



SPEKTROSKOPİK ANALİZLER VE YAPAY ZEKA UYGULAMALARI

Alperen KARAKUŞ

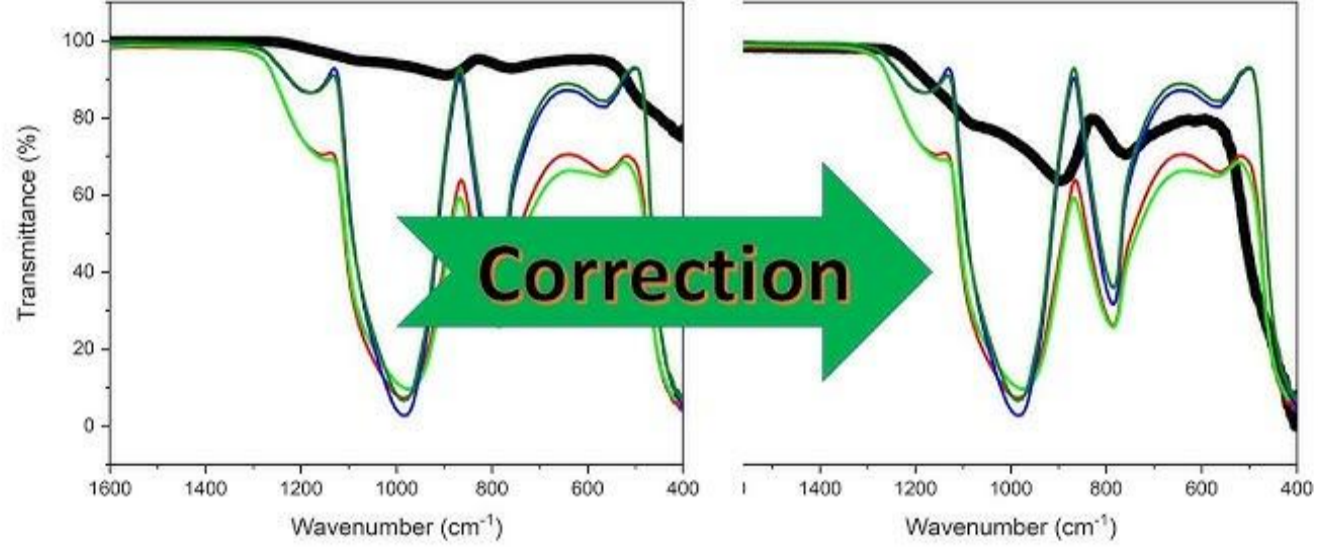
Prof. Dr. Feyzullah TOKAY



Spektroskopi Ve Analitik Kimya

Temel İlke: Spektroskopi, maddenin elektromanyetik radyasyon ile etkileşimini temel alan, modern analitik kimyanın en güçlü araçlarından biridir.

- Kimyasal örneklerin bileşimini ve yapısını belirleme.
- Nitel (kalitatif) ve nicel (kantitatif) analizde kritik rol.
- Son yıllarda YZ (Yapay Zeka) ve MÖ (Makine Öğrenmesi) algoritmaları ile veri işlemede devrimsel artış.



Spektral Verinin Doğası ve Zorluklar

Veri Özellikleri

- Yüksek Boyutluluk (binlerce dalgaboyu)
- Sinyal-Gürültü Oranı problemleri
- Baseline drift
- Piklerin üst üste binmesi (Overlap)

Neden Yapay Zeka?

Geleneksel yöntemler genellikle lineer modelleri temel alır. Ancak spektral verilerdeki matris etkileri ve cihaz kaynaklı sapmalar non-lineer yaklaşımlar gerektirir.

"AI, insan gözünün kaçırabileceği mikro-değişimleri tespit ederek spektral çözünürlüğü artırır."

Avantajlar ve Sınırlamalar

Avantajlar

- Non-lineer sistemlerde yüksek hassasiyet.
- Gerçek zamanlı analiz imkanı.
- Özellik seçiminde otomasyon.
- Değişken matris etkilerini tolere edebilme.

Sınırlamalar

- Büyük ve kaliteli eğitim verisi ihtiyacı.
- "Kara Kutu" (Black Box) problemi: Açıklanabilirlik.
- Modelin aşırı öğrenmesi (Overfitting) riski.
- Yüksek işlem gücü gereksinimi.

Gelecek Perspektifi

Minispektrometrelerin akıllı telefonlara entegrasyonu ve bulut tabanlı AI modelleri ile "kişisel analitik laboratuvarlar" dönemi başlamaktadır.

Teşekkürler

Spektroskopik Tekniklere Bakış



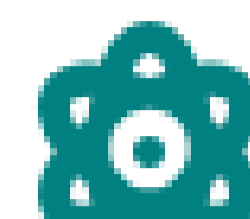
UV-Vis

Kantitatif analizlerde yapay sinir ağlarının (YSA) yoğun kullanımı ile hassas sonuçlar.



FT-IR / Raman

Moleküler parmak izi bölgelerinin AI tabanlı otomatik sınıflandırılması ve teşhisi.



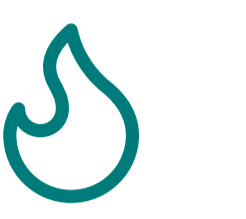
NMR

Karmaşık spektrumların ve kimyasal kaymaların yapay zeka ile otomatik çözülmesi.



Kütle (MS)

Proteomik ve metabolomik verilerdeki devasa veri setlerinin AI ile analizi.



AAS

Eser element analizlerinde karşılaşılan karmaşık matris etkilerinin ve sinyal gürültülerinin AI ile otomatik düzeltilmesi.

Kemometri ve Klasik Yöntemler

Klasik Yaklaşımlar

Kemometri, kimyasal verileri analiz etmek için istatistiksel ve matematiksel yöntemlerin uygulanmasıdır.

- PCA:** Temel Bileşen Analizi (Boyut indirgeme)
- PLS:** Kısmi En Küçük Kareler (Regresyon)
- LDA:** Lineer Diskriminant Analiz

Yeni Nesil: AI & ML

Klasik yöntemlerin yetersiz kaldığı non-lineer veri yapılarında ve "Big Data" ölçeklerinde devreye girer.

Otomatik özellik çıkarımı ve kendine öğrenen model mimarileri.

Spektroskopide Kullanılan AI Algoritmaları

CNN (Evrimsimli)

1D spektrum verilerini birer sinyal gibi işleyerek otomatik özellik çıkarma. (Otomatik Öznitelik Çıkarımı & Gürültü Filtreleme)

Random Forest

Karar ağaçları topluluğu ile değişkenlerin (dalgaboyu) önem derecesini belirleme. (Dalgaboyu Önem Analizi & Karar Mekanizması)

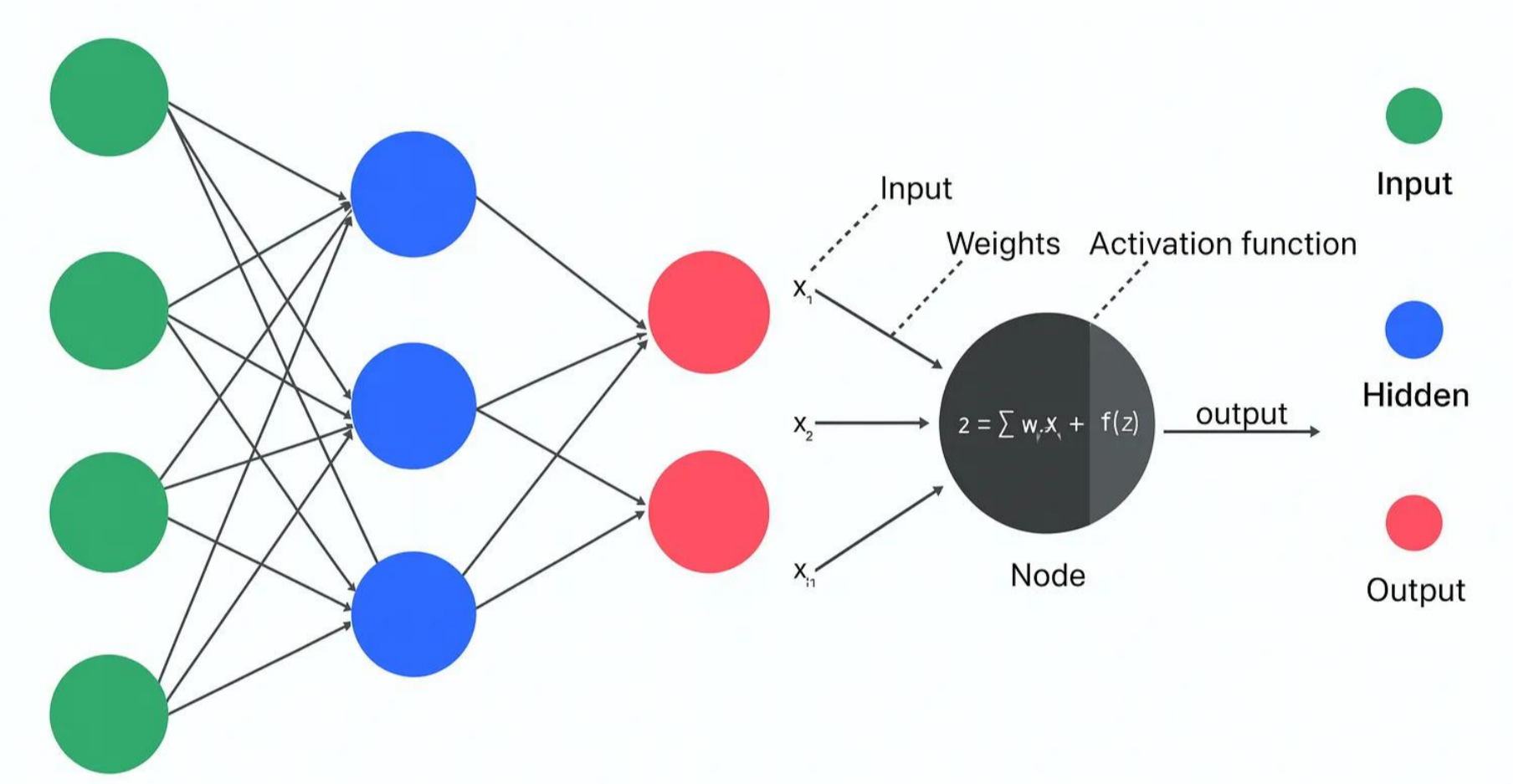
SVM (Destek Vektör)

Küçük veri gruplarında bile yüksek doğruluklu sınıflandırma ve regresyon. (Küçük Veri Setleri & Yüksek Boyutlu Sınıflandırma)

ANN (Yapay Sinir)

Girdi ve çıktı arasındaki karmaşık non-lineer ilişkileri modelleme. (Non-lineer ilişkiler & Kantitatif Regresyon)

Neural Network Architecture



Veri Ön İşleme ve AI Entegrasyonu

1

Gürültü Giderme

Savitzky-Golay algoritması, spektrumdaki önemli tepe noktalarını (pikleri) ve sinyal şeklini bozmadan veriyi pürüzsüzleştirir.

2

Baseline

Gerçek absorbans veya geçirgenlik değerlerinin (pik alanlarının) doğru hesaplanabilmesi için spektrumu sıfır eksenine oturtur.

3

Normalizasyon

Farklı numune kalınlıkları, partikül boyutları veya fiziksel farklılıklardan doğan spektral saçılma etkilerini minimize eder.

MSC veya SNV yöntemleri ile tüm spektrumlar ortak bir matematiksel ölçeğe getirilir.

4

Boyut Azaltma

Binlerce dalga boyundan oluşan spektral verideki birbirini tekrar eden veya gereksiz bilgileri sıkıştırır.

PCA, verinin karakteristiğini koruyarak değişken sayısını düşürür; böylece YZ modelinin aşırı öğrenmesini engeller ve hesaplama hızını artırır.

5

AI Model

Temizlenmiş ve optimize edilmiş veriler kullanılarak amaca yönelik örüntü tanıma işlemi gerçekleştirilir.

Numune türünün belirlenmesi için Sınıflandırma veya bilinmeyen bir bileşenin konsantrasyon miktarını tahmin etmek için Regresyon modelleri eğitilir.

Uygulama Alanları ve Literatür

Yapay zekâ destekli spektroskopik analizler; gıda güvenliği, farmasötik endüstri ve çevre izleme gibi alanlarda geleneksel ıslak kimya yöntemlerine kıyasla devrimsel bir hız ve hassasiyet sunmaktadır. Bu entegrasyonun endüstriyel açıdan en kritik ve yaygın uygulaması, yüksek ekonomik değere sahip gıda ürünlerindeki sahteciliğin (tağşiş) saniyeler içinde tespit edilmesidir.

Klasik analitik prosedürlerin getirdiği uzun işlem süreleri ve numune bütünlüğünün bozulması gibi metodolojik kısıtlamalar, kemometri ve yapay zekâ tabanlı hibrit sistemler ile aşılmaktadır. Enstrümantal analizlerden elde edilen ham spektral sinyallerin matematiksel optimizasyonu ve makine öğrenmesi modelleriyle işlenmesi, insan algısının ötesindeki mikro spektral varyasyonların ve karmaşık veri yapılarının deşifre edilmesini sağlamaktadır.

