

Karanlık Tepkimeler İçin Bir Işık

Yrd. Doç. Dr. Şule Atahan Evrenk [TOBB Ekonomi ve Teknoloji Üniversitesi Tıp Fakültesi

Ampul için uzun ömürlü bir filament buluncaya kadar Edison'un insan saçı da dahil olmak üzere binlerce farklı malzeme denediğini duymuşsunuzdur. Yeni kristaller sentezlemeye çalışan bilim insanları için de durum bundan daha iç açıcı değil. Deneme yanılma yöntemine dayalı yaklaşımlar hem emek hem de zaman alıyor; başarısız denemelerin neredeyse tamamı ise laboratuvar köşelerinde ve tozlu defterlerde kalıyor.

Yeni kristaller sentezlemeye uğraşan bilim insanlarının laboratuvar defterleri az ürün vermiş ya da tamamen başarısız olmuş pek çok denemeyi barındırır. İstenilen ürünün elde edilmesi için gerekli kimyasallar belirleninceye, tepkimelerin fiziksel şartları optimize edilinceye kadar pek çok değişiklik yapılır, deneyler defalarca tekrarlanır. Bazen başarılı olunurken bazen de tüm denemeler boşa gider, laboratuvar defterleri dolar ve bir kenarda kendi haline terk edilir.

Bilimsel makaleler, başarılı insanların hayat öyküleri gibi çoğunlukla başarıları bildirir. Makalelerde paylaşılan bulgulara nazaran başarısız sonuçlar buzdağının saklı kısmı gibidir. Bu bilgiler çoğu zaman bilim insanlarının kafasında neyin sonuç verdiği neyin sonuç vermediği bilgisi olarak kalır. Bir araş-

tırma grubundan diğerine aktarılması mümkün olmaz.

Nature dergisinin 2016 Mayıs sayısına kapak olan Karanlık Tepkimeler Projesi (Dark Reactions Project) karanlıkta kalan, makalelere girmeyen veriler için bir ışık yakmış. Projenin kurucuları olan Haverford Koleji araştırmacıları kötü sonuç veren ya da hiç sonuç veremeyen deneylerin verilerini de değerlendirerek yeni inorganik-organik hibrit kristallerin sentezlenmesini hızlandırmayı hedeflemiş.

Bu tür kompleks problemlerin çözümünde sıklıkla kullanılmaya başlanan yapay öğrenme algoritmaları kullanılmışlar.

Geleneksel bir yazılımda verilerin düzenlenmesi ve değerlendirilmesi ile ilgili kurallar detaylı olarak kodlanır. Yazılımlar belirlemicidir, yazılımın



Pedro Domingos

geliştirilmesinin amacı otomasyondur. Veri zamanla değişirse, prog-

ramcı bu kuralları güncelleyerek programını canlı tutar. Yapay öğrenme algoritmalarına dayalı yazılımlar ise veriyi inceleyerek girdiler ile çıktılar arasındaki kuralları kendileri bulur. Washington Üniversitesi araştırmacılarından Pedro Domingos yapay öğrenme algoritmalarını tohuma, veriyi gübreyle, programları da bitkiye benzetiyor. Programcının görevi tıpkı bir bahçıvan gibi amaca uygun algoritmaları seçmek ve veri setlerine uygulayarak programı geliştirmektir. Yazılımın karşılaştığı veri sayısı artıp çeşitlendikçe,

Geleneksel programlama



Yapay öğrenme



tahmin gücü de artar. Tıpkı uzun yıllar laboratuvarında çalışan bir kimyacının deneyim kazanması gibi ne kadar çok deney hakkında bilgi verilirse yazılımın başarı oranı o kadar artar.

Karanlık tepkimeler projesinde hangi kimyasal tepkimelerin hangi durumlarda kristal verdiğini hangi durumlarda vermediğini öğrenecek bir yazılım geliştirilmiş. Bunun için yaklaşık 4000 başarılı ve başarısız tepkime kullanılmış. Geliştirilen yazılımın kristal oluşup oluşmayacağını tahmin oranı hayli yüksek: Model daha önce sentezlenmiş kristallerde kullanılan kimyasallar ve tepkime şartları girdi olarak verildiğinde, tepkimelerin sonucunu %79 oranında doğru tahmin etmiş. Araştırmacılar ayrıca modeli daha önce sentezlenmemiş vanadyum selenit kristalleri üzerinde de denemiş. Bu kristaller vanadyum, selenyum ve oksijen atomlarının küçük organik moleküllerle, örneğin aminlerle oluşturduğu bileşikler. 500 tane kristal için yapılan testte, on sene kristal sentezi deneyimi olan bir kimyacının tahmin gücü %78 iken, yapay öğrenme modelleri %89 oranında başarılı olmuş. Bu başarı yapay öğrenme tekniklerinin yeni bileşik ve malzemelerin bulunmasında oynayabileceği rolü gösteriyor.

Yapay öğrenme teknikleri özellikle karmaşık verilerle uğraşan bilim insanları için önemli avantajlar sağlıyor ama dezavantajları da var. Bunlardan en

önemlisi bu yazılımların değişkenler ile hedeflenen özellikler arasındaki ilişkileri açıkça ortaya koymaması, yani bir anlamda makinenin ne öğrendiğini anlamak zor. Bu durumda yazılımın tahmin gücü yüksek olsa da bilim insanlarının farklı hipotezler geliştirmesine pek bir faydası olmuyor. Haverford araştırmacıları buna çözüm olarak bir karar ağacı kullanmış. Geliştirilen karar ağacı yapay öğrenme modelinin insanların anlayabileceği bir modeli niteliğinde. Söz konusu kristalde oksijen var mı, asitlik derecesi 3'ten küçük mü büyük mü gibi sorularla karar ağacı üzerinde farklı yollardan gidilerek deney sonuçları tahmin edilebiliyor ve farklı hipotezler geliştirilebiliyor.

Karanlık tepkimeler projesi kristal sentezi çalışmalarında üretilmiş ancak karanlıkta kalmış deneyler için yeni bir ümit kaynağı. Sizin de başarısız olan tepkimeleriniz varsa ve projeye katkıda bulunmak isterseniz <https://darkreactions.haverford.edu> adresine kayıt olup tepkimelerinizi veri tabanına ekleyebilirsiniz. Böylece karanlıkta kalan çalışmalar için bir ışık yakmış olursunuz. ■

Kaynaklar

Raccuglia, P. vd., "Machine-learning-assisted materials discovery using failed experiments", *Nature*, Cilt 533, s. 73, Mayıs 2016.

Ball, P., "Computer gleans chemical insight from lab notebook failures", *Nature News*, doi:10.1038/nature.2016.19866

Domingos, P., *The Master Algorithm: How the Quest for the Ultimate Learning Machine Will Remake Our World*, Perseus Books, 2015.

