliği vb.dir. Deterjan kirliliğinin toprakta devam etmesi ile toprağın biyolojik ekosistemi bozularak hasar görecektir. Bu hasar sonucu topraktaki mineraller, mikroorganizmalar başta olmak üzere birçok bileşeni geri dönüşümü mümkün olmayan bozulmalara girecektir.

Deterjan yüksek aktif maddelerinin çevrelerindeki sularla temas etmeleri halinde ortamda etkileşim sonucunda ayrışarak çözünmüş oksijeni kullanırlar. Bu durumda su habitatında yaşayan birçok canlı için tehlikeli durum oluşturmaktadır.

4. YÜZEY AKTİF MADDELER

Yüzey aktif madde kavramı suyu çeken hidrofilik ve suyu iten hidrofobik yapıları birlikte kapsayan homojen olmayan uzun bir zincir yapısına sahip molekül yapısını belirtmektedir. Yüzey aktif madde (YAM) hidrofobik ve hidrofolik yapılarını değiştirerek birçok özellik eklenebilmektedir. (Islanma, dağıtma, köpürme kontrol vb.) [Bajpai and Tyagi, 2007]. Deterjanların ana maddesini oluşturan yüzey aktif maddeler tanım olarak su içerisinde veya bir çözelti içerisinde çözündüğünde genellikle yüzey gerilimini düşüren bir etkiye sahiptir.



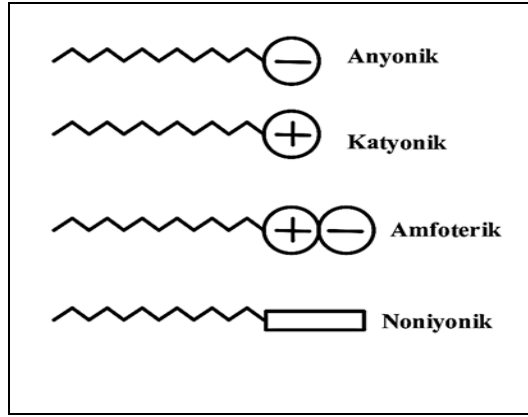
Şekil 4.1: Amfilik molekülün şematik gösterimi.

Bununla birlikte iki bileşenin yüzeyleri arasındaki gerilime de etki etmektedir. Yüzey gerilimdeki azalma yıkama işlemlerinde köpürme etkisi yaratarak temizlemeyi kolaylaştırmaktadır [Büyükbay et al, 2010].

Çözücü içindeki yüzey aktif madde (YAM) yoğunluğu kritik sınır değerlerinin üzerine çıktığında iyon veya molekül yapılarından meydana gelen misel oluşumlarının meydana getirirler. Belirtilen bu misel yapılarının formu, yerleşim şekli ve tip olarak farklılık gösterip göstermediği kesinlik kazanmamıştır. Moleküllerden misel yapılarının meydana gelmesinin tekrarlı olduğu varsayılmaktadır. Çözeltinin koloidal yapıya haslığı misel yapılarının büyüklüğüne bağlıdır. Çözeltinin iletkenliğini etkileyen parametre ise yüzey aktif maddenin iyonize duruma sahip olup misel yapısının yüklendiği durumdur. Yüzey aktif maddelerin iyonize olduğu durumlarda koloidal elektrolit özelliğinde değerlendirilebilir [Arpapay, 1992].

4.1. Yüzey Aktif Maddelerin Sınıflandırılması

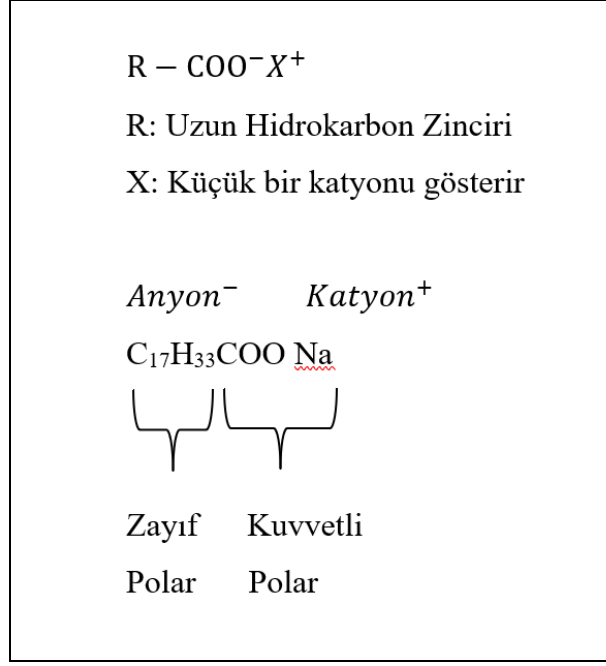
Genel olarak yüzey aktif maddeleri sınıflandırma yapılacak olsa hidrofilik yapıya sahip uç bölgelerinin yük duruma göre; anyonik, katyonik, amfoterik ve non-iyonik olarak sınıflandırılmaktadır. Hidrofobik yapı uzun hidrokarbon zincirdir. Buna ek aşağıda olarak yer alan yapılarıda kapsayabilir [Roy, 2012].



Şekil 4.2: Yüzey Aktif Maddelerin şematik gösterimi ve sınıflandırılması.

4.1.1. Anyonik Yüzey Aktif Maddeler

Hidrofilik yapıya sahip baş kısmı negatif yük barındıran Yüzey aktif maddelerdir. Yüzey madde olarak anyonik Yam'lerin kullanımının ana sebepleri imalatının diğer YAMlere göre daha basit olması ve ekonomik açıdan daha uygun olmasıdır. Belirtilen bu sebeplerden dolayı anyonik sınıftaki yüzey aktif maddeler başka sınıftaki yüzey aktif maddelere göre çok daha fazla miktarlarda kullanılmakta olup deterjan bileşimlerinin birçoğunda yer bulmaktadır. Deterjanlarda maksimum temizleme özelliği kazandırması için hidrofobik baş kısım zincir 12-16 karbon atomuna sahip ve doğrusal formda olmalıdır. Kullanılacak olan karşıt iyonla göre su çözünürlüğü(sodyum), yağ çözünürlüğü(kalsiyum) artmaktadır.

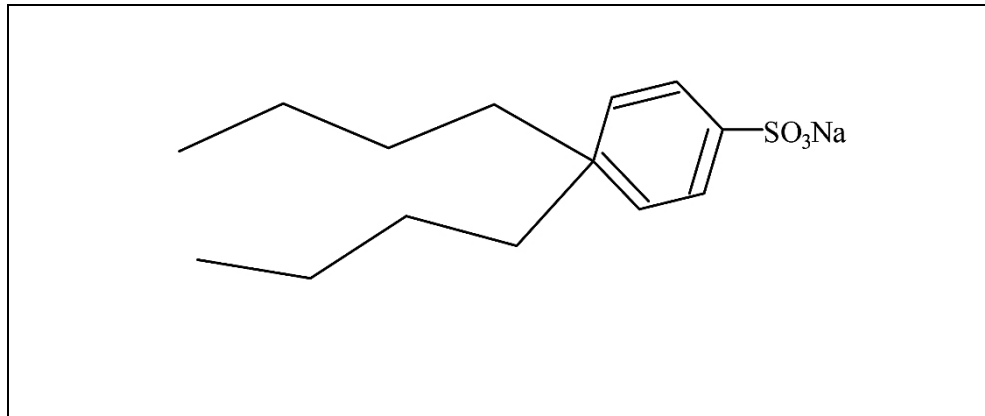


Şekil 4.3: Anyonik yüzey aktif maddelerin genel formülü.

Yüzey aktif maddelerden başlıcaları; sülfatlar, polieter, karboksilatlar, sülfonatlar, Isotionatlar, Sarkosinatlar (amid sarkosinatlar), Sülfoksinatlar ve sülfoksinamidlerdir.

Belirtilen yüzey aktif maddelerden en yoğun kullanılanın Lineer Alkilbenzen Sülfonat olmasının sebebi diğer anyonik maddelere göre daha düşük maliyet daha fazla performans sağlaması olarak biliniyor.

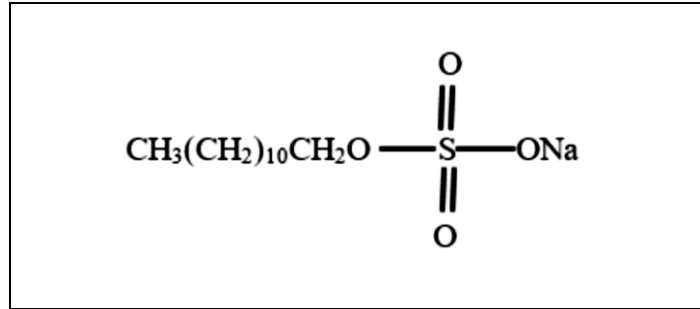
Lineer Alkilbenzen Sülfonat (LAS) maliyetinin düşük olması ve yüksek performans sağlaması nedeniyle en çok kullanılan yüzey aktif madde olarak bilinmektedir (Şekil 4.4).



Şekil 4.4: Lineer alkil benzin sülfonat.

Normal yapıdaki sabun numunelerine oranla daha dayanıklı bir yapıya sahip olmasına rağmen su sertliğine karşı hassasiyete sahiptir. Bu sorunun önüne geçmek için iyonik olmayan yüzey aktif maddeler ile birleşim yapılması veya magnezyum iyonlarını bağlayan yapı oluşturucular ile birleştirilmelidirler.

Bir diğer yaygın olarak kullanılan anyonik yüzey madde ise Sodyum Loril Sülfattır. Geniş bir kullanım alanına sahiplerdir (Deterjan, sabun, şampuan, nemlendiriciler ve losyonlar). Bunlara ek olarak gıda katkı maddesi olarakda kullanılmaktadır.



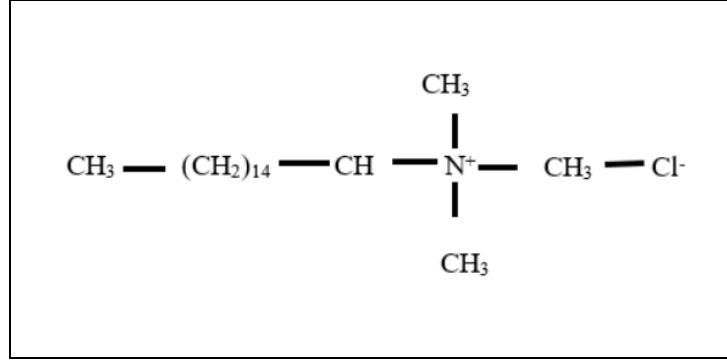
Şekil 4.5: Sls'nin yapısı.

Anyonik sınıftaki yüzey aktif maddeler, alkil benzen sülfonat, amid sülfonat ve yağ alkolü sülfat olarak gruplandırılabilir [Munson et al., 2004].

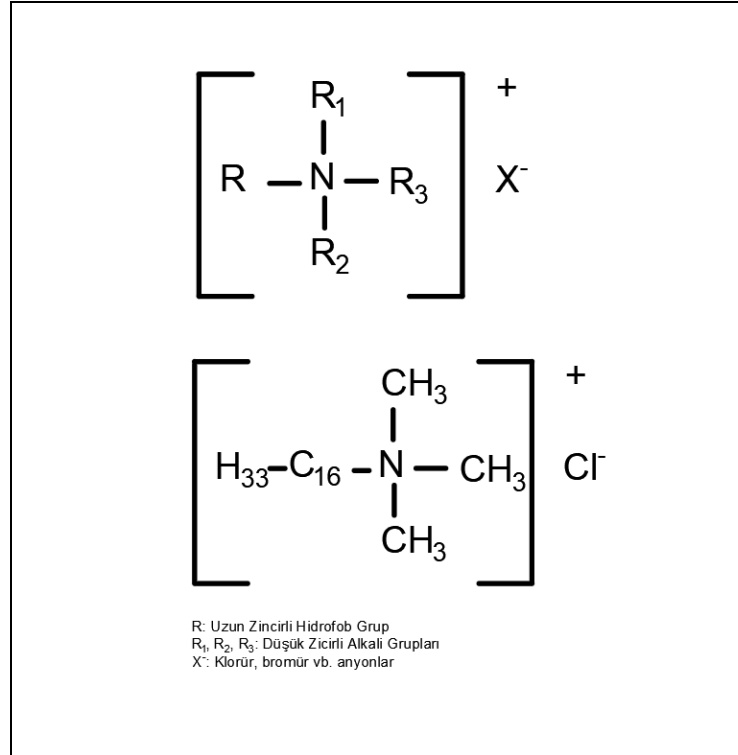
4.1.2. Katyonik Yüzey Aktif Maddeler

Organize bazların tuzları olarak da adlandırılan ve hidrofilik yapıdaki baş kısmı pozitif yüke sahip yüzey aktif maddelerdir. Dokulu yüzeylere tutunmalarının iyi olmasının sebebi pozitif yüke sahip olmalarından kaynaklanmaktadır. Bu yüzey aktif maddeler genel olarak temizlik amacıyla ve çamaşır yumuşatıcı amacıyla kullanılmaktadır. Sanitasyonda tercih edilmeleri ise antiseptik özelliklerini iyi olmasından dolayıdır [Gültekin et al., 2003].

En fazla kullanıma sahip olan katyonik yüzey aktif maddeler setiltrimetil amonyum klorür ve alkil dimetil benzil amonyum klorittir.



Şekil 4.6: Setil trimetil amonyum klorürün kimyasal yapısı.



Şekil 4.7: Katyonik yüzey aktif maddenin genel formülü.

4.1.3. Amfoterik Yüzey Aktif Maddeler

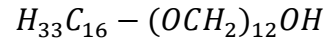
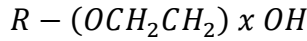
Amfoterik sınıftaki yüzey aktif maddeler, anyonik kısmında bir negatif yük ve katyonik kısmında bir pozitif yük taşımaktadır [Kaya vd, 2000]. Negatif ve pozitif yük durumları bulundukları çözeltinin pH seviyesine bağlı olarak değişmektedir. Bazı davranışlı çözeltilerde negatif, asidik davranışlı çözeltilerde pozitif bir yük kazanarak katyonik davranış sergilemektedir.

Amfoterik yapıdaki yüzey aktif maddelerin aktivitesi yüklenmiş kısımlar arasındaki mesafeye bağlı olmakla birlikte isoelektrik notasında en yüksek değerde

olmaktadır. Belirtilen yüzey aktif maddelerin pH seviyesi ve yükteki değişimleri köpürme, temizleme ve ıslatma gibi bünyesindeki özelliklere doğrudan tesir etmektedir. [Bajpai et al., 2007]. Amfoterik maddelere iyonik olmayan yüzey aktif maddelere isoelektrik noktada çok benzerdir. Bu noktanın alt veya üst seviyesindeki özellikler ise anyonik ile katyonik YAM lere doğru yönelmektedir [Bajpai et al., 2008].

4.1.4. Non-İyonik Yam

Non-iyonik yüzey aktif maddeler hiçbir elektriksel yükü yoktur. Non-iyonik YAM'lerin yağ bazlı lekelerde etkili olması emülsiyonlaştırma yapısını bünyesinde barındırmasından kaynaklanmaktadır. Belirtilen bu yüzey aktif maddeler polyster esaslı sentetiklere yapışarak kir ve boya vb. yapılardan korunmasına olanak sağlar. Bu amaca istinaden temizlik ürünlerinde kullanımı oldukça yaygındır. Tercih edilmesine sebep olan özelliklerine ek olarak bu maddelerin olumsuz yönlerinden en önemlisi ise kir tabakasının yüzeyden ayırdıktan sonra, yüzeyden uzak tutabilmek için yeterli güce sahip olamamasıdır. En sık kullanılan non-iyonik yam yapısı ise alkil fenol etilen oksit kondensatlarıdır.



R: Uzun Hidrofob Zincir.

X: Etilen oksit molekül sayısı (etoksillenme derecesi)

Şekil 4.8: İyonik olmayan yüzey aktif maddenin genel formülü.

4.2. Deterjanlarda Bulunan Yüzey Aktif Maddeler

Başlıca temizlik amacı kullanılan deterjan, sabun, şampuan, yüzey temizleyici ve diş macunlarının bileşenlerinde yer alan temel yüzey aktif maddelerin en önemlilerini sıralayacak olursak; alkil sülfat, alkil polietoksietilen sülfat, Polioksietilen alkil eter ve linear alkil benzin sülfonat bunların başında yer alır [Bajpai et al., 2008]. Belirtilen bu yüzey aktif maddelerin birincil amaçları misel yapıları oluşturduktan sonra mevcut kirleri ortamdaki ayırmaktadır. Bu belirtilen özelliğe ek

olarak köpük oluşturmak ve kir yapılarının tekrardan yapışmasının önüne geçmesi beklenmektedir.

Belirtilen özelliklerin etki gösterebilmesi için bazı uygun değerler vardır. Bu şartlar başlıca ortam sıcaklığı, uygulanan süre, su tipi, kimyasal ürün tipi, ürün yoğunluğu ve mekanik etkidir. Bu özelliklerin bir kısmı yıkamayı gerçekleştirecek makineye bir kısmı ise kullanılacak kimyasal ürüne bağlı olarak değişmektedir [Riggs et al, 2005].

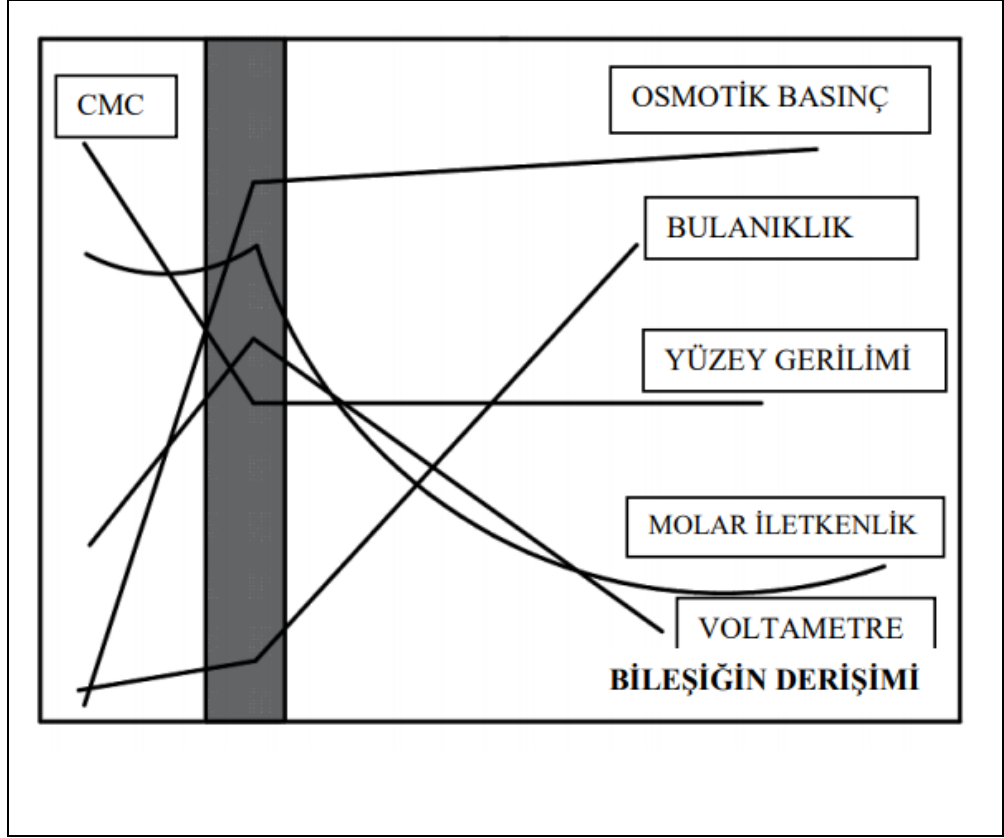
Deterjanları genel olarak evde kullanmak amaçlı ve sanayi de kullanmak amaçlı olarak sınıflandırmak mümkün olabilir. Ev tipi deterjan sınıfındakileri: Çamaşır yıkamada, bulaşık yıkamada, şampuan olarak ve vücut temizliği amaçlı kullanılanlar olarak sıralayabiliriz. Sanayi tipi ürünleri ise çok yönlü temizlik amaçlı ve ev tipi kullanılan çamaşır deterjanlarının büyük ölçekli yıkamalarda kullanılan ürünlerdir.

4.3. Kritik Misel Konsantrasyonu

Misel kavramını yüzey aktif maddelerin bir uçta negatif bir uçta pozitif uç bulunan polar diye tabir edilen bünyesinde çözünmüş özdecikleri barındıran yapılar içinde kendiliğinden birleşerek oluşan en basit yapı olarak tanımlanabilir.

Polar bir yapıya sahip olan su molekülüne yüzey aktif madde ilavesi ile yüzey aktif maddenin hidrofilik kısmı ortamdaki su molekülleri ile çevrelenirken diğer bir kısım olan hidrofobik kısım ise kendilerini çevreleyen yüzeye doğru gitmeye çalışacaktır. Bu şekilde sunun yüzeyinde meydana gelen gerilim seviyeside azalmış olacaktır. Bu sürecin tekrarlanması ile yüzeyde bulunan gerilim ciddi oranda azalmaya devam eder. Yüzey gerilimi ortamın derişiminin belirli bir noktaya gelmesiyle birlikte sabitlenecektir. Bunun sebebi ise artık yüzey aktif maddeler yüzeye doğru gitmiyor kendi aralarında misel olarak tabir edilen yapıların oluşumuna başlarlar. Kritik misel konsantrasyonu (CMC) terimi ise misel yapılarının oluşmaya başladığı bu derişim değeri olarak adlandırılmaktadır.

Kritik misel konsantrasyon değeri misel oluşumuna sebep olan yüzey aktif maddenin basıncına, sıcaklık değerine ve tipine bağlı olarak değişmektedir. Misel yapılarının çözeltiler içinde oluşmaya başlaması ile meydana gelecek değişimler temsili olarak gösterilmektedir.

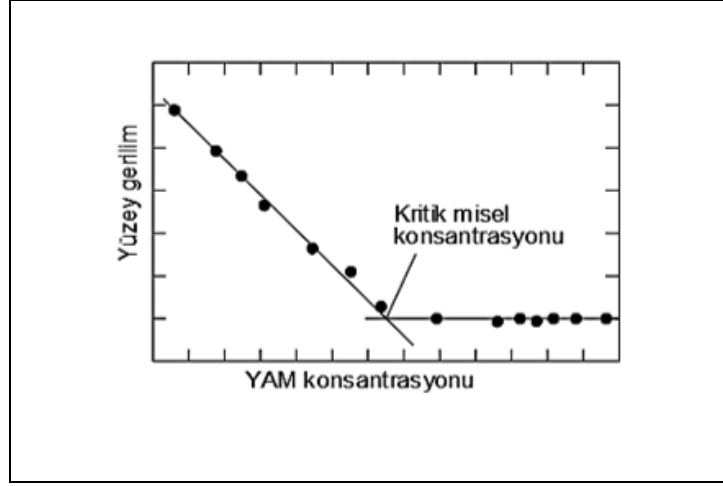


Şekil 4.9: Yüzey gerilimi- bileşik derişimi grafiđi.

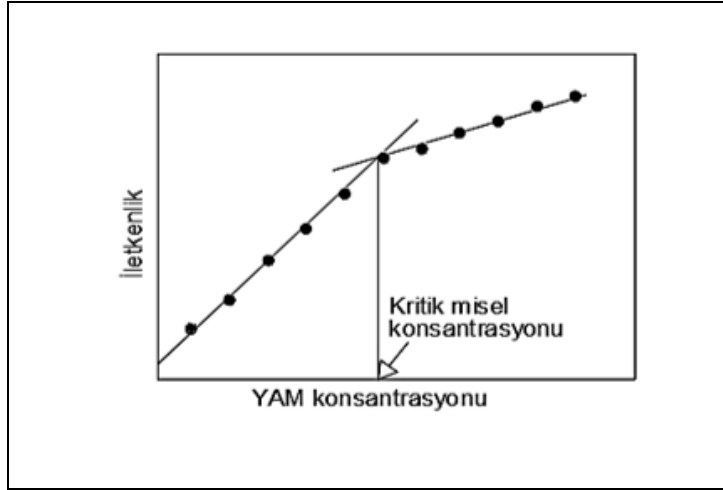
Su içeren bir çözeltide YAM'ın suya afinitesi olan kısmı suya doğru yönelir. Çözelti içerisinde yağda çözünen bir bileşen varsa YAM'ın yağa afinitesi olan kısmı yağda çözünen kısma doğru yönelir. Tüm bunların sonucunda misel yapıları oluşur.

Yüzey aktif madde çözeltileri suyu seven – yağı seven gibi karşıt davranışları gösterdiğinden basit bir çözelti gibi davranmaz, konsantrasyon ile orantılı özellikler sergiler. Düşük konsantrasyonlu çözeltilerde yüzey aktif madde stabil bir çözünme davranışı gösterirken yüksek konsantrasyona sahip çözeltilerde osmotik basınç, iletkenlik ve yüzey gerilimi gibi fiziksel özellikleri ani bir değişim göstermektedir.

Kritik misel konsantrasyonu ölçüm yöntemleri, kullanılan moleküllerin fiziksel özelliklerinde ani farklılaşmalardan esinlenerek ortaya çıkmıştır. Meydana gelen bu değişimler çözeli içinde bulunan parçacıkların sayı ve büyüklüklerindeki farklılıklar, çözünmeyen maddelerin miselar çözünmesi ve yüzeydeki gerilim kuvvetindeki değişim göstermesi ile meydana gelebilir.



Şekil 4.10: Yüzey gerilimi-YAM konsantrasyonu grafiği.



Şekil 4.11: Yüzey aktif madde derişimiyle orantılı olarak iletkenlik ve yüzey geriliminin değışimi ve grafiklerden kritik misel konsantrasyonu tayini tespiti.

Misel yapısı uygun derişim ve ortam sıcaklığında oluşur. Misel yapılarının oluşum gösterdiği derişim tanımına kritik misel konsantrasyonu mevcut sıcaklığa ise Kraft sıcaklığı denilmektedir.

5. YAPAY SİNİR AĞLARI

Yapay sinir ağı (YSA), esas olarak biyolojik bir sinir ağı yapısını temel alarak geliştirilmiş olan bilgiyi işleme tekniğidir. Ortaya çıkış amacı bilim insanlarının beyin fonksiyonlarının çalışma mekanizmasına olan ilgisi ve hayranlığı olmuştur. İnsan beyninin hem mükemmel derecede organize olarak iş yapabilmesi, karmaşık yapısı ve bunlara ek olarak yapay olarak taklit edilememesi yüzyıllardır ilgi çekiciliğini korumasına yardımcı olmuştur. Beynin çalışma felsefesini incelemek ve bunu tümüyle kopyalamak son dönemin en hayalî düşüncelerindendir [Arena et al., 1998]. Genel olarak yapay zekâ alanında amaç insanların bir durum karşısında verdiği tepkileri temel alarak bu yetileri makinelerle kazandırmaktır. Özet olarak makineleri insanlardan daha üstün hale getirmektir.

Tanım olarak YAS (Yapay Sinir Ağları) beyin yapısının sinir ağı yapısına benzer şekildeki yapısı ile öğrenilmiş olan veya gruplandırılmış verileri kullanarak yeni veriler üreten karar mekanizmasına sahip yazılımlar olarak tanımlanabilir. Örüntü tanıma, sistem tanımlama, robotik, sinyalleri işleme, lineer olmayan denetim alanları gibi birçok uygulama alanında yapay sinir ağı yaygın olarak kullanılmaktadır [Abadoğlu et al., 1999]

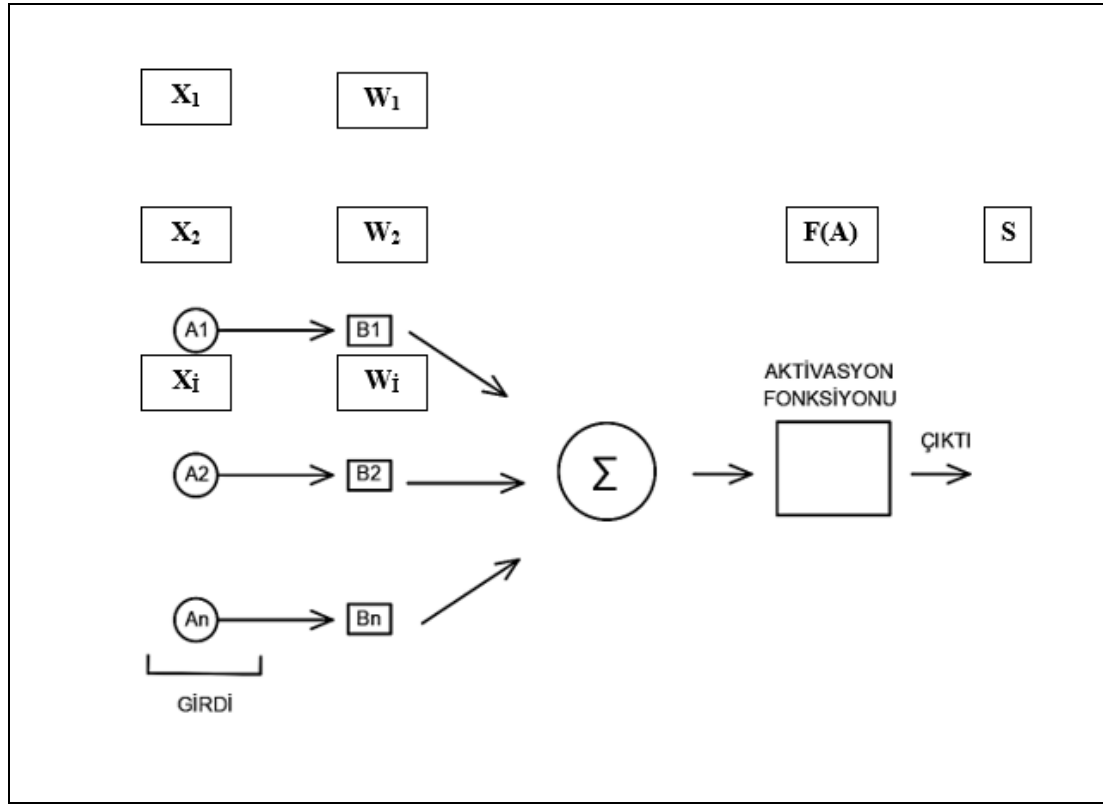
5.1. Tanım ve Tarihçesi

Yapay sinir ağlarının ilk temelleri, 1940'ların başında araştırmalara başlayan McCulloch ve Pitts tarafından 1943'te yayınlanan bir makaleyle atıldı. Ancak XOR problemi olarak bilinen yapay sinir ağı literatürünün başarısız olması nedeniyle yapay sinir ağına olan ilgi belirli bir süreliğine azalmıştır. Hopfield'in 1980'lerdeki çalışmaları, yapay sinir ağlarının geliştirilebileceğini ve geleneksel bilgisayar programlama ile çözülmesi zor olan problemler için kullanılabileceğini göstermektedir [Web1, 2019].

Yapay sinir ağlarının avantajları Non-linear olabilmesi, giriş ve çıkış eşlemeleri ile tasarım yapabilme, adaptasyon imkânı ve hataya toleranslı olması olarak açıklanabilir [Haykin, 1999].

Yapay sinir ağlarının teknik açıdan bakılarak görev tanımı açıklanacak olursa verilen bilgilere karşılık çıktı üretebilme olarak açıklanabilir. Bu belirtilen mekanizmanın çalışabilmesi için ise sistem belirli örnekler kullanılarak eğitilir. Sonra

sistemde karar mekanizmasının (Şekil 5.1) çalışabilir hale gelmesi sağlanır. Son olarak da sistemde çıktılar üretilir.



Şekil 5.1: Çok katmanlı yapay sinir ağı nöronu çalışma fonksiyonu.

Şekil 5.1’de S verilerin çıktısını ifade etmektedir. $F(A)$ aktivasyon fonksiyonunu, X_1 - X_2 - X_i sisteme yüklenen girdileri ifade etmektedir. W_1 - W_2 - W_i bağlantının vektörel ağırlıklarını ifade etmektedir [Baldi et al., 1989]. 1950 li yıllardan günümüze bilgisayar biliminde çok büyük gelişmeler olmuştur. 1980 yılları itibariyle yapay sinir ağlarında yaşanan gelişmeler bu konu için 1980 yılını dönüm noktası olarak kabul etmektedir. 1980 öncesinde yapılan çalışmalara Amerikalı Doktor Warren Sturgis McCulloch ve matematikçi Walter Pitts öncülük yapmıştır. Warren Sturgis McCulloch ve Walter Pitts tarafından geliştirilen model yapay sinir ağ modellemeye eşik mantığı modelini temel alan hesap modeli geliştirmişlerdir. Yapmış oldukları çalışmada biyolojik süreçlere ve yapay zeka uygulama yöntemi üzerine yoğunlaşmışlardır. Bu çalışmanın ardından 1954 yılında Farelly ve Cark tarafından adaptif tepki üretme terimi ortaya çıkarılmıştır. 1959 senesinde elektrik mühendisi Bernard Widrow ve doktor Marcian Hoff tarafından Madaline ve Adaline olarak isimlendirdikleri ağ modellerini geliştirmişlerdir.

1980 ve öncesi yapılan çalışmaların camelot çağı (1890-1969), karanlık çağ (1969-1980) olarak tanımlanabilir. 1980 sonrası yapılan çalışmaların dönemleri ise Rönesans Çağı (1982 – 1986), Bağlantıcılık Çağı (1988 – 1994) ve Yapay Zekâ Çağı (1998 –) olarak adlandırılabilir.

5.2. Yapay Sinir Ağları Kullanım Alanları

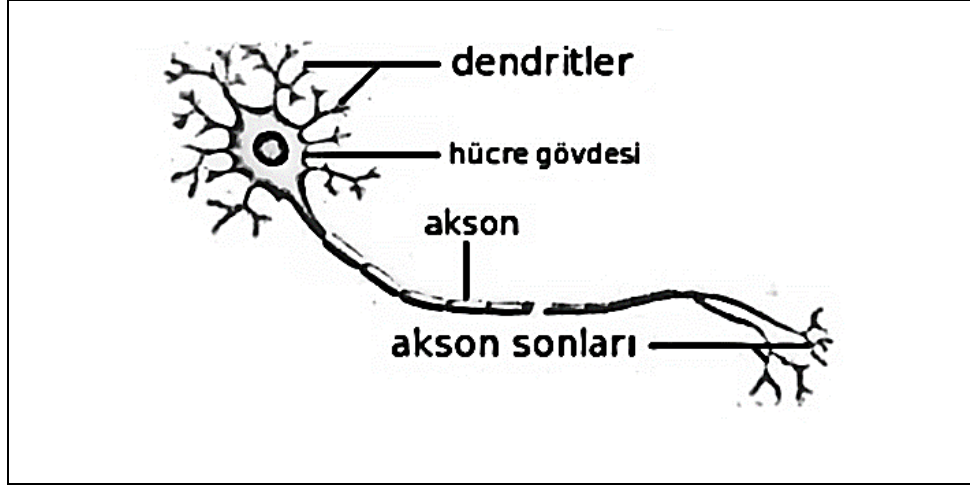
Yapay sinir ağları öğrenme özelliği sayesinde geleneksel teknikler için çok karmaşık kalan problemlere çözüm sağlayabilmekte ve daha önce karşılaşılmamış durumlarda genelleme yapabilmektedir.

Yapay sinir ağları birçok disiplin alanlarında kullanılmaktadır. Bu uygulama alanlarından bazıları; tıp alanında (kan analizlerinin sınıflandırılması, beyin modellemesi çalışmaları), otomotiv sektöründe (otomatik araç denetimi, akıllı araçlar ve robotlar için en mantıklı güzergâh belirleme, mekanik parçaların kullanım sürelerinin belirlenmesi), otomatik kontrol, uzay sanayisinde, bankacılıkta (kredi kartı hileleri saptama), elektrik alanında, arıza analizi, haberleşme, askeri teknoloji, robotik, konuşma ve ses yorumlama, karakter ve resim tanıma, güvenlik, endüstri alanında.

5.3. Yapay Sinir Ağlarının Biyolojik Yapısı

Biyolojik sinir ağlarının temel elemanı sinir hücreleridir. Bir sinir hücresinin temel elemanları ise hücre gövdesi, dendrit ve akson'dur.

Sağlıklı bir insan beyninin fizyolojik yapısında ortalama 10 milyar adet sinir hücresi (nöron) yer almaktadır. Bu sinir hücreleri yaklaşık 10 bin bağlantı ile komşu nöronlara aktarılmaktadır. Sinir hücreleri birbirlerine sinaps denilen oluşumlarla bağlıdır. Sinaps; bir hücrenin akson sonuyla diğer hücrenin dendrit kısımlarının birleştikleri noktadır. Bir sinir hücresi dendritleri aracılığıyla kendisine bağlı diğer hücrelerden iletiler alır. Bu iletiler belirli bir kritik değeri aşarsa hücre gövdesinden akson boyunca ilerleyen ve bağlı olduğu sinir hücrelerine elektrik akımı oluşur.



Şekil 5.2: Sinir ağ yapısı.

5.3.1. Yapay Sinir Ağlarının Genel Yapısı

Yapay sinir ağları nöronların kendi aralarında bağlar kurmasıyla meydana gelen yapılardır. Genel olarak yapay sinir ağ yapısı 3 başlıkta incelenir; bunlar giriş, ara ve çıkış katmanı olarak tanımlanabilir. Bilgiler ağa giriş katmanından iletilir. Ara katmanlarda işlenerek oradan çıktı katmanına gönderilir.

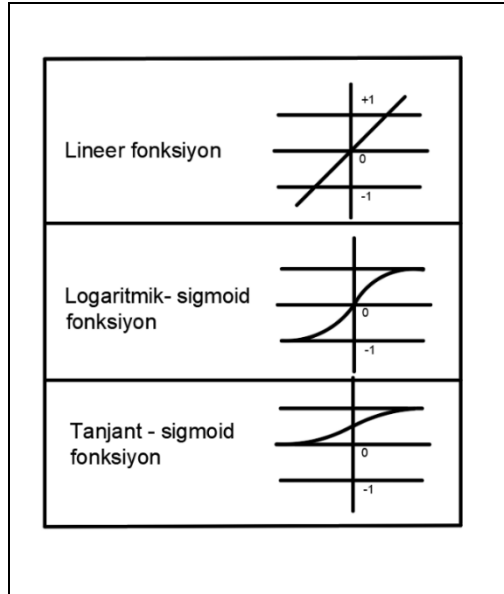
5.3.2. Yapay Sinir Ağlarının Bileşenleri

Yapay sinir ağ yapılarının başlıca 5 bileşeni vardır. Giriş bölümü yapay sinir ağlarında öğrenme işlemi girişler ile gerçekleştirilir. Girişler mevcut sistemin dışından gelebileceği gibi farklı sinir ağ yapılarından oluşan çıktı verileri de olabilir. Ağırlık kavramı mevcut bir sinir hücre yapısına çoğunlukla birçok girdi verisi gelebilir. Bütün girişlerin mevcut bir ağırlığa sahiptir ve bu değerler değişken veya sabit olabilmektedir. Toplama fonksiyonu tanımlanan bir yapay sinir hücresine gelen net girişin hesaplanması işlemidir. En yaygın kullanılan yöntem ağırlıklı toplamı bulmaktır. Toplama işleminde, giriş verilerinin her birinin bağımlı bulunduğu ağırlıkla çarpım toplamı ve sınır değerinin toplama işlemi yapılır. Tablo 5.1’de en çok kullanılan birleştirme fonksiyonu çeşitleri verilmiştir. Elde edilen bu toplam aktivasyon işlemine gönderilir.

Tablo 5.1: Birleştirme Fonksiyonları.

Toplama	Çarpım
$Net_i = \sum W_{ij} I_j$	$Net_i = \prod W_{ij} I_j$
Maksimum	Minimum
$Net_i = \text{Max} (W_{ij} I_j)$	$Net_i = \text{Min} (W_{ij} I_j)$
Çoğunluk	Kümülatif Toplam
$Net_i = \sum \text{Sgn}(W_{ij} I_j)$	$Net_i = \sum (W_{ij} I_j) + Net_{eski}$
Toplama = Nörona giren net girdi.	
W_{ij} = i ve j nöronlarının arasındaki bağlantısı ağırlığı.	
I_j = Nöronun çıktısı.	

Aktivasyon Fonksiyonu: Toplama fonksiyonu tarafından belirlenen net girdiyi olarak nöronun çıktısını belirleyen fonksiyondur. En yaygın olarak kullanılan aktivasyon fonksiyonları logaritmik sigmoid (logsig), tanjant sigmond (tansig) ve lineer (pürelin) transfer fonksiyonlarıdır. Tablo 5.1’de bu transfer fonksiyonları gösterilmiştir.

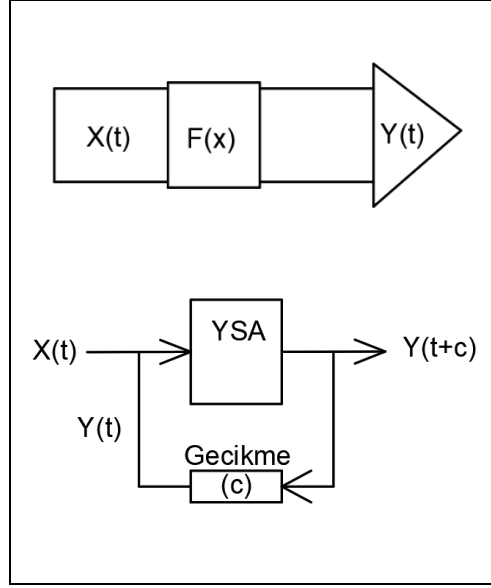


Şekil 5.3: Transfer fonksiyonları.

Lineer fonksiyon doğrusal bir problemi çözmek amacıyla kullanılan doğrusal fonksiyon, hücrenin net girdisini doğrudan hücre çıkışı olarak verir. Doğrusal aktivasyon fonksiyonu matematiksel olarak $y=v$ şeklinde tanımlanabilir. Tanjant – sigmoid fonksiyonu uygulamalarda çok kullanılan aktivasyon fonksiyonlarından biridir. Çift kutuplu fonksiyon olarak da bilinir. Sigmoid fonksiyonu sigmoid fonksiyonları en çok tercih edilen aktivasyon fonksiyonlarından biridir. Türevlenebilir bir fonksiyon olduğu için öğrenme işlemini gerçekleştirebilecek bir fonksiyondur. Ayrıca iyi bir sınıflandırıcı olarak da kullanılabilir. Bir avantajı da her zaman $[0,1]$ aralığında bir değer üretir. Dezavantajı ise fonksiyonumuzun x 'lerde gerçekleşen değişimlere y değerleri küçük tepkiler verebilir. Başka bir deyişle türev değerlerinin bu bölgelerde çok küçük olma ihtimali doğar. Bu da öğrenme ihtimalinin çok küçük olmasına sebep olur. Çıkış aktivasyon fonksiyonlarını n oluşturduğu çıkış bilgileridir. Bu bilgi, dış dünyaya, başka bir hücreye ya da kendisine giriş bilgisi olarak iletebilir.

5.3.3. Yapay Sinir Ağlarının Sınıflandırılması

Yapay sinir ağ yapıları bünyesinde barındırdığı nöronların bağlanma şekillerine göre ileri besleme ve geri besleme olarak ikiye ayrılır. İleri beslemeli ağlar yapısında nöronlar girişten çıkışa doğru düzgün katmanlar şeklindedir. Dış ortamdan alınan veriler giriş katmanına uygulanır ve girişte işleme girer, bilgi akış yönünde hiçbir değişikliğe uğratılmadan ortadaki katmana iletilir. Bu katmanlarda işleme giren bilgi ileri yönde çıkış katmanına iletilir. Bilginin girişten çıkışa doğru ileri yönde iletilmesi çalışma prensibine dayalı yapay sinir ağlarına ileri besleme sinir ağları denir [Canan, 2006]. Şekil 5.4' te ileri beslemeli ağ blok diyagramı verilmiştir. Çok katmanlı perseptronlar (multilayered perceptrons – MLP) ve LVQ (Learning Vector Quantization) ağları ileri beslemeli ağlara örnek olarak verilebilir. Geri beslemeli ağlarda, nöronların çıktısı ya kendilerine ya da bir önceki seviyedeki nöronlara geri gönderilir. Böylece girişler hem ileri yöne doğru hem de geri yöne doğru aktarılmış olur. Bu türdeki ağlar ileri beslemeli ağlardan farklı olarak bir de dinamik bir hafızaya sahiptirler [Karadal,2003]. Şekil 5.4 'de bir geri beslemeli ağın blok diyagramı görülmektedir. Geri beslemeli sinir ağlarına örnek olarak Elman, Hopfield ve Jordan ağları verilebilir.



Şekil 5.4: İleri (üst) ve Geri beslemeli (alt) sinir ağı blok diyagramı.

5.4. Yapay Sinir Ağlarında Öğrenme Algoritmaları

Yapay sinir ağlarının öğrenme yeteneği çok önemli bir özelliktir ve örnekler yardımıyla sağlanmaktadır. Dış dünyadan aldığımız verileri ağ yapısında giriş katmanına veririz ve çıkan ağın öğrenmiş olduğunu bekleriz. Öğrenme süreci tamamlanana kadar güncellemeler yapar, ağ yapısından en verimli sonucu almayı amaçlarız. Bir yapay sinir ağ yapısının temelde üç tane öğrenme algoritması vardır. Bunlar; danışmanlı, danışmansız ve takviyeli öğrenmedir. Danışmanlı öğrenme yapay sinir ağlarında sıkça kullanılan bir öğrenme yöntemidir. Danışmanlı öğrenmede ağın kullanılmadan önce eğitilmesi gerekir. Ağı eğitmek için giriş ve çıkış verilerini ağa sunmak gerekmektedir. Girdi – çıktı karşılıklarının tutarlı olabilmesi için modelde bulunan ağırlıkların katsayıları buna göre güncellenmelidir. En uygun değer bulunana kadar ağırlıklar girdi – çıktı verileri baz alınarak güncellenir. Danışmansız öğrenme yönteminde girdilere karşılık oluşturulan çıktı değerleri verilmez sadece dış dünyadan alınan girdi verileri ağ yapısına katılır. Ağ yapısında verilen girdileri birbirine yakınlığı baz alınarak sınıflandırması beklenir. Ağırlıkları bu sınıflandırmayı yapabilecek şekilde güncellenir. Ağ yapısı yapması gereken sınıflandırmayı verilen ağırlık katsayılarından anlar. Güncelleme tamamlandığında ağ yapısının öğrenmesi tamamlanmış sayılır. Takviyeli öğrenme modeli, danışmanlı öğrenme modelinin özel bir formudur. Girilen bilgiler karşısında çıkan çıktıya bakılarak, ağ yapısına çıkardığı

sonucun doğru veya yanlış ya da iyi ve kötü olduğu söylenir. Verilen bu bilgiyi ağı kullanarak tekrar öğrenmesi amaçlanmaktadır.

Yapay sinir ağlarında geliştirilmesi için literatür de çok sayıda öğrenme algoritması bulunmasına rağmen en yaygın kullanılan algoritmalar; Geri Yayılım Algoritması ve Levenberg-Marquardt metodudur [Pletnev, 2001], [Steber, 2007].

Geri yayılım algoritması: Geri yayılım algoritması ilk olarak 1974 yılında Paul Werbos tarafından ortaya atılmasına rağmen bu algoritmanın bilim dünyasında kabulü 1986 yılında Rummelhart ve Parker tarafından geliştirilmesiyle oluşmuştur. Günümüzde geri yayılım metodu, yapay sinir ağı kullanarak çözüm bulan birçok alanda başarıyla kullanılmaktadır.

5.4.1. Levenberg-Marquardt Metodu

(LMM) Levenberg – Marquardt metodu Kenneth Levenberg ve Donald Marquardtın sayesinde geliştirilmiş algoritmik sistemdir. Küçük ve orta boyut ölçekli problemlere pratik ve tutarlı sonuçlar üretmektedir.

Günümüzde sıklıkla kullanılan geri yayılım algoritması yavaş yakınsamaya özelliği bu algoritmanın etkisiz olarak nitelendirilmesine sebep olmaktadır. Bu algoritmanın belirtilen olumsuz özelliğinin başlıca sebebi; hata yüzey genişlik boyutlarının farklı dağılımlar göstermesi olarak açıklanabilir. Gauss – Newton algoritması kullanılarak bu yavaş yakınsama durumu geliştirilebilir [Ateşoğlu, 2015].

Levenberg – Marquardt algoritması temel olarak Gauss – Newton ve geri yayılım algoritmalarından meydana gelmiştir. LMM algoritması Gauss – Newton algoritmasının yapısal olarak en faydalı özelliği olan hızını, diğer bir algoritma olan geri yayılım algoritmasından ise tutarlılığı bünyesine katmıştır [Ateşoğlu, 2015].

5.5. Yapay Sinir Ağlarında Performans Ölçütleri

Öngörü modellerinin performanslarının karşılaştırılması amacı ile çeşitli performans ölçütleri kullanılmaktadır. En iyi ve en önemli performans kriteri eğitim verilerinin ötesinde ağı başarabileceği öngörü doğruluğudur. Doğruluk kriteri, çoğu zaman gerçek ve öngörü değerleri arasındaki fark olan öngörü hatası olarak tanımlanır.

6. MATERİYAL ve METOD

Bu çalışmada yüzey aktif maddelerin kritik misel konsantrasyonu- kimyasal yapı ilişkisi Yapay Sinir Ağları (YSA) yöntemi kullanılarak modellenmiştir. Yapay Sinir Ağları'nın teknik açıdan bakılarak görev tanımı açıklanacak olursa verilen bilgilere karşılık çıktı üretebilme olarak açıklanabilir. Bu belirtilen mekanizmanın çalışabilmesi için ise sistem belirli örnekler kullanılarak eğitilir. Sonra sistemde karar mekanizmasının çalışabilir hale gelmesi sağlanır. Son olarak da sistemde çıktılar üretilir. [Öztürk ve Şahin, 2018] Çalışmamızda literatürde hesaplanmış deneysel veriler baz alınarak verilerin girdi ve çıktı değerleri belirlenmiştir.

Tüm verilerin; %70'i eğitim, %30'u test amaçlı kullanılmıştır. Veriler EK B'de belirtilmiştir. Çalışmada model MATLAB programı kullanılarak oluşturulmuştur. Program komutları EK C'de verilmiştir.

Kritik misel konsantrasyonunu en çok etkileyen 3 parametre olan Q_{cmax} , Dipol moment ve Atom sayısı girdi olarak tanımlanmıştır. Bu tanımlamanın ardından literatürdeki deneysel verilerle tanjant sigmoid transfer fonksiyonu kullanılarak oluşturulan yeni modelde hata kareler toplamı ortalamasının kare kökü, determinasyon katsayısı, ortalama mutlak yüzde ve ortalama karesel hata değerleri hesaplanarak literatürdeki model ve bu çalışmada oluşturulan modelin karşılaştırmalı analizi yapılmıştır. Bu analizlerde kullanılan parametreler Q_{cmax} , Dipol Moment ve Atom Sayısıdır.

7. ARAŞTIRMA BULGULARI ve SONUÇLAR

Yapay Sinir Ağları ve makine öğrenmesi yöntemlerinin performans değerlendirmelerinde kullanılan temel performans göstergeleri arasında R^2 , MSE, RMSE ve MAPE sayılabilir [Karasu et al., 2018]. Bu çalışmada Tablo 7.1 'de verilen doğruluk ölçütleri kullanılmaktadır. Bu performans ölçütleri içerisinde R^2 , modelin doğruluk oranı karar verme katsayısıdır.

Tablo 7.1 : Performans ölçütleri.

Açıklama	Hata Ölçüt Formülü
MSE	$MSE = \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n e_t^2$
RMSE	$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{t=1}^n e_t^2}$
MAPE	$MAPE = \frac{100\%}{n} \sum_{t=1}^n \left \frac{e_t}{y_t} \right $

Performans değerlendirme ölçütlerinden ilk MSE (Ortalama kare hata) tanım olarak bir regresyon eğrisinin bir dizi noktaya olan yakınlığı ifade eder. MSE bir öğrenme modelinin performansını ölçer ve her zaman pozitif değere sahip olup sıfıra yakın olan tahminleyicilerin daha verimli performans göstermektedirler.

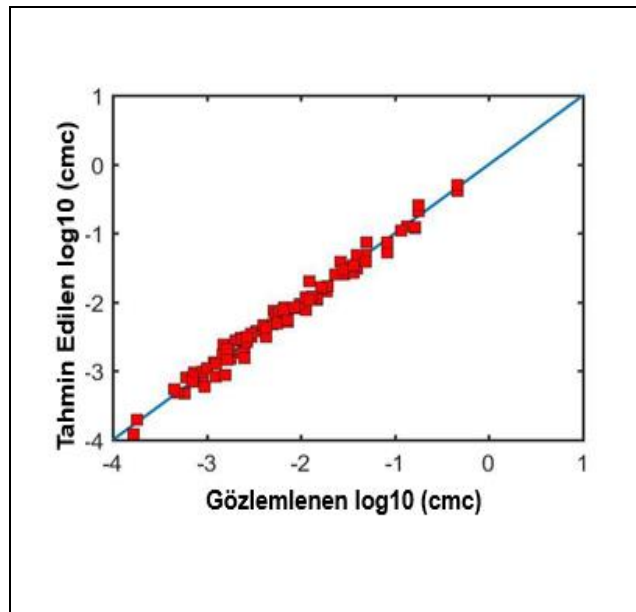
RMSE (Kök ortalama kare hata) tanım olarak tahmin edilen değerler ile mevcut gerçek verilerin mesafelerinin belirlenmesinde kullanılan hatanın oranını tespit eden metriktir.

MAPE (Ortalama mutlak yüzde hata) tahminlerin doğruluğunu belirlemek amacıyla kullanılmaktadır. MAPE tahminleyicilerin doğruluğunu karşılaştırmak için kullanıldığında, tahinleri çok düşük olan bir yöntemi sistematik olarak seçmesi nedeniyle önyargılıdır.

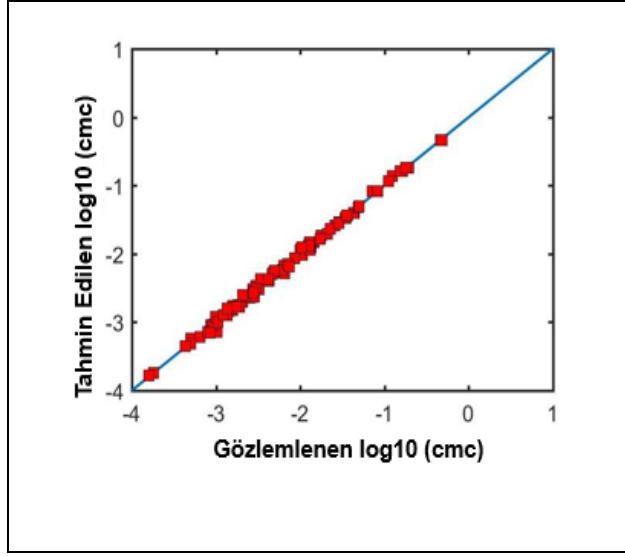
Tablo 7.2: Geliştirilen modele ait karşılaştırmalı sonuçlar.

Değer	Mevcut Model	Yeni Model
RMSE_EĞİTİM	0.1000	0.0413
MAPE_EĞİTİM	4.5045	1.4956
R_EĞİTİM	0.9912	0.9985
MSE_EĞİTİM	0.0100	0.0017
RMSE_TEST	0.0859	0.0564
MAPE_TEST	2.8497	1.7878
R_TEST	0.9925	0.9968
MSE_TEST	0.0074	0.0032

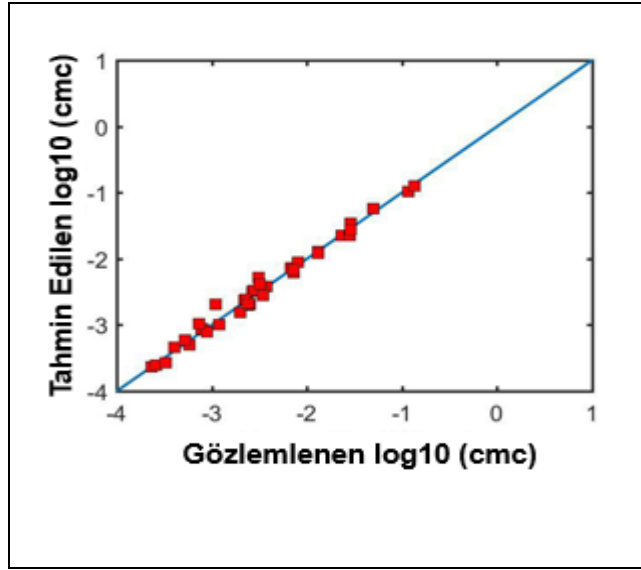
Tüm verilerin %70'i eğitim %30'u test için kullanılmıştır. Kritik misel konsantrasyonunu en çok etkileyen 3 parametre (Q_{cmax} , dipol moment, atom sayısı) girdi olarak tanımlanmıştır. Bu tanımlamanın ardından literatürdeki deneysel verilerle tanjant sigmoid transfer fonksiyonu kullanılarak oluşturulan yeni modelde RMSE: hata kareler toplamı ortalamasının karekökü, R: determinasyon katsayısı, MAPE: ortalama mutlak yüzde ve MSE: ortalama karesel hata değerleri hesaplanarak literatürdeki model ve bu çalışmada oluşturulan modelin karşılaştırmalı analizi yapılmıştır. Bu değerler yeni oluşturulan modelin mevcut modelden daha başarılı tahminleme yapabildiğini göstermektedir.



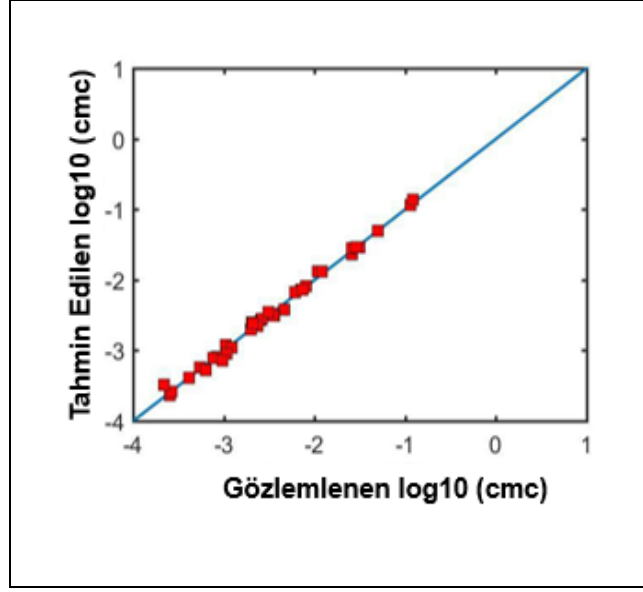
Şekil 7.1: Mevcut model eğitim değerleri.



Şekil 7.2: Yeni model eğitim değerleri.



Şekil 7.3: Mevcut model test değerleri.



Şekil 7.4: Yeni model test değerleri.

8. SONUÇLAR ve TARTIŞMA

Yapay sinir ağıları ile modelleme de modelin başarılı bir tahminleme yapıp yapamadığına sadece regresyon katsayısıyla karar verilmesi sağlıklı olmayacaktır. Tablo 7.2’de belirtilen RMSE (Kök ortalama kare hata), MSE (Ortalama kare hata) MAPE (Ortalama mutlak yüzde hata) değerleri de analiz edilmelidir. Bu değerler ne kadar küçük olursa hatanın daha az olduğu ve tahmin performansının daha başarılı olduğu yorumu yapılabilir. En mükemmel model doğrusal bir grafikte tahmin değerlerinin hedeflenen çizginin üzerinde olmasıdır bu noktadan sapma miktarları belirtilen hata değerlerini hesaplamada kullanılır bu sayede modelin performansı farklı şekillerde yorumlanır. Şekil 7.1, 7.2, 7.3 ve 7.4 incelendiğinde grafiklerde mevcut model ve yeni modelin eğitim ve test değerleri görülmektedir. Burada yeni modelin grafik üzerindeki değerlerine bakarak mevcut modelden daha başarılı bir tahminleme yaptığını söyleyebiliriz. Ayrıca tablo 7.2’deki sonuçlarda yeni modeldeki hata oranlarının mevcut modele göre çok daha düşük olduğu görülmektedir. Tüm bu farklı parametrelerin sonuçlardan yola çıkarak kritik misel konsantrasyonunun yeni model ile tahmin performansının daha başarılı olduğu söylenebilir.

KAYNAKLAR

- Arena P., (1998), "Bifurcation and chaos in noninteger order cellular neural networks", International Journal of Bifurcation and Chaos in Applied Sciences and Engineering, 8(7), 1527–1539.
- Ateşoğlu A. A., (2015), "Arıma ve ysa kullanılarak hibrit tahmin modeli geliştirilmesi", Doktora Tezi, Başkent Üniversitesi.
- Bajpai D., Tyagi V. K., (2007), "Laundry detergents: an overview", Journal of oleo science, 56(7), 327–340.
- Bajpai D., Tyagi V. K., (2008), "Microwave synthesis of cationic fatty imidazolines and their characterization", Journal of Surfactants and Detergents, 11(1), 79–87.
- Baldi P., Hornik K., (1989), "Neural networks and principal component analysis: Learning from examples without local minima", Neural Networks, 2(1), 53–58.
- Bourne M. C., Jennings W. G., (1963), "Kinetic studies of detergency. I. Analysis of cleaning curves", Journal of the American Oil Chemists' Society, 40(10), 517–523.
- Büyükbay B., (2010), "Cleaner production application as a sustainable production strategy, in a Turkish Printed Circuit Board Plant", Resources, Conservation and Recycling, 54(10), 744–751.
- Canan S., (2006), "Yapay sinir ağları ile gps destekli navigasyon sistemi", Doktora Tezi, Selçuk Üniversitesi.
- Çeltikli O. D., (2013), "Anyonik ve katyonik yüzey aktif maddelerin toprak ortam parçalanabilirliklerinin tarla koşullarının belirlenmesi", Yüksek Lisans Tezi, Namık Kemal Üniversitesi.
- Doherty S. K., (1999), "Control of ph in chemical processes using artificial neural networks" Doktora Tezi, Liverpool John Moores University.
- Efe M. O., Abadoğlu E., Kaynak O., (1999), "Novel analysis and design of a neural network assisted nonlinear controller for a bioreactor", International Journal of Robust and Nonlinear Control, 9(11), 799–815.
- Gültekin S. S., Güney K., Sarioglu S., (2003), "Neural networks for the calculation of band width of rectangular microstrip antennas" Aces Journal, 18(2), 110-120.
- Hagan M. T., Demuth H. B., De Jesús. O., (2002), "An introduction to the use of neural networks in control systems", International Journal of Robust and Nonlinear Control, 12(11), 959–985.
- Huibers P. D. T., (1996), "Prediction of critical micelle concentration using a quantitative structure-property relationship approach. 1. Nonionic surfactants", Langmuir, 12(6), 1462–1470.
- Huibers P. D. T., Obanov V. S. L., Atritzky A. R. K., Hah D. O. S., (1997), "Prediction of critical micelle concentration using a quantitative structure – property relationship approach" Journal of Colloid And Interface Science, 120(187), 113–120.

Karadal H., (2003), “Enerji sistemlerinde yapay sinir ağı ile gerilim kararlılığı analizi” Yüksek Lisans Tezi, Niğde Üniversitesi.

Karakaplan N., (2017), “Nane (*mentha spicata*) bitkisinden uçucu yağ eldesi için optimum koşulların elde edilmesi”, Yüksek Lisans Tezi, İnönü Üniversitesi.

Kaya Y., Aydın Ç., Barlas H., Keskinler, B., (2006), “Anyonik ve nonyonik yüzey aktif madde (yam) çözeltilerinin nanofiltrasyonunda giderim mekanizmaları ve akı azalma analizleri”, Türkiye’de Çevre Kirlenmesi Öncelikleri Sempozyumu V, 117-122, İstanbul, Türkiye, 18-19 Haziran.

Kumbur H., Vural N., (1989), “Berdan çayının metal ve deterjan kirliliğinin araştırılması” J. Fac. Eng. Arch. Gazi Univ, 4(1-2), 25-41.

Li X., Zhang G., Dong J., Zhou X., (2004), "Estimation of critical micelle concentration of anionic surfactants with QSPR approach", Journal of Molecular Structure: Theochem, 710(1-3), 119-126.

Nie J., Haykin S., (1999), "A Q-learning-based dynamic channel assignment technique for mobile communication systems", IEEE Transactions on Vehicular Technology, 48(5), 1676-1687.

Öztemel E., (2008), "Yapay Sinir Ağları", Papatya Yayıncılık, First edition, Ankara.

Öztürk K., Şahin M. E., (2018), "Yapay sinir ağları ve yapay zekâ’ya genel bir bakış", Takvim-i Vekayi, 6(2), 25-36.

Pletnev M. Y., (2001), "1. Chemistry of surfactants", Studies in Interface Science, 13(C), 1-97.

Riggs C. L., Klipper M., (2005), "Textile laundering technology", Textile Rental Services Association of America, First edition, Florida.

Roy K., Kabir H., (2012), "QSPR with extended topochemical atom (ETA) indices, 3: Modeling of critical micelle concentration of cationic surfactants", Chemical Engineering Science, 81, 169-178.

Roy K., Kabir H., (2013), "QSPR with extended topochemical atom (ETA) indices: Exploring effects of hydrophobicity, branching and electronic parameters on logCMC values of anionic surfactants", Chemical Engineering Science, 87, 141-151.

Surfactants A., (1997), "Prediction of critical micelle concentration using a quantitative structure – property relationship approach", Journal of Colloid And Interface Science, 120(187), 113-120.

Wang Z., (2002), "A quantitative structure-property relationship study for the prediction of critical micelle concentration of nonionic surfactants", Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 197(1-3), 37-45.

Yager R. R., (2004), "On the retranslation process in zadeh’s paradigm of computing with words", IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, Part B: Cybernetics, 34(2), 1184-1195.

Web 1, (2019), <https://medium.com/@fahrettinf/4-1-1-artificial-neural-networks-6257a7a54bb3>, (Erişim Tarihi: 21/06/2021).

ÖZGEÇMİŞ

1992 doğumlu Merve Erkoç, 2011 yılında başladığı Kocaeli Üniversite Mühendislik Fakültesi Kimya Mühendisliği bölümünden 2016 yılında başarıyla mezun olmuştur. Daha sonra 2017 yılında Gebze Teknik Üniversitesi Fen bilimleri Enstitüsü Kimya Mühendisliği Anabilim Dalında Yüksek Lisans eğitimine başlamıştır. 2017 yılından bu yana Çalık Holdinge bağlı Çalık Denim Tekstil A.Ş firmasında TC. Bilim Sanayi Teknoloji Bakanlığı onaylı Ar-Ge merkezinde Ar-Ge proje yöneticisi olarak görev almaktadır.

EKLER

Ek A: Tez Çalışması Kapsamında Yapılan Yayınlar

Erkoc M., Bayramoglu M., (2021), “Investigation of the relationship of surface active substances critical micelle concentration - chemical structure”, 4th International Istanbul Scientific Research Congress, Regional Development Studies Institute, Newyork, USA, 2-4 April.

Ek B: Tez Çalışmasında Kullanılan Veriler

No.	NT (Atom sayısı)	Dipol Moment μ (D)	QC-max (a.u.)	Log10 cmc deney	Log10 cmc hesap	cmc deneysel	cmc hesapla
1	28	21.4858	0.9763	-0.333	-0.38362	0.46452	0.41341
2	34	27.3208	0.9763	-0.936	-0.99029	0.11588	0.10226
3	40	33.2424	0.9763	-1.538	-1.59976	0.02897	0.02513
4	46	39.2189	0.9763	-2.137	-2.211	0.00729	0.00615
5	52	45.2325	0.9763	-2.745	-2.82344	0.00180	0.00150
6	29	19.5324	-0.4163	-0.79	-0.92081	0.16218	0.12000
7	35	24.9856	-0.4163	-1.4	-1.51515	0.03981	0.03054
8	41	30.6056	-0.4162	-1.943	-2.11483	0.01140	0.00768
9	44	33.4686	-0.4162	-2.421	-2.41641	0.00379	0.00383
10	47	36.3402	-0.4162	-2.602	-2.71826	0.00250	0.00191
11	50	39.2442	-0.4162	-3.139	-3.02116	0.00073	0.00095
12	53	42.1539	-0.4162	-3.237	-3.32424	0.00058	0.00047
13	56	45.0875	-0.4162	-3.635	-3.6281	0.00023	0.00024
14	39	30.189	-0.2297	-1.886	-1.89092	0.01300	0.01286
15	45	35.8554	-0.2298	-2.569	-2.49218	0.00270	0.00322
16	51	41.6119	-0.2298	-3.215	-3.09632	0.00061	0.00080
17	57	47.4354	-0.2298	-3.745	-3.70262	0.00018	0.00020
18	38	29.2091	1.0008	-1.312	-1.32075	0.04875	0.04778
19	44	34.6202	1.0008	-1.883	-1.91373	0.01309	0.01220
20	50	40.1611	1.0008	-2.523	-2.5109	0.00300	0.00308
21	56	45.8012	1.0008	-3.046	-3.11127	0.00090	0.00077
22	41	26.0929	-0.4151	-1.827	-1.96865	0.01489	0.01075
23	41	22.0856	-0.4155	-1.73	-1.83937	0.01862	0.01448
24	41	16.2136	-0.4157	-1.635	-1.64978	0.02317	0.02240
25	41	16.1841	-0.4155	-1.548	-1.64875	0.02831	0.02245
26	41	13.7099	-0.4165	-1.442	-1.56922	0.03614	0.02696
27	50	16.3601	-0.4155	-2.144	-2.28174	0.00718	0.00523
28	30	21.1392	-0.031	-0.866	-0.89561	0.13614	0.12717
29	36	26.6603	-0.031	-1.481	-1.49214	0.03304	0.03220
30	39	29.4749	-0.031	-1.783	-1.79215	0.01648	0.01614
31	42	32.3218	-0.031	-2.063	-2.09321	0.00865	0.00807
32	45	35.1906	-0.0311	-2.367	-2.39501	0.00430	0.00403

33	48	38.0817	-0.031	-2.62	-2.69745	0.00240	0.00201
34	51	40.9895	-0.031	-2.921	-3.00047	0.00120	0.00100
35	54	43.9135	-0.031	-3.237	-3.30402	0.00058	0.00050
36	60	49.7967	-0.031	-3.783	-3.91224	0.00016	0.00012
37	54	19.2652	-0.025	-2.523	-2.50559	0.00300	0.00312
38	54	19.5053	-0.025	-2.638	-2.51335	0.00230	0.00307
39	54	20.6499	-0.025	-2.697	-2.55032	0.00201	0.00282
40	54	22.5381	-0.025	-2.824	-2.61131	0.00150	0.00245
41	54	25.0456	-0.025	-2.959	-2.6923	0.00110	0.00203
42	54	34.785	-0.029	-3.046	-3.0084	0.00090	0.00098
43	54	36.7175	-0.0262	-3.097	-3.06976	0.00080	0.00085
44	30	16.4383	0.1527	-0.745	-0.67378	0.17989	0.21194
45	36	21.1823	0.1527	-1.305	-1.24521	0.04955	0.05686
46	39	21.3857	0.1529	-1.539	-1.4608	0.02891	0.03461
47	39	15.8461	0.1563	-1.081	-1.28058	0.08299	0.05241
48	45	28.8681	0.1527	-2.187	-2.12076	0.00650	0.00757
49	45	17.9801	0.1563	-1.714	-1.76771	0.01932	0.01707
50	48	31.5456	0.1527	-2.481	-2.41634	0.00330	0.00383
51	48	28.8776	0.1529	-2.367	-2.33009	0.00430	0.00468
52	48	22.5287	0.1555	-2.288	-2.12403	0.00515	0.00752
53	48	22.9834	0.1563	-2.171	-2.13841	0.00675	0.00727
54	48	19.4067	0.1563	-2.013	-2.02289	0.00971	0.00949
55	51	34.2522	0.1527	-2.767	-2.71287	0.00171	0.00194
56	51	31.4988	0.1529	-2.658	-2.62386	0.00220	0.00238
57	51	25.2457	0.1563	-2.469	-2.42059	0.00340	0.00380
58	51	20.0506	0.1562	-2.177	-2.25282	0.00665	0.00559
59	54	27.0319	0.1555	-2.764	-2.68768	0.00172	0.00205
60	54	22.4349	0.1562	-2.629	-2.53894	0.00235	0.00289
61	54	21.5057	0.1562	-2.372	-2.50892	0.00425	0.00310
62	57	39.7718	0.1527	-3.31	-3.30935	0.00049	0.00049
63	57	22.1725	0.1562	-2.629	-2.73956	0.00235	0.00182
64	60	42.5772	0.1527	-3.585	-3.60906	0.00026	0.00025
65	60	31.852	0.1555	-3.347	-3.26157	0.00045	0.00055
66	60	26.2992	0.1562	-3.143	-3.08195	0.00072	0.00083
67	63	34.9976	0.1563	-3.481	-3.57197	0.00033	0.00027
68	63	24.2492	0.1562	-3.027	-3.22484	0.00094	0.00060
69	36	23.9698	-0.0484	-1.582	-1.41186	0.02618	0.03874
70	39	26.3941	-0.0484	-1.907	-1.69927	0.01239	0.01999
71	45	31.4724	-0.0484	-2.509	-2.2815	0.00310	0.00523
72	51	36.73	-0.0484	-2.921	-2.86952	0.00120	0.00135
73	45	28.6609	-0.0472	-2.27	-2.19023	0.00537	0.00645
74	45	26.5671	-0.0415	-2.23	-2.12043	0.00589	0.00758
75	45	25.0362	-0.0411	-2.18	-2.07083	0.00661	0.00850
76	45	24.5133	-0.0411	-2.09	-2.05394	0.00813	0.00883
77	48	31.0182	-0.0472	-2.55	-2.47547	0.00282	0.00335
78	48	28.3107	-0.0418	-2.5	-2.38596	0.00316	0.00411

79	48	26.8046	-0.0411	-2.4	-2.33705	0.00398	0.00460
80	48	26.1714	-0.0411	-2.3	-2.3166	0.00501	0.00482
81	48	25.7591	-0.0411	-2.25	-2.30328	0.00562	0.00497
82	51	33.4718	-0.0472	-2.83	-2.76382	0.00148	0.00172
83	51	30.8878	-0.0415	-2.78	-2.67819	0.00166	0.00210
84	51	29.1005	-0.0411	-2.65	-2.62031	0.00224	0.00240
85	51	27.8354	-0.0411	-2.57	-2.57944	0.00269	0.00263
86	51	27.1814	-0.0411	-2.46	-2.55832	0.00347	0.00276
87	54	35.9454	-0.0472	-3.11	-3.05282	0.00078	0.00089
88	54	33.1771	-0.0415	-3	-2.96123	0.00100	0.00109
89	54	31.1371	-0.0411	-2.9	-2.89519	0.00126	0.00127
90	54	29.3362	-0.0411	-2.78	-2.83702	0.00166	0.00146
91	54	28.5059	-0.0411	-2.7	-2.8102	0.00200	0.00155
92	54	28.3589	-0.0411	-2.6	-2.80545	0.00251	0.00157
93	57	38.4938	-0.0472	-3.39	-3.34423	0.00041	0.00045
94	57	34.9085	-0.0418	-3.28	-3.22637	0.00052	0.00059
95	57	32.7457	-0.0411	-3.15	-3.15625	0.00071	0.00070
96	57	31.152	-0.0411	-3.05	-3.10477	0.00089	0.00079
97	57	30.3494	-0.0411	-2.9	-3.07884	0.00126	0.00083
98	57	29.6942	-0.0411	-2.8	-3.05768	0.00158	0.00088
99	27	21.488	0.752	-0.333	-0.29400	0.46452	0.50816
100	34	27.325	0.752	-0.936	-0.96000	0.11588	0.10965
101	40	33.243	0.759	-1.538	-1.56000	0.02897	0.02754
102	46	39.219	0.756	-2.137	-2.16000	0.00729	0.00692
103	30	19.532	-0.3	-0.79	-0.91500	0.16218	0.12162
104	36	19.187	-0.298	-1.4	-1.31700	0.03981	0.04819
105	42	25.64	-0.3	-1.943	-1.93500	0.01140	0.01161
106	48	36.34	-0.3	-2.602	-2.68500	0.00250	0.00207
107	51	39.243	-0.3	-3.139	-2.98400	0.00073	0.00104
108	31	21.14	0.016	-0.866	-0.89800	0.13614	0.12647
109	37	26.66	0.016	-1.481	-1.48500	0.03304	0.03273
110	40	29.476	0.017	-1.783	-1.78000	0.01648	0.01660
111	43	32.323	0.017	-2.063	-2.07700	0.00865	0.00838
112	46	35.188	0.017	-2.367	-2.37400	0.00430	0.00423
113	49	38.084	0.017	-2.62	-2.67200	0.00240	0.00213
114	40	29.209	0.84	-1.312	-1.41800	0.04875	0.03819
115	46	31.703	0.804	-1.883	-1.91300	0.01309	0.01222
116	52	35.519	0.818	-2.523	-2.45200	0.00300	0.00353
117	42	26.092	-0.3	-1.827	-1.94900	0.01489	0.01125
118	42	14.776	-0.296	-1.635	-1.59300	0.02317	0.02553
119	42	12.506	-0.294	-1.548	-1.52100	0.02831	0.03013
120	42	10.844	-0.303	-1.442	-1.46900	0.03614	0.03396
121	51	16.36	-0.299	-2.144	-2.26300	0.00718	0.00546
122	31	13.444	0.169	-0.745	-0.59300	0.17989	0.25527
123	37	17.401	0.142	-1.305	-1.13400	0.04955	0.07345
124	40	10.738	0.146	-1.081	-1.12900	0.08299	0.07430

125	46	28.868	0.148	-2.187	-2.11500	0.00650	0.00767
126	41	29.987	-0.189	-1.886	-1.91400	0.01300	0.01219
127	47	35.766	-0.188	-2.569	-2.51000	0.00270	0.00309