

# Sağlıkta Güncel Simülasyon Yaklaşımları: Bir Derleme Çalışması

## Recent Simulation Studies in Healthcare: A Review

Melis Almula KARADAYI<sup>1</sup> , Yakup Görkem GÖKMEN<sup>1</sup> , Lamia Gülnur KASAP<sup>1</sup> , Hakan TOZAN<sup>1</sup> 

<sup>1</sup> İstanbul Medipol Üniversitesi, Endüstri Mühendisliği Bölümü, 34810, İstanbul, Türkiye

### Öz

Son on yılda, sağlık hizmeti maliyetlerindeki çarpıcı artış, araştırmacıları ve sağlık politikacılarını maliyetleri düşürmek için yeni yollar bulmaya zorlamıştır. Simülasyon, sağlık hizmetlerinde verimliliği artırmak ve kaliteyi yükseltmek için kullanılan popüler ve etkili bir yöntem haline gelmiştir. Araştırmacıların sağlık hizmetlerinde gerçekleştirilen simülasyon çalışmalarına olan ilgileri, yayın sayısında sürekli bir artışa neden olmuştur. Bu derleme çalışmasında, sağlık alanında gerçekleştirilen ayrık olay simülasyonu (AOS) çalışmaları özetlenmiş ve sınıflandırılmıştır. Özellikle de yüksek düzeyde belirsizlik ve kısıtlı kaynaklar altında çalışan ameliyathanelerde gerçekleştirilen AOS çalışmalarına odaklanılmıştır. Ayrıca derleme çalışmasının sonucunda simülasyon tabanlı optimizasyon yöntemi ile ameliyathane çizelgeleme süreçlerinin iyileştirilmesi konusunda literatürde var olan eksiklikler belirlenmiştir. Bu doğrultuda, sağlık alanında çalışan araştırmacılar ve profesyoneller gelecek AOS araştırma ve uygulamaları hakkında yeni çalışmalarda bulunabilirler.

**Anahtar Kelimeler:** Ayrık Olay Simülasyonu, Hastane, Sağlık, Simülasyon

### Abstract

In recent decades, the dramatic increase in healthcare costs has compelled researchers and healthcare policy makers to find out new ways to reduce costs. Simulation has become a popular and effective method for improving efficiency and enhancing quality in healthcare operations. The interest of researchers in the domain of simulation studies in healthcare induces a steady increase in the number of publications. In this regard, different discrete-event simulation (DES) studies employed in healthcare field are summarized and classified in this review. A particular attention is on the published studies that involve DES studies of operating rooms. The operating room is specifically the most complicated and expensive hospital resource that runs with high level of uncertainty and limited resources. Moreover, as a result of this review study, deficiencies in the literature about the improvement of the operating room scheduling processes with simulation based optimization method have been determined. In the literature, most of the simulation models only include demand and capacity constraints. However, they should include more constraints such as labor constraints, preferences of surgeons for surgical scheduling, number of available beds in intensive care unit, number of recovery beds, etc. Moreover, there is a need in the field to develop stochastic models, which involve uncertain surgery and recovery times. In most of the studies, it is assumed that these periods are known precisely. It is also determined that number of multi-objective models is quite low. In addition, only a few simulation studies have an online scheduling approach. Thus, these issues need to be addressed. In light of this review, healthcare professionals and researchers can make new suggestions and improvements regarding future research and applications of DES.

**Keywords:** Discrete-Evet Simulation, Hospital, Healthcare, Simulation

### I. GİRİŞ

Gelişen teknoloji ve hizmet sektöründe yaşanan yüksek rekabetle birlikte sağlık sistemleri üzerine yapılan çalışmalara son yıllarda giderek artan ölçüde ivme kazandırılmıştır. Sağlık kurumlarında yapılan süreç iyileştirmeleri sayesinde kurumların maliyetlerinde düşüş sağlanırken hasta memnuniyeti ve hizmet kalitesi artırılabilir. Bu doğrultuda, literatürde sağlık süreçlerinin iyileştirilmesi konusuna odaklanan birçok uluslararası çalışma mevcuttur. Ülkemizde ise bu sayının az olması konunun önemini biraz daha artırmakta ve gelecek çalışmalara yol gösterici olmak hedefiyle beraber bu çalışmanın temel motivasyonlarından birini oluşturmaktadır.

Gerçekleştirilen simülasyon çalışmalarında hastane birimleri ayrı ayrı ele alınabilmektedir. Bu birimlerden “Ameliyathaneler” ise hastane işletmelerinin en pahalı ve karmaşık süreçlerini içerdikleri için kritik öneme sahip birimler olarak karşımıza çıkmaktadır. Ameliyathane süreçlerinin planlanmasını etkileyen birçok faktör vardır. Bir ameliyatı gerçekleştirmek için gereken kaynaklar; ameliyat personeli (cerrahlar, anestezi uzmanları, hemşireler, vb.), özel ekipmanlar, ameliyat odaları, anestezi sonrası bakım üniteleri ve yoğun bakım üniteleri olarak ele alınabilir. Ameliyathane süreçlerinin planlanmasını etkileyen bir diğer faktör de bazı ameliyathane planlanabilirken bazılarının acil durumlar sonucu oluşması ve ani müdahale gerektiren ameliyathane olmasıdır. Üstelik bu süreç hasta alım süreci, iyileşme süreci, ameliyathane, acil hasta gelişi ve tıbbi personelin müsait olması gibi birçok belirsizlikleri de barındırmaktadır. Bu belirsizlikler; ameliyathane ekibini bekleme zamanı, ameliyathane odasının boş kalması, fazla mesai, ameliyathane kullanım verimliliği ve bakım kalitesi gibi birçok problemi doğurmaktadır. Tüm bu faktörleri ve belirsizlikleri aynı zamanda ele almak problemin yapısını oldukça karmaşık bir hale getirmektedir. Bu nedenle tüm bu yapıyı ele alan modelleri çözmek zor ya da imkansız olabilmektedir. İlgili literatürde modelin zorluğundan dolayı bu konu farklı bölümlere ayrılmış ve genel olarak sadece planlanabilen ameliyathane ya da acil ameliyathanelerin çözümlenmesi üzerine çalışılmıştır. Tüm sistemi ele alan çalışmalarda ise problemin karmaşıklığından dolayı çözüm yöntemi olarak sezgisel yöntemlere ya da simülasyon tekniklerine başvurulmuştur.

Bu amaçla, derleme çalışması kapsamında genel olarak sağlık sektöründe gerçekleştirilen simülasyon çalışmaları ayrıntılı bir şekilde özetlenmiştir. Kurgulanan sınıflandırma şemasına Bölüm 2 içerisinde yer verilmiştir. Kritik öneme sahip ameliyathanelere odaklanan; Ameliyathane çözümlenme süreçlerinde gerçekleştirilen simülasyon çalışmalarına ise Bölüm 3’te yer verilmiştir. Yine bu bölüm içerisinde önerilen sınıflandırma şemasına ve çalışmalarda gözlemlenen ana hedeflerin listesine yer verilmiştir. Sonuç bölümü ise gerçekleştirilen derleme çalışmasının analizi yapılmış, literatürdeki konuyla ilgili eksiklikler belirtilmiş ve elde edilen bulgular hakkında bilgi verilmiştir.

## II. SAĞLIK SEKTÖRÜNDE SİMÜLASYON ÇALIŞMALARI

Bu bölüm, sağlık sektöründe gerçekleştirilen simülasyonla modelleme çalışmalarının kapsamlı bir özetini içermektedir. “Simülasyon modellerinin” sağlık hizmeti sunumunda sağlık hizmeti veren yöneticiler ve profesyoneller tarafından etkili bir araç olarak kullanıldığı çok sayıda örnek bulunmaktadır.

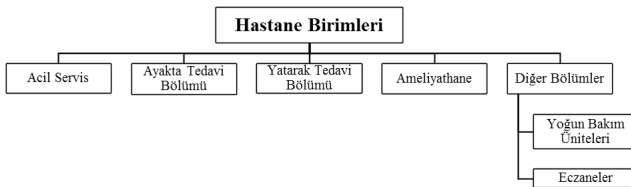
Bunun en önemli nedeni simülasyon modellerinin belirsizliklerle başa çıkmak için uygun olmalarının yanı sıra darboğazları azaltmak, operasyonel verimliliği artırmak, maliyeti azaltmak ve bakım kalitesini artırmak gibi sistemdeki problemleri çözmek için kolaylıkla kullanılabilirlerdir. Literatürde bu alanda yer alan çalışmalar şu şekilde özetlenebilir: Özellikle tıp öğrencileri için simülasyon temelli eğitim çalışmaları [Schroedl ve diğ. (2012); Jansson ve diğ. (2013); Ballangrud ve diğ. (2014); Wenk & Pöpping (2015); Warren ve diğ. (2016); Mirza & Athreya (2017); Camp & Legge (2018)], hasta güvenliği ve servis kalitesi konusunda yapılan çalışmalar [Reed ve diğ. (2017)], hastalıkların tanınması konusunda gerçekleştirilen çalışmalar [Fabian et al. (2012); Chemweno ve diğ. (2014); Ariöz & Günel, 2016; Pan ve diğ. (2017)], enfeksiyon ve bulaşıcı hastalıklar konusunda yapılan çalışmalar [Nikakhtar & Hsiang; Viana ve diğ. (2014); Orbann ve diğ. (2017)], kaynak planlaması ve yönetimi konusuna odaklanan çalışmalar [Sadatsafavi ve diğ. (2016)] ve en çok ilgi gören araştırma alanı ise son kategori olan “çizelgeleme ve hasta akışı”na aittir. [Granja ve diğ. (2014); Ben-Tovim ve diğ. (2016); Ahmadi-Javid ve diğ. (2017)].

Sağlık alanında gerçekleştirilen simülasyon ve modelleme ile ilgili daha önce yapılan literatür taraması çalışmaları sırasıyla; Jun ve diğ. (1999), Fone ve diğ. (2003) ve Günel & Pidd (2010)’a aittir. June ve diğ. (1999) hasta akışı (örneğin: hasta planlaması ve kabulleri, hastanın yönlendirilmesi ve akış şemaları, kaynakların planlanması ve kullanılabilirliği) ve kaynak tahsisi alanında (örneğin: yatak kullanımının planlanması, hasta odası kullanımının planlanması, personel atamalarının planlanması) Ayrık Olay Simülasyonu (AOS) yaklaşımı üzerine literatür taraması yapmışlardır. Fone ve diğ. (2003) 1980-1999 yılları arasında hastane planlaması ve organizasyonu, enfeksiyon ve bulaşıcı hastalıklar, maliyet ve ekonomik değerlendirme ve tarama ile ilgili sağlık hizmetlerinde gerçekleştirilen simülasyon modellerini gözden geçirmişlerdir. Yenilikçi bir çalışma olarak, Günel & Pidd (2010), kaza ve acil servis hizmetleri, yatarak tedavi bölümü, ayakta tedavi bölümü gibi ünitelere özgü hastane birimlerine simülasyon modellerinin uygulanmasını araştırmışlardır. Özellikle simülasyon modellerinin özgünlükten eksik olduklarını raporlayıp, sağlık hizmetlerinde performans modellemesi için kapsamlı yaklaşımların gerekliliğine işaret etmişlerdir. Bu çalışmaların hepsi zaman ve maliyet boyutlarının dahil edildiği daha kompleks simülasyon modellerinin eksikliğini vurgulamaktadırlar.

AOS hastane yöneticilerine “eğer?” sorusunu sorarak mevcut sağlık hizmeti sistemlerinin performansını değerlendirme ve yeni sistemler geliştirme olanağı sunar. AOS’nin bireysel doğası hastane ortamı gibi küçük nüfuslu yerleri modellemeyi uygun hale getirmektedir. AOS ayrıca, hasta

akışındaki değişimlerin etkisini tahmin etmek, işgücü ve kaynak kapasitelerini araştırmak veya hasta geliş oranı ile mevcut hizmet oranı arasındaki karmaşık ilişkileri incelemek için de kullanılabilir. Bu bilgiler sağlık yöneticilerine verimliliği artırmak için mevcut sistemleri yeniden yapılandırılmalarını ya da yeni sistemleri planlamalarını sağlar. (Jun ve diğ., 1999). Ayrıca, sistem dinamiği gibi (Faezipour & Ferreira (2013); Kumar & Kumar (2014); Gonul Kochan ve diğ. (2018)) ya da ajan tabanlı modelleme gibi (Cabrera ve diğ. (2011); Silverman ve diğ. (2015); Liu ve diğ. (2017)) AOS yaklaşımları dışındaki alanda da simülasyon modelleme örnekleri de vardır. Bu yöntemlere ek olarak, sezgisel optimizasyon [Aringhieri ve diğ.; Molina-Pariente ve diğ.; Xiang ve diğ. (2015)] gibi simülasyon kullanılmayan teknikler de mevcuttur.

Bu derleme çalışması kapsamında, “Sağlık hizmetlerinde son on yılda gerçekleştirilen simülasyon çalışmalarını” analiz etmek adına, bu süre zarfında yayınlanan çalışmaların sistematik olarak incelemesi yapılmıştır. Çalışmanın odak noktası ise sağlık hizmetlerinde sistem verimliliğini artırmak için kullanılan AOS modelleri olmuştur. Daha önceki çalışmaların analizi, araştırmacıların belirli bir hastane ünitesine odaklandıklarını ve bir simülasyon modelinde karmaşıklık, veri ihtiyaçları, zaman ve para gereksinimleri ile başa çıkabilmek için hastane süreçlerinin bir kısmını etkisiz hale getirdiklerini ortaya koymaktadır. Mevcut literatürden yararlanarak, simülasyon çalışmaları hastanenin uygulama ünitesine bağlı olarak beş grupta incelenmiştir. Böylece, hastanenin bölümleri (1) acil servis bölümü (ASb), (2) ayakta tedavi bölümü, (3) yatarak tedavi bölümü, (4) yoğun bakım üniteleri ve eczaneler, (5) ameliyathane olmak üzere beş gruba ayrılmıştır. Önerilen sınıflandırma şemasına Şekil 1’de gösterilmektedir. Hastanelerin farklı birimlerinde gerçekleştirmiş olan AOS çalışmalarının kapsam ve içeriğine gelecek bölümlerde ayrıntılı olarak yer verilmiştir.



Şekil 1. Simülasyon çalışmalarının sınıflandırılması

## 2.1. Acil Servis

Birinci çalışma grubu, acil servis birimlerinde (ASb) uygulanan AOS çalışmalarını içermektedir. Simülasyon çalışmaları, hastanın ortalama bekleme süresini kısaltarak,

sağlık personelini ve hizmet verilen hasta sayısını artırarak ASb’nin mevcut performansını iyileştirmek için kullanılmıştır.

Hoot ve diğ. (2008) ASb’nin gelecekteki çalışma koşullarının tahmin edilmesi ile ilgili bir çalışma sunmuşlardır. 400 gün boyunca 57.995 hastayı kaydederek ve bu verileri, ASb kalabalıklaşma problemini çözebilecek ve önleyecek bir sistem tasarlamak için talep tahmini simülasyonunda kullanmışlardır. Çalışmada, öngörülen ve fiili çalışma koşulları (hasta bekleme süresi, doluluk seviyesi, hasta kalış süresi, yatan hasta sayısı, yatış süresi ve ambulans güzergâhı değiştirme gibi) arasındaki ilişkiyi incelenmişlerdir. Khurma ve diğ. (2008), ASb işlemlerinin verimliliğini artırmak için ProModel yazılım simülasyonu gibi Yalın Üretim araçlarını kullanmışlardır.

Zeng ve diğ. (2012), Lexington, Kentucky’de hizmet veren ASb’nin potansiyel kullanımının verimliliğini artırmak için SIMUL8 yazılımını kullanarak bir simülasyon modeli tasarlamışlardır. ASb’de kalma süresi, bekleme süreleri, ekipman kullanımı, hasta girdi-çıkıtı bilgileri ve personel verileri hastaneden toplanmış ve incelenmiştir. Yapılan analizler sonrasında hemşirelerin, doktorların ve Bilgisayarlı Tomografi (BT) cihazlarının sayısının, kalış süresi, bekleme süresi ve hasta seçiminde önemli bir etkisinin olduğunu göstermişlerdir. Ortalama bekleme süresini %13, kalış süresini %5 ve hasta kayıplarını %25 oranında azaltmayı başarmışlardır.

Al-Refaeie ve diğ. (2014), Ürdün’deki bir hastanede ASb için kapasite, maliyet ve mevcut kaynak kısıtlamalarını karşılayan 10 olası çalışma senaryosu arasından en iyi senaryoyu seçmek için simülasyon ve Veri Zarflama Analizi (VZA) yöntemlerini birleştirmişlerdir.

Best ve diğ. (2014), Gana’da bir belediye hastanesinde hizmet verilen hasta sayısının artırılması amacıyla acil bakım süreci için bir AOS modeli oluşturmuşlardır. Simülasyon modeli, Arena Simülasyon Yazılımı tarafından oluşturulup; karar vericiler, personel gibi ek kaynakların etkilerini ve modifiye personel başlangıç zamanları ve mevcut sistem üzerindeki rolleri gibi kapasite tahsisinde meydana gelen değişiklikleri analiz etmişlerdir. Yapılan analizler sonucunda, bu değişikliklerin, acil sağlık sistemi için kalma süresini azaltarak hasta akışını geliştirdiğini göstermişlerdir.

Radhakrishnan ve diğ. (2014) birincil bakımda hastalar için giyilebilir sağlık izleme cihazları üzerinde çalışmışlardır. Bu cihazlarla, pratisyen hekimler hastanın kalp atışlarını, kan basıncını, solunumlarını internet üzerinden kontrol edebilmişlerdir. Böylece, hasta sırasını azaltmak, zamandan tasarruf etmek, operasyon maliyetlerini azaltmak ve çeşitli sağlık birimleri arasındaki iletişimi artırmak için giyilebilir

sağlık izleme sistemini önermişlerdir. Mevcut hasta akışını modellemek için AOS kullanılmıştır.

Lin ve diğ. (2015), Ambulans Yönlendirme (AY) stratejilerini değerlendirebilen bir model sunmuşlardır. AY aralıklarını, AY başlangıç ölçütlerini analiz etmek için üç farklı simülasyon modeli önermişlerdir.

Azadeh ve diğ. (2016), İran'daki bir hastanenin ASb hizmet kalitesini iyileştirmek için tekrarlanan damar tıkanıklığı, güvensiz ulaşım ve örnekleme gibi insana dayalı (hemşireler ve teknisyenler gibi) faktörleri analiz etmişlerdir. Bekleyen hasta sayısını azaltmak ve hataları tespit etmek için toplam 70 senaryo tanımlamışlardır. Bu yöntemleri değerlendirmek için rassal veri zarflama analizi yöntemini kullanmışlardır. Senaryoları simüle etmek için AOS modellerinden biri olan AweSim kullanmışlardır. Elde edilen sonuçlara dayanarak, başarılı sonuçlar veren senaryo modeller uygulandığında ASb'nin toplam performansının iyileştirilebileceği kanıtlanmıştır.

Ünlüyurt & Tunçer (2016) ambulansların kullanım verimliliğine odaklanmışlardır. En yakın ambulansın yoğun olduğu durumda müsait olan başka bir ambulansın yönlendirilebileceği deterministik ambulans yeri modelinin çözümü için simülasyon tekniğini kullanmışlardır. Önerilen modelin test edilmesi için çalışmada, Türkiye'nin en büyük şehri olan İstanbul'a ait verileri kullanmışlardır.

## 2.2. Ayakta Tedavi Bölümü

İkinci çalışma grubu, ayakta tedavi bölümünde uygulanan AOS çalışmalarını içermektedir. Ayakta tedavi bölümleri ve ASb'ler benzer özelliklere sahip oldukları için AOS yöntemi bu birimler için de sıklıkla kullanılmaktadır. Ayakta tedavi hizmeti veren birimlerin ASb'nden en önemli farkları ise ayakta tedavi bölümlerinde ana hedefin kapasite planlaması olmasıdır. (Günal & Pidd, 2010).

Coelli ve diğ. (2007) bir mamografi taramasının analizi için AOS modeli önermişlerdir. Önerilen çalışmada, kaynaklar ve süreçlerin tanımlanmasına dayanan Medmode 6.0 yazılımını kullanarak, beklenen hasta akış hızını göz önünde bulundurarak verimliliğin artırılmasına yönelik stratejinin belirlenmesine odaklanmışlardır. Kapamara (2007) İngiltere'deki Arden Kanser Merkezi'nde radyoterapi sürecinin Simul8 olarak adlandırılan AOS tabanlı bir yazılım kullanarak simülasyon modellemesini yapmıştır. Kapamara (2007) çalışmasında, hastalar ve ekipman olanakları arasındaki ilişki-deki darboğaz ve komplikasyonları belirlemeyi, bununla beraber hasta akışlarını araştırmaya odaklanmıştır.

J. Klassen (2009) daha fazla değişkeni ve çevresel faktörleri dikkate alabilen simülasyon tabanlı bir optimizasyon

modeli önermiştir. En iyi sonuç veren randevu çizelgesini belirlemek adına elde edilen senaryoların karşılaştırılması yapılmıştır.

Villamizar ve diğ. (2011) Brezilya'da hizmet veren bir fizyoterapi kliniğinin performansını incelemek için AOS yöntemini kullanmışlardır. İlk olarak, yeni sistemi simülasyon tekniği ile analiz etmişlerdir. Takip eden aşamada, 5 farklı senaryo vasıtasıyla hasta sayısını, personel sayısını ve hastaların varış zamanlarını analiz etmişlerdir. Rohleder ve diğ. (2011) Kanada'da hizmet veren bir ortopedi kliniğinde hasta bekleme sürelerini iyileştirmeyi amaçlamışlardır. Çalışma sonucunda ilgili klinikte hasta bekleme sürelerini kısaltmayı başarmışlardır.

Masselink ve diğ. (2012), Hollanda Kanseri Enstitüsü'nün kemoterapi ünitesinde hasta bekleme süresi ve eczane politikaları arasındaki ilişkiyi incelemişlerdir. Çalışma sonucunda, bekleme süresinin yarı yarıya azaltılmasıyla eczane maliyetlerinin sadece %1-2 oranında arttığını ortaya koymuşlardır.

Baril ve diğ. (2014) Ortopedi kliniğinin performansını değerlendirmek amacıyla kaynak planlama, randevu belirleme kuralları ve hasta gelişleri arasındaki ilişkiyi inceleyen bir yöntem önererek, literatürdeki bu boşluğu doldurmuşlardır. Çalışma sonucunda, ortalama hasta bekleme sürelerini azaltmayı başarmışlardır. Mevcut hemşire sayısı artırıldığında, ortalama hasta bekleme süresinin 30 dakikaya düştüğünü ve muayene odalarının sayısı artırıldığında hastanın ortalama bekleme süresinin 55 dakikaya düştüğünü gözlemlemişlerdir.

Peng ve diğ. (2014), MATLAB programında kodlanan AOS ve Genetik Algoritmayı (AOS-GA) kullanarak, açık erişim klinikleri ve randevusuz hastalar için en uygun çizelgeleme şablonlarını tasarlamaya çalışmışlardır. AOS ve GA tekniklerini kullanılarak, randevuların optimal yüzdesini ve optimal tahsisini bulmuşlardır. Açık erişim ve randevusuz hastaların başvuru başına ödediği ortalama maliyeti önerilen yöntemle azaltmışlardır.

Ben-Towim ve diğ. (2016), Güney Avustralya'daki bir tıp merkezinin hasta akışına odaklanmıştır. Tüm hastaneyi ayrıntılı bir şekilde temsil etmesi için Hastane Olay Simülasyon Modeli: Taburcu Edilenler'i (HOBMT) oluşturmayı önermişlerdir. İlgili çalışma, farklı hastane müdahalelerinin "eğer" analizi için HOBMT'nin olası uygulanabilirliğiyle alakalı bir vaka çalışmasını da kapsamaktadır. Aynı zamanda önerilen yöntem, ASb'nin olası sorunlarını belirlemek ve bazı çözüm senaryolarını oluşturmak için de kullanılabilir. Baril ve diğ. (2016), sağlık hizmeti veren işletmeler arasındaki ciddi rekabet ile başa çıkmak için kendi hizmet sunum süreçlerini geliştirmeyi hedeflemişlerdir.



Kanada’da bir Hematoloji-Onkoloji ayakta tedavi bölümündeki hastaların akışını iyileştirmek için AOS ve Yalın Yönetim kavramlarını birlikte kullanmışlardır.

Babashov ve diğ. (2017) Kanada’daki bir kanser tedavi merkezinde hasta bekleme sürelerini kısaltmak için tüm radyasyon tedavisi planlama sürecini ayrıntılı bir şekilde ele almışlardır. Hasta gelişlerini ve sistemde oluşabilecek kuyukların görselleştirilmesini ve modellenmesine imkan veren Simul8 yazılım paketini (SIMUL8 Corporation) kullanmışlardır Ayrıca önerilen bu model ile mevcut hizmet kalitesinin artırılacağını de belirtmişlerdir.

### 2.3. Yatarak Tedavi Bölümü

Üçüncü çalışma grubunu, hastanelerin yatarak tedavi bölümlerinde gerçekleştirilen AOS çalışmaları oluşturmaktadır. Yatarak tedavi birimleri hastane işletmeleri için önemli olan başka bir bölümdür. Bu bölümlerde genel olarak AOS modelleri, tıbbi personel sayısına, yatak doluluk oranlarına ve hastanede kalış süresine odaklanan farklı matematiksel modelleri geliştirmek ve analiz etmek için kullanılmıştır.

Kim ve diğ. (2013), ruh sağlığı ve hastalıkları kliniğinde görev yapan personelin değişen çalışma koşullarını (terapistler, psikiyatristler) dikkate alan dört farklı senaryoyu analiz etmiş ve bu senaryoların sonuçlarını mevcut sistemle karşılaştırmışlardır.

Chemweno ve diğ. (2014), Belçika’daki bir üniversite hastanesinde inme geçiren hastaların yatış sürelerini analiz etmişlerdir. Klinikte hasta akışları ve yatak kapasitesi problemlerine odaklanmışlardır. ARENA’da toplam beş senaryo oluşturulup, sonuçlar analiz edilmiştir.

Devapriya ve diğ. (2015) hastanenin yatak kapasitesi, hasta bekleme süreleri, hastaların doluluk oranı ve maliyetleri gibi temel sorunlarına odaklanmışlardır. Bu amaçla, Stratejik Yatak Analiz Modelini mevcut sağlık sisteminin kapasitesinin nasıl artırılacağını araştırmak için bir AOS modeli olarak tasarlamışlardır. Önerdikleri simülasyon

modellerinin genellenebilir ve diğer hastanelerin sağlık sistemleri için de uygulanabilir olduğunu belirtmişlerdir.

### 2.4. Diğer Hastane Birimleri

Dördüncü çalışma grubunda yoğun bakım üniteleri ve eczaneler gibi diğer birimlerde gerçekleştirilen AOS çalışmaları listelenmiştir.

Reynolds ve diğ. (2011), Londra’da hastane bünyesinde hizmet veren iki eczanenin iş yükünü incelemek için ExtendSim’de bir AOS modeli tasarlamışlardır. Önerdikleri çalışmanın sonucunda, sisteme yeni bir eczacının eklenmesi, günlük iş yükünde %10’luk ve aynı zamanda geri dönüş sürelerinde %20’lik bir düşüşe neden olmuştur. Dan ve diğ. (2016) Sichuan Üniversitesi Hastanesi’nin eczanesinde hasta bekleme sorununun çözümü için bir AOS modeli önermişlerdir. İstatistiksel sonuçlar simülasyon modelinin etkinliğini kanıtlamıştır ve simülasyon sonuçlarına göre ana problem keşfedilmiştir ve tek sıralı çok sunuculu sıralama modelinin mevcut sistemin işletim verimliliğini artırabileceğini belirtmişlerdir. Rodrigues ve diğ. (2017) hastanelerdeki karmaşık hasta akışını göstermek için bir AOS modeli tasarlamışlardır. Yoğun bakım ünitelerinde ve yatarak tedavi bölümünde kapasite ve yatak sorunlarının değişikliklerinin etkilerine yoğunlaşmışlardır. Önerdikleri model sonucunda, hasta maliyetlerini günde %18’e kadar düşürebilmişlerdir.

Derleme çalışması kapsamında taranan, sağlık sektöründe farklı hastane birimlerinde gerçekleştirilen simülasyon çalışmaları yayın yılı, yazar, ülke, kullanılan yöntemler, ele alınan problem ve sonuçlar bilgileri ile birlikte Tablo 1’de özetlenmiştir.

Son kategori ise ameliyathane süreçlerinde uygulanan AOS çalışmalarına aittir. Derleme çalışmasının odak noktası bu birimler olduğundan, ameliyathane süreçlerinin simülasyon modellemesini yapan çalışmaların literatür taramasına ayrıntılı olarak Bölüm 3’te yer verilmiştir.

**Tablo 1.** Sağlık sektöründe gerçekleştirilen simülasyon çalışmaları

<i>Acil Servis</i>					
Yayın Yılı	Yazar	Ülke	Kullanılan Yöntemler	Ele Alınan Problem	Sonuçlar
2008	Hoot ve diğ.		Talep tahmini simülasyonu	ASb kalabalıklaşma	Öngörülen ve fiili çalışma koşulları arasındaki ilişkiyi incelemişlerdir.
2008	Khurma ve diğ.		ProModel yazılım simülasyonu	ASb işlemlerinin verimliliği	Verimliliği belirli ölçüde artırmışlardır.
2012	Zeng ve diğ.	Lexington, Kentucky, ABD	SIMUL8 yazılımını kullanarak AOS	ASb’nin potansiyel kullanımının verimliliği	Ortalama bekleme süresini %13, kalış süresini %5 ve hasta kayıplarını %25 oranında azaltmayı başarmışlardır.
2014	Al-Refaie ve diğ.	Ürdün	Simülasyon ve Veri Zarflama Analizi	ASb için kapasite, maliyet ve mevcut kaynak kısıtı	10 olası çalışma senaryosu arasında en iyi senaryoyu seçmişlerdir.

2014	Best ve diğ.	Gana	Arena Simülasyon Yazılımını kullanarak AOS	Hasta sayısının artırılması	Ek kaynakların etkilerini ve kapasite tahsisinde meydana gelen değişiklikleri analiz ederek acil sağlık sistemi için kalma süresini azaltarak hasta akışını geliştirdiğini göstermişlerdir.
2014	Radhakrishnan ve diğ.		AOS	Hasta sırasını azaltmak, zamandan tasarruf etmek, operasyon maliyetlerini azaltmak ve çeşitli sağlık birimleri arasındaki iletişimi artırmak	İstenilen amaçlara ulaşmak için giyilebilir sağlık izleme sistemini önermişlerdir.
2015	Lin ve diğ.		Üç farklı AY stratejisine sahip simülasyon modeli	AY stratejilerini belirleme	AY aralıklarını, AY başlangıç ölçütlerini analiz etmişlerdir.
2016	Azadeh ve diğ.	İran	Veri Zarflama Analizi ve Awe-Sim yazılımını kullanarak AOS	ASb'nin hizmet kalitesini iyileştirmek (bekleyen hasta sayısını azaltmak ve hataları tespit etmek)	ASb'nin toplam performansının iyileştirilebileceği kanıtlamışlardır.
2016	Ünlüyurt & Tunçer	İstanbul	AOS	Ambulanların kullanım verimliliği	En yakın ambulansın yoğun olduğu durumda müsait olan başka bir ambulansın yönlendirilebileceği deterministik ambulans yeri modelini önermişlerdir.

**Ayakta Tedavi Bölümü**

Yayın Yılı	Yazar	Ülke	Kullanılan Yöntemler	Ele Alınan Problem	Sonuçlar
2007	Coelli ve diğ.		Medmode 6.0 yazılımını kullanarak AOS	Bir mamografi taramasının analizi	Beklenen hasta akış hızını göz önünde bulundurarak verimliliğin artırılmasına yönelik stratejinin belirlenmesine odaklanmışlardır.
2007	Kapamara	İngiltere	Simul8 yazılımını kullanarak AOS	Hastalar ve ekipman olanakları arasındaki ilişkideki darboğaz ve komplikasyonları ve hasta akışını incelemek	Hastalar ve ekipman olanakları arasındaki ilişkideki darboğaz ve komplikasyonları belirlemeyi, bununla beraber hasta akışlarını araştırmaya odaklanmıştır.
2009	J. Klassen		Simülasyon tabanlı optimizasyon modeli	En iyi sonuç veren randevu çizelgesini belirlemek	Daha fazla değişkeni ve çevresel faktörleri dikkate alabilen bir model önermişlerdir.
2011	Villamizar ve diğ.	Brezilya	AOS	Bir fizyoterapi kliniğinin performansını incelemek	1. Aşama: Yeni sistemi simülasyon tekniği ile analiz etmişlerdir. 2. Aşama: Senaryo analizi ile hasta sayısını, personel sayısını ve hastaların varış zamanlarını analiz etmişlerdir.
2011	Rohleder ve diğ.	Kanada	AOS	Hasta bekleme sürelerini iyileştirmek	Hasta bekleme sürelerini kısaltmayı başarmışlardır.
2012	Masselink ve diğ.	Hollanda	AOS	Hasta bekleme süresi ve eczane politikaları arasındaki ilişkiyi incelemek	Bekleme süresinin yarı yarıya azaltılmasıyla eczane maliyetlerinin %1-2 oranında arttığını ortaya koymuşlardır.
2014	Baril ve diğ.		Kaynak planlama, randevu belirleme kuralları ve hasta gelişleri arasındaki ilişkiyi inceleyen bir AOS	Ortopedi kliniğinin performansını değerlendirmek	Ortalama hasta bekleme sürelerini azaltmayı başarmışlardır.
2014	Peng ve diğ.		MATLAB programında kodlanan AOS-GA	Açık erişim klinikleri ve randevusuz hastalar için en uygun çizelgeyi tasarlamak	Randevuların optimal yüzdesini ve optimal tahsisini bulmuşlardır ve bahsedilen iki tip hastaların başvuru başına ödediği ortalama maliyeti önerilen yöntemle azaltmışlardır.
2016	Ben-Towim ve diğ.	Güney Avustralya	HOBMTE	Hasta akışını incelemek	Tüm hastaneyi ayrıntılı bir şekilde temsil eden bir model önermişlerdir.
2016	Baril ve diğ.	Kanada	AOS ve Yalın Yönetim	Hizmet sunum süreçlerini geliştirmek	Bir Hematoloji-Onkoloji ayakta tedavi bölümündeki hastaların akışını iyileştirmişlerdir.
2017	Babashov ve diğ.	Kanada	Simul8 yazılımını kullanarak, AOS	Hasta bekleme sürelerini kısaltmak için tüm radyasyon tedavisi planlama sürecini incelemek	Hasta bekleme sürelerini ciddi oranda iyileştirmeyi başarmışlardır. Ayrıca bu model ile mevcut hizmet kalitesinin artırılabilirliğini de belirtmişlerdir.

**Yatarak Tedavi Bölümü**

Yayın Yılı	Yazar	Ülke	Kullanılan Yöntemler	Ele Alınan Problem	Sonuçlar
2013	Kim ve diğ.		AOS	Personelin değişen çalışma koşullarını analiz etmek	Bu senaryoların sonuçlarını mevcut sistemle karşılaştırmışlardır.
2014	Chemweno ve diğ.	Belçika	ARENA yazılımını kullanarak AOS	İnme geçiren hastaların yatış sürelerini analiz etmek	Klinikte hasta akışları ve yatak kapasitesi problemlerine odaklanmışlardır.

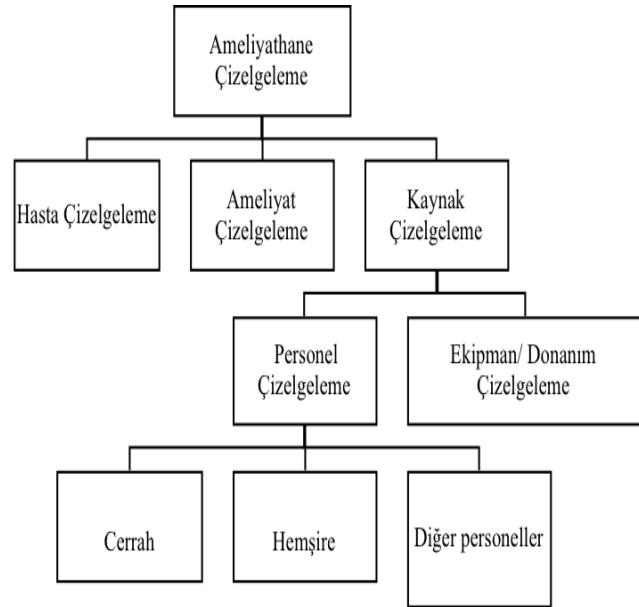
2015	Devapriya ve diğ.		AOS	Yatak kapasitesi, hasta bekleme süreleri, hastaların doluluk oranı ve maliyetleri gibi sorunları incelemek	Stratejik yatak analiz modeli ile mevcut sağlık sistemi kapasitesinin nasıl artırılabilirliği incelenmiştir.
<b>Diğer Hasta Birimleri</b>					
Yayın Yılı	Yazar	Ülke	Kullanılan Yöntemler	Ele Alınan Problem	Sonuçlar
2011	Reynolds ve diğ.	Londra	ExtendSim kullanılarak AOS	Hastane bünyesinde hizmet veren iki eczanenin iş yükünü incelemek	Sisteme yeni bir eczacının eklenmesi, günlük iş yükünde %10'luk ve aynı zamanda geri dönüş sürelerinde %20'lik bir düşüşe neden olmuştur.
2016	Dan ve diğ.	Çin	AOS	Hasta bekleme sorununu incelemek	Simülasyon sonuçlarına göre ana problem keşfedilmiştir
2017	Rodrigues ve diğ.		AOS	Yoğun bakım ünitelerinde ve yatarak tedavi bölümündeki karmaşık hasta akışı incelemek	Hasta maliyetlerini günde %18'e kadar düşürmüşlerdir.

### III. AMELİYATHANE ÇİZELGELEME SÜREÇLERİNDE GERÇEKLEŞTİRİLEN SİMÜLASYON ÇALIŞMALARI

Hastanelerdeki ameliyathane çizelgeleme süreçleri, yüksek düzeyde belirsizlik ve kaynak kısıtlarını içeren; daha da önemlisi, hastaların bekleme süreleri insan hayatına bile mal olabileceğinden, dikkatli bir şekilde planlanması gereken çok karmaşık ve maliyetli bir süreç olarak karşımıza çıkmaktadır. Ameliyathane çizelgeleme süreçlerinin planlamasını etkileyen birçok faktör vardır. Ameliyat yapmak için gerekli kaynaklar, ameliyathane personeli (cerrahlar, anestezi uzmanları, hemşireler, vb.), özel donanımlar, ameliyathaneler, anestezi sonrası bakım üniteleri ve yoğun bakım üniteleri olarak ele alınabilir. Ameliyathane çizelgeleme süreçlerinin planlanmasını etkileyen diğer bir faktör de bazı ameliyathane planlanabilirken, diğerlerinin acil durumlarda ve ani müdahale durumlarında planlanmasında zorluk yaşanabilmesidir. Bu süreç aynı zamanda tedarik süreci, iyileşme süreci, ameliyathane, acil hasta varış ve sağlık personelinin uygunluğu gibi pek çok belirsizlik içermektedir. Bu belirsizlikler, ameliyathane ekibi için bekleme süresi, ameliyathane boşalması, fazla mesai, verimlilik ve bakım kalitesi gibi birçok soruna da neden olmaktadır. Tüm bu faktörleri ve belirsizlikleri aynı anda ele almak sorunu daha da karmaşıklaştırabilmektedir. Sonuç olarak, tüm bu parametreleri ele alan modelleri çözmek zor ya da imkânsızlaşabilmektedir. Modelin yapısının zorluğundan dolayı literatürde bu konu bölümlere ayrılmıştır ve sadece acil ameliyathane planlanması veya programlanması çalışılmıştır. Tüm sistemle ilgilenen çalışmalarda genellikle problemin karmaşıklığı nedeniyle modeli çözmek için sezgisel yöntemler veya simülasyon teknikleri kullanılmıştır.

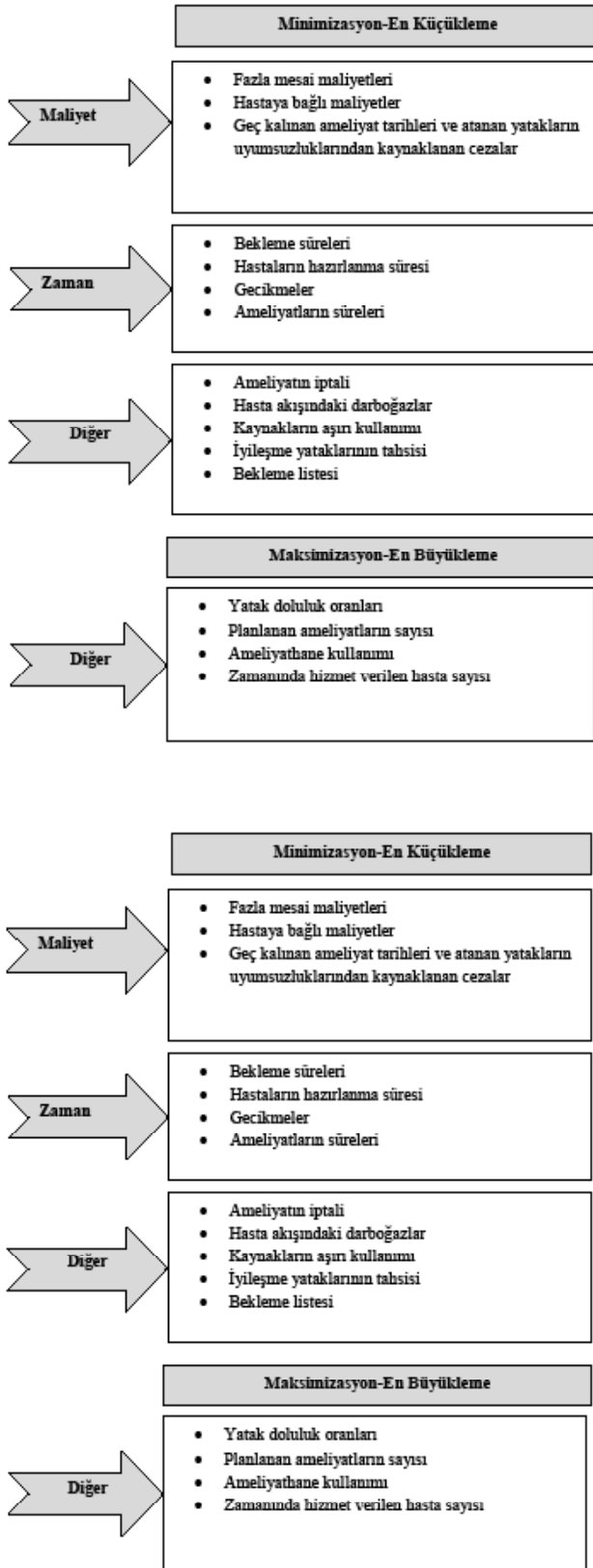
Bu çalışma kapsamında ameliyathane süreçlerinin çizelgeleme problemi, hasta, ameliyat ve kaynak üzerine odaklanılarak üç kategoride ele alınmıştır. Ayrıca kaynak çizelgeleme modelleri, personel (cerrah, hemşire ve diğer personel) ve ekipman/donanım olarak 2 grupta ele alınmıştır.

İncelenen ameliyathane çalışmalarının sınıflandırmasına Şekil 2'de yer verilmiştir.



Şekil 2. Ameliyathane çalışmalarının sınıflandırılması

Ayrıca, fazla mesai, hasta bekleme süreleri, hastaya bağlı maliyetler, ameliyatın iptal edilmesi, hastaların ameliyata hazırlanma süresi, ameliyathane tahlilleri, ameliyathanelerin dolması, hasta akışındaki darboğazlar, kaynakların aşırı kullanımı, geç kalınan ameliyat tarihleri ve atanan yatakların uyumsuzluklarından kaynaklanan cezalar, iyileşme bölümü yataklarının tahsis ve maliyetlerinin en aza indirilmesi; yatak doluluk oranları, planlanan ameliyat sayısı, ameliyathane kullanımı, hizmet verilen hasta sayısının maksimizasyonu gibi modellerin ana amaçlarına dayanan bir başka sınıflandırma grubu daha oluşturulmuştur. Çalışma kapsamında önerilen ana hedef sınıflandırma şemasına Şekil 3'te yer verilmiştir.



Şekil 3. Ameliyathane çizelgeleme çalışmalarının ana hedeflerinin sınıflandırılması

### 3.1. Hasta Çizelgeleme

İlk çalışma grubu, ameliyathanelerde uygulanan hasta çizelgeleme çalışmalarını içermektedir. Ameliyathane çizelgeleme çalışmaları, aynı zamanda hasta çizelgeleme modellerinde incelenen ayakta tedavi edilen hastalar için de kullanılmaktadır. Bu gruptaki çalışmaların çoğu, hasta bekleme süresinin, iptal edilen ameliyat sayılarının, hastaya bağlı maliyetlerin, fazla mesai masraflarının minimizasyonunu ve belirtilen süre içinde hizmet verilen hasta miktarının maksimizasyonunu hedeflemiştir.

Lamiri ve diğ. (2007) planlı ve acil ameliyatları göz önünde bulundurarak ameliyathane çizelgeleme problemi için bir matematiksel model önermişlerdir. Önerilen modelin amacı, seçilmiş hastalarının işletme maliyetlerini ve ameliyathanenin fazla mesai ücretlerinin toplamını azaltmaktır. Çözüm yöntemi olarak, Monte-Carlo Simülasyonu ve Sütun Ekleme yöntemlerini birleştiren bir yaklaşımı önermişlerdir. Lamiri ve diğ. (2009) ise daha sonra bu modeli geliştirmişlerdir.

Persson & Persson (2010) belirsiz hasta talebi ve ameliyat sürelerini dikkate alarak ameliyathane yönetim politikasını iyileştirmek için bir model önermişlerdir. Önerdikleri farklı politikaların, hasta bekleme sürelerini, operasyon iptalleri ve ameliyathane kullanımlarını nasıl etkilediğini analiz etmek için simülasyon tekniği kullanmışlardır. Bekleme olasılıklarına dayalı olarak öncelik verilen hastaları dikkate alan ameliyatları acil veya acil olmayan şeklinde sınıflandırarak planlamışlardır. Ayrıca, ameliyatların gerçek ve beklenen sürelerinin etkisini de analiz etmişlerdir. Beklenen ameliyat süreleri geçmiş verilerden toplanırken, gerçek ameliyat süreleri logaritmik normal olasılık dağılımına göre elde edilmiştir. Acil durumlar için ameliyathane ayırmanın ve personel sayısını artırmanın ameliyathanelerin performansını artırmaya yardımcı olduğunu göstermişlerdir. Önerilen model geliştirmek için İsveç'teki Blekinge Hastanesindeki Ortopedi bölümünde yapılan ameliyatların verilerini kullanılmıştır.

Niu ve diğ. (2011), Winnipeg Sağlık Bilimleri Merkezi'ndeki ameliyathanelerdeki hasta akışındaki darboğazları bulmak için bir simülasyon modeli önermişlerdir. Ameliyathane'nin simülasyon modelini oluşturmak için WITNESS yazılımını kullanmışlardır. Önerilen modelde seçilmiş acil hastaların ameliyat planını ele almışlardır. Bunun yanı sıra tüm ameliyathane sistemini simülasyona eklemek için Anestezi Sonrası Bakım Ünitesini ve Cerrahi Yoğun Bakım Ünitesini de modele dahil etmişlerdir.

Chow ve diğ. (2011), cerrahi servislerinde yatak doluluk oranlarındaki değişimleri azaltan hem cerrahları hem de hasta tiplerini dikkate alan ameliyat çizelgesi oluşturmak



adına Monte - Carlo simülasyonu ve karma tamsayı programlama modellerinin kombinasyonunu olan bir yöntem önermişlerdir. Literatürde yer alan diğer simülasyon modelleri ile karşılaştırıldığında, önerilen yazılımın kullanıcı dostu arayüzü, MS Excel tabanlı olma özelliği ve eğer/ne (what/if) analizleri yapabilme özelliği dikkat çekmektedir.

Gul ve diğ. (2011), ameliyathane çizelgeleme problemini simülasyon modeli, iki ölçütlü genetik algoritma yöntemi ve senaryo analizi olmak üzere üç aşamada ele almışlardır. Önerilen modelin amacı, hasta bekleme sürelerini, kaynakların aşırı kullanımını ve fazla mesai masraflarını en aza indirmektir. Simülasyon modelini kullanarak farklı sıralama ve hasta randevu zamanlarını analiz etmişlerdir. Çözüm yöntemi olarak iki kriterli genetik algoritma yöntemini önermişler ve farklı değişkenler göz önünde bulundurularak kullanılan genetik algoritma yönteminin etkinliğini araştırmışlardır.

Batun ve diğ. (2011) ameliyathane çizelgeleme problemi için bir karma tamsayı programlama modeli önermişlerdir. Önerilen model, her gün kaç tane ameliyathanenin açık olması gerektiğine dair kararları, her bir ameliyathane içindeki ameliyat sırasını ve her cerrahın başlangıç zamanını içermektedir. Ameliyat öncesi kesi, kesi ve kesi sonrası için ameliyat süresini hesaplamak için bir AOS modeli kurmuşlardır. Önerilen modelde ameliyathaneler ve cerrahlar önerilen modelde kaynak olarak kullanılırken, hastalar varlık olarak kullanılmıştır.

Saremi ve diğ. (2012), çoklu kaynakların kullanılabilirliğini, hasta tipi ve cerrah uzmanlığı uyumluluğunu göz önünde bulunduran bir model önermişlerdir. Ameliyat iptallerini, ameliyatların tamamlanma sürelerini, hastaların bekleme sürelerini azaltmayı hedeflemişlerdir. Ameliyat türlerini çizelgelemek için simülasyon tabanlı tabu arama yöntemini geliştirmişlerdir.

Aringhieri ve diğ. (2015), her bir zaman dilimi içinde çizelgelenen hastaları göz önünde bulundurularak ameliyathane ve iyileşme yataklarının çizelgelenmesi problemi üzerinde çalışmışlardır. Önerilen modelin literatüre en önemli katkısı, hafta sonu yatış yapması gereken hastaların modele eklenmiş olmasıdır. Hastaların bekleme sürelerini azaltmayı ve iyileşme yataklarının kullanım verimliliğini artırmayı amaçlamışlardır. Problemin polinomsal zamanda bir çözümünün olmaması (NP-Hard) nedeniyle, modeli çözmek için iki seviyeli sezgisel bir çözüm yöntemi önermişlerdir. Önerilen yöntem, İtalya'nın Cenova kentinde bulunan bir kamu hastanesinin Genel Cerrahi servisinde toplanan veriler kullanılarak sayısal olarak test edilmiş ve doğrulanmıştır.

Saadouli ve diğ. (2015) ameliyat sürelerinin, iyileşme sürelerinin ve kaynak kapasitelerinin belirsizliği göz önünde

bulundurularak hasta çizelgeleme problemi için bir karma tamsayı programlama algoritması önermişlerdir. Bu belirsizlikler ile başa çıkmak için iki fazlı modeller kullanmışlardır. Seçilmiş ameliyatları, gecikmeleri en aza indirmek için bir karma tamsayı model kullanarak ameliyathaneye atamışlardır. Çalışma kapsamında mevcut strateji ile önerilen stratejinin performansını karşılaştırmak için simülasyon modeli kullanmışlardır.

Astaraky & Patrick (2015) hasta talebi ile ameliyat tarihi arasındaki süreyi, ameliyathanede yaşanabilecek fazla mesai durumunu ve sistemde yaşanacak darboğaz nedeniyle oluşabilecek hasta bekleme sürelerini en aza indiren, Markov Karar Süreci ile ilgili problemi ele alan bir model ve çözüm yöntemi ortaya koymuşlardır. Bu çalışmanın literatüre en önemli katkısı hem ameliyathanenin hem de iyileşme yataklarının kullanım verimliliğinin dikkate alan bir ana cerrahi çizelgeleme yaratmasıdır. Önerilen politikanın başarısını göstermek için yerel bir hastaneden elde edilen verilerle model test edilmiştir.

Duma & Aringhieri (2015), ameliyatların iptallerine, gecikmelere ve fazla mesailere neden olan hastalar için gerçek zamanlı ameliyathane çizelgelemesi ile ilgilenmişlerdir. Gerçek zamanlı yönetim için çevrim içi optimizasyon yöntemini ve ameliyat tipi çizelgelemesi için de ek optimizasyon tekniklerini önermişlerdir. Modeli çözmek için melez bir simülasyon tekniğini önermişlerdir. Gerçek zamanlı hasta akışını sağlamak için gerçek zamanlı yönetim stratejisinde kullanılan çevrim içi yaklaşım ve rassallık ile başa çıkmak için simülasyon tekniklerini kullanmışlardır.

Landa ve diğ. (2015), ameliyat çizelgeleme problemini "ileri çizelgeleme" ve "atama çizelgeleme" olmak üzere iki kategoride ele almışlardır. Birinci kategoride, ameliyat tarihlerini belirlemişlerdir ve ikinci aşama olarak da hasta akışını bir sıra halinde belirlemişlerdir. İşlem sürelerinin, bilinen bir dağılım olarak rastgele bir değişken olduğunu varsamışlardır. Her bir alt problemi çözmek için tamsayı doğrusal programlama ve tüm problemi çözmek için Monte-Carlo simülasyonu ile komşuluk arama tekniklerinin karması olan iki aşamalı bir iyileştirme algoritması önermişlerdir. Ameliyathanelerin kullanımını artırmayı ve hasta iptallerini azaltmayı amaçlamışlardır.

Samudra ve diğ. (2017) Belçika Leuven Üniversite Hastanesi'nde var olan hasta çizelgeleme problemi için gerçekçi bir simülasyon modeli önermişlerdir. Oluşabilecek sağlık risklerini azaltabilmek için hasta bekleme sürelerini azaltmayı hedeflemişlerdir. Planlı olmayan hasta gelişlerinin çizelgelenmesi kararını da modele ekleyerek literatüre katkıda bulunmuşlardır ve böylelikle ameliyat zamanından önce hasta çizelgeleme planını yeniden oluşturmayı

amaçlamışlardır. Önerilen modelin performansını farklı çizelgeleme stratejileri ve senaryo analizleri kullanarak analiz etmişlerdir.

### 3.2. Operasyon Çizelgeleme

İkinci çalışma grubunu, ameliyathanelerde uygulanan operasyon çizelgeleme çalışmalarını içermektedir. Banditori ve diğ. (2013) ameliyathane odası, ameliyat sonrası yatak gibi kaynakların kullanılabilirliğini göz önünde bulundurarak, karma tamsayılı programlama, ana cerrahi planlama problemini ele almışlardır. Bekleyen hastaları sınıflandırmak için ameliyatları gruplandırmışlardır. Planlanan ameliyat sayısını en büyükmek için, gecikmeler ve yatak uyumsuzluklarından kaynaklanan cezaları en aza indirmeyi hedeflemişlerdir. Karma tamsayılı programlama optimizasyonu ve AOS yaklaşımı kullanarak modeli çözmüşlerdir. Önerilen modelin uygulaması, İtalya'nın Floransa kentindeki Meyer Üniversitesi Çocuk Hastanesi'nin verileri ile yapılmıştır. Xiang (2017) çok amaçlı ameliyathane çizelgeleme probleminin çözümü için Pareto çözüm setleri ve Karınca Kolonisi Optimizasyonu yaklaşımını içeren meta-sezgisel bir yöntem önermişlerdir. Önerilen yöntem, M.D. Anderson Kanseri Merkezi'ne ait veriler üzerinde test edilmiştir ve elde edilen hesaplama sonuçları söz konusu yöntemin çizelge tamamlanma zamanını kısaltmada, hemşirelerin fazla mesai sayısını azaltmada ve genel olarak kaynakların dengelenmesinde iyi sonuçlar elde ettiğini göstermiştir.

### 3.3. Kaynak Kısıtlı Çizelgeleme

Üçüncü çalışma grubunu, ameliyathanelerde uygulanan kaynak kısıtlı çizelgeleme çalışmaları oluşturmaktadır. Bu gruptaki çalışmalar, genellikle personel (cerrahlar veya hemşireler) atama için genetik modelleri ile ilgilenmiş ve bazı çalışmalar da hasta yatakları ve açık ameliyat odaları gibi kısıtlı kaynaklar dikkate almıştır.

Van Oostrum ve diğ. (2008) ameliyathanede gece gerçekleşen ameliyatlar için personel çizelgeleme problemi üzerinde çalışmışlardır. Cerrahların, ameliyathane ve anestezi hemşirelerinin ve diğer personeli dikkate alan bir simülasyon modeli önermişlerdir. Önerilen modelde kullanılan veriler, Erasmus Üniversitesi Tıp Merkezi hasta giriş verilerinden (acil durum hastalarının geliş zamanları, ameliyatların süreleri, hastaların anestezi sonrası bakım ünitesinde kalma süresi ve nakil süreleri) toplanmıştır. Problemin

karmaşık yapısı ve büyüklüğü nedeniyle ilk olarak ameliyathane kullanımını en üst düzeye çıkaran ve daha sonra servis ve yoğun bakım üniteleri gibi diğer hastane birimlerine olan talepleri dikkate alan iki aşamalı bir sütun oluşturma yaklaşımını çözüm yöntemi olarak önermişlerdir.

Arnaout & Kulbashian (2008), ameliyathane odalarının kullanımını en büyüklerken, ameliyatın tamamlanma zamanını en küçükmek için amaçlayan bir paralel makine çizelgeleme problemi tanımlamışlardır. Ele aldıkları problem, ameliyat süreçlerinin ve hazırlık sürelerinin belirsizliklerine sahiptir. Önerilen model, En Uzun İşlem Süresi, En Kısa İşlem Süresi, En Uzun Beklenen İşlem Süresi, En Kısa Beklenen İşlem Süresi, simülasyon tekniği kullanılarak Hazırlık Süresi ile En Uzun Beklenen İşlem süresi gibi farklı işlem süreleri stratejilerini dikkate alan buluşsal algoritmalar ile çözmüşlerdir.

M'Hallah & Al-Roomi (2014) blokmalı çizelgeleme stratejisini kullanarak seçilmiş cerrahi vakalar için ameliyathane çizelgeleme problemini ele almışlardır. Ameliyathane çizelgeleme problemini, çevirim içi ve çevirim dışı olmak üzere iki kategoride değerlendirmişlerdir. Önerilenler arasında en iyi stratejiyi bulmak için kullanıcı dostu bir simülasyon modeli önermişlerdir. Ameliyathanenin aşırı iş yükünü azaltmak için ameliyatın çevrimiçi seviyede iptal edilmesi ve iş yükünün çevrimdışı seviyede sınırlandırılması olarak iki strateji önermişlerdir.

Molina-Pariente ve diğ. (2018), belirsiz ameliyat süreleri ve öngörülemez acil ameliyatları dikkate alarak, süre ve kapasite kısıtlarının aşılmasının yaratacağı maliyeti en küçükmek için hedeflemişlerdir. Çözüm yöntemi olarak yeni Monte-Carlo simülasyon yöntemini yerel bir arama algoritması ile birleştirmişlerdir. Yazarlar elde edilen sonuçları problemin deterministik çözümü ile karşılaştırarak önerilen yöntemin maliyetleri azalttığını göstermişlerdir.

Derleme çalışması kapsamında taranan, ameliyathane çizelgeleme süreçlerinde gerçekleştirilen simülasyon çalışmaları yayın yılı, yazar, ülke, kullanılan yöntemler, ele alınan problem ve sonuçlar bilgileri ile birlikte Tablo 2'de özetlenmiştir.

**Tablo 2.** Ameliyathane çizelgeleme süreçlerinde gerçekleştirilen simülasyon çalışmaları

<i>Hasta Çizelgeleme</i>					
Yayın Yılı	Yazar	Ülke	Kullanılan Yöntemler	Ele Alınan Problem	Sonuçlar
2007-2009	Lamiri ve diğ.		Monte-Carlo Simülasyonu ve Sütun Ekleme Yöntemi	Planlı ve acil ameliyatlara göz önünde bulundurularak ameliyathane çizelgeleme	Seçilmiş hastalarının işletme maliyetlerini ve ameliyathane için fazla mesai ücretlerinin toplamını azaltmışlardır.
2010	Persson & Persson	İsveç	AOS	Belirsiz hasta talebi ve ameliyat sürelerini dikkate alarak ameliyathane yönetim politikasını iyileştirmek	Acil durumlar için ameliyathane ayırmanın ve personel sayısını artırmanın ameliyathanelerin performansını arttırmaya yardımcı olduğunu göstermişlerdir.
2011	Niu ve diğ.	Kanada	WITNESS yazılımını kullanarak AOS modeli	Ameliyathanelerdeki hasta akışındaki darboğazlar	Tüm ameliyathane sistemini simülasyona eklemek için Anestezi Sonrası Bakım Ünitesini ve Cerrahi Yoğun Bakım Ünitesini modele dahil ederek seçilmiş acil hastaların ameliyat planını ele almışlardır.
2011	Chow ve diğ.	Kanada	Monte-Carlo simülasyon modeli ile karma tamsayı optimizasyon modeli	Hem cerrahları hem de hasta tiplerini çizelgeleme	Maksimum yatak doluluğunu en aza indirmeyi başarmışlardır.
2011	Gul ve diğ.	Minnesota, ABD	Simülasyon modeli, iki ölçütlü bir genetik algoritma ve senaryo analizi	Ameliyathane çizelgeleme	Hasta bekleme sürelerini, kaynakların aşırı kullanımını ve fazla mesai masraflarını en aza indirmişlerdir.
2011	Batun ve diğ.	Minnesota, ABD	AOS, iki aşamalı – rassal karma tamsayı programlama ve Ameliyathane Odası Gruplama (Operating Room Pooling)	Ameliyathane çizelgeleme	Toplam tahmin edilen operasyon maliyetini azaltmayı amaçlamışlardır.
2012	Saremi ve diğ.	Kanada	ARENA yazılımını kullanarak, Simülasyon tabanlı tabu arama yöntemi	Ameliyat tiplerini çizelgeleme	Ameliyat iptallerini, ameliyatların tamamlanma sürelerini, hastaların bekleme sürelerini azaltmayı hedeflemişlerdir.
2015	Saadouli ve diğ.	Tunus	Sırt çantası modeli, karma tamsayı programlama algoritması ve ARENA yazılımını kullanarak AOS	Hasta çizelgeleme problemi ve mevcut strateji ile önerilen stratejinin performansını karşılaştırmak	<b>Sırt çantası modeli:</b> Eşzamanlı olarak fazla mesai süresini ve ameliyat odalarının yetersiz kullanımını en aza indirmeyi amaçlamışlardır. <b>Karma tamsayı programlama:</b> Her bir ameliyatın maksimum tamamlanma süresini ve odanın toplam bekleme süresini en aza indirmeyi amaçlamışlardır. <b>AOS:</b> Her bir ameliyat edilen hastanın atandığı iyileşme odası yataklarını en aza indirmeyi amaçlamışlardır.
2015	Astaraky & Patrick	Kanada	Simülasyona dayalı dinamik programlama	Hasta talebi ile ameliyat tarihi arasındaki süreyi, ameliyathanedeki yaşanabilecek fazla mesai durumunu ve sistemde yaşanacak darboğaz nedeniyle oluşabilecek hasta bekleme süreleri	Hem ameliyathane için hem de iyileşme yataklarının kullanım verimliliğinin dikkate alınması için bir ana cerrahi çizelgeleme yaratmışlardır.
2015	Duma & Aringhieri		AnyLogic 6.9 ve Java yazılımlarını kullanarak melez simülasyon tekniği	Ameliyatların iptallerine, gecikmelere ve fazla mesailere neden olan hastalar için gerçek zamanlı ameliyathane çizelgeleme	Bekleme listesini uzunluğuna ve bekleme zamanına bağlı olarak en aza indirmeyi amaçlamışlardır.
2015	Landa ve diğ.	Genova, İtalya	Tamsayı doğrusal rassal algoritma ve Monte-Carlo simülasyonu ile komşuluk arama tekniklerinin karışması olan iki aşamalı bir iyileştirme algoritması	Ameliyat çizelgeleme	“İleri çizelgeleme” aşaması ile ameliyat tarihlerini ve “atama çizelgeleme” aşaması ile hasta akışını bir sıra halinde belirlemişlerdir.

2017	Samudra ve diğ.	Leuven, Belçika	MATLAB ve Simulink yazılımlarını kullanarak AOS	Hasta çizelgeleme	Planlı olmayan hasta gelişlerinin çizelgelenmesi kararını da modele ekleyerek ameliyat zamanından önce hasta çizelgeleme planını yeniden oluşturmuşlardır ve oluşabilecek sağlık risklerini azaltabilmek için hasta bekleme sürelerini azaltmayı hedeflemişlerdir.
<b>Operasyon Çizelgeleme</b>					
Yayın Yılı	Yazar	Ülke	Kullanılan Yöntemler	Ele Alınan Problem	Sonuçlar
2013	Banditori ve diğ.	Floransa, İtalya	Karma tamsayı programlama optimizasyonu ile birleştirilmiş AOS	Ameliyathane odası, ameliyat sonrası yatak gibi kaynakların kullanılabilirliğini göz önünde bulunduran ana cerrahi planlama	Planlanan ameliyat sayısını en büyükmek için, gecikmeler ve yatak uyumsuzluklarından kaynaklanan cezaları en aza indirmeyi hedeflemişlerdir.
2017	Xiang	Teksas, ABD	MATLAB yazılımını kullanarak, Pareto çözüm setleri ve Karınca Kolonisi Optimizasyonu yaklaşımını içeren meta-sezgisel bir yöntem	Çok amaçlı bir ameliyathane çizelgeleme	1. Amaç fonksiyonu: Ameliyatların tamamlanma zamanlarının en küçüklenmesi 2. Amaç fonksiyonu: Kaynakların çalışma zamanının en aza indirilmesi 3. Amaç fonksiyonu: tüm kaynakların fazla mesai toplamını en küçüklemek
<b>Kaynak Kısıtlı Çizelgeleme</b>					
Yayın Yılı	Yazar	Ülke	Kullanılan Yöntemler	Ele Alınan Problem	Sonuçlar
2008	Van Oost-rum ve diğ.	Hollanda	AOS	Ameliyathanede gece gerçekleşen ameliyathane için personel çizelgeleme	Cerrahların, ameliyathane ve anestezi hemşirelerinin ve diğer personeli dikkate alan bir simülasyon modeli önermişlerdir.
2008	Arnaout & Sevag	Lübnan	ARENA yazılımını kullanarak buluşsal algoritmalar	Ameliyathane çizelgeleme	Ameliyathane odalarının kullanımını en yüklerken, ameliyatın tamamlanma zamanını en küçüklemeyi amaçlamışlardır.
2014	M'Hallah & Al-Roomi		ARENA yazılımını kullanarak AOS	Seçilmiş cerrahi vakalar için ameliyathane çizelgeleme	Ameliyathane aşırı iş yükünü azaltmak için ameliyatın çevrimiçi seviyede iptal edilmesi ve iş yükünün çevrimdışı seviyede sınırlandırılması olarak iki strateji önermişlerdir.
2015	Molina-Pariente ve diğ.	İspanya	Karma tamsayı programlama optimizasyonu ve AOS	Ameliyathane çizelgeleme	Planlanan hasta sayısının maksimizasyonu, gecikmenin en aza indirilmesi (Çizelgelenen tarih ile gerçekleşen tarih arasındaki fark), Cerrahların ameliyatları arasında bekleme süresinin en aza indirilmesi amaçlanmıştır.

#### IV. SONUÇ

Sonuç olarak yapılan ayrıntılı literatür çalışması ile mevcut süreçlerde yapılan iyileştirmeler sayesinde hastane işletmelerinin maliyetlerinde ciddi düşüşler sağlanırken hasta memnuniyetinin de artırılmasını mümkün kılan sağlık alanında gerçekleştirilen simülasyon çalışmalarının artarak devam edeceği açıktır. Bununla birlikte, sağlık sistemlerinde ve ameliyathane süreçlerinin iyileştirilmesi üzerine yapılan çalışmaların yurt dışında çok fazla olmasına karşın Türkiye'deki örneklerinin çok az olduğu saptanmıştır.

Ayrıca ameliyathane çizelgeleme süreçlerinde daha çok kısıta yer veren modellere ihtiyaç olduğu, literatürde önerilen

modellerin çoğunda sadece talep ve kapasite kısıtlarının dikkate alındığı gözlemlenmiştir. Özellikle iş gücü kapasite kısıtları (anestezi uzmanları, hemşireler, vb.), cerrahların tercih kısıtları (ameliyat sırası), malzeme gereksinimi ile ilgili kısıtlar, ekipman değişim kısıtları, yoğun bakım ve servislerde yer alan yatak sayısı gibi kısıtlı kaynaklar modele dahil edilmelidir. Bununla birlikte belirsiz ameliyat ve iyileşme sürelerine yer veren stokastik modellerin geliştirilmesine ihtiyaç vardır. Yapılan çalışmaların çoğunda bu sürelerin kesin olarak bilindiği varsayılmıştır. Literatüre bakıldığında çok amaçlı modellerin sayısının da oldukça az olduğu saptanmıştır. Ayrıca çevrimiçi çizelgeleme konusunda çok az

çalışma olduğu çalışmaların çoğunun çevrimdışı yaklaşıma sahip olduğu gözlemlenmiştir.

Literatürde tespit edilen bu boşlukları gelecek çalışmalarda doldurulabilmesi adına bu derleme çalışmasında son yıllarda gerçekleştirilen simülasyon çalışmaları sınıflandırılmış ve özetlenmiştir. Çalışmanın, bu alanda çalışan akademisyen ve profesyonellerin gelecek araştırmalarına ışık tutarak ilgili literatüre önemli katkısı olacağı düşünülmektedir. Ayrıca, sağlık alanındaki politika yapıcılar ve yöneticiler, sağlık sektörüne yönelik stratejik kararların alınmasında mevcut süreçleri iyileştirmek adına çalışma kapsamında bahsedilen yöntem ve analizleri kullanabilirler.

### Teşekkür

Bu çalışma, İstanbul Medipol Üniversitesi 2017/16 no.lu Bilimsel Araştırma Projesi (BAP) kapsamında desteklenmiştir.

### Kaynaklar

- [1] Schroedl, C. J., Corbridge, T. C., Cohen, E. R., Fakhraan, S. S., Schimmel, D., McGaghie, W. C., ve Wayne, D. B. (2012). Use of Simulation-Based Education to Improve Resident Learning And Patient Care in The Medical Intensive Care Unit: A Randomized Trial. *J Crit Care*, 27(2), 217-213.
- [2] Jansson, M., Kääriäinen, M. ve Kyngäs, H. (2013). Effectiveness of Simulation-Based Education in Critical Care Nurses' Continuing Education: A Systematic Review. *Clinical Simulation in Nursing*, 9(9), 355-60.
- [3] Ballangrud, R., Hall-Lord, M. L., Persenius, M., ve Hedelin, B. (2014). Intensive Care Nurses' Perceptions of Simulation-Based Team Training for Building Patient Safety in Intensive Care: a Descriptive Qualitative Study. *Intensive Crit Care Nurs*, 30(4), 179-187.
- [4] Wenk, M., ve Popping, D. M. (2015). Simulation for Anesthesia in Obstetrics. *Best Pract Res Clin Anaesthesiol*, 29(1), 81-86.
- [5] Warren, J. N., Luctkar-Flude, M., Godfrey, C., & Lukewich, J. (2016). A Systematic Review of the Effectiveness of Simulation-Based Education on Satisfaction and Learning Outcomes in Nurse Practitioner Programs. *Nurse Educ Today*, 46, 99-108.
- [6] Mirza, S., & Athreya, S. (2017). Review of Simulation Training in Interventional Radiology. *Acad Radiol*, 25(4), 529-539.
- [7] Camp, S., & Legge, T. (2018). Simulation as a Tool for Clinical Remediation: An Integrative Review. *Clinical Simulation in Nursing*, 16, 48-61.
- [8] Reed, S., Remenye-Prescott, R., ve Rees, B. (2017). Effect of Venepuncture Process Design on Efficiency and Failure Rates: A Simulation Model Study for Secondary Care. *Int J Nurs Stud*, 68, 73-82.
- [9] Fabian, M.P., Stout, N.K., Adamkiewicz, G., Geggel, A., Ren, C., Sandel, M., Levy, J.I. (2012). The Effects of Indoor Environmental Exposure Pediatric Asthma: A Discrete Event Simulation Model. *Environmental Health*, 11(1), 66.
- [10] Chemweno, P., Thijs, V., Pintelon, L., & Van Horenbeek, A. (2014). Discrete Event Simulation Case Study: Diagnostic Path for Stroke Patients in A Stroke Unit. *Simulation Modelling Practice and Theory*, 48, 45-57.
- [11] Ariöz, U., ve Günel, B. (2016). Evaluation of Hearing Loss Simulation Using A Speech Intelligibility Index. *Turkish Journal of Electrical Engineering & Computer Sciences*, 24, 4193-4207.
- [12] Pan, F., Reifsnider, O., Zheng, Y., Proskorovsky, I., Li, T., He, J., ve Sorensen, S. V. (2017). Modeling Clinical Outcomes in Prostate Cancer: Application and Validation of the Discrete Event Simulation (DES) Approach. *Value in Health*. 21(4), 416-422.
- [13] Nikakhtar, A., ve Hsiang, S. M. (2014). Incorporating The Dynamics of Epidemics in Simulation Models of Healthcare Systems. *Simulation Modelling Practice and Theory*, 43, 67-78.
- [14] Viana, J., Brailsford, S. C., Harindra, V., ve Harper, P. R. (2014). Combining Discrete-Event Simulation and System Dynamics in A Healthcare Setting: A Composite Model for Chlamydia Infection. *EJOR*, 237(1), 196-206.
- [15] Orbann, C., Sattenspiel, L., Miller, E., ve Dimka, J. (2017). Defining Epidemics in Computer Simulation Models: How Do Definitions Influence Conclusions?. *Epidemics*, 19, 24-32.
- [16] Sadatsafavi, H., Niknejad, B., Zadeh, R., ve Sadatsafavi, M. (2016). Do Cost Savings From Reductions in Nosocomial Infections Justify Additional Costs of Single-Bed Rooms in Intensive Care Units? A simulation Case Study. *J Crit Care*, 31(1), 194-200.
- [17] Granja, C., Almada-Lobo, B., Janela, F., Seabra, J., ve Mendes, A. (2014). An Optimization Based on Simulation Approach to The Patient Admission Scheduling Problem Using A Linear Programming Algorithm. *J Biomed Inform*, 52, 427-437.
- [18] Ben-Tovim, D., Filar, J., Hakendorf, P., Qin, S., Thompson, C., ve Ward, D. (2016). Hospital Event Simulation Model: Arrivals to Discharge-Design, Development and Application. *Simulation Modelling Practice and Theory*, 68, 80-94.
- [19] Ahmadi-Javid, A., Jalali, Z., ve Klassen, K. J. (2017). Outpatient Appointment Systems in Healthcare: A Review of Optimization Studies. *EJOR*, 258(1), 3-34.
- [20] Jun, J. B., Jacobson, S. H., ve Swisher, J. R. (1999). Application of Discrete-Event Simulation in Health Care Clinics: A Survey. *The Journal of the Operational Research Society*, 50(2), 109-123.
- [21] Fone, D., Hollinghurst, S., Temple, M., Round, A., Lester, N., Weightman, A., Roberts, K., Coyle, E., Bevan, G., Palmer, S. (2003). Systematic Review of The Use and Value of Computer Simulation Modelling in Population Health and Health



- Care Delivery. *Journal of Public Health Medicine*, 25(4), 325-335.
- [22] Günal, M. M., ve Pidd, M. (2017). Discrete Event Simulation for Performance Modelling in Health Care: A Review of The Literature. *Journal of Simulation*, 4(1), 42-51.
- [23] Faezipour, M., ve Ferreira, S. (2013). A System Dynamics Perspective of Patient Satisfaction in Healthcare. *Procedia Computer Science*, 16, 148-156.
- [24] Kumar, D., ve Kumar, D. (2014). Modelling Rural Healthcare Supply Chain in India using System Dynamics. *Procedia Engineering*, 97, 2204-2212.
- [25] Gonul Kochan, C., Nowicki, D. R., Sauser, B., ve Randall, W. S. (2018). Impact of Cloud-Based Information Sharing on Hospital Supply Chain Performance: A System Dynamics Framework. *International Journal of Production Economics*, 195, 168-185.
- [26] Cabrera, E., Taboada, M., Iglesias, M. L., Epelde, F., ve Luque, E. (2011). Optimization of Healthcare Emergency Departments by Agent-Based Simulation. *Procedia Computer Science*, 4, 1880-1889.
- [27] Silverman, B. G., Hanrahan, N., Bharathy, G., Gordon, K., ve Johnson, D. (2015). A Systems Approach to Healthcare: Agent-Based Modeling, Community Mental Health, and Population Well-Being. *Artif Intell Med*, 63(2), 61-71.
- [28] Liu, Z., Rexachs, D., Epelde, F., ve Luque, E. (2017). An Agent-Based Model For Quantitatively Analyzing and Predicting The Complex Behavior of Emergency Departments. *Journal of Computational Science*, 21, 11-23.
- [29] Aringhieri, R., Landa, P., Soriano, P., Tánfani, E., ve Testi, A. (2015). A Two Level Metaheuristic for The Operating Room Scheduling and Assignment Problem. *Computers & Operations Research*, 54, 21-34.
- [30] Molina-Pariente, J. M., Hans, E. W., Framinan, J. M., ve Gomez-Cia, T. (2015). New Heuristics for Planning Operating Rooms. *Computers & Industrial Engineering*, 90, 429-443.
- [31] Xiang, W., Yin, J., ve Lim, G. (2015). An Ant Colony Optimization Approach for Solving An Operating Room Surgery Scheduling Problem. *Computers & Industrial Engineering*, 85, 335-345.
- [32] Hoot, N. R., LeBlanc, L. J., Jones, I., Levin, S. R., Zhou, C., Gadd, C. S., ve Aronsky, D. (2008). Forecasting Emergency Department Crowding: A Discrete Event Simulation. *Ann Emerg Med*, 52(2), 116-125.
- [33] Khurma, N., Bacioiu, G. M., ve Pasek, Z. J. (2008). Simulation-Based Verification of Lean Improvement for Emergency Room Process. *Proceedings of the 40th Conference on Winter Simulation Conference*, 1490-1499.
- [34] Zeng, Z., Ma, X., Hu, Y., Li, J., ve Bryant, D. (2012). A Simulation Study to Improve Quality of Care in The Emergency Department of A Community Hospital. *J Emerg Nurs*, 38(4), 322-328.
- [35] Al-Refaie, A., Fouad, R. H., Li, M.-H., ve Shurrab, M. (2014). Applying Simulation and DEA to Improve Performance of Emergency Department in A Jordanian Hospital. *Simulation Modelling Practice and Theory*, 41, 59-72.
- [36] Best, A. M., Dixon, C. A., Kelton, W. D., Lindsell, C. J., ve Ward, M. J. (2014). Using Discrete Event Computer Simulation to Improve Patient Flow in A Ghanaian Acute Care Hospital. *Ann J Emerg Med*, 32(8), 917-922.
- [37] Radhakrishnan, S., Duvvuru, A., ve Kamarthi, S. V. (2014). Investigating Discrete Event Simulation Method to Assess the Effectiveness of Wearable Health Monitoring Devices. *Procedia Economics and Finance*, 11, 838-856.
- [38] Lin, C. H., Kao, C. Y., & Huang, C. Y. (2015). Managing Emergency Department Overcrowding via Ambulance Diversion: A Discrete Event Simulation Model. *J Formos Med Assoc*, 114(1), 64-71.
- [39] Azadeh, A., Baghersad, M., Farahani, M.H., ve Zarrin, M. (2015). Semi-Online Patient Scheduling in Pathology Laboratories. *Artificial Intelligence in Medicine*, 64(3), 217-226.
- [40] Ünlüyurt, T., ve Tunçer, Y. (2016). Estimating The Performance of Emergency Medical Service Location Models via Discrete Event Simulation. *Computers & Industrial Engineering*, 102, 467-475.
- [41] Coelli, F. C., Ferreira, R. B., Almeida, R. M., ve Pereira, W. C. (2007). Computer Simulation and Discrete-Event Models in The Analysis of A Mammography Clinic Patient Flow. *Comput Methods Programs Biomed*, 87(3), 201-207.
- [42] Kapamara, T., Sheibani, K., Petrovic, D., Haas, O. C. L., ve Reeves, C. (2014). A Simulation of A Radiotherapy Rreatment System: A Case Study of A Local Cancer Center. in *Proceedings of ORP3, EURO: Cadiz, Spain*, 29-35.
- [43] J. Klassen, K., ve Yoogalingam, R. (2009). Improving Performance in Outpatient Appointment Services with a Simulation Optimization Approach. *Production and Operations Management*, 18(4), 447-458.
- [44] Villamizar, J. R., Coelli, F. C., Pereira, W. C., ve Almeida, R. M. (2011). Discrete-Event Computer Simulation Methods in The Optimisation of A Physiotherapy Clinic. *Physiotherapy*, 97(1), 71-77.
- [45] Rohleder, T. R., Lewkonja, P., Bischak, D. P., Duffy, P., ve Hendijani, R. (2011). Using Simulation Modeling to Improve Patient Flow at An Outpatient Orthopedic Clinic. *Health Care Manag Sci*, 14(2), 135-145.
- [46] Masselink, I. H. J., van der Mijden, T. L. C., Litvak, N., ve Vanberkel, P. T. (2012). Preparation of Chemotherapy Drugs: Planning Policy For Reduced Waiting Times. *Omega*, 40(2), 181-187.
- [47] Baril, C., Gascon, V., ve Cartier, S. (2014). Design and Analysis of An Outpatient Orthopaedic Clinic Performance with Discrete Event Simulation and Design of Experiments. *Computers & Industrial Engineering*, 78, 285-298.
- [48] Peng, Y., Qu, X., ve Shi, J. (2014). A Hybrid Simulation and Genetic Algorithm Approach to Determine The Optimal Scheduling Templates for Open Access Clinics Admitting

- Walk-In Patients. *Computers & Industrial Engineering*, 72, 282-296.
- [49] Baril, C., Gascon, V., Miller, J., ve Côté, N. (2016). Use of A Discrete-Event Simulation in A Kaizen Event: A Case Study in Healthcare. *EJOR*, 249(1), 327-339.
- [50] Babashov, V., Aivas, I., Begen, M. A., Cao, J. Q., Rodrigues, G., D'Souza, D., Lock, M., Zaric, G. S. (2017). Reducing Patient Waiting Times for Radiation Therapy and Improving the Treatment Planning Process: a Discrete-event Simulation Model (Radiation Treatment Planning). *Clin Oncol (R Coll Radiol)*, 29(6), 385-391.
- [51] Kim, B., Elstein, Y., Shiner, B., Konrad, R., Pomerantz, A. S., ve Watts, B. V. (2013). Use of Discrete Event Simulation to Improve A Mental Health Clinic. *Gen Hosp Psychiatry*, 35(6), 668-670.
- [52] Chemweno, P., Thijs, V., Pintelon, L., ve Van Horenbeek, A. (2014). Discrete Event Simulation Case Study: Diagnostic Path for Stroke Patients in A Stroke Unit. *Simulation Modelling Practice and Theory*, 48, 45-57.
- [53] Devapriya, P., Stromblad, C. T., Bailey, M. D., Frazier, S., Bulger, J., Kemberling, S. T., ve Wood, K. E. (2015). Strategic Hospital Bed Capacity Decisions. *J Med Syst*, 39(10), 130.
- [54] Reynolds, M., Vasilakis, C., McLeod, M., Barber, N., Mounsey, A., Newton, S., Jacklin, A., Franklin, B. D. (2011). Using Discrete Event Simulation to Design A More Efficient Hospital Pharmacy for Outpatients. *Health Care Manag Sci*, 14(3), 223-236.
- [55] Dan, Z., Xiaoli, H., Weiru, D., Li, W., ve Yue, H. (2016). Outpatient Pharmacy Optimization Using System Simulation. *Procedia Computer Science*, 91, 27-36.
- [56] Rodrigues, F., Zaric, G. S., ve Stanford, D. A. (2017). Discrete Event Simulation Model for Planning Level 2 "Step-Down" Bed Needs Using NEMS. *Operations Research for Health Care*. 17, 42-54.
- [57] Lamiri M., Drezo, J., Xie, X. (2007). Operating Room Planning with Random Surgery Times. In: *Proceedings of the 3rd Annual IEEE Conference on Automation Science and Engineering*, Sept 22–25. Scottsdale, AZ, USA.
- [58] Lamiri, M., Grimaud, F. ve Xie, X. (2009). Optimization Methods for A Stochastic Surgery Planning Problem. *International Journal of Production Economics*, 120(2), 400-410.
- [59] Persson, M. J ve Persson, J. A. (2010). Analysing Management Policies for Operating Room Planning Using Simulation. *Health Care Manag Sci*, 13(2), 182-191.
- [60] Niu, Q., Peng, Q., El Mekki, T., Tan, Y. Y., Bruant, H. ve Bernaerdt, L. (2011). Performance Analysis of The Operating Room Using Simulation. *Proceedings of the Canadian Engineering Education Association*.
- [61] Chow, V. S., Puterman, M. L., Salehirad, N., Huang, W. ve Atkins, D. (2011). Reducing Surgical Ward Congestion Through Improved Surgical Scheduling and Unavailable Simulation. *Production and Operations Management*, 20(3), 418-430.
- [62] Gul, S., Denton, B. T., Fowler, J. W. ve Huschka, T. (2011). Bi-Criteria Scheduling of Surgical Services for An Outpatient Procedure Center. *Production and Operations Management*, 20(3), 406-417.
- [63] Batun, S., Denton, B. T., Huschka, T. R. ve Schaefer, A. J. (2011). Operating Room Pooling and Parallel Surgery Processing Under Uncertainty. *INFORMS Journal on Computing*, 23(2), 220-237.
- [64] Saremi, A., Jula, P., El Mekki, T. ve Wang, G. G. (2013). Appointment Scheduling of Outpatient Surgical Services in A Multistage Operating Room Department. *International Journal of Production Economics*, 141(2), 646-658.
- [65] Aringhieri, R., Landa, P., Soriano, P., Tãnfani, E. ve Testi, A. (2015). A Two Level Metaheuristic for The Operating Room Scheduling and Assignment Problem. *Computers & Operations Research*, 54, 21-34.
- [66] Saadouli, H., Jerbi, B., Dammak, A., Masmoudi, L. ve Bouaziz, A. (2015). A Stochastic Optimization and Simulation Approach for Scheduling Operating Rooms and Recovery Beds in An Orthopedic Surgery Department. *Computers & Industrial Engineering*, 80, 72-79.
- [67] Astaraky, D. ve Patrick, J. (2015). A Simulation Based Approximate Dynamic Programming Approach to Multi-Class, Multi-Resource Surgical Scheduling. *EJOR*, 245(1), 309-319.
- [68] Duma, D. ve Aringhieri, R. (2015). An Online Optimization Approach for The Real Time Management of Operating Rooms. *Operations Research for Health Care*, 7, 40-51.
- [69] Landa, P., Aringhieri, R., Soriano, P., Tãnfani, E. ve Testi, A. (2016). A Hybrid Optimization Algorithm for Surgeries Scheduling. *Operations Research for Health Care*, 8, 103-114.
- [70] Yahia, Z., Eltawil, A. B. ve Harraz, N. A. (2016). The Operating Room Case-Mix Problem Under Uncertainty and Nurses Capacity Constraints. *Health Care Manag Sci*, 19 (4), 383-394.
- [71] Samudra, M., Demeulemeester, E., Cardoen, B., Vansteenkiste, N. ve Rademakers, F. E. (2017). Due Time Driven Surgery Scheduling. *Health Care Manag Sci*, 20 (3), 326-352.
- [72] Banditori, C., Cappanera, P. ve Visintin, F. (2013). A Combined Optimization {Simulation Approach to The Master Surgical Scheduling Problem. *IMA Journal of Management Mathematics*, 24(2), 155-187.
- [73] Xiang, W. (2017). A Multi-Objective Aco for Operating Room Scheduling Optimization. *Natural Computing*, 16(4), 607-617.
- [74] van Oostrum, J. M., Van Houdenhoven, M., Vrieling, M. M., Klein, J., Hans, E. W., Klimek, M., Wullink, G., Steyerberg, E. W. ve Kazemier, G. (2008). A Simulation Model for Determining The Optimal Size of Emergency Teams on Call in The Operating Room at Night. *Anesthesia & Analgesia*, 107(5), 1655-1662.

- [75] Arnaout, J. ve Kulbashian, S. (2008). Maximizing The Utilization of Operating Rooms with Stochastic Times Using Simulation. *In Proceedings of The 40th Conference on Winter Simulation, Winter Simulation Conference.* pages 1617-1623.
- [76] Beliën, J., Demeulemeester, E. ve Cardoen, B. (2009). A Decision Support System for Cyclic Master Surgery Scheduling with Multiple Objectives. *Journal of Scheduling*, 12(2), 147.
- [77] MHallah, R. ve Al-Roomi, A. (2014). The Planning and Scheduling of Operating Rooms: A Simulation Approach. *Computers & Industrial Engineering*, 78, 235-248.
- [78] Molina-Pariente, J. M., Hans, E. W., & Framinan, J. M. (2018). A Stochastic Approach for Solving The Operating Room Scheduling Problem. *Flexible Services and Manufacturing Journal*, 30(1-2), 224-251.

# Türkçe Kısa Mesajları Sınıflandıran Çok Katmanlı Süzgeçleme Mimarisi ve Akıllı SMS Kutusu

## A Novel Multi-tier Filtering Architecture and Smart SMS Box for Classification of Turkish Short Messages

Halil İbrahim BESTİL<sup>1</sup> , M. Amaç GÜVENSAN<sup>1</sup> 

<sup>1</sup>Yıldız Teknik Üniversitesi, Elektrik-Elektronik Fakültesi, Bilgisayar Mühendisliği Bölümü, 34220, Esenler / İstanbul

### Öz

Kısa mesaj servisi en yaygın kullanılan iletişim kanallarından biridir. Kişisel, reklam, promosyon, etkinlik bildirim, satış onaylama vb. birçok farklı amaç için kullanılan kısa mesajların sayısının her geçen gün artması takip edilebilirliklerini ve aranan mesajın mesaj kutusunda hızlıca bulunmasını zorlaştırmaktadır. Öte yandan istenmeyen mesajların mesaj kutusunu doldurması ve mesaj kirliliği yaratması bir diğer önemli problemdir. Bu çalışmada Türkçe Kısa Mesajları sınıflandırmak ve akıllı bir SMS kutusu oluşturmak amacıyla Çok Katmanlı Süzgeçleme Mimarisi önerilmiştir. Ayrıca bu mimari bir Android uygulaması üzerinde gerçekleştirilmiştir. Bu mimari yardımı ile telefona ulaşan mesajlar *kişisel*, *ticari*, *otp kodları*, *hatırlatıcı* ve *istenmeyen* adı altında 5 farklı kategoriye ayrılmaktadır. Önerilen mimari Kara Liste, Regex, Makine öğrenmesi ve Beyaz Liste süzgeçlerinden oluşmaktadır. Makine öğrenmesi süzgeçinde Naive Bayes, Bayes Net, J48 ve Random Forest algoritmalarının performansları incelenmiştir ve Random Forest %87'lik başarısı nedeniyle uygulamada tercih edilmiştir. Önerilen çok katmanlı yapı sayesinde mesaj sınıflandırma süresi azaltılırken sınıflandırma başarısı %93'e yükseltilmiştir. Ayrıca başarının yükseltilmesinde seçilen özellikler ve Zemberek kütüphanesinin kullanımı ile kelimelerin türlerinin ve köklerinin elde edilmesi önemli rol oynamıştır.

**Anahtar Kelimeler:** Türkçe SMS Sınıflandırma, Çok Katmanlı Süzgeçleme Mimarisi, Mobil Uygulama, Kara ve Beyaz Liste, Kurallı İfadeler, Makine Öğrenmesi

### Abstract

The short message service is one of the most commonly used communication channels. Increasing number of short messages that are used for many different purposes including personal, advertising, promotion, event notification, sales approval, etc. makes it difficult to keep track of messages and to find the target message quickly in the message box. On the other hand, another important problem is the spam messages filling the message box unnecessarily. In this study, a novel Multi-tier Filtering Architecture is proposed to classify Turkish Short Messages and to create a smart SMS box. This architecture is also implemented on an Android application. Received messages and old messages are divided into 5 different categories under *personal*, *commercial*, *otp codes*, *reminders* and *spam messages* with the help of the proposed architecture. This architecture consists of 4 tiers including Black List, Regex, Machine Learning, and White List filters. The performance of Naive Bayes, Bayes Net, J48 and Random Forest algorithms were examined and Random Forest was preferred for mobile application due to its success of 87%. Thanks to the proposed multi-tier system architecture, the classification success rate has been increased to 93% while the message classification time is reduced. In addition, the selected features, the use of the Zemberek library and the acquisition of the types and roots of the words within the message played an important role in the promotion of success.

**Keywords:** Turkish SMS Messages, Classification, Multi-tier Filtering Architecture, Mobile Application, Black and White List, Regex, Machine Learning

## I. GİRİŞ

Mobil haberleşmede en yaygın kullanılan iletişim biçimlerinden bir tanesi kısa mesaj servisedir (SMS – Short Message Service). SMS mesajlarının kullanımının yaygınlaşması mesajların niteliklerini ve tiplerini arttırmıştır. Günümüzde SMS kişisel mesajlaşmaların yanı sıra; pazarlama, mobil doğrulama, kargo takip hizmetleri ve bankacılık işlemleri gibi birçok alanda kullanılmaktadır.

Kısa mesaj servisi ucuz ve kullanımı kolay olması sebebi ile duyuru, reklam, promosyon gibi ticari içeriklerin dağıtılmasında kullanılan yöntemlerin başında gelmektedir. Telefon numaraları kişiye mahsus ve benzersiz olduğu için firmalar güvenlik ve doğrulama kodlarını SMS olarak göndermektedir. Toplantı, uçuş vb. birçok etkinliği organize eden şirketler bilet örneklerini kullanıcılara SMS yoluyla ulaştırmaktadır. Aynı zamanda kurumlar yaklaşan etkinliklerini kısa mesajlar ile kullanıcılarına hatırlatmaktadır. SMS gelen kutusuna düşen farklı nitelikteki mesaj sayısının artması, kullanıcının mesajlarını takip etmesini ve yönetmesini gün geçtikçe zorlaştırmaktadır.

Günümüz yaşam şartlarında zamanın etkin ve verimli kullanılması kaçınılmaz hale gelmiştir. İnsanlar zamanı etkin kullanmaya gayret etmekte, zamandan tasarruf edebilecekleri hizmetleri talep etmekte ve bu hizmetlere para harcamaktadır. Örneğin e-posta araçlarından Gmail ve Outlook; e-postaları sosyal, önemsiz, tanıtım gibi başlıklar altında sınıflandırarak elektronik postaların kullanım ve erişim kolaylığını arttırmaktadır. E-postalar gibi SMS'lerin de kategoriler altında sınıflandırılması, SMS hizmetini kullananlar için kolaylık ve zaman tasarrufu sağlayacaktır.

Literatürde yapılan çalışmalar incelendiğinde, mesajları ve e-postaları sınıflandırma işleminin çeşitli makine öğrenmesi algoritmaları ve doğal dil işleme yöntemleri kullanılarak oluşturulan tek veya çok katmanlı mimariler ile sağlandığı gözlenmektedir. Literatürde, e-postaların farklı kategoriler altında sınıflandırılması probleminin çözümü için çok sayıda çalışma [1,2] bulunmasına rağmen, kısa mesajların sınıflandırılmasına yönelik problem için yapılan çalışmalar sınırlı sayıdadır.

Kısa mesajların sınıflandırılması hakkında Healy, Matt [3] ve arkadaşlarının yaptıkları çalışmada Destek Vektör Makineleri ve Naive Bayes sınıflandırıcılar kullanılarak karar tabanlı sınıflandırıcılar oluşturulmuştur. Najadat [4] ve Joe [5] yaptıkları çalışmalarda kısa mesaj gövdelerinden oluşturdukları sözcük vektörlerine göre kısa mesajları sınıflandırmışlardır. Mahmoud ve Ahmet [6] oluşturdukları yapay bağışıklık sistemi ile istenmeyen (spam) kısa mesaj olan ve olmayan mesajları sınıflandırmışlardır. Deepshikha ve Monika [7] yapay sinir ağları yardımı ile kısa mesajları önceden belirlenmiş

şaka, festival ve istenmeyen gibi kategorilere ayırmışlardır. Ghayda ve Hind [8] vektör uzay modeli ve TF-IDF tekniğini temel alarak kısa mesajları önceden belirlenmiş kategoriler (durumlar, tebrik, arkadaşlık ve satış) altında sınıflandırmışlardır. Parimala [9] yaptığı çalışmada doküman frekans eşik değerini ve Destek Vektör Makinelerini kullanarak sınıflandırma işlemini gerçekleştirmiştir. Deng vd. [10] tarafından yapılan çalışmada, Naive Bayes sınıflandırıcısı kullanarak kullanıcı cihazında sınıflandırma yapılmasını sağlamıştır. Geliştirdikleri sistem kullanıcının girdilerine göre kendi-kendini eğitmekte ve bu sayede eğitim verileri sürekli güncel tutulmaktadır. Dipak [11], çalışmasında J48, Naive Bayes gibi farklı algoritmaları karşılaştırarak istenmeyen kısa mesajları filtrelemiştir. Kuruvilla [12] yaptığı çalışmada popüler istenmeyen mesaj filtreleme tekniklerini karşılaştırmalı olarak incelemiştir. Bahsedilen çalışmalarda kullanılan veri setleri ve çıkartılan özellikler İngilizce içerikli mesajların sınıflandırılmasına yönelik uygulamalardır. Türkçe yapılan çalışmalarda da İngilizce için kullanılanlara benzer teknikler kullanılmıştır ancak dillerin farklı olması sebebiyle metinlerden çıkartılan özellikler değişmiştir. Uysal ve arkadaşlarının [13] yaptığı çalışmada Türkçe kısa mesajları içeriklerine göre etkin öznitelik seçme ve örüntü sınıflandırma yöntemlerini kullanan bir süzgeç geliştirilmiştir. Esma vd. [14] kara liste, beyaz liste ve anlamsal/biçimsel özellikler katmanlarından oluşan üç katmanlı hibrit mesaj filtreleme mimarisi ile istenmeyen ve normal mesajları birbirinden ayıran sınıflandırma işlemini gerçekleştirmişlerdir.

Bu çalışmada, bahsedilen diğer çalışmalardan farklı olarak, hem beyaz liste/kara liste yaklaşımını hem tarih/otp (Tek Kullanımlık Şifre – One Time Password) kodları ön-süzgeçlerini içeren hem de kısa mesaj içeriklerini biçimsel ve anlamsal yönleri ile değerlendirerek sınıflandırmayı gerçekleştiren bir mimari önerilmektedir. Önceki çalışmalarda mesajlar genellikle “istenmeyen” ve “normal” olarak iki sınıfa ayrılırken, bu çalışmada kısa mesajlar *kişisel*, *hatırlatıcı*, *ticari*, *otp kodları* ve *istenmeyen* olmak üzere toplamda beş kategori altında sınıflandırılmaktadır. Ön süzgeçlerin oluşturulmasında tarih ve otp kodlarını algılayan Regex'ler (kurallı ifadeler) kullanılmaktadır. Beyaz/kara liste ve ön süzgeçlerin kullanılmasıyla makine öğrenmesi modeline iletilen SMS sayısı azaltılmıştır. Kara listede bulunan numaralardan gelen veya gövdesinde kara listede bulunan kelimeleri bulunduran kısa mesajlar sınıflandırma filtresine gönderilmeden “*istenmeyen*” mesaj olarak değerlendirilmektedir. Aynı şekilde bahsedilen ön-süzgeçler yardımı ile içerisinde zaman ifadesi içeren mesajlar “*hatırlatıcı*”, otp kodu bulunduran kısa mesajlar “*otp*” olarak değerlendirilmektedir.

Mesajların biçimsel ve anlamsal özelliklerine göre sınıflandırılmasında *Naive Bayes*, *Bayes Net*, *J48* ve *Random*



*Forest* algoritmalarının performansları incelenmiştir. Analizler sonucunda başarıyı en yüksek *Random Forest* sınıflandırma yöntemi tercih edilerek kısa mesajları sınıflandıran bir Android mobil uygulaması geliştirilmiştir.

Önerilen sistem mimarisi Şekil 1’de ifade edilmiştir. Şekil 1’de sarı ile çevrelenmiş alan çok katmanlı süzgeçleme mimarisinin sınırlarını ifade etmektedir. Çok katmanlı süzgeçleme mimarisine ulaşan kısa mesajlar filtrelenerek ait olduğu sınıfa karar verilmektedir. Elde edilen sınıf bilgisi ile birlikte kısa mesaj uygulama veri tabanına kaydedilerek uygulama arayüzünde listelenmeye hazır hale gelmektedir.

“Çok katmanlı Süzgeçleme Mimarisi” başlığında çok katmanlı sınıflandırma mimarisinden ve alt başlıklar halinde mimarinin süzgeçleme katmanlarından bahsedilmiştir. “Uygulama” başlığı ile tasarlanan mimarinin Android ortamında gerçekleşmesi ile geliştirilmiş uygulama genel hatlarıyla tanıtılmıştır. “Performans Analizi” kısmında adım adım yapılan çalışmaların sonuçlara etkisi irdelenmiştir. “Uygulama Metrikleri” bölümünde sistemin genel performansının karşılaştırmalı analizine yer verilmiştir. “Sonuç” bölümünde elde edilen çıktılar yorumlanmış, sistem genel hatlarıyla özetlenmiştir.

## II. Çok Katmanlı Süzgeçleme Mimarisi

Önerilen çok katmanlı mesaj süzgeçleme mimarisi ile cihaza ulaşan mesaj dört farklı süzgeçten geçirilmektedir. Süzgeçleme mimarisine giren kısa mesajın önce kara listede olup olmadığı kontrol edilmektedir. Eğer kısa mesajın göndereni veya mesaj içeriğindeki bir kelime kara liste içerisinde bulunuyorsa mesaj “istenmeyen” olarak etiketlenmektedir.

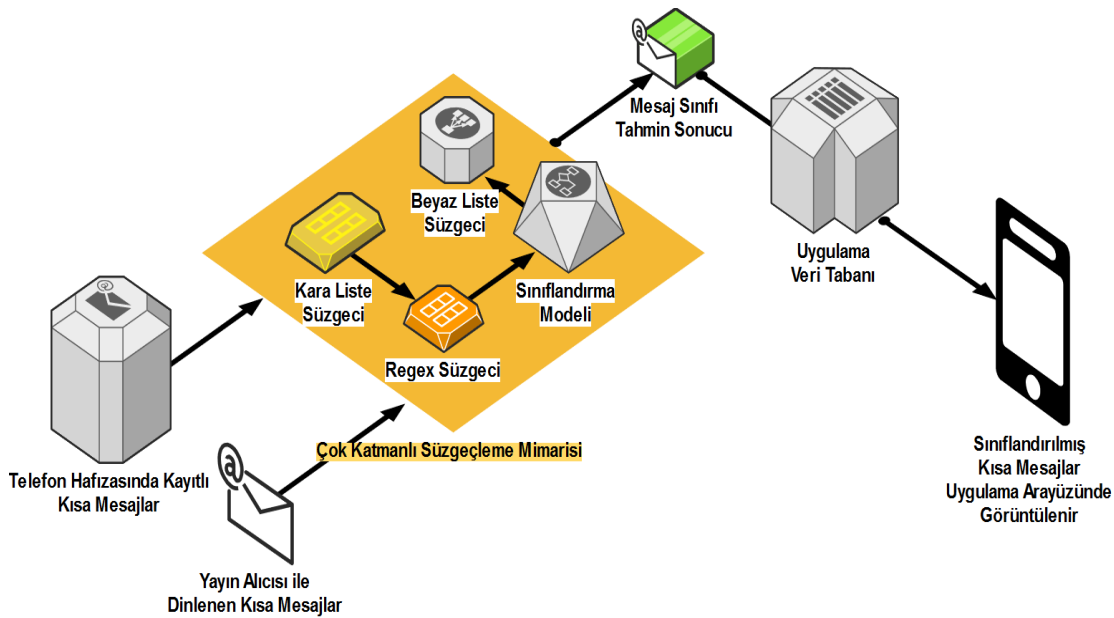
Bu aşamayı geçen kısa mesaj henüz etiketlenmemiş ise mesaj içerisinde OTP kodları ve tarihler ile eşleşen Regex’lerin bulunduğu diğer bir filtreye tabii tutulur. Eğer mesaj içeriğinde Regex’ler ile bir eşleşme varsa mesaj ilgili olduğu Regex’in sınıfıyla, “otp” veya “hatırlatıcı”, olarak etiketlenmektedir.

Önceki iki süzgece de takılmadan ilerleyebilmiş bir kısa mesaj var ise mesajın sınıf bilgisi *Random Forest* algoritması ile oluşturulmuş sınıflandırma modeli çalıştırılarak elde edilmektedir. Beyaz liste yaklaşımı da modelin çalışmasının ardından devreye girmektedir. Belirlenmiş koşullara uygunluk durumunu değerlendiren bu yaklaşıma ilerleyen paragraflarda değinilmiştir. Çok katmanlı süzgeçleme sayesinde sınıflandırma algoritmasının çalıştırılma sayısı azaltılmıştır. Önerilen çok katmanlı süzgeç mimarisinde kullanılan algoritmanın akış diyagramı Şekil 2’de ifade edilmiştir.

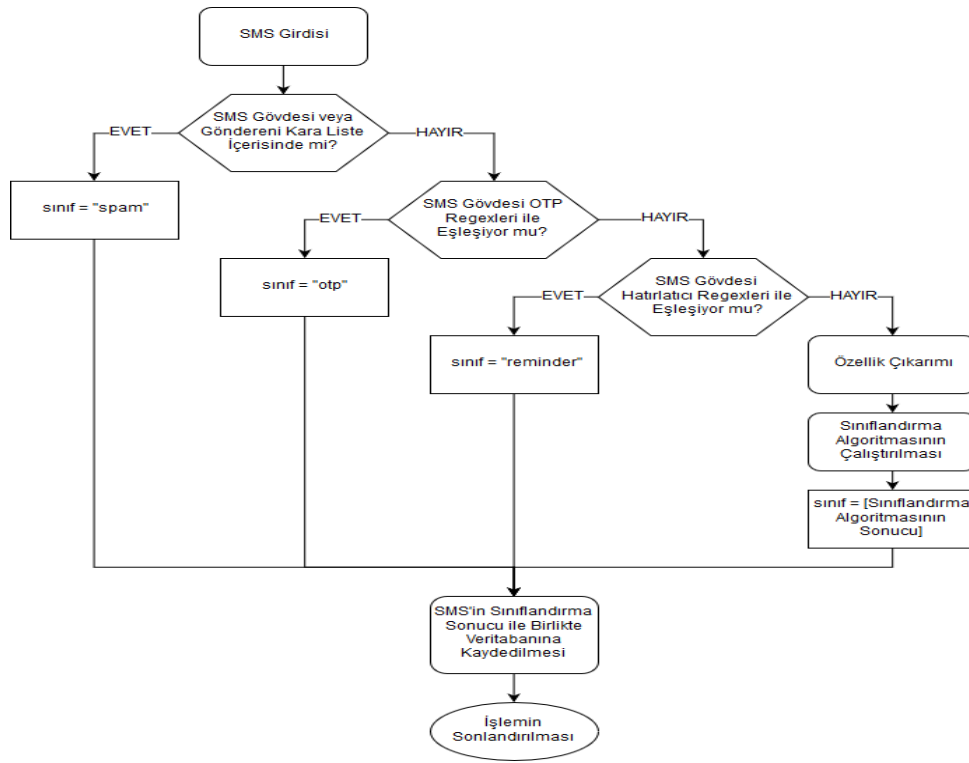
### 2.1 Kara Liste Süzgeci

Ön süzgeçleme yöntemlerinden biri olan kara ve beyaz liste yöntemi anahtar kelime bazlı filtreleme uygulamalarında sıkça kullanılan yöntemlerden biridir. Bu yöntemde kullanıcı, beyaz (güvenli) ve kara (istenmeyen) olarak tanımlanan iki sınıf için kelime listelerini oluşturur.

Herhangi bir metin kara liste süzgecinden geçirilmek istendiğinde metnin içerdiği tüm kelimeler “kara liste” elemanları ile karşılaştırılır, eğer metin kara liste elemanlarından birini ya da birkaçını içeriyorsa “kara liste” süzgeci pozitif çıktı üretir. Negatif çıktı ise metin içerisinde herhangi bir kara liste elemanının bulunmaması sonucunda üretilir.



Şekil 1. Sistem Mimarisi



Şekil 2. Süzgeçleme Mimarisinin Akış Diyagramı

## 2.2 Regex ile OTP ve Hatırlatıcı Süzgeci

Metin içerisinde belirli bir dizilimde bulunan ancak içerikleri farklı olabilen birtakım kelimeler bulunabilir. Örneğin tarihler zaman dilimi ifade edebilir ancak sunumları 24.03.1997 ya da 11/04/2024 gibi farklı şekillerde olabilir. Benzer problemler ile SMS sınıflandırma sürecinde karşılaşılmaktadır. Bankaların onay kodları, kargo takip numaraları ve tarih hatırlatıcıları gibi formatı aynı ancak içeriği farklı olan SMS'lerin sınıflandırılması "Regex"ler yardımı ile hızlı bir şekilde yapılabilir.

Regex'ler metin içerisinden belli kurallara uyan alt metinler elde etmek için kullandığımız bir yöntemdir. Metin içerisinde geçen yararlı özellik niteliğindeki düzenli alt metinlerin sınıflandırma modeli çalıştırılmadan süzgeçlenmesi sistem performansına olumlu katkı sağlayacaktır. Bu sebeple sistem mimarisine ara katman olarak Regex temelli "hatırlatıcı" ve "otp kodları" süzgeçleri eklenmiştir.

"Hatırlatıcı" Regex'i ile tarih ifade eden mesajlar süzgeçlenerek "hatırlatıcı" sınıfında uygulama veri tabanına kaydedilmektedir. Benzer şekilde "otp kodu" Regex formatları ile eşleşen bir kısa mesaj ile karşılaşıldığında mesajın sınıfı "otp kodu" olarak etiketlenmektedir. Tarih yazımlarındaki 24.03.2018, 24/03/2018 gibi farklılıklar, otp kodlarındaki biçimsel farklılıklar göz önünde bulundurularak her süzgeç için sık kullanılan formatlar incelenmiş ve

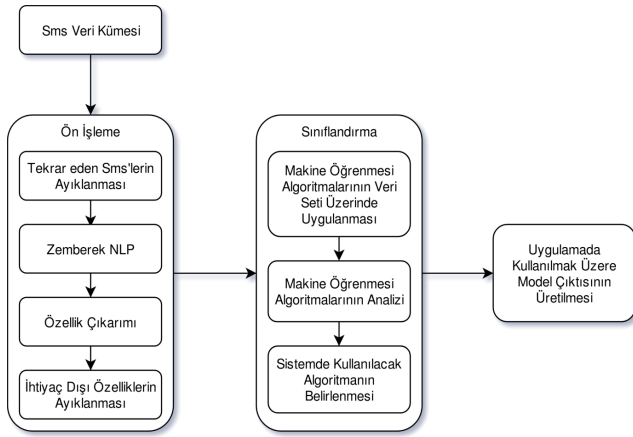
tespit edilen formatlar ile eşleşen Regex'ler geliştirilip sisteme entegre edilmiştir.

## 2.3 Kısa Mesajların Makine Öğrenmesi Yöntemleri ile Sınıflandırılması

Mesajların farklı kategoriler altında sınıflandırılarak organize edilmesi bir metin sınıflandırma problemidir. Sistem girdi olarak SMS mesajı almakta ve mesajın etiket bilgisini "kişisel", "ticari", "hatırlatıcı", "otp kodları" ve "istenmeyen" olarak tespit etmektedir.

Çok katmanlı bir sınıflandırma mimarisinin gerçekleştirilmesi için, veri setinin toparlanması, ön işlemlerden geçirilmesi ve özellik çıkarımı gibi izlenmesi gereken adımlar bulunmaktadır. Önerilen çok katmanlı sınıflandırma mimarisini gerçeklerken Şekil 3'te ifade edilen yol haritası izlenmiştir.

Gönüllü kısa mesaj sağlayıcılardan elde edilen mesajlar ayıklama, özellik seçimi gibi ön işleme aşamalarına tabii tutulmuş, ardından algoritmaların veri seti üzerindeki başarımlarını ölçebilmek için çeşitli testler gerçekleştirilmiştir. Yapılan testler sonucunda en güvenilir algoritma belirlenmiş ve model çıktısı alınmıştır. Sonuçların gerçek zamanlı ölçülebilmesi ve sınıflandırma modelini kullanıcıya ulaştırabilmek için bir Android uygulaması geliştirilmiştir.



Şekil 3. Sistemin Oluşturulması Sırasında İzlenen Temel Adımlar

### 2.3.1 Veri setinin oluşturulması

Metinlerin sınıflandırılabilmesi için eğitim ve test veri kümelerine ihtiyaç duyulmaktadır. Veri kümesini oluşturabilmek için 11 kişiden 2402 adet kısa mesaj toplanmıştır. Kişilerden çalışma kapsamında kısa mesajlarının alınmasına ve gerçekleştirilecek tüm akademik çalışmalarda kullanılmasına dair onay alınmıştır. Benzerlik gösteren veya aynı kısa mesajlar elenerek mesaj sayısı 1780'e düşürülmüştür. Ardından mesajlar incelenerek önceden belirlenmiş “*kişisel*”, “*ticari*”, “*hatırlatıcı*”, “*otp kodları*” ve “*istenmeyen*” etiketleriyle etiketlenmiştir.

Tablo 1. Mesaj Sınıfları ve Bulundurdıkları Mesaj Miktarları

Mesaj Sınıfı	Miktar	%
Kişisel	839	47,13
Ticari	245	13,76
Otp Kodları	132	7,41
Hatırlatıcı	510	28,65
İstenmeyen	54	3,03

### 2.3.2 Örnek mesajlar

Mesaj tiplerinin öne çıkan karakteristik özellikleri bulunmaktadır. Örneğin “hatırlatıcı” tipindeki mesajlarda “bilet” ve “toplantı” kelimeleri çokça kullanılmakta, “ticari” tipteki mesajlarda ise “kampanya” ve “hediye” kelimeleri öne çıkmaktadır. Ayrıca biçimsel olarak incelendiğinde “istenmeyen” mesajların içeriğinde büyük harf oranının daha fazla olması gibi biçimsel-karakteristik özellikler de bulunmaktadır. Tablo 2’de her mesaj tipi için örnekler sunulmuştur. Sunulan örneklerde bazı şirket isimleri ve özel veriler değiştirilerek bilginin gizliliği sağlanmaya çalışılmıştır Bir sonraki

bölümde mesajların sınıflandırılabilmesi için yapılan özellik çıkarımı çalışmaları detaylandırılacaktır.

Tablo 2. Sınıflar için Örnek Mesajlar

Mesaj Sınıfı	Mesaj Gövdesi	Gönderen
Kişisel	Merhaba, nasılsın?	551.123.4567
Kişisel	Dün derste aldığın notların fotoğrafını gönderebilir misin?	A. Yiğit İlkadam
Hatırlatıcı	Merhaba Adem Bey, ABS filmine 24.03.2019 tarihine almış olduğunuz bilet onaylanmıştır. Keyifli seyirler dileriz. B125	BILETOMNIA
Hatırlatıcı	Merhaba Adem, Haftaya cuma ( 24/03/2020) tarihine düzenlediğimiz toplantıya katılman ekibimizi gururlandıracaktır.	Faruk Dağcı
Ticari	Süpper Kampanya!! Atikali Petrolerinden yapacağımı 100TL ve üzeri alışverişlerinizde 20TL market harcaması hediye!	ATİKALİ PET-ROLLERİ
Ticari	Sana özel promosyon bu ay sonuna kadar yapacağın ilk 2 sürüş %20 indirimli. Ayrıntılı bilgi : ubr.com/flasdw	Uber
Otp Kodları	Değerli Müşterimiz, 24.03.2018 tarihinde yapmış olduğunuz 1223TL değerindeki alışverişinizi tamamlamanız için doğrulama kodunuz : A34sfS Keyifli alışverişler dileriz. B125	JETTOBANK
Otp Kodları	Satış Bilgileri : 09.02.2019 18:00 ISTANBUL-ESKİSEHIR YHT PNR No : S15 6QWE549 (65 TL) İyi yolculuklar dileriz... TCDD Taşımacılık A.Ş	TCDD EYBIS
İstenmeyen	KAMPANYA!!! HEMEN AL, HAYATINA SAĞLIK KAT! go.gl/as46dw58	554.859.9999
İstenmeyen	ANTALYADA DENİZE SIFIR LUX DAIRE VE YAZLIKLAR BU SEZONDA ZONA OZEL %50 YE VARAN İNDİRİMLİ FİYATLARLA. KACIRMAYIN : http://tinyurl.com/asdwlmm	ANTALYA BE-ACH

### 2.3.3 Özellik çıkarımı

Mesajların karakterini belirleyen mesajın göndereni, gönderim zamanı, büyük/küçük harf frekansı, kaç kelimededen oluştuğu vb. biçimsel birçok özellik bulunmaktadır. Aynı zamanda mesajın karakteristiğini belirleyen anlamsal özelliklerinin de göz önünde bulundurulması gereklidir. Anlamsal özelliklerin çıkarımı için Türkçe için geliştirilmiş doğal dil işleme kütüphanesi olan Zemberek kullanılmıştır. Zemberek yardımıyla cümle içerisindeki kelimelerin tipleri (*kelime*, *kısaltma*, *email*, *url* ve *tarih*) belirlenmiştir. Kelimeler köklerine ayrılarak “*kampanyalar*” ve “*kampanyası*” gibi kelimelerin aynı kelime olduğu algılanmaktadır. Tablo 4’te,

başlangıçta yapılan çalışmalar sonucu belirlenen özellikler ve tanımları bulunmaktadır.

Kısa mesaj içerisinde *URL*, *E-posta adresi*, *tarih* gibi içerik olarak farklı olan ancak ifade ettiği tip aynı olan simgeler (token) bulunabilir. Örneğin “;” (noktalı virgül) karakteri de bir noktalama işaretidir, “!” (ünlem işareti) de bir noktalama işaretidir. Kelime vektörlerini oluştururken “\*” ve “!” gibi aynı tipteki simgelerin tip ismi ile kullanılması özellik seçiminde noktalama işaretlerinin sınıf belirlemedeki etkisini göstermesini sağlayacaktır.

Simgelerin yerine simge tiplerinin sonuçlara etkisini inceleyebilmek için yeni bir yaklaşım geliştirilmiştir. Bu yaklaşımda oluşturulacak “roots” özelliği için tipi “kelime” olan simgeler kelimenin kökü çıkarılarak, tipi “kelime” olmayan tüm simgeler ise simge tipi ile kaydedilmektedir. Örneğin “Çantamda” simgesi bir kelimedir, “çanta” olarak değerlendirilecektir. Ancak “24.03.2019” simgesi kelime değil, bir tarihtir. Dolayısıyla bu simge yerine simgenin tipi olan “DATE” yazılacaktır. Bahsedilen simge değerlendirme yaklaşımı Tablo 3’te örneklendirilmiştir.

**Tablo 3.** Simge Değerlendirme Yaklaşımı Örneği

Girdi (SMS Gövdesi)	Çıktı(Kökler)
”Kampanya 30.01.2018 tarihine kadar ‘B3SEW4’ kodu ile indirimli alışveriş şansı : <a href="http://www.abcd.com">http://www.abcd.com</a> ”	”kampanya DATE tarih kadar WORDWITHAPOSTROPHE kod indirim alışveriş şansı URL”
”Merhaba, 07.05.2016* TARİHİNDE YAPTIGINIZ ALISVERISTEN GALAXY ‘S5’ CEP TELEFONU KAZANDINIZ HEDİYENİZİ ALMAK İCİN HEMEN ARAYIN 021.296.70098 B364”	”merhaba DATE PUNCTUATION tarih yap alışveriş galaxy WORDWITHAPOSTROPE cep telefon kazan hediye al için hemen ara NUMBER WORDWITHAPOSTROPE “

Her bir mesaj örneği için yukarıdaki özellik çıkarımlarının yapılmasının ardından WEKA kütüphanesinin sağladığı *StringToWordVector* filtresi yardımı ile yeni özelliklerin çıkarımında bulunulmuştur. *StringToWordVector* [15], *String* özniteliklerini, bir dizi metinden elde edilmiş özelliklere dönüştüren bir filtredir. Yeni özellikler filtrelenmiş sözcüklerden oluşmaktadır.

### 2.3.4 Sınıflandırma

Çalışma kapsamında *Naive Bayes*, *Bayes Net*, *J48* ve *Random Forest* algoritmaları veri seti üzerinde çalıştırılmış ve elde edilen sonuçlar kıyaslanmıştır. Sınıflandırma çalışması yapılırken özelliklerin sonuçlara etkisini incelemek için yeni özellikler eklenerek modeller tekrar test edilmiştir. Doğrulama yöntemi olarak *k katlamalı çapraz*

*doğrulama* (k-fold cross validation) kullanılmıştır ve yöntemdeki k değeri 10 olarak belirlenmiştir.

Naive Bayes [16] bir sınıflandırma/kategorilendirme algoritmasıdır ve Bayes Teoremine dayanan bir sınıflandırma tekniğidir. Basit bir ifadeyle, bir Naive Bayes sınıflandırıcı, bir sınıftaki belirli bir özelliğin varlığının başka herhangi bir özelliğin varlığına bağlı olmadığını varsayar. Örneğin, bir meyve yeşil, yuvarlak ve çapı yaklaşık 10 cm ise bir karpuz olarak düşünülebilir. Bu özellikler birbirlerine veya diğer özelliklerin varlığına bağlı olsa bile, bu özelliklerin tümü, bu meyvenin bir karpuz olması olasılığına bağımsız olarak katkıda bulunur ve bu yüzden “Naif” olarak bilinir.

Bayes Net [17], veriden modeller oluşturmak için kullanılabilen bir olasılıksal grafik modeli türüdür. Tahmin, belirsizlik algılama, tanılama, otomatik iç görü, akıl yürütme, zaman dizisi tahmini ve belirsizlik altında karar verme gibi çok çeşitli görevlerde kullanılabilirler. Bayes Net, bir dünyanın modellenen bir kısmının durumlarını yansıtır ve bu durumların olasılıklarla nasıl bağlantılı olduğunu anlatır. Örneğin, araba motoru normal çalışıyor veya sorun veriyor olabilir, vücudunuz hasta veya sağlıklı olabilir.

J48 [18][19], bir karar ağacı algoritmasıdır. Karar Ağacı algoritmaları, özniteliklerin – birtakım örnekler için davranış biçimlerini bulmayı sağlar. Bu algoritmalar, hedef değişkenin tahmin edilmesi için kurallar üretir. Ağaç sınıflandırma algoritması yardımıyla verilerin kritik dağılımı kolayca anlaşılabilir. C4.5 algoritmasının açık-kaynak JAVA gerçekleştirilmesi olan J48 algoritması ID3’ün bir uzantısıdır. J48 ek olarak eksik değerler, karar ağaçları budaması, sürekli öznitelik değer aralıkları, kuralların türetilmesi gibi birtakım özellikleri bulundurmaktadır.

Random Forest [20], hiper-parametrelili ayar yapmadan bile, çoğu zaman iyi bir sonuç üreten, esnek, kullanımı kolay bir makine öğrenmesi algoritmasıdır. Aynı zamanda en çok kullanılan algoritmalarından biridir, çünkü hem kullanımı kolaydır hem de sınıflandırma ve regresyon görevleri için kullanılabilir.

### 2.4 Beyaz Liste Süzgeci

Sistemin son katmanı olan “*Sınıflandırma Modeli*” katmanına yardımcı olarak tasarlanmış bu katman, sınıflandırma modelini sonucunu inceleyerek koşullu çıktılar üretmektedir.

Örneğin: Hiçbir süzgece takılmadan sınıflandırma modelinin çalıştırıldığı katmana kadar gelebilen dört kısa mesaj



“A”, “B”, “C” ve “D” kısa mesajları olarak adlandırın. A kısa mesajın içeriği hatırlatıcı olsun, B’nin içeriği istenmeyen kısa mesaj özelliği gösterecek. C kısa mesajı da kişisel kısa mesajların özelliklerini barındırsın. D kısa mesajı ise içerisinde ticari nitelikte öğeler buldursun.

A, B, C ve D mesajlarını telefon rehberinde kayıtlı, yani beyaz liste içerisinde değerlendirilecek bir kişinin gönderdiğini varsayalım. Bu durumda mesajların kişisel olarak mı etiketlenmesi gerekir, yoksa tahmin edilen etiketi ile mi? Bu karışıklığın önüne geçebilmek için makine öğrenmesi modelinin yaptığı tahmini belirli parametreler ile kontrol edilerek sonuç iyileştirilmeye çalışılmıştır.

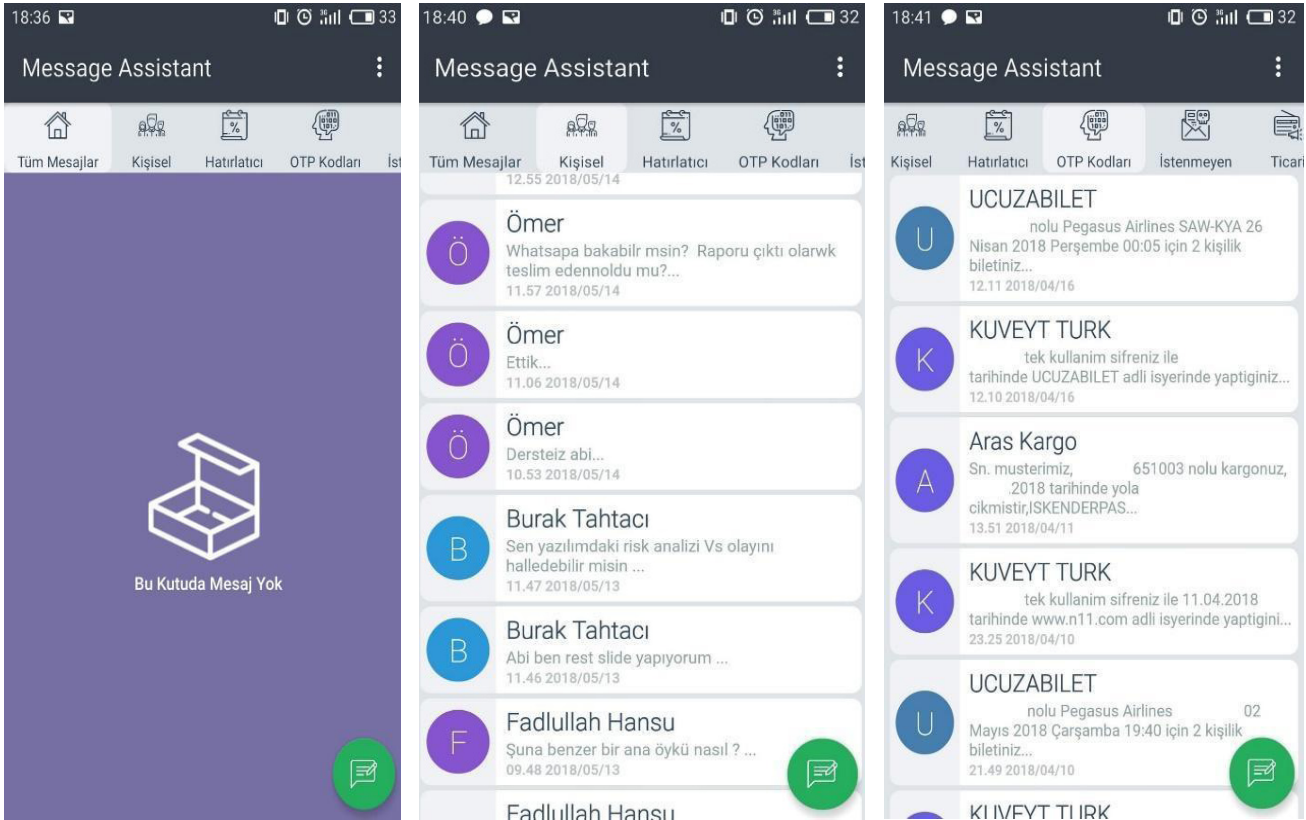
Model kısa mesajın etiketini tahmin ettikten sonra üç şey kontrol edilir: “Mesaj göndereni kayıtlı mı?”, “Modelin tahmin ettiği etiket ‘hatırlatıcı’ mı?” ve “Modelin tahmin ettiği etiket ‘otp kodu’ mu?”. Eğer gönderen kayıtlı ise ve tahmin edilen etiket “hatırlatıcı” ise A mesajında olacağı gibi mesajın etiketi “hatırlatıcı” olacaktır. Çünkü hatırlatıcı özelliği kişisel özelliğine baskın gelmiştir. Aynı şekilde, gönderen kayıtlı ve tahmin edilen etiket “otp kodu”

ise sonuç “otp kodu” olacaktır. Ancak “hatırlatıcı” ve “otp kodu” sınıflarının dışında rehberde kayıtlı bir kişinin ticari veya istenmeyen mesaj atmış olması düşünülemez. Bu sebeple B ve D mesajlarının sınıflandırma sonuçlarında olacağı gibi sınıflandırma sonucu “kişisel” olacaktır. C mesajı ise zaten “kişisel” özellikleri barındırdığı için model tahmini de kişisel olacak, rehberde kayıtlı olması ile “kişisel” mesaj olduğu teyit edilecektir.

Uygulanan bu yöntemde model çıktı doğruluğunun beyaz liste içeriği ile artırılması amaçlanmıştır.

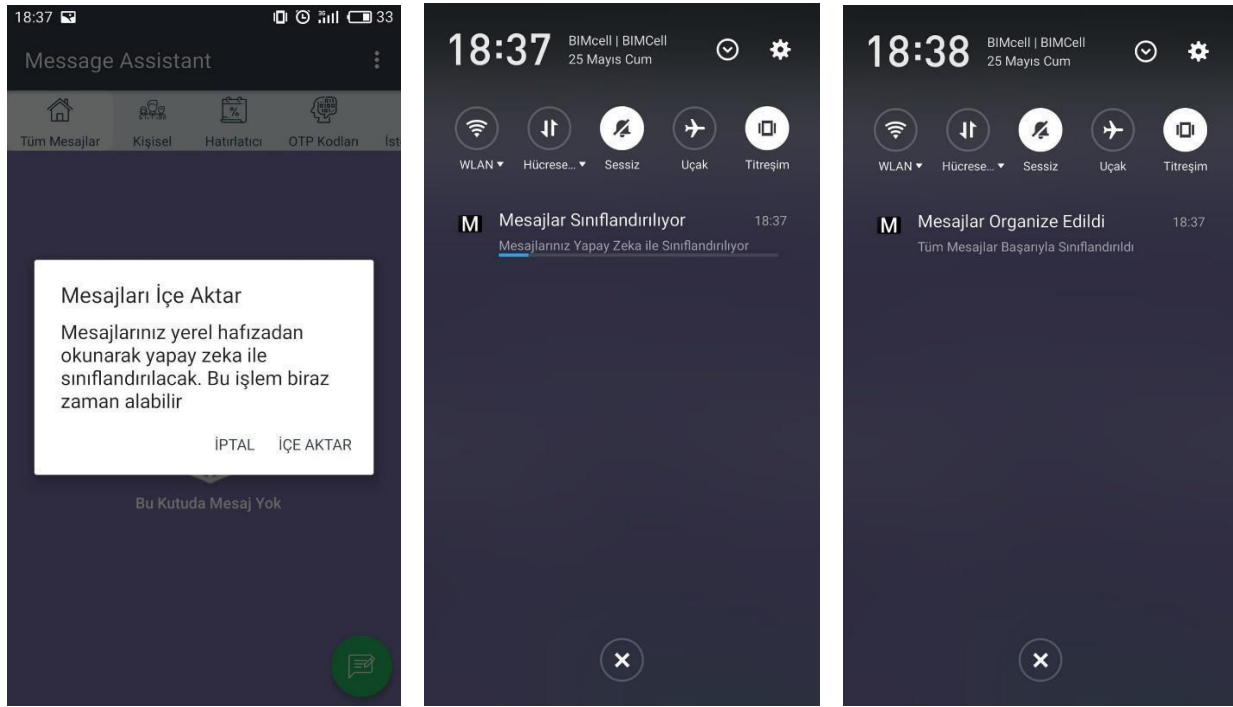
### III. UYGULAMA

Üretilen çok katmanlı süzgeçleme mimarisi *Android Studio* üzerinde JAVA dili kullanılarak gerçekleştirilmiş ve bir mobil uygulama geliştirilmiştir. Geliştirilen uygulama mesaj gönderme, alma, okuma ve silme gibi standart özellikleri bu- lundurmakla birlikte cihazdaki kısa mesajları sınıflandırılmış bir biçimde kullanıcıya sunmaktadır.



Şekil 4. Uygulama Arayüzü (Mesajların bazı bölümleri bilgi gizliliği gereği maskelenmiştir.)





Şekil 5. Geçmiş Mesajların Toplu Bir Şekilde Sınıflandırılması

Şekil 4’de gösterildiği gibi uygulama arayüzünde “Tüm mesajlar”, “Kişisel”, “Hatırlatıcı”, “OTP Kodları”, “İstenmeyen” ve “Ticari” başlıklarında kısa mesajlarını listeleme ekranları bulunmaktadır. “Tüm Mesajlar” tüm kısa mesajların birlikte listelendiği bir arayüzdür. “Kişisel” ve diğer ekranlarda ise ilgili kategorideki kısa mesajlar listelenmektedir. Bu ekranlar arasında kaydırarak geçiş yapılabilmesi sağlanmıştır.

Uygulama, bulundurduğu yayın alıcısı (*broadcast receiver*) ile telefona gelecek mesajları dinlemektedir. Aynı zamanda “İçe aktar” seçeneği ile telefon hafızasında kayıtlı tüm kısa mesajlar okunarak Şekil 5’te örneklendiği üzere sınıflandırılabilir. Alıcı tarafından yakalanan veya telefon hafızasından okunan kısa mesajlar çok katmanlı süzgeçleme mimarisine tabii tutularak sınıflandırıldıktan sonra etiketleri ile birlikte uygulama veri tabanına kaydedilmektedir. Yeni mesaj geldiğinde bildirim oluşturularak kullanıcı bilgilendirilmektedir.

Mesajlara uzun süre basıldığında Şekil 6’daki gibi mesaj seçenekleri ekranı çıkmaktadır. Her mesaj tipinde “Sil”, “Başka sınıfa gönder” ve “Takvime Ekle” seçenekleri bulunmaktadır. Kullanıcı “başka sınıfa gönder” seçeneği ile

mesajı istediği kategoriye gönderebilmekte, “Takvime Ekle” seçeneği ile mesaj için etkinlik planlayabilmektedir. Ayrıca “Hatırlatıcı” ve “OTP Kodları” mesaj tipleri için özelleştirilmiş bazı ek seçenekler bulunmaktadır.

Hatırlatıcı olarak etiketlenmiş kısa mesajların mesaj seçeneklerinde “Takvime Ekle” seçildiğinde geliştirilen Regex yardımı ile mesaj içerisindeki tarih tespit edilmekte ve etkinlik oluşturma arayüzü ilgili tarihe planlanmış olarak açılmaktadır.

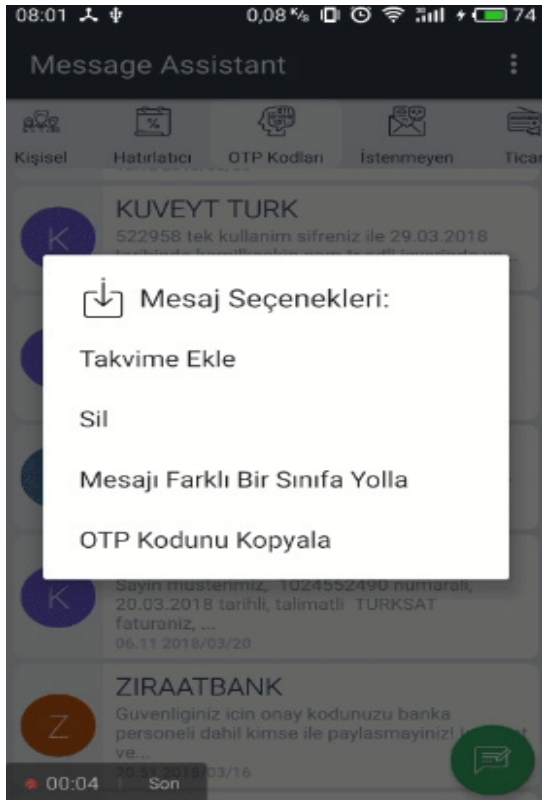
“OTP Kodları” olarak etiketlenmiş mesajlarda ise “Kodu Kopyala” seçeneği bulunmaktadır. Bu seçenek sayesinde mesaj gövdesinde bulunan OTP kodları tespit edilip, cihazın geçici taşıma panosuna (clipboard) kopyalanmaktadır.

Kısa mesajlar kullanım alanları gereği sınırlı boyuttaki metin kümelerinden oluşmaktadır. Bir cihaza bir kısa mesaj ulaştığında beraberinde şu bilgileri de bulundurmaktadır:

*Zaman Damgası:* Mesajın gönderilme zamanına ait bilgi

*Gönderen Numarası:* Mesajı gönderen tarafın telefon numarası veya ismi

*Mesaj Gövdesi:* Göndericinin ilettiği mesajın içeriği



Şekil 6. Mesaj Seçenekleri

#### IV. PERFORMANS ANALİZİ

Kısa mesajların içerdiği temel bilgilerden yola çıkılarak ne zaman gönderildiği, kimin gönderdiğinin değerlendirilmesi gibi koşulsal sınıflandırma yapılması mümkündür. Ancak metin içerisinden çıkartılabilen anlamsal ve biçimsel özelliklerin elde edilmesi metnin daha doğru bir şekilde daha çok sınıf altında sınıflandırılmasında yardımcı olacaktır.

Metnin sınıflandırılabilmesi için özellik çıkarımına ihtiyaç duyulmaktadır. Bu sebeple bu çalışma altında sınıflandırmaya yönelik özellikler seçilmiş ve özelliklerin sonuçlara etkisi incelenmiştir. “*Temel Biçimsel Özellikler*” başlığı altında kısa mesaj üzerinden elde edilen biçimsel özelliklerden bahsedilmiş; “*adresType ve PartOfDay Özelliğinin Eklenmesi*”, “*letterCaseNormalization Özelliğinin Eklenmesi*” başlıkları altında mesajlardan dolayı yollarla elde edilmiş yeni biçimsel özelliklerin eklenmesinden bahsedilmiştir. “*String2WordVector Filtresinin Kullanılması*” başlığında ise kelimelerin uzaysal alana yerleştirilmesi ile elde edilen özelliklerden ve bu özelliklerin nasıl elde edildiğinden bahsedilmiştir.

Her bölümde karmaşıklık matrislerine yer verilmiş bunun yerine özelliklerin neden seçildiği ve beklenen

etkisinden bahsedilmiştir. Son bölüm olan “*Eklenen Özellikler ile Başarı Değişimlerinin Kıyaslanması*” bölümünde ise sistemin genel başarısını özetleyen testler ve sonuçlar irdelenerek karmaşıklık matrisine yer verilmiştir.

#### 4.1 Temel Biçimsel Özellikler

Sınıflandırma çalışmalarının başlangıcında temel özellikler tespit edilmiş ve sınıflandırma modelleri ile test edilmiştir. Bu adımda kullanılan özellikler, Tablo 4’te gösterilmiştir.

Tablo 4. Temel Biçimsel Özellikler Tablosu

Özellik	Tipi	Açıklama
PercentNumeral	Nümerik	Yüzdellik ifade sayısı / Mesajdaki toplam kelime sayısı
RomanNumeral	Nümerik	Mesajda geçen roma rakamı sayısı / Mesajdaki toplam kelime sayısı
URL	Nümerik	Mesajda geçen URL sayısı / Mesajdaki toplam kelime sayısı
Word	Nümerik	Mesaj içeriğindeki Zemberek sözlüğünde bulunan kelime miktarı / Mesajdaki toplam kelime sayısı
AbbreviationWithDots	Nümerik	Mesajda geçen noktalı kısaltma sayısı / Mesajdaki toplam kelime sayısı
DateX	Nümerik	Tarih ifadesi sayısı / Mesajdaki toplam kelime sayısı
Email	Nümerik	Mesajda geçen e-posta adresi sayısı / Mesajdaki toplam kelime sayısı
Emoticon	Nümerik	Mesajda geçen emoji sayısı / Mesajdaki toplam kelime sayısı
Number	Nümerik	Mesajda geçen numara sayısı / Mesajdaki toplam kelime sayısı
Punctuation	Nümerik	Mesaj içeriğindeki noktalama işareti sayısı / Toplam token sayısı
SpaceTab	Nümerik	BoşlukTab sayısı / Mesajdaki toplam kelime sayısı
total	Nümerik	Toplam kelime sayısı
UnknownWord	Nümerik	Mesaj içeriğindeki Zemberek sözlüğünde bulunmayan kelime miktarı / Mesajdaki toplam kelime sayısı
WordWithApostrophe	Nümerik	Kesme işareti içeren kelime sayısı / Mesajdaki toplam kelime sayısı
TimeX	Nümerik	Zaman ifadesi sayısı / Mesajdaki toplam kelime sayısı
Abbreviation	Nümerik	Kısaltmaların sayısı / Mesajdaki toplam kelime sayısı

Bu özellikler kullanılarak yapılan testlerin sonucu incelendiğinde %78,57 ile en iyi başarıyı Random Forest Algoritması yakalamıştır.

#### 4.2 adresType ve PartOfDay Özelliğinin Eklenmesi

SMS verilerinin tekrar incelenmesi sonucu SMS gönderim zamanının mesajların doğru sınıfa yerleştirilebilmesi için

etkili bir özellik olabileceği fark edilmiştir ve mesajları öğleden önce (am) ve öğleden sonra (pm) bilgisini tutan PartOfDay adında yeni bir özellik eklenmiştir.

SMS'i gönderen adresler bir telefon numarası ya da bir şirket ismi olabilir. Örneğin kişisel bir mesajda gönderen bilgisini tutan Adress değişkenindeki değer "+09 555 123 45 67" şeklinde bir telefon numarası iken; Bir devlet kurumunun Adress değişkeni değeri "PTT TAŞIMACILIK" şeklinde bir String olmaktadır. Ticari mesajların çoğunluğunda Adress değişkeni String içerdiği fark edilmiştir ve bunun bir özellik olarak kullanılmasına karar verilmiştir. SMS mesajı gönderen bilgisinden elde edilen addressType özelliği String ve number olarak mesajların gönderenlerini iki tipe ayırmaktadır.

### 4.3 String2WordVector Filtresinin Kullanılması

Bu başlığa kadar kullanılan özellikler SMS gövdesinden elde edilmiş oransal verilerden oluşmaktadır. Örneğin Tablo 5'deki kısa mesajda URL 1 kere kullanılmıştır, bu sayı tüm simgelere oranlandığında elde edilen değer 0,09 (  $1/(simge\ sayısı=11)$  ) olacaktır. URL özelliğinde olduğu gibi diğer oransal değerler de bu yolla elde edilmiştir.

**Tablo 5.** Önişleme adımı olarak simgeleme yöntemi örneği

SMS Gövdesi:	
"Kampanya : 30.01.2018 tarihine kadar B3SEW4 kodu ile indirimli alışveriş şansı : <a href="http://www.abcd.com">http://www.abcd.com</a> "	
Sonuç:	
Simge	Tip
Kampanya	Word
30.01.2018	Date
tarihine	Word
kadar	Word
B3SEW4	WordWithApostrophe
kodu	Word
ile	Word
indirimli	Word
alışveriş	Word
şansı	Word
<a href="http://www.abcd.com">http://www.abcd.com</a>	URL

Özellikler Zemberek kütüphanesi yardımı ile tokenize edilmekte ve tipleri toplam kelime sayısına oranlanarak (normalizasyon) yeni özellikleri Tablo 3'de ifade edildiği gibi çıkarılmaktadır. Literatürdeki metin sınıflandırma çalışmaları incelendiğinde, metinlerin sınıflandırılmasında StringtoWordVector gibi filtreler ile ön işlemlerden geçirilerek yeni özellikler çıkarılmaktadır.

Bu bölümde SMS gövdelerinden elde edilen yeni özellikler kullanılarak sınıflandırma sonuçlarının iyileştirilmesi

amaçlanmaktadır. Zemberek kütüphanesi yardımı ile SMS gövdesi sırasıyla; tokenize edilir, kelime tipinde ise tokenize edilecek ve kullanılmak üzere kaydedilecek eğer kelime tipinde değilse özellik tipi kaydedilir. Örnek olarak verilen Tablo 3 yeni yaklaşımın girdi ve çıktılarını göstermektedir.

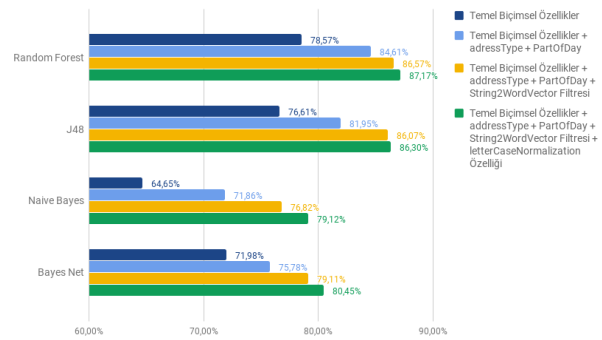
SMS gövdelerinin Tablo 3'de örneklendirilen şekilde ön işlemden geçirilmesi sonucu WEKA içerisindeki arff formatlı dosyaya @attribute roots string satırı eklenmiştir. roots özelliği StringtoWordVector Filtresinden geçirilerek yeni özellik çıkarımları için kullanılır.

### 4.4 letterCaseNormalization Özelliğinin Eklenmesi

Cümle içerisindeki küçük büyük harf oranı normalizasyonu yapılarak letterCaseNormalization özelliği oluşturulmuştur.

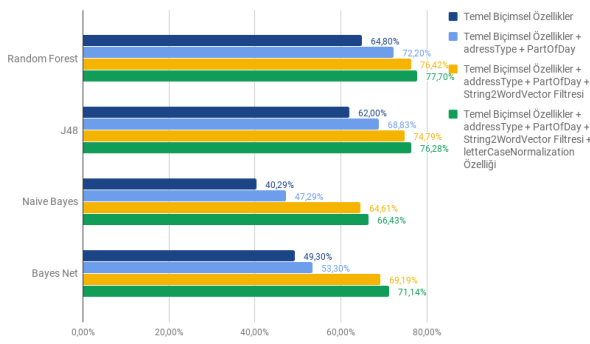
### 4.5 Eklenen Özellikler ile Başarı Değişimlerinin İncelenmesi

Her bir adımda eklenen yeni özellikler ve uygulanan yöntemler sınıflandırma modeli başarısına katkıda bulunmuştur. Verisetinin sınıf dağılımının dengesiz olması nedeni ile başarı değerlendirmesi yapılırken mikro ve makro doğruluk değerleri hesaplanmıştır. Şekil 7'de ve Şekil 8'de test edilen her bir algoritmanın yeni eklenen özelliklere bağlı olarak değişen makro ve mikro doğruluk oranlarına yer verilmiştir.



**Şekil 7.** Model Çıktılarının Mikro Doğruluk Bazında Eklenen Özelliklere Göre Karşılaştırılması

Random Forest algoritması ile oluşturulan model her adımda en başarılı sonuçları vermiştir. Mikro doğruluk bazında incelendiğinde, başlangıçta Random Forest ile doğru sınıflandırılan örnek oranı %78,57 iken yapılan çalışmalar sonucu bu oran %87,17'ye çıkarılmıştır. Benzer şekilde makro doğruluk bazında elde edilen çıktılar incelendiğinde Random Forest'ın tüm özellik testlerinde en yüksek sonuçları verdiği görülmüştür.



Şekil 8. Model Çıktılarının Makro Doğruluk Bazında Eklenen Özelliklere Göre Karşılaştırılması

## V. UYGULAMA METRİKLERİ

Sistem mimarisi sunduğu çok katmanlı mimari sayesinde mesajları daha hızlı bir şekilde kategorize etmeyi hedefler. Bu amaca yönelik yapılan çalışmaların sonucunda mesajların sınıflandırılmasında doğruluk ve hız artışı gözlemlenmiştir. Tablo 6’da “yalnızca sınıflandırma modeli kullanılması” ve “çok katmanlı süzgeçleme mimarisi kullanımı” durumlarında elde edilen zaman ve doğruluk oranı metriklerine yer verilmiştir.

Tablo 6. Karşılaştırmalı Uygulama Metrikleri

	Yalnızca Sınıflandırma Modeli Kullanıldığında	Çok Katmanlı Süzgeçleme Mimarisi Kullanıldığında
Ortalama Mesaj Sınıflandırma Süresi (ms)	23ms	19ms
Doğru Sınıflandırma Oranı (%)	%87,17	%93,48

Tablo 6’da elde edilen sonuçlar göz önünde bulundurulduğunda “Çok Katmanlı Süzgeçleme Mimarisi” kullanıldığında bir mesajın ortalama sınıflandırma süresi azalmış ve doğru sınıflandırılma oranı artmıştır.

Tablo 7’de sistemin genel başarımını ölçümleyen bir karmaşıklık matrisi gösterilmiştir. Karmaşıklık matrisi üzerindeki verilerin anlaşılabilirliğini arttırmak için kesinlik ve hassasiyet değerleri hesaplanmıştır. Kesinlik (precision) pozitif olarak tahmin edilen bir durumdaki başarıyı gösteren değerdir. Hassasiyet (recall) ise pozitif durumların ne kadar başarılı tahmin edildiğini gösteren değerdir.

Tablo 7 incelendiğinde karmaşıklık matrisinde bazı sınıfların birbiri ile karıştırıldığı dikkat çekmektedir. Özellikle *hatırlatıcı-ticari* ve *istenmeyen-ticari* sınıfları arasında yüksek miktarda karışma olduğu gözlemlenmektedir. Bu karışıklığın sebebi ticari mesajların ve hatırlatıcı mesajlarının

içeriklerinin anlamsal ve biçimsel yönlerden benzer olabilmesi ile açıklanabilir. Örneğin ticari içeriğe sahip bir mesaj gövdesi “*Ayakkabılarda sezon indirimi! Son gün 28 Eylül!*” olsun. Bu mesaj anlamsal olarak değerlendirildiğinde hem “*hatırlatıcı*” hem “*ticari*” mesaj niteliği taşımaktadır. Veri seti üzerinde örnekteki benzer mesajlar incelendiğinde bu karışıklığın sebebinin etiketleme işlemindeki etiketleyicinin tercihidir. Aynı şekilde “*istenmeyen*” ve “*ticari*” sınıflarında bir mesajın hangi sınıfa ait olduğu göreceli bir kavramdır. Antalya’da bir otelin reklamını içeren kısa mesaj yakın zamanda tatil planlayan birisi için “*ticari*” kısa mesaj niteliği taşırken, tatil planlamayan başka bir kimse için “*istenmeyen*” niteliği taşıyabilir. Bu karmaşıklıkların engellenmesi için sunulan öneri “Sonuç ve Gelecek Çalışmalar” başlığında açıklanmıştır.

Öte yandan, Zemberek’in kullanımının başarıya etkisi incelendiğinde yapılan testler sonucu sınıflandırma başarısının %2 arttığı gözlemlenmiştir. Teorik olarak köklere ayrılan kelimelerin StringToWordVector filtresine etkisi köklere ayrılmamış örneklere göre daha fazladır. Zemberek’ten elde edilen kelime kökleri ve özellikler kullanılmadığında oluşan doğruluk farkının az olmasının sebebi kullanılan veri setinin kelime bazında zengin olmamasından kaynaklanmaktadır. Daha geniş bir coğrafyadan, farklı yaş aralıkları ve düşüncelerden insanların kısa mesajları ile oluşturulmuş bir veri seti ile yapılacak testlerde sonuçlardaki farkın daha belirgin olması beklenmektedir.

Tablo 7. Karmaşıklık Matrisi

Gerçek Sınıf \ Tahmin Edilen Sınıf	kişisel	ticari	hatırlatıcı	otp kodları	istenmeyen	Toplam	Precision
kişisel	824	1	5	1	8	839	%98,21
ticari	0	226	15	3	1	245	%92,25
hatırlatıcı	7	36	464	2	1	510	%90,98
otp kodları	3	14	7	107	1	132	%81,06
istenmeyen	1	5	3	2	43	54	%79,63
Recall	%98,68	%80,14	%93,93	%93,04	%79,63		

## VI. SONUÇ VE GELECEK ÇALIŞMALAR

Bu çalışmada Türkçe mesajlar için metin sınıflandırma yaklaşımlarından faydalanılarak mesajları beş farklı kategoriye ayıran mesaj asistanı uygulaması gerçekleştirilmiştir. Mesajları sınıflar halinde kategorize edebilmek için mesajların yapıları incelenip doğru sonuca götürecek özellikler belirlenmiştir. Adım adım özellikler belirlenirken her yeni eklenen özelliğin sınıflandırma sonucuna etkisi incelenmiştir. Sınıflandırma sonuçlarının yeni özelliklere göre değişimini incelerken Naive Bayes, Bayes Net, J48 ve Random Forest algoritmaları kullanılmıştır. Yapılan çalışmalar sonucunda Random Forest yöntemi %87,17 ile doğruluk oranı ile en



iyi sınıflandırma algoritması olmuş ve uygulamada bu algoritma kullanılmıştır. Ayrıca içerisinde 4 adet filtre bulunan çok katmanlı süzgeçleme mimarisi sayesinde 5 farklı mesaj kategorisi %93 oranında bir başarı ile daha kısa sürede gruplanabilmiştir. Ucuz ve etkili bir iletişim yöntemi olan SMS, pazarlama, kişisel, doğrulama vb. birçok amaçla kullanılan bir yöntemdir. Mesajların çeşitliliğinin artması ile mesajların okunabilirliği ve erişilebilirliği azalmaktadır. Geliştirilen uygulama ile kullanıcıların SMS gelen kutularını daha organize ve verimli kullanmasını sağlayarak, farklı mesajların yoğun bir şekilde bir arada bulunması yüzünden vakit ve enerji kaybının engellenmesi sağlanmıştır.

Öte yandan belirlenmiş sayıda sınıfı bulunan organize edilmiş bir kısa mesaj gelen kutusu kullanıcıların gereksinimlerini karşılayabilir olmasına rağmen, gelecek çalışmalarda daha özelleşmiş bir gelen kutusu deneyimi için kullanıcıların kendilerine ait sınıfları oluşturabilmesi ve sistemin eğitilebilir olması bu sayede kullanıcı memnuniyetinin ve kullanım kolaylığının artırılması hedeflenmektedir. Kullanıcının sınıf sayısını özelleştirmesi gibi kendi mesajları ile sistemi eğitilmesi kişiselleştirilmiş bir sınıflandırma sistemini oluşturulmasına yönelik çalışmalar planlanmaktadır. Bu sayede veri setinin etiketlenmesi sırasında etiketleyicinin göreceli yaklaşımı nedeniyle oluşabilecek hatalar kullanıcının sistemi kendi mesajları ile eğitmesi sonucu en aza indirgenebilecektir.

## VII. BİLGİ

Bu proje TÜBİTAK tarafından organize edilen “2209-A Üniversite Öğrencileri Araştırma Projeleri Destekleme Programı” kapsamında desteklenmektedir.

## Kaynaklar

- [1] Zhu, S., Ji, X., Xu, W., & Gong, Y. (2005, August). Multi-labelled classification using maximum entropy method. In Proceedings of the 28th annual international ACM SIGIR conference on Research and development in information retrieval (pp. 274-281). ACM.
- [2] Klimt, B., & Yang, Y. (2004, September). The enron corpus: A new dataset for email classification research. In European Conference on Machine Learning (pp. 217-226). Springer, Berlin, Heidelberg.
- [3] Healy, M., Delany, S. J., & Zamolotskikh, A. (2004). An assessment of case base reasoning for short text message classification In *Proceedings of the 15th. Irish Conference on Artificial Intelligence and Cognitive Sciences (AICS'04)*, pp.9-18, 2004.
- [4] Najadat H., Abdulla, N., Abooraig, R. ve Nawasrah S. (2014). Mobile SMS Spam Filtering based on Mixing Classifiers. *International Journal of Advanced Computing Research*, 1.
- [5] Joe, I., & Shim, H. (2010, December). An SMS spam filtering system using support vector machine. In *International Conference on Future Generation Information Technology* (pp. 577-584). Springer, Berlin, Heidelberg.
- [6] Mahmoud, T. M., & Mahfouz, A. M. (2012). SMS spam filtering technique based on artificial immune system. *International Journal of Computer Science Issues (IJCSI)*, 9(2), 589.
- [7] Patel, F. N., & Soni, N. R. (2012). Text mining: A Brief survey. *International Journal of Advanced Computer Research*, 2(4), 243-248.
- [8] Al-Talib, G. A., & Hassan, H. S. (2013). A study on analysis of SMS classification using TF-IDF Weighting. *International Journal of Computer Networks and Communications Security*, 1(5), 189-194.
- [9] Parimala, R., & Nallaswamy, R. (2012). A Study on Analysis of SMS Classification Using Document Frequency Thresold. *International Journal of Information Engineering and Electronic Business*, 4(1), 44.
- [10] Deng, W. W., & Peng, H. (2006, August). Research on a naive bayesian based short message filtering system. In *Machine learning and cybernetics, 2006 international conference on* (pp. 1233-1237). IEEE.
- [11] Kawade, D. R., & Oza, K. S. (2015). SMS spam classification using WEKA. *International Journal of Electronics Communication and Computer Technology*, 5, 43-7.
- [12] Mathew, K., & Issac, B. (2011, December). Intelligent spam classification for mobile text message. In *Computer Science and Network Technology (ICCSNT), 2011 International Conference on* (Vol. 1, pp. 101-105). IEEE.
- [13] Uysal, A. K., Günel, S., Ergin, S., & Günel, E. Ş. (2012, April). Detection of SMS spam messages on mobile phones. In *Signal Processing and Communications Applications Conference (SIU), 2012 20th* (pp. 1-4). IEEE.
- [14] Kilic, E., Arslan, S. N., & Guvensan, M. A. (2014, April). 3-Tier hybrid approach for SMS filtering. In *Signal Processing and Communications Applications Conference (SIU), 2014 22nd* (pp. 1950-1953). IEEE.
- [15] StringToWordVector. (2016, April 14). Retrieved July/August, 2018, from <http://weka.sourceforge.net/doc.stable/weka/filters/unsupervised/attribute/StringToWordVector.html>
- [16] Naive Bayes Slide. (2017). Retrieved July 23, 2018, from <https://web.stanford.edu/class/cs124/lec/naivebayes.pdf>
- [17] Cooper, G. F., & Herskovits, E. (1992). A Bayesian method for the induction of probabilistic networks from data. *Machine learning*, 9(4), 309-347.
- [18] J48. (2018, September 04). Retrieved July 23, 2018, from <http://weka.sourceforge.net/doc.dev/weka/classifiers/trees/J48.html>
- [19] Kaur, G., & Chhabra, A. (2014). Improved J48 classification algorithm for the prediction of diabetes. *International Journal of Computer Applications*, 98(22).
- [20] Liaw, A., & Wiener, M. (2002). Classification and regression by randomForest. *R news*, 2(3), 18-22.



# Synthesis, Characterization and Electrical Admittance Study of LaCrO<sub>3</sub> Perovskite Compound

## LaCrO<sub>3</sub> Perovskit Bileşiminin Sentezi, Karakterizasyonu ve Elektriksel Admittans Çalışması

Mustafa COŞKUN<sup>1</sup> 

<sup>1</sup> Istanbul Medeniyet University, Faculty of Engineering and Natural Sciences, Department of Engineering Physics, 34700 Uskudar, Istanbul, Turkey

### Abstract

We synthesized the ferroelectric perovskite oxide LaCrO<sub>3</sub> (LCO) using solid-state reaction method. Scanning electron microscope (SEM), energy x-ray dispersive (EDX) and X-ray diffraction (XRD) have been employed to study structural and chemical analysis of synthesized powder, respectively. Electrical admittance properties of the perovskite oxide sample was performed in wide range frequency (1Hz-10MHz) and temperature (-100 °C to +100 °C) using dielectric/impedance spectrometer. The results showed that the LCO has different activation energies and the calculated activation energies are of 0.175 eV and 0.220 eV from the  $G_{dc}$  vs.  $1000/T$  and 0.152 eV and 0.197 eV from the  $f_{min}$  vs.  $1000/T$  plots, respectively. The temperature-dependent exponent  $s$  showed that the overlapping large polaron tunneling (OLPT), quantum mechanical tunneling (QMT) and the correlated barrier hopping (CBH) conduction mechanism models can be suggested for the LCO compound.

**Keywords:** LaCrO<sub>3</sub>, Perovskite Oxide, Admittance, Activation Energy,

### Öz

Ferroelektrik perovskit oksit LaCrO<sub>3</sub>'ü (LCO) katı hal reaksiyonu yöntemiyle sentezledik. Sentezlenen tozun yapısal ve kimyasal analizini yapmak için sırasıyla, taramalı elektron mikroskobu (SEM), enerji x-ışını dağılımı (EDX) ve X ışını kırınımı (XRD) yöntemleri kullanılmıştır. Perovskit oksit örneğinin elektriksel admittans özellikleri, dielektrik/empedans spektrometresi kullanılarak geniş bir frekans (1Hz-10MHz) ve sıcaklık (-100 °C ile +100 °C) aralığında gerçekleştirilmiştir. Sonuçlar, LCO'nun farklı aktivasyon enerjilerine sahip olduğunu ve hesaplanan aktivasyon enerjilerinin sırasıyla,  $G_{dc}$  &  $1000/T$  grafiğinden 0.175 eV ve 0.220 eV,  $f_{min}$  &  $1000/T$  grafiğinden de 0.152 eV ve 0.197 eV olduğu görülmüştür. Sıcaklığa bağlı  $s$  parametresi, örtüşen büyük polaron tünelleme (OLPT), kuantum mekaniksel tünelleme (QMT) ve ilişkili bariyer hoplama (CBH) iletim mekanizması modellerinin LCO bileşiği için önerilebileceğini göstermiştir.

**Anahtar Kelimeler:** LaCrO<sub>3</sub>, Perovskit Oksit, Admittans, Aktivasyon Enerjisi.

### 1. INTRODUCTION

Perovskite-oxide materials stated by ABO<sub>3</sub> chemical formula, have considerable attention among the researchers due to their physical and chemical properties such as high crystallinity, high electrical conductivity, high stability in air, high temperature processability etc. Such unique properties of perovskite-oxides offer very large application areas including gas sensing [1], fuel cell [2], membrane [3], heating element [4], catalysis [5] so on. Researchers have synthesized and investigated many perovskite-oxide type compounds so far [6-9]. They proposed different routes such as solid-state reaction [10], Pechini method [11], hydrothermal reaction [12], microwave [13], sol gel [14], citrate gel combustion [15], etc. to synthesis perovskite-oxide compounds. Compare to the other synthesis methods solid-state reaction is still a favorable method employed by researchers due to the reduced the costs, less amount of chemical waste, minimizing side product and impurity formation, simple applying heat to the reaction and so on [16].

LaCrO<sub>3</sub> (LCO) is one of the important members of perovskite-oxide family with high optical band gap (3.4-3.5 eV), orthorhombic crystalline structure with  $a = 5.513 \text{ \AA}$ ,  $b = 5.476 \text{ \AA}$ ,  $c = 7.759 \text{ \AA}$  lattice parameters (space group  $P_{bnm}$ ), high  $p$ -type conductivity, and high temperature durability in reducing atmosphere, high physical and chemical stability in air ambient etc. [17]. Although, researchers have investigated various properties of LCO compound, they mainly focused on the solid oxide fuel cell application [18-19]. So, the electrical properties of LCO still need to be investigated to understand its nature. K. Yoshii et. al [20] synthesized the LCO and studied its structural, chemical, dielectric and magnetic properties at room temperature. They reported the real and imaginary part of dielectric, conductivity and activation energy of the LCO at room temperature for two different frequency values (20 Hz and 1 kHz). S. M. Khetre et al [21] synthesized LaCrO<sub>3</sub> compound using solution combustion method and they studied its electrical and dielectric properties. They documented that the temperature dependent resistivity of LCO behaves like semiconductor. In addition, they studied frequency dependent dielectric constant of LCO at room temperature and it showed a dispersion based on electron-hole hopping mechanism, which is responsible for conduction and polarization. V. D. Nithya et al [22] synthesized LaCrO<sub>3</sub> and LaCr<sub>0.5</sub>M<sub>0.5</sub>O<sub>3</sub> (M= Cu and Fe) compounds using solution process method. They investigated their structural, chemical, electrical and magnetic properties. The results showed that undoped LaCrO<sub>3</sub> has  $1.66 \times 10^{-5} \text{ S/cm}$  conductivity at room temperature and the doping Cu increased the conductivity while the doping Fe decreased the conductivity. As it can be seen from literature, there is no any comprehensive study in terms of wide temperature and frequency range on the electrical admittance properties, temperature dependent charge transport mechanism and activation energy of LaCrO<sub>3</sub> so there is a gap on the electrical and dielectric properties of LaCrO<sub>3</sub> compound.

In this study, beside the electrical admittance study structural and chemical nature of LaCrO<sub>3</sub> compound were studied. The powder compound was prepared via solid state reaction. Scanning electron microscopy (SEM), X-ray diffraction (XRD) and energy dispersive X-ray (EDX) analyses were employed to study surface characteristics, crystalline morphology and chemical nature of synthesized powder. A detailed study has been performed on the electrical admittance in wide range frequency (1 Hz to 10 MHz) and temperature (-100 °C to 100 °C) of LCO compound.

## I. MATERIALS AND METHOD

Material synthesis and characterization have been reported in our previous work and details can be found in there [6]. The LCO powder was prepared by classic solid state reaction technique. In order to synthesis LCO powder, La<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (ACROS, 99.9%) and Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (ACROS, 99%) powders were used as starting materials. First, the high purity La<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> powders were mixed in an agate mortar for 1 h with ethanol and calcined at 900 °C for 10 h in the air to obtain LCO compound. After the first step calcination the powders were reground for homogeneity purpose. After reground the powder for several hours the second calcination was carried out at 1200 °C for another 12 h in the air. The chemical and structural analysis of LCO powder were carried out using a FEI scanning electron microscope (SEM), energy dispersive X-ray spectroscopy (EDX) and X-ray diffractometer (XRD, Bruker D8 Discover) analyses.

The LCO powder was pressed into 13 mm pellets at 10 tons pressure for several minutes in order to study electrical properties. After that, the pellet was heated at 1150 °C for 4 h in air to sinter the targets. Novocontrol Broadband Dielectric/Impedance Spectrometer was employed to study frequency-dependent electrical admittance property measurements varied temperature from -100 °C to 100 °C with 20 °C step. In order to investigate of electrical properties of LCO, the LCO pellet was sandwiched between two platinum (Pt) electrodes and placed into Dielectric Spectrometer for measurements.

## II. RESULT AND DISCUSSION

SEM and EDX analyses of synthesized LCO are illustrated in Figure 1. As can be noticed from the Figures 1 (b) and (c) particles are not uniform and their sizes are variable. We can clearly see from the Figure 1 (c) particles have different sizes and the biggest one has over the 1 μm size. Figure 1 (d) displays the energy-dispersive X-ray (EDX) result of studied compound. The EDX analysis confirmed that our compound has La, Cr and O atoms with associated energies. The inset figures represents atomic ratio of elements inside the LCO. The XRD analysis of present compound was conducted and the result is shown in Figure 2. According to the XRD pattern the LCO compound has orthorhombic crystalline structure (PDF-01-070-2694 card) and all planes with associated two thetas are shown in Figure 2. Further XRD analysis results can be found in our previous study [17].

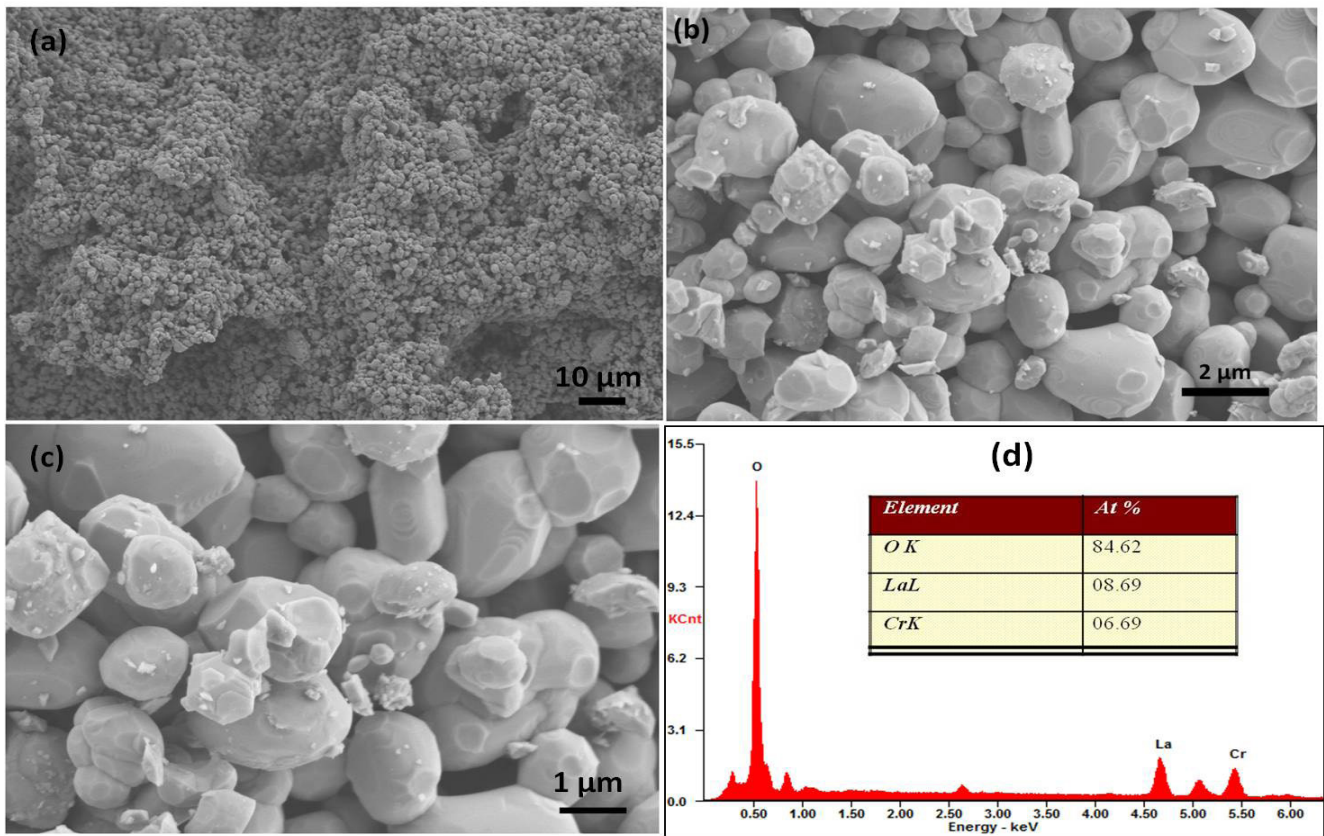


Figure 1. SEM micrographs of LCO (a) low, (b) middle and (c) high magnification images, (d) EDX analysis result of LCO.

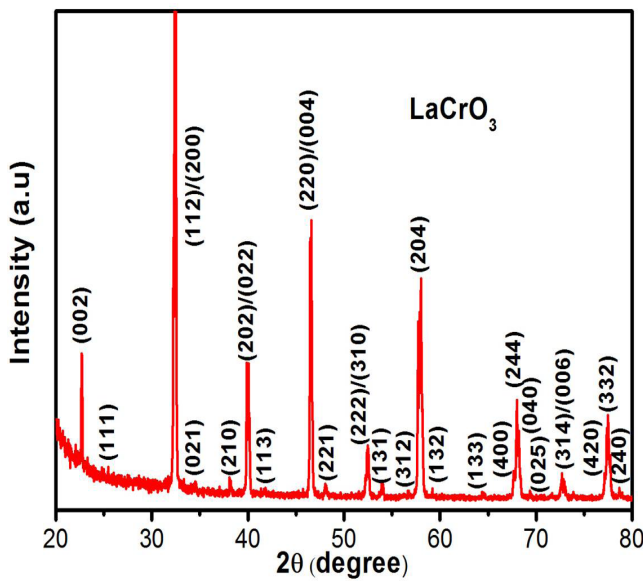


Figure 2. XRD pattern of LCO compound.

The complex admittance ( $Y^*$ ) is an important parameter for dielectric materials and defined as follows [23]:

$$Y^* = \frac{1}{Z^*} = Y' + jY'' = G + jB \tag{1}$$

where  $Z^*$  is the complex impedance,  $Y'$  ( $Re Y$ ) and  $Y''$  ( $Im Y$ ) real and imaginary ( $Im Y$ ) parts of complex admittance and  $G$  is conductance and  $B$  is susceptance. The complex impedance,  $Z^*$ , can be written as [6]:

$$Z^* = R_s - jX \tag{2}$$

where  $R_s$  is series resistance or is called as capacitive reactance and  $X$  is called as inductive reactance. So, if we substitute equation (2) into the equation (1), the complex admittance,  $Y^*$ , can be rewritten as below:

$$Y^* = \frac{1}{R_s - jX} = Y' + jY'' = G + jB \tag{3}$$

$$\frac{1}{R_s - jX} = \frac{R_s + jX}{R_s^2 + X^2} = \frac{R_s}{R_s^2 + X^2} + j \frac{X}{R_s^2 + X^2} = Y' + jY'' = G + jB \tag{4}$$

$$Y' = \frac{R_s}{R_s^2 + X^2} = G \tag{5}$$

$$Y'' = \frac{X}{R_s^2 + X^2} = B \tag{6}$$

The real part of admittance (*Re Y*) or conductance (*G*) of the LCO is illustrated in Figure 3 (a). As can be seen from the figure the *G* has two different behavior depend on frequency. The first part is in the low frequency values that the *G* is frequency independent that called as dc region. It is clear that the *G* strongly depends on temperature and increases with increasing temperature. The dc region extends to the higher frequency with increasing temperature. The second part is in the high frequency and the *G* strongly depends on frequency values so this region is called as ac region. It is noticed that the ac region has two different linear slopes. These slopes are related charge transport phenomenon in the compounds and different slopes mean different charge transport mechanisms [6]. Figure 3 (b) shows frequency dependent the imaginary part of admittance (*Im Y*) or susceptance (*B*) of the LCO at various temperature.

The negative values indicate capacitive effect is dominant rather inductive effect. The *Im Y* decreases with increasing frequency then reaches a minimum value and start increases with increasing frequency between  $-100\text{ }^{\circ}\text{C}$  and  $0\text{ }^{\circ}\text{C}$ . However, this behavior is a little bit different between  $0\text{ }^{\circ}\text{C}$  and  $100\text{ }^{\circ}\text{C}$ . In this region, the *Im Y* first increases with frequency and reaches a maximum value, then decreases

with increasing frequency finally reaches a minimum value then increases with increasing frequency again. Those minimum and maximum values indicate the relaxation process in the studied compound. Furthermore, those maximum and minimum values shift through higher frequency with increasing temperature which indicate the relaxation process is highly thermally affected. Figure 3 (c) illustrates the *Re Y* vs.  $-Im Y$  plots (or Cole-Cole plot) of the LCO at various temperature. It is clear from the plots that there are two different regions: the first region is the low frequency region and the *Im Y* decreases sharply till a certain value (like a vertical line) or minimum value whereas the *Re Y* remain almost constant. After *Im Y* reaches a minimum value both *Im Y* and *Re Y* increase together which is the second region and this region relatively includes higher frequency region. Moreover, these minimum values both increase and shift through the right side with increasing temperature that indicate relaxation process is thermally activated [24].

We have calculated the activation energy of LCO compound via employing the temperature dependent relaxation frequency from the  $-Im Y$  vs.  $\log f$  and the dc conductance region from *Re Y* vs.  $\log f$  plots, which are given by Arrhenius relations [24]:

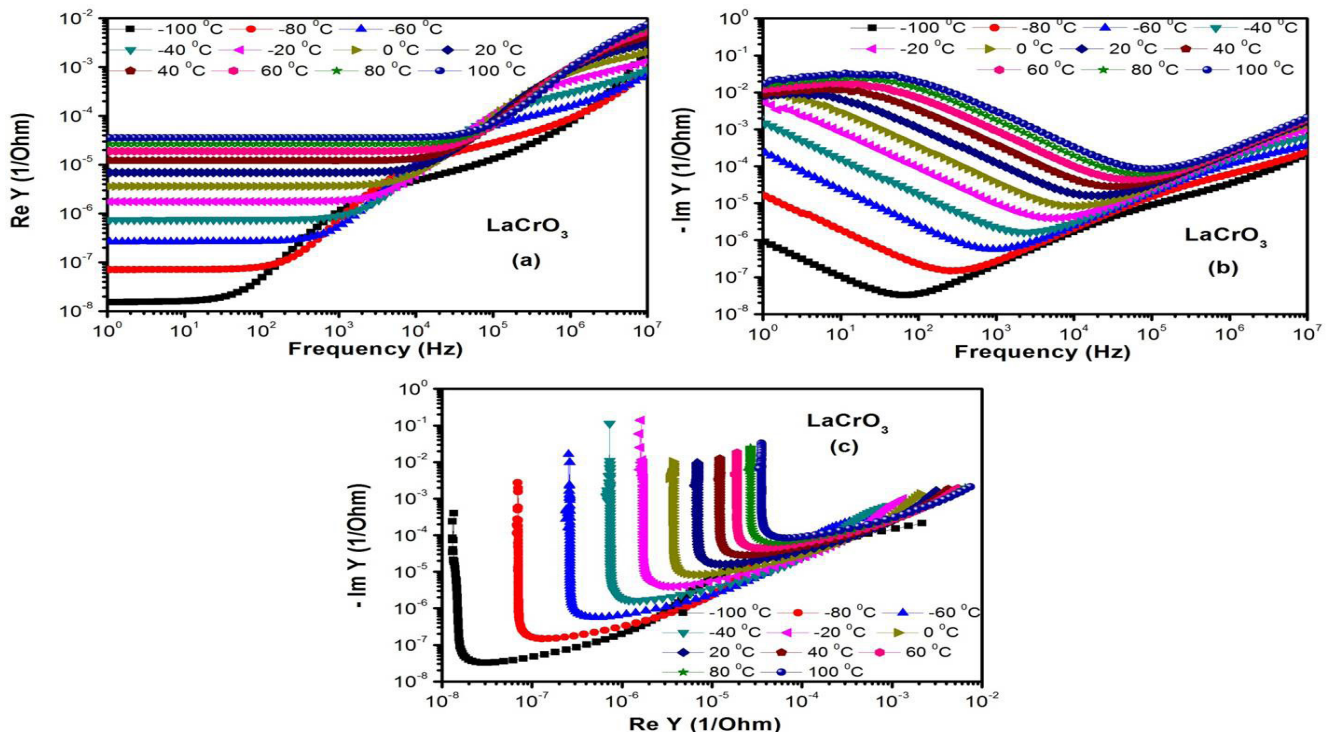


Figure 3. The real (a) and imaginary part (b) of admittance and (c) *Re Y* vs.  $-Im Y$  (c) plots of LCO.

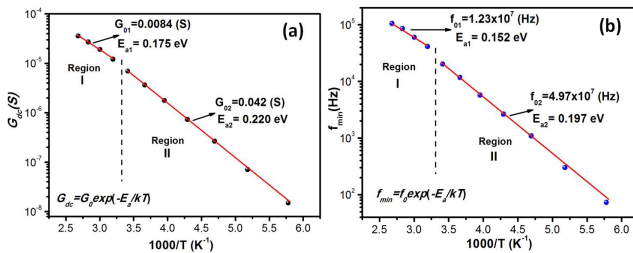


$$f_{min} = f_0 e^{\left(-\frac{E_a}{k_B T}\right)} \quad (7)$$

$$G_{dc} = G_0 e^{\left(-\frac{E_a}{k_B T}\right)} \quad (8)$$

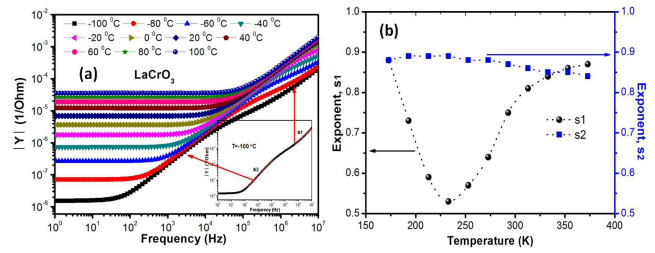
where  $f_{min}$ ,  $f_0$ ,  $G_{dc}$ ,  $G_0$ ,  $E_a$ ,  $k_B$  and  $T$  are values at min. frequency in the  $-Im Y$  vs.  $\log f$  plots, a constant related to frequency, dc conductance from  $Re Y$  vs.  $\log f$  plots, a pre-exponential factor for dc conductivity, activation energy,

boltzman constant and temperature in Kelvin scale, respectively. The activation energy,  $E_a$ , extracted from the both  $G_{dc}$  vs.  $1000/T$  and  $f_{min}$  vs.  $1000/T$  plots. It can be noticed from the Figure 4 that the LCO compound has two different regions denoted as *Region I* and *Region II*. The calculated activation energy was denoted as  $E_{a1}$  for *Region I* and  $E_{a2}$  for *Region II*. In the *Region I*, the activation energy was calculated as 0,175 eV from the  $G_{dc}$  vs.  $1000/T$  plot and  $f_{min}$  vs.  $1000/T$  plot. The activation energy for *Region II* was calculated as 0,220 eV and 0,197 eV from the  $G_{dc}$  vs.  $1000/T$  and  $f_{min}$  vs.  $1000/T$  plots, respectively. As can be seen each activation energy pretty close each other for LCO. Such activation energy values have been obtained for



**Figure 4.** Semilog a) ( $G_{dc}$ ) versus ( $1000/T$ ), b) ( $f_{min}$ ) versus ( $1000/T$ ) plots for LCO.

many perovskite type compounds in literature before [6, 10, 24,]. Two different activation energy values for the LCO can be related different charge transport phenomena. In order to proof this different charge transport phenomena we plotted frequency depended absolute admittance  $|Y|$  plots with different temperature ( $|Y| = \sqrt{(Re Y)^2 + (Im Y)^2}$ ). Figure 5 (a) shows the  $|Y|$  vs.  $f$  plots of LCO compound. It is clear that the frequency dependence behavior of the  $|Y|$ , is so similar to  $Re Y$ . The  $|Y|$ , has two different regions: the first one is low frequency region and as can be seen from the Figure 5 (a) this region called as dc region and is frequency independent. The second one is high frequency region which the  $|Y|$  strongly depends on frequency and called as ac region.



**Figure 5.** a) Frequency dependent the total admittance (or conductance) plot (inset figure show linear slopes in the ac region), b) Temperature dependent variation of exponent  $s$ .

Hence the conductance,  $G$ , or  $|Y|$  consists two parts (dc and ac parts) and can be given as below [6]:

$$G = G_{dc} + G_{ac} \quad (9)$$

The  $G_{ac}$  is described well by Jonscher's power law relation [6]:

$$G_{ac} = A\omega^s \quad (10)$$

where  $A$  is a constant,  $\omega$  is angular frequency ( $\omega=2\pi f$ ) and  $s$  is the dimensionless frequency exponent constant and gives us about the type of conduction mechanism knowledge in the studied compound. The exponent  $s$  is strongly depends on the temperature and mostly utilized to study possible conduction mechanism in material. In present study, the exponent  $s$  values were calculated from the conductivity measurement results with equation (10) and obtained results are given in Figure 5. The temperature dependent of the exponent  $s$  explained by some models in the literature. The first one is quantum mechanical tunneling (QMT) and according this model,  $s$  is not temperature dependent and remain constant [25]. The second one is overlapping large polaron tunneling (OLPT) model and according to this model, the exponent  $s$  decreases with temperature until a minimum value then it increases with increasing temperature [26]. The third one is small polaron model and according to this model,  $s$  value increases with increasing the temperature [27]. The last model or the fourth one is the correlated barrier hopping (CBH) model and this model proposes that the value of  $s$  decreases as the temperature increases [28].

It is realized that the *ac* region has two different linear slopes and these slopes denoted as  $s1$  and  $s2$  (see inset figures in Figure 5 (a)). The  $s1$  is at the high frequency region whereas  $s2$  is at the relatively middle or low frequency region. Figure 5 (b) depicts the temperature dependent exponent  $s$  behavior of LCO compound. The  $s1$  first decreases with elevating temperature and reach a minimum value then increases with escalating temperature. Hence, in the  $s1$  region the overlapping large polaron tunneling (OLPT) model



conduction mechanism is dominant mechanism. The  $s_2$  first remains constant then decreases with increasing temperature which shows us that the conduction mechanism includes both quantum mechanical tunneling (QMT) and correlated barrier hopping (CBH) model.

### III.CONCLUSION

LaCrO<sub>3</sub> (LCO) compound has been synthesized using the solid-state reaction method. Structural and chemical analysis of LCO were carried out using SEM, EDX and XRD analyses. The crystal structures of the obtained LCO was investigated via XRD measurements and the measurement result revealed that the LCO has an orthorhombic crystalline structure. The calculated temperature dependent power law exponent,  $s$  is less than 1 for LCO compound for all temperatures as expected, the exponent  $s$  showed that the OLPT at high frequency region, the QMT and CBH conduction mechanisms observed at low frequency region for LCO depend on  $s$  exponent behavior, respectively. The calculated activation energies from admittance and dc conductance measurements are in close agreement with the each other.

### ACKNOWLEDGEMENTS

The author would like to thank Dr. Özgür POLAT, Dr. Fatih M. Coskun, Assoc. Prof. Zehra Durmus, Prof. Mujdat Caglar and Prof. Abdulmecit Turut for their valuable comments.

### REFERENCES

- [1] Panpan, Z., Hongwei, Q., Heng, Z., Wei, L., Jifan, H. (2017). CO<sub>2</sub> gas sensors based on Yb<sub>1-x</sub>Ca<sub>x</sub>FeO<sub>3</sub> nanocrystalline powders. *Journal of Rare Earths*, 35(6), 602.
- [2] Hilpert, K., Steinbrech, R.W., Boroomand, F., Wessel, E., Meschke, F., Zuev, A., Teller, O., Nickel, H., Singheiser, L., (2003). Defect formation and mechanical stability of perovskites based on LaCrO<sub>3</sub> for solid oxide fuel cells (SOFC). *J. Eur. Ceram. Soc.* 23, 3009-3020.
- [3] Wang, S., Dong, Y., Lin, B., Gao, J., Liu, X., Meng, G., (2009). Fabrication of dense LaCrO<sub>3</sub> – based interconnect thin membrane on anode substrates by co-firing. *Mater. Res. Bull.*, 44, 2127-2133.
- [4] Azad, A. M., Sudha, R., Sreedharan, O. M., (1990). Thermodynamic stability of LaCrO<sub>3</sub> by a CaF<sub>2</sub>-based E.M.F. method. *J. Less Common Metals*. 166, 57–62.
- [5] Rida, K., Benabbas, A., Bouremmad, F., Pen, M. A., Sastre, E., Martinez-Arias, A., (2008). Effect of strontium and cerium doping on the structural characteristics and catalytic activity for C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> combustion of perovskite LaCrO<sub>3</sub> prepared by sol-gel. *Appl. Catal. B Environ.*, 84, 457-467.
- [6] Coskun, M., Polat, O., Coskun, F. M., Durmus, Z., Çağlar, M., Türüt, A., (2018). Frequency and temperature dependent electrical and dielectric properties of LaCrO<sub>3</sub> and Ir doped LaCrO<sub>3</sub> perovskite compounds. *Journal of Alloys and Compounds*, 740, 1012-1023.
- [7] Adem, U., Mufti, N., Nugroho, A. A., Catalan, G., Noheda, B., Palstra, T. T. M., (2015). Dielectric relaxation in YMnO<sub>3</sub> single crystals. *Journal of Alloys and Compounds*, 638, 228–232.
- [8] Chao, Z., Xiaofei, W., Zhaowu, W., Haitao, Y., Haisheng, L., Liben, L., (2016). Dielectric relaxation, electric modulus and ac conductivity of Mn-doped YFeO<sub>3</sub>. *Ceramics International*, 42, 19461–19465.
- [9] Jie, Z., Zhenxing, Y., Yu, L., Xiaohua, Z., Longtu, L., (2017). Understanding the thermally stimulated relaxation and defect behavior of Ti-containing microwave dielectrics: A case study of BaTi<sub>4</sub>O<sub>9</sub>. *Materials & Design*, 130, 479–487.
- [10] Polat, O., Coskun, M., Coskun, F. M., Durmus, Z., Çağlar, M., Türüt, A. (2018). Os doped YMnO<sub>3</sub> multiferroic: A study investigating the electrical properties through tuning the doping level. *Journal of Alloys and Compounds*, 752, 274-288.
- [11] Mori, M., Sammes, N. M., (2002). Sintering and thermal expansion characterization of Al-doped and Co-doped lanthanum strontium chromites synthesized by the Pechini method. *Solid State Ionics*, 146, 301–312.
- [12] Vazquez, I. P. R., Angeles, J. C. R., Galicia, J. L. R., Jhu, K., Yanagisawa, K., (2004). Hydrothermal synthesis and sintering of lanthanum chromite powders doped with calcium. *Solid State Ionics*, 172, 389.
- [13] Masato, I., Hirotsugu, T., Kyota, U., Tadashi, E., Masahiko, S. (1998). Microwave synthesis of LaCrO<sub>3</sub>. *J. Mater. Chem.*, 8, 2765–2768
- [14] Zhang, G. J., Song, Y. W., Xiong, H., Zheng, J. Y., Jia, Y.Q., (2002). Synthesis and crystal structure of La<sub>0.9</sub>Ca<sub>0.1</sub>Cr<sub>1-x</sub>Ni<sub>x</sub>O<sub>3</sub> (x = 0.0–1.0) and electric conductivity of La<sub>0.9</sub>Ca<sub>0.1</sub>Cr<sub>0.5</sub>Ni<sub>0.5</sub>O<sub>3</sub>. *Mater. Chem. Phys.*, 73, 101.
- [15] Correa, H. P. S., Paiva-Santos, C. O., Setz, L. F., Martinez, L. G., Mello-Castanhe, S. R. H., Orlando M. T. D., (2008). Crystal structure refinement of Co-doped lanthanum chromites. *Powder Diff. Suppl.*, 23, S18.
- [16] Li, D.-H., He, S.-F., Chen, J., Jiang, C.-Y., Yang, C., (2017). Solid-state Chemical Reaction Synthesis and Characterization of Lanthanum Tartrate Nanocrystallites Under Ultrasonication Spectra, *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering*, 242, 012023.
- [17] Polat, O., Durmus, Z., Coskun, F. M., Coskun, M., Turut, A., (2018). Engineering the band gap of LaCrO<sub>3</sub> doping with transition metals (Co, Pd, and Ir), *J. Mater. Sci.*, 53, 3544–3556.
- [18] Pudmich, G., Boukamp, B.A., Gonzalez-Cuenca, M., Jungen, W., Zipprich, W., Tietz, F. (2000). Chromite/titanate based perovskites for application as anodes in solid oxide fuel cells. *Solid State Ion.*, 135, 433–438.

- [19] Fergus, J.W. (2004). Lanthanum Chromite-based Materials for Solid Oxide Fuel Cell Interconnects. *Solid State Ion.*, 171, 1–15.
- [20] Kenji, Y., Naoshi, I., Yutaka, S., Yoshinobu, I., (2017). Absence of a polar phase in perovskite chromite RCrO<sub>3</sub> (R=La and Pr), *Materials Chemistry and Physics*, 190, 96-101.
- [21] Khetre, S. M., Chopade, A. U., Khilare, C. J., Jadhav, H. V., Jagadale, P. N., Bamane, S. R., (2013). Electrical and dielectric properties of nanocrystalline LaCrO<sub>3</sub>, *J. Mater. Sci: Mater. Electron.*, 24, 4361–4366.
- [22] Nithya, V.D., Immanuel, J. R., Senthilkumar, S.T., Sanjeeviraja, C., Perelshtein, I., Zitoun, D., Selvan K. R., (2012). Studies on the structural, electrical and magnetic properties of LaCrO<sub>3</sub>, LaCr<sub>0.5</sub>Cu<sub>0.5</sub>O<sub>3</sub> and LaCr<sub>0.5</sub>Fe<sub>0.5</sub>O<sub>3</sub> by sol–gel method, *Materials Research Bulletin*, 47 1861–1868
- [23] Yong, S. L., Jae-Hoon, P., Jong, S. C., (2003). Frequency-Dependent Electrical Properties of Organic Light-Emitting Diodes. *Journal of the Korean Physical Society*, 42, 294-297.
- [24] Coskun, M., Polat, O., Coskun, F. M., Durmus, Z., Çaglar, M., Türüt, A. (2018). The electrical modulus and other dielectric properties by the impedance spectroscopy of LaCrO<sub>3</sub> and LaCr<sub>0.90</sub>Ir<sub>0.10</sub>O<sub>3</sub> perovskites. *RSC Adv.*, 8, 4634–4648.
- [25] Jung, W. H. (2008). AC conduction mechanisms of Gd<sub>1/3</sub>Sr<sub>2/3</sub>FeO<sub>3</sub> ceramic. *Physica B*, 403, 636-638.
- [26] Wang, K., Chen, H., Shen, W.Z., (2003). AC electrical properties of nanocrystalline silicon thin films. *Physica B*, 336, 369-378.
- [27] Abdelmoneim, H. M. (2010). Dielectric and ac conductivity of potassium perchlorate, KClO<sub>4</sub>. *Acta Physica Polonica A*, 117, 936-940.
- [28] Elliott, S. R. (1977). A theory of a.c. conduction in chalcogenide glasses. *Philos. Mag. B.*, 36, 1291-1304.

# Kimya Endüstrilerinde Patlama ve Yangınların Önlenmesi ve İlgili Vaka Çalışması

## Prevention of Explosion and Fire in Chemical Industries and A Related Case Study

Ufuk MEVLEVİOĞLU<sup>1</sup>, M.A. Neşet KADIRGAN<sup>1</sup>, Gökçen Alev ÇİFTÇİOĞLU<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Marmara Üniversitesi, Kimya Mühendisliği Bölümü, 34722, İstanbul, Türkiye

### Öz

Bu çalışmada, iş yerlerinde karşılaşılabilen patlama ve yangın risklerini değerlendirmek ve bu risklere karşı alınabilecek önlemleri belirlemek için Türkiye'nin ulusal mevzuatı ve TSE standartlarında belirtilen yöntemler incelenmekte ve hayali bir kimya tesisine uygulanmaktadır. Hayali tesisteki solvent tankı ve solvent pompası için yapılan değerlendirmede, tank içerisinde "Bölge 0" patlayıcı ortam olarak sınıflandırılabileceği, pompa etrafında ise çeşitli mühendislik yaklaşımlarıyla farklı patlayıcı ortam değerlendirmeleri yapılabileceği sonuçlarına varılmıştır. Ayrıca hayali tesisteki polimer toz besleme hunisi için yapılan değerlendirmede, huni içerisinde "Bölge 20" patlayıcı ortam olarak sınıflandırılabileceği, huni etrafında oluşabilecek patlayıcı ortamın tehlike mesafesinin ise, ilgili standartta verilen nitel yöntemlere dayanarak tahmini olarak yapılabileceği gösterilmiştir. Sınıflandırılmış olan bu tehlikeli bölgelerin dahilinde kullanılacak cihazların kategorileri ve diğer özellikleri belirlenmiş, bu bölgelerde patlama ve yangınlara karşı alınabilecek önlemlere çeşitli örnekler verilmiştir. Sonuç olarak kimya endüstrisinde sıkça rastlanabilecek tanklar, pompalar, solventler vb. etkenlerle ilgili deneysel veriler üretilemesine ve yanıcı tozlarla ilgili standart testleri yapabilecek akredite laboratuvarlara ihtiyaç duyulduğu vurgulanmıştır.

**Anahtar Kelimeler:** tehlikeli bölge sınıflandırma, yangın ve patlamadan korunma, patlayıcı ortam hesaplamaları

### Abstract

This study introduces the assessment and prevention methods of explosion and fire risks in workplaces stated in Turkey's national legislation and TSE standards, then will be applied into a fictive chemical facility. In the assessment of the solvent tank and solvent pump of this fictive facility, it has been concluded that inside of the tank can be classified as Zone 0 explosive atmosphere and various explosive atmosphere assessments can be made around the pump with various engineering approaches. It has also been shown that as a result of the assessment of the polymer dust feed hopper, hopper interior can be classified as Zone 20 explosive atmosphere and the distance of the explosive atmosphere that can occur around the hopper can be predicted based on qualitative methods given in the relevant standard. The categories and other characteristics of the equipment that can be used within these classified hazardous areas have been identified, and precautions that can be taken against explosion and fire risks in these areas have been summarized. As a result, it was emphasized that accredited laboratories for carrying out standard tests on combustible powders and experimental data for tanks, pumps, solvents etc. which are frequently encountered in the chemical industry are needed.

**Keywords:** zone classification, fire and explosion protection, explosive atmosphere calculations

### 1.GİRİŞ

Yanıcı kimyasal maddelerin gaz, buhar, sis ve tozlarının hava ile oluşturduğu ve tutuşması halinde tümüyle yanabilen karışımlar "patlayıcı ortam" olarak tanımlanmakta olup boya/baskı, petrokimya, deri, tekstil, ilaç ve diğer kimya endüstrilerinde çalışanlar ve işyeri güvenliği açısından önemli bir tehlike kaynağı oluşturmaktadır [1]. Kimyasal gaz ve toz patlamaları sonucunda can ve mal kayıpları meydana gelmekte, çalışanlar ve ekipmanlar önemli zararlar görmektedir. Patlayıcı ortam oluşabilecek tüm yerlerde risk değerlendirmesi yapılmalı, sonuçlara göre gerekli ve mümkün olan tüm teknik ve organizasyonel önlemler belirlenerek uygun ekipman ve koruyucu sistemler seçilmelidir [1].

Bu çalışmanın kapsamında; yanıcı gazların, sıvı buharlarının, sislerin veya tozların atmosferdeki oksijenle karıştığına oluşturabileceği patlayıcı ortamlar detaylı olarak incelenecektir. Atmosferik oksijene ihtiyaç duymadan kendi kendine oksitlenerek patlayabilen maddeler ve yalnızca basınçtan kaynaklanan fiziksel patlamalar çalışmanın kapsamı dışında tutulacaktır. Aksi takdirde çalışmanın kapsamı fazla geniş bir hale gelebileceğinden, bu şekilde sınırlandırılmıştır.

Türkiye’de, bu konuda Avrupa mevzuatı ve standartlarına uyumlu olarak oluşturulmuş ulusal mevzuat ve standartlar uygulanmaktadır. Bu mevzuat ve standartlara uygun olarak yapılan çalışmalarda, tesislerdeki tüm bölümler, makineler, prosesler ve maddeler ile bunların karşılıklı etkileşimleri incelenerek patlayıcı ortamların oluşması, bu ortamın tutuşturucu kaynaklarla buluşması ihtimali ve olası patlamanın şiddeti değerlendirilir [2]. Değerlendirme yapılırken planlı faaliyetlerde ortama salınan yanıcı maddelerin yanı sıra, olası kazalar veya hata durumlarında oluşabilecek yanıcı madde salımları da göz önüne alınmalıdır. Değerlendirmede ortama yayılan/salınan yanıcı maddenin fiziksel ve kimyasal özellikleri, debisi, sıcaklığı, basıncı, kısıtlanmışlığı, salım sıklığı ve daha birçok koşul göz önünde bulundurularak patlayıcı atmosfer sınıflandırması yapılır ve buna bağlı olarak ortamdaki elektrikli veya tahrikli cihazların uygunlukları değerlendirilerek olası tutuşturma kaynakları denetlenir. Bu değerlendirme sonucunda tesislerdeki tüm patlayıcı ortamların oluşma ve tutuşma riskleri kontrol altına alınmaya çalışılır. Eğer patlamanın gerçekleşmesi olasılığı yeterince düşürülemezse, gerçekleşmesi halinde oluşabilecek zararların boyutu da incelenmeli, bu patlamaların yıkım etkilerini söndürmek, azaltmak veya bertaraf etmek için teknik ve organizasyonel önlemler de belirlenerek uygulanmalıdır.

Bu çalışmada, Türkiye’deki kimya endüstrisine, patlama ve yangından korunmak üzere ulusal ve Avrupa mevzuatı ve standartlarına uygun çalışmaları yapabildiği için bir kaynak oluşturmak amaçlanmıştır.

## II. MATERYAL ve YÖNTEM

### 2.1 Yangın ve Patlamanın Kimyası

Yangın; sonucunda ısı, ışık ve diğer çeşitli yanma ürünlerinin oluştuğu, ekzotermik ve hızlı bir oksidasyon reaksiyonudur. Bir yangının oluşması için bir araya gelmesi gereken 3 ana etken; yakıt, oksitleyici ve tutuşma olarak bilinir. 3 ana unsurdan biri devre dışı edilebilirse yangın tehlikesi ortadan kalkar.



Patlama ise; oksijen ile yanıcı maddenin belli bir

orandaki karışımının tutuşturma kaynağı ile buluşması sonucunda, yanıcı maddenin tamamının veya büyük bir kısmının hızla yanması sonucunda bir şok dalgası oluşturan kimyasal reaksiyon olarak tanımlanır. Yangın ve patlama olaylarında gerçekleşen kimyasal reaksiyon aynıdır, ancak patlama olayında reaksiyonun yanıcı madde kütleindeki ilerleme hızı çok büyüktür ve bu nedenle bir şok dalgası oluşmaktadır. Reaksiyondaki bu yüksek ilerleme hızı, yangın ana etkenlerine ek olarak yakıt ile oksijenin birbiri içerisinde dağılmış olmasını (karışma) ve ortamdaki yakıt miktarının, belli bir konsantrasyon aralığında olmasını gerektirir. Bu konsantrasyon aralığının alt eşiği “Alt Patlama (veya Alevlenme) Limiti”, üst eşiği ise “Üst Patlama (Alevlenme) Limiti” olarak adlandırılmış olup bu değerler, kimyasala özgü karakteristiktir. Örneğin, alt ve üst patlama limitleri sırasıyla Benzenin %1,2 – %8,6 ; Metanın %4,4 – %17 ; Asetilenin %2,3 – 100’dür [3]. 5 ana unsurdan biri devre dışı edilebilirse patlama tehlikesi ortadan kalkar.

Parlama noktası, proses/ortam sıcaklığından yüksek olan sıvılar, ortama tutuşabilecek kadar buhar çıkarmayacağından patlama riski taşımaz. Ancak parlama noktası, proses/ortam sıcaklığından düşük olan sıvılar, tutuşabilecek miktarda buhar çıkaracağından çok ciddi yangın riski taşımakla birlikte, oluşan buhar ortamda birikirse patlama riski de taşır. Bu süreç doğal olarak sıvının sıcaklığından güçlü bir şekilde etkilenir.

Toz veya elyaf halindeki yanıcı katı maddeler, havada bulut halinde dağılabilecek yapıda ise atmosferik oksijen ile tepki verip patlayabilirler. Yanıcı tozun tanecik çapı yaklaşık olarak ortalama 0,5 mm’den küçükse patlama riski olabilir, büyükse patlaması beklenmez ancak eğer elyaf şeklinde ipiksi yapıda olan bazı katı parçacıklar, 0,5 mm çapından büyük boyutta olsalar bile patlayıcı ortam oluşturabilirler. Tanecik çapı ne kadar küçükse, havada asılı kalıp dağılabilecek kabiliyeti ve dolayısıyla patlama potansiyeli o kadar yüksek olur. Genel olarak bir toz patlamasına sebep olabilecek minimum toz konsantrasyonu 30-60 g/m<sup>3</sup>, maksimum toz konsantrasyonu ise 2-4 kg/m<sup>3</sup>tür. Bu sınırlar, yanıcı tozun cinsine ve tanecik büyüklüğü dağılımına bağlı olarak değişebilir. Toz tabakaları, tutuşması halinde için için yanmaya duyarlıdır; havada asılı bir toz bulutu ise tutuşması halinde patlayabilir. Birikmiş toz tabakaları tutuşup, kendisi bir tutuşturma kaynağı görevi görerek daha büyük patlamalara sebebiyet verebilir. Ayrıca bir gaz, buhar ya da toz patlaması, patlamanın olduğu mekânda ki başka tozları kaldırabilir ve ilk patlama, ikincil ve daha da tehlikeli bir toz patlamasına dönüşebilir [4].

Yanıcı maddelerin veya patlayıcı ortamların yanma reaksiyonunu başlatabilecek çok çeşitli tutuşturma kaynakları mevcuttur. Açık alev, mekanik etkilerle oluşan kıvılcıklar,

elektrikli aparatlar, yıldırım, statik elektrik ve ekzotermik reaksiyonlara kimya endüstrisinde sıkça rastlamak mümkündür. Risk değerlendirmesi yapılırken ve gerekli önlemler belirlenirken, tutuşturma kaynaklarının tümü göz önüne alınarak mümkün olduğunca tehlikeli bölgelerden uzaklaştırılmalıdır [1].

Elektrikli ekipmanlar, düşük voltajlarda bile patlayıcı ortamları tutuşturabilecek enerjiye sahip sıcak yüzeyler veya elektriksel kıvılcımlar oluşturabilir. Ayrıca elektrikli olmasa bile hava veya başka tahriklerle çalışan ekipmanların döner aksamları, olası arıza hallerinde mekanik kıvılcımlar veya yüksek ısı oluşturabilir, hatta çelikten üretilmiş çekiç vb. el aletleri çarpma veya sürtünme sonucu tutuşmaya sebep olabilir [2, 5]. İletken olmayan malzemelerden yapılan (Ör: polimer) filmler makaralarda döndürülürken, özellikle iletkenliği düşük olan sıvılar borularda aktarılırken veya tanklarda karıştırılırken, toz veya granül haldeki katılar kovalardan boşaltılırken, insanlar günlük işlerini yaparken veya başka çok çeşitli şekillerde statik elektrik oluşabilir.

## 2.2 Patlama ve Yangından Korunma

Patlamaların önlenmesi ve patlamalardan korunma amacıyla teknik ve organizasyona yönelik önlemler alınırken aşağıda belirtilen temel ilkelere ve verilen öncelik sırasına uyulur [1];

### a) Patlayıcı ortam oluşmasını önlemek

Yanıcı maddelerin kullanımından kaçınarak veya azaltarak tehlikeli patlayıcı ortamların oluşması önenebilir [2]. Tozlarla ilgili olarak, parçacık büyüklüğünü arttırmak bazen mümkündür, böylece katı parçacıklar havada asılı kalmayarak zemine/yüzeyle çöker ve patlayıcı bir karışım oluşmaz. Yanıcı madde salımını kısıtlayarak veya ortamdaki havalandırmanın etkisini artırarak alt patlama sınırının altında kalmak mümkün olabilir [2]. Endüstriyel uygulamalarda genel olarak, alt patlama limitinin %20'sinden düşük konsantrasyonlar güvenli kabul edilir. Doğal havalandırma, toz birikimi olabilen yerlerde biriken tozları havaya savurarak patlayıcı atmosfer oluşmasına sebep olabilmektedir. Bununla beraber cebri-lokal havalandırma ile direkt salım kaynağından tozun çekilmesi ile tehlikeli bölgeyi küçültmek/yok etmek mümkün olabilmektedir. İner gazların (azot, karbon dioksit, soy gazlar vb.), su buharının veya işlenen ürünlerle uyumlu, inert toz halindeki maddelerin (kalsiyum karbonat vb.) ilave edilmesi, patlayıcı ortamların oluşmasını önleyebilir (inertleştirme) [2].

### b) Yapılan işlemlerin doğası gereği patlayıcı ortam oluşmasının önlenmesi mümkün değilse, patlayıcı ortamın tutuşmasını önlemek

Kaynak, taşlama vb. sıcak işler ya da sigaradan kaynaklı alevler veya kıvılcıklar, organizasyon önlemleri ile engellenmelidir. Bunun için dünya çapında yaygın olarak "çalışma izni sistemleri" kullanılmaktadır. Çalışma izni sistemlerinde, sıcak işler ve özel risk kaynağı olan diğer tüm faaliyetler, ancak bölüm yöneticileri ve iş güvenliği sorumlularından alınacak özel izin ve imzalı bir form aracılığıyla yapılabilir. Böylece riskli faaliyetin güvenli bir şekilde gerçekleştirilebilmesi için gaz ölçümü, yanıcı maddelerin ve tutuşturma kaynaklarının ortamdaki uzaklaştırılması, kullanılacak ekipmanın işe uygunluğu, işi yapacak personelin eğitiminin uygunluğu, acil durum müdahale planı vb. gerekli tüm önlemlerin alındığından emin olunması amaçlanmaktadır.

Tehlikeli bölgelerde statik elektriğin oluşmasını kısıtlayacak veya iletkenlik sağlayarak birikmeden boşalmasını sağlayacak tasarım ve malzeme seçimi yapılmalı, iletken olan tüm ekipmanlar topraklanmalıdır [2]. İletken veya anti-statik zemin kaplamaları, anti-statik ayakkabı ve iş kıyafetleri gibi önlemler de alınabilir. Ayrıca havanın bağıl neminin %65'in üzerinde tutulması, aslında yalıtkan olan malzemelerin çoğunluğunun yüzeyinde yeterince nem adsorblanarak iletken hale gelmesini ve dolayısıyla statik elektriğin hava yoluyla boşalmasını sağlar [6].

Tehlikeli bölgelerde bakır-berilyum, alüminyum-bronz vb. özel alaşımlardan, özel ısı işlemleriyle üretilmiş kıvılcım çıkarmayan el aletleri kullanılmalıdır.

Tehlikeli bölgelerde kullanılacak elektrikli ekipmanlar veya tahrikli cihazlar ise; patlamaya karşı korunmuş tip (Ex-proof) olmalı ve tehlikeli bölge sınıfının ve yanıcı maddenin gerektirdiği özelliklere uygun olmalıdır. Bölge sınıfına bağlı olarak ekipmanın hangi kategoriye sahip olması gerektiği, Tablo.1'de listelenmiştir. Ekipman üreticileri, ürettikleri ekipmanların kategorilerini ve diğer özellikleri, akredite/onaylanmış kuruluşlar aracılığıyla, "EU-Type Examination Certificate" (endüstride "ATEX sertifikası" olarak bilinir) belgeleri edinerek kanıtlamalıdır [5, 7].

**Tablo 1.** Tehlikeli bölgelerde kullanılacak teçhizatın ATEX ekipman kategorileri [7]

Bölge Sınıfı	Ekipman Kategorileri	..... İçin Tasarlanmış İse
0	II 1 G	Gaz, buhar veya sis ile hava karışımı
1	II 1 G veya 2 G	
2	II 1 G veya 2 G veya 3 G	
20	II 1 D	Toz ile hava karışımı
21	II 1 D veya 2 D	
22	II 1 D veya 2 D veya 3 D	



Tehlikeli bölgelerde kullanılacak elektrikli veya tahrikli ekipmanların yüzeylerinin ulaşabileceği en yüksek sıcaklık değeri, ortamda bulunabilecek yanıcı maddenin tutuşma sıcaklığından düşük olmalıdır [8, 9]. Ekipmanlar, yüzeyinin ulaşabileceği en yüksek sıcaklık değerine göre Tablo.2'deki gibi sınıflandırılır. En yüksek yüzey sıcaklığı, tablodaki iki sınır değer arasında denk gelen ekipmanlar, bu iki sınır değerden üsttekinin sıcaklık sınıfına atanır.

Gaz ve buharlar ayrıca, tutuşma hassasiyetlerine bağlı olarak 3 gruba (IIA, IIB, IIC) ayrılırlar. IIA'dan IIC'ye doğru gittikçe minimum tutuşma akımı (veya enerjisi) düşer. Minimum tutuşma akımı, IEC 60079-11 standardına göre kıvılcım deneyi donanımındaki patlayıcı deney karışımının tutuşmasına sebep olan rezistif veya endüktif devrelerdeki en küçük akım olarak tanımlanır [3].

**Tablo 2.** Tehlikeli bölgelerde kullanılacak teçhizatın sıcaklık sınıfları [8]

Sıcaklık Sınıfı	En Yüksek Yüzey Sıcaklığı (°C)
T1	450
T2	300
T3	200
T4	135
T5	100
T6	85

### c) Çalışanların sağlık ve güvenliklerini sağlayacak şekilde patlamanın zararlı etkilerini azaltacak önlemleri almak.

Çoğu gaz/hava ve toz/hava karışımı için en yüksek patlama basıncı 8-10 bardır, ancak alüminyum veya magnezyum gibi hafif metallerin tozları için daha yüksek olabilir. Tank, boru ve kap gibi tesis öğeleri, içten patlamalarda beklenen en yüksek basınca dayanıklı inşa edilmelidir. Özellikle tanklarda, olası en yüksek patlama basıncına dayanamayabileceği durumlarda, patlamanın en güvenli (insanlardan ve kritik ekipman kontrol bölgelerinden uzak) bölgeye doğru yönlendirilmesi sağlanabilir [10]. Bunun için tankın uygun bir yönü, bilinçli olarak zayıf tasarlanarak patlama basıncının bu yönden tankı yırtarak nispeten güvenli olan kısma doğru boşalması sağlanır, böylece diğer bölümlerdeki insan ve ekipmanlar korunmuş olur.

Patlama, sensörler tarafından algılanarak çok kısa bir tepki süresinde ekipman içine yangın söndürme maddesi enjekte edilip alev bastırılabilir. Bu sistemlerin tasarımında, patlama basıncının artış hızı (dP/dt) çok önemlidir. Tüm yanıcı maddeler için bu değer karakteristiktir ve standart testlerle tespit edilebilir [10, 11].

Bir boru boyunca hareket eden bir patlama, sensörler tarafından algılanarak milisaniyeler içinde bir vana veya kapak kapatılarak patlamanın ilerleyişi durdurulabilir [10].

İçinden yanıcı madde geçen aktarım hattına, gözenekli/hüresel filtre benzeri bir teçhizat eklenebilir. Bu teçhizat alevin hızını düşürerek kendi yanma ürünleri içerisinde boğulmasını ve sönmesini sağlar. Bu teçhizat patlama basıncının yönlendirildiği sistemlere entegre edilerek alevsiz bir basınç boşalması da sağlanabilmektedir. Böylece iç ortamlarda, yangınlara sebep olmadan basınç yönlendirme sistemleri kurulabilmektedir [10].

### 2.3 Yöntem

Tehlikeli bölge sınıflandırması ve bu bölgelerde kullanılacak teçhizatın seçimi için Türkiye'de iş yerlerini düzenleyen temel mevzuatlar olarak "Çalışanların Patlayıcı Ortamların Tehlikelerinden Korunması Hakkında Yönetmelik" ve "Muhtemel Patlayıcı Ortamda Kullanılan Teçhizat ve Korumaya Sistemlerle İlgili Yönetmelik" geçerli olup, ayrıca birçok TS EN standardı (Ör: TS EN 60079 serisi, TS EN 13463-1 vb.) mevcuttur. Bu mevzuat ve standartlara göre patlama tehlikesi olan yerler, patlayıcı ortam oluşma sıklığı ve bu ortamın devam etme süresi esas alınarak, Tablo.3'deki gibi sınıflandırılmıştır [1].

**Tablo 3.** Tehlikeli bölge sınıfları [1]

Bölge Sınıfı	Açıklama
Bölge 0	Gaz, buhar ve sis halindeki yanıcı maddelerin hava ile karışımından oluşan patlayıcı ortamın sürekli olarak veya uzun süreli ya da sık sık oluştuğu yerler.
Bölge 1	Gaz, buhar ve sis halindeki yanıcı maddelerin hava ile karışımından oluşan patlayıcı ortamın normal çalışma koşullarında ara sıra meydana gelme ihtimali olan yerler.
Bölge 2	Gaz, buhar ve sis halindeki yanıcı maddelerin hava ile karışarak normal çalışma koşullarında patlayıcı ortam oluşturma ihtimali olmayan yerler ya da böyle bir ihtimal olsa bile patlayıcı ortamın çok kısa bir süre için kalıcı olduğu yerler.
Bölge 20	Havada bulut halinde bulunan tutuşabilir tozların, sürekli olarak veya uzun süreli ya da sık sık patlayıcı ortam oluşturabileceği yerler.
Bölge 21	Normal çalışma şartlarında, havada bulut halinde bulunan tutuşabilir tozların ara sıra patlayıcı ortam oluşturabileceği yerler.
Bölge 22	Normal çalışma şartlarında, havada bulut halinde bulunan tutuşabilir tozların patlayıcı ortam oluşturma ihtimali bulunmayan ancak böyle bir ihtimal olsa bile bunun yalnızca çok kısa bir süre için geçerli olduğu yerler.

Alevlenebilir maddelerin, patlayıcı ortam oluşabilecek şekilde ortama salınabildiği nokta veya konum, "salım

kaynağı” olarak tanımlanmış olup, 3 salım derecesi belirlenmiştir [4, 12]:

**Sürekli Salım:** Sürekli olan veya uzun periyotlar boyunca veya sıklıkla olması beklenen salım.

**Birincil Salım:** Normal çalışma sırasında periyodik olarak veya nadiren olması beklenebilen salım.

**İkincil Salım:** Normal çalışmada olması beklenmeyen ve olursa yalnızca kısa bir periyot boyunca ve seyrek olarak meydana gelmesi muhtemel olan salım.

Sıvı, gaz veya buhar salımları sonucu oluşan tehlikeli bölge sınıflarını belirlemede ve salım kaynağı etrafındaki tehlike mesafelerinin hesaplanmasında, TS EN 60079-10-1 standardındaki formüller yanıcı maddelerin salım hızını ve ortamdaki havalandırmanın etkinliğini tespit ederek değerlendirmek temelinde kuruludur. Vaka çalışmasında kullanacağımız formüller Tablo.4’de gösterilmiş, formüllerde kullanılan sembollerse Tablo.5’de açıklanmıştır.

**Tablo 4.** Hesaplamalarda kullanılacak formüller [12]

No	Sembol	Açıklama	Formül	Birim
1	W	Sıvının borudan kaçak/salım hızı	$W = C_d S \sqrt{2\rho\Delta p}$	kg/sn
2	W <sub>e</sub>	Dökülmüş sıvının buharlaşma hızı (1 cm derinliğinde havuz oluşturduğu varsayılmıştır)	$W_e = \frac{6,55 u_w^{0,78} A_p p_v M^{0,667}}{R \times T}$	kg/sn
3	ρ <sub>g</sub>	Oluşan buharın yoğunluğu	$\rho_g = \frac{p_a M}{RT_a}$	kg/m <sup>3</sup>
4	SK	Salım karakteristiği	$\frac{W_g}{\rho_g kLFL}$	m <sup>3</sup> /sn

**Tablo 5.** Formüllerde kullanılan semboller [12]

Sembol	Açıklama	Birim
A <sub>p</sub>	Havuz/birikintinin yüzey alanı	m <sup>2</sup>
C <sub>d</sub>	Salım açıklıklarının ayırt edici bir özelliği olan ve hesaplamaya türbülans ve viskozitenin etkilerini dahil eden tahliye katsayısıdır.	birimsiz
M	Gaz veya buharın mol kütlesi	kg/kmol
Δp	Salımın gerçekleştiği açıklıktaki basınç farkı	Pa
p <sub>a</sub>	Atmosferik basınç (101.325)	Pa
p <sub>v</sub>	T sıcaklığındaki sıvının buhar basıncı	kPa

R	Evrensel gaz sabiti (8314)	J/kmol K
ρ	Sıvının yoğunluğu, özgül ağırlık	kg/m <sup>3</sup>
ρ <sub>g</sub>	Gaz veya buharın yoğunluğu	kg/m <sup>3</sup>
S	Akışkanın salım yaptığı açıklığın (deliğin) kesiti	m <sup>2</sup>
T	Gaz veya sıvı akışkanın mutlak sıcaklığı	K
T <sub>a</sub>	Mutlak ortam sıcaklığı	K
u <sub>w</sub>	Salım kaynağı yakınındaki veya sıvı havuzu yüzeyindeki rüzgar hızı	m/sn
W	Sıvının salım hızı	kg/sn
W <sub>e</sub>	Sıvının buharlaşma hızı	kg/sn
W <sub>g</sub>	Alevlenebilir gaz/buharın toplam kütle salım hızı	kg/sn
k	LFL ile ilgili bir emniyet katsayısı	birimsiz
LFL	Alt alevlenme sınırı	hac/hac

Bu formülasyonlarla tespit edilen SK ve u<sub>w</sub> değerleri kullanılarak, Şekil.1’deki grafikten “seyrelme derecesi” tespit edilir.

Seyrelme derecesi; havalandırmanın, bir salımı güvenli bir seviyeye kadar seyreltme etkinliğinin ölçüsü olup, 3 seyrelme derecesi tanımlanmıştır [12]:

**Yüksek seyrelme:** Salım kaynağının yakınındaki derişim hızla azalır ve salım durduktan sonra neredeyse hiç kalıcılığı olmaz.

**Orta seyrelme:** Salım devam ederken kararlı bir bölge sınırı oluşturularak derişim kontrol altına alınır ve ayrıca salım durduktan sonra patlayıcı gaz ortamı aşırı derecede kalıcılığını sürdürmez.

**Düşük seyrelme:** Salım devam ederken derişim büyüktür ve/veya salım durduktan sonra alevlenebilir ortamın kalıcılığı büyüktür.

Daha sonra, Tablo.6 üzerinde salım derecesi, seyrelme derecesi ve havalandırmanın emre amadeligi (güvenilirliği) verileri kullanılarak tehlikeli bölgenin sınıfı belirlenir. Havalandırma için üç emre amadelik derecesi tanımlanmıştır [12]:

**İyi:** Havalandırma neredeyse sürekli mevcuttur.

**Vasat:** Havalandırmanın normal çalışmada sürekli mevcut olması beklenir. Ancak seyrek ve kısa süreli kesintiler olabilir.

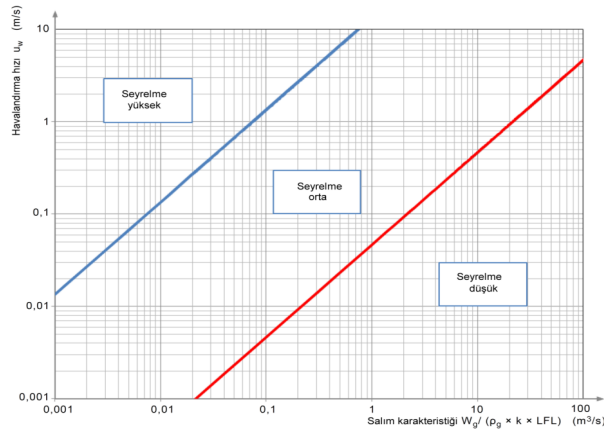
**Kötü:** İyi veya orta emre amadelik derecesini karşılamayan havalandırma, fakat yine de kesintilerin uzun sürelerle oluşması beklenmez.

Sınıflandırılmış olan tehlikeli bölgenin mesafesini değerlendirmek içinse, yine SK değeri ve gaz/buharın salım tipi kullanılarak Şekil.2’deki grafikten “tehlikeli mesafe” tespit edilir. 3 salım tipi tanımlanmıştır [12]:

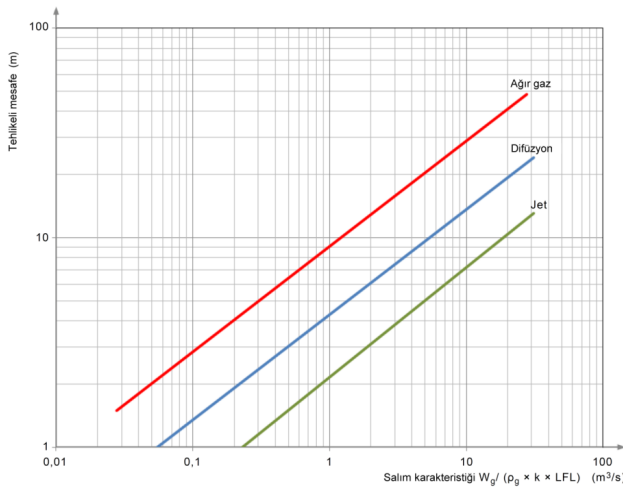
**Jet Tipi Salım:** Bir boru bağlantı elemanındaki sızıntının, basıncın yüksek olması durumunda, yüksek hızda bir jet salım oluşturması beklenir. Jet kendi kendine seyrelecek ve hatta belirgin başka hava hareketi olmaksızın dağılacaktır.

**Difüzyon Tipi Salım:** Düşük hızda difüzyonla yayılan veya salım geometrisinden ya da yakın yüzeylere çarpmadan kaynaklı ivmesini kaybeden jet salımlardır.

**Ağır Gaz Tipi Salım:** Yatay yüzeyler (örneğin toprak) boyunca yayılan ağır gazlar veya buharlardır.



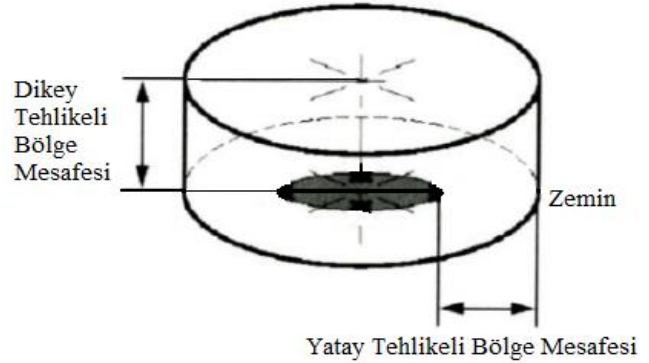
Şekil 1. Seyrelme derecesini değerlendirme grafiği [12]



Şekil 2. Tehlikeli alan mesafelerinin tahmini için kullanılan grafik [12]

Bu grafikte yapılan işlem; salım karakteri değerinin, salım tipi eğrisi ile kesiştiği noktadaki tehlikeli bölgenin mesafesini okumaktır.

Salım kaynağının özellikleri ve ortam şartları dikkate alınarak yapılan değerlendirmelere göre tehlikeli bölgenin silindirik, konik vb. diğer şekillerde olmasına bağlı olarak mesafelerde değişiklikler oluşabilir. Bu değerlendirmeler, değişiklikler ve düzenlemeler, değerlendirmeyi yapan uzman(lar) tarafından yapılır. Tehlikeli bölge şekillerine bir örnek, Şekil.3'te verilmiştir.



Şekil 3. Alevlenebilir sıvı (kaynamayan buharlaşma havuzu) [12]

Tutuşabilir tozların oluşturacağı tehlikeli bölgelerin sınırları ve salım kaynağı etrafındaki tehlike mesafeleri, en kötü koşullarda yapılan gözlemlere dayanılarak ve toz miktarı, tozun patlayıcılık özellikleri, salım hızı, parçacık boyutları ve tozun nem oranı gibi parametreler göz önüne alınarak değerlendirilebilir. Tabaka, tortu veya yığın halinde tutuşabilir tozların bulunduğu yerler, patlayıcı ortam oluşturabilecek diğer bir salım kaynağı olarak dikkate alınmalıdır [4].

### III.BULGULAR ve TARTIŞMA

#### 3.1 Hayali Tesisin Tanıtımı

Örnek olarak, Marmara Bölgesi'nde kurulu bir ambalaj baskı tesisindeki ambalaj filmi üretim prosesini ve solvent depolama tanklarını inceleyeceğiz. Hayali tesiste, mürekkep solventi olarak kullanılan etil asetat, sıkça ve bol miktarda kullanıldığından dolayı bina dışında kurulu 20 ton'luk çelik depolama tanklarında saklanmakta ve burada kurulu mekanik salmastralı bir pompa ile işletme içerisine pompalanmaktadır. Özellikle pompa veya kompresör gibi yüksek devirle çalışan ekipmanlarla yanıcı madde aktarımı yapılırken kaçaklar oluşması beklenebilir. Tesiste ayrıca, ambalaj filmi üretimi için, toz halde polivinil klorür (PVC) kullanılmaktadır. PVC tozu taneciklerinin en az %90'ının çapı 0,063 mm ile 0,25 mm arasındadır. PVC film hammaddelerinin kontrolleri yapıldıktan sonra mikserlere verilerek karıştırılır. Mikserlere toz hammadde aktarımı, emişli havalandırma

sistemine sahip besleme hunileri aracılığı ile yapılmaktadır. Aktarım işlemi yapılırken emiş yapan havalandırma sistemi her zaman açık tutulmaktadır ve emiş etkinliğinin iyi olduğu bilinmektedir. Çuvallar bıçakla kesilerek elle boşaltılmaktadır. Karıştırma sırasında ilave yardımcı maddeler ekledikten sonra, üretim yapılacak makinenin ekstrüderine verilerek işlenmeye başlar. Ekstrüderlerin yüzey sıcaklıkları 50 – 170 °C arasındadır. Bu sıcaklık, bölümde bulunan PVC tozunun tutuşma sıcaklığı olan 450 °C'nin çok altındadır.

### 3.2 Uygulama ve Bulgular

Hayali tesisimizde inceleyeceğimiz 2 bölüm için, mevcut durumdaki veya olası en kötü senaryolarda oluşabilecek patlayıcı ortamları aşağıda ayrı ayrı inceleyeceğiz.

**Değerlendirme 1** – Solvent tanklarının iç hacminde sürekli olarak yüksek miktarda solvent buharı bulunacaktır. Buhar konsantrasyonunun üst patlama limitini aşması beklenebilir, ancak tanka dolun, boşaltım vb. tutuşma riski yüksek operasyonlar esnasında patlayıcı ortam oluşmasını sağlayacak miktarda hava girişi ile mümkün olduğundan, tankların tüm iç hacimleri **Bölge 0** olarak sınıflandırılır.

**Değerlendirme 2** – Depolama tanklarından etil asetat iletimi için kullanılan pompalardan olası kaçakların oluşabileceği patlayıcı ortamlar değerlendirilecektir.

Hesaplama için kullanılacak veri ve kabuller şöyledir:

- Tesiste olası en kötü koşullar için en yüksek atmosferik sıcaklık  $T_a = 40^\circ\text{C} = 312\text{ K}$
- Atmosferik basınç  $p_a = 101.325\text{ Pa}$
- TS EN 60079-10-1 standardındaki B.1 çizelgesi kullanılarak, pompa salmastrasından olası kaçığın yüzey alanı  $S = 5\text{ mm}^2$
- Pompaların max basıncı yaklaşık  $10\text{ bar} = \Delta p = 1.000.000\text{ Pa}$ .
- Etil asetatın alt patlama limiti  $\text{LFL} = \%2 = 0,02$  [3]
- Olası kaçığın şekli belirsiz olacağından, standarttaki örneklerle uygun olarak  $C_d = 0,75$
- Etil asetat molekül ağırlığı  $M = 88,11\text{ kg/kmol}$ , sıvı yoğunluğu  $\rho = 900\text{ kg/m}^3$
- TS EN 60079-10-1 standardındaki C.1 çizelgesi kullanılarak, rüzgar hızı  $u_w = 0,3\text{ m/sn}$
- Etil asetatın LFL değeri sabittir, ancak olası konsantrasyon dalgalanmaları LFL değerine de küçük bir etki edebileceğinden  $k = 0,9$
- Tablo 4, Formül No:3 kullanılarak yapılan işlem sonucu, buhar yoğunluğu  $\rho_g = 3,43\text{ kg/m}^3$

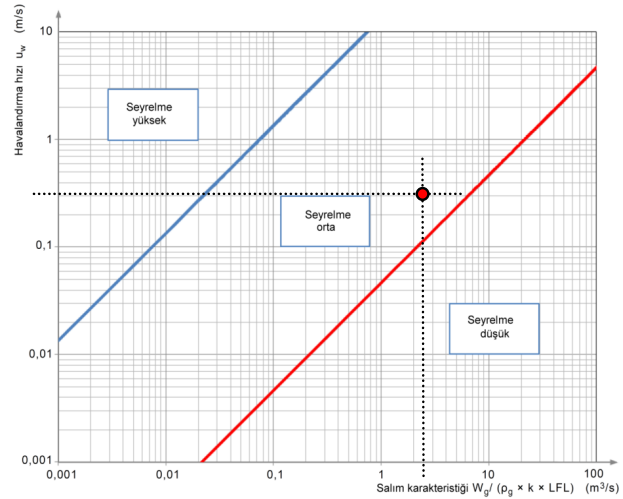
Hesaplamalar: (Sıvı kaçağı – İkincil Salım)  
Tablo 4, Formül No:1 kullanılarak yapılan işlem sonucu, kaçan sıvının kütleli debisi 'W = 0,16 kg/sn'

4 farklı buhar oluşum senaryosu denenecektir:

1 – Kaçan solventin %100'ünün, sıvı salım hızıyla aynı hızda yanıcı bileşen olarak buharlaştığı varsayılırsa, bu kaçığın yanıcı buhar salım hızı:  $W_g = 1,6 \times 10^{-1}\text{ kg/sn}$

Tablo 4, Formül No:4 kullanılarak yapılan işlem sonucu, salım karakteristiği 'SK = 2,6 m<sup>3</sup>/sn'

Hesaplama sonucunda elde edilen veriler, Şekil 1'de gösterilen grafiğe yerleştirilir. Bu adım Şekil 4'de çizilerek gösterilmiştir. Görüldüğü gibi bu elde edilen veriler sonucu seyrelme derecesi **Orta** bulunmuştur.

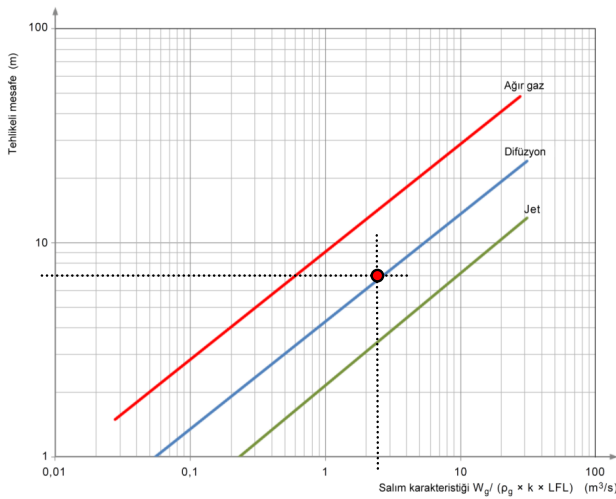


Şekil 4. Seyrelme derecesinin tespiti

Salım kaynağı kaçak ihtimali olduğundan **ikincil** salım derecesine sahip olduğu ve havalandırma emre amadeliğinin ise **Vasat** olduğu değerlendirilmiştir. Bu değerlendirmeler Tablo 6 üzerinde kullanılarak patlayıcı atmosfer sınıfının **Bölge 2** olduğu tespit edilmiştir. Bu adım Tablo 7 üzerinde oklarla gösterilmiştir.

Etil asetat buharı havadan yoğundur, ancak senaryomuzdaki şekliyle kaçan sıvının %100'ünün buharlaşması yüksek hızda püskürmeye işaret ettiğinden, salım tipinin "jet" olmasa bile **difüzyonla yayılım** olarak değerlendirilmesi gerçeğe daha yakın olacaktır. SK değeri ve salım tipi, Şekil 2'de gösterilen grafiğe yerleştirildiğinde, Bölge 2 olarak sınıflandırılmış olan tehlikeli bölgenin mesafesi 7 metre okunmaktadır. Bu adım Şekil 5'de çizilerek gösterilmiştir. Etil asetat buharının havaya göre yoğunluğu yaklaşık 3'tür ancak ağır gaz yayılımından daha hızlı bir salım öngörüldüğünden, pompalardan etrafa doğru **7 metre yarıçapındaki hacmin Bölge 2** olarak sınıflandırılması gerektiği değerlendirilebilir.





Şekil 5. Tehlikeli bölgenin mesafesinin tespiti

2 – Kaçan solventin %20'sinin yanıcı bileşen olarak buharlaştığı varsayılırsa, bu kaçağın yanıcı buhar salım hızı:  $W_g = 3,2 \times 10^{-2} \text{ kg/sn}$

Tablo 4, Formül No:4 kullanılarak yapılan işlem sonucu, salım karakteristiği 'SK = 0,5 m³/sn'

Hesaplama sonucunda Şekil 1. kullanılarak seyrelme derecesi **Orta** bulunmuştur. Salım kaynağı kaçak ihtimali olduğundan **ikincil** salım derecesine sahip olduğu ve havalandırma emre amadeliğinin ise **Vasat** olduğu değerlendirilmiştir. Tablo 5. kullanılarak kaçak ihtimalinin **Bölge 2** oluşturduğu tespit edilmiştir. Etil asetat buharı havadan ağırdır ve senaryomuzdaki şekliyle kaçan sıvının %20'sinin buharlaşması, orta-düşük hızda püskürmeye işaret ettiğinden, salım tipinin **ağır gaz salımı** olarak değerlendirilmesi uygun bulunmuştur.

Şekil 2.'ye göre, Bölge 2 olarak sınıflandırılmış olan tehlikeli bölgenin mesafesi 6,5 metre okunmaktadır. Bu senaryoya göre, pompalardan etrafa doğru **6,5 metre yarıçapındaki alanın, zeminden 2,5 metre yüksekliğe kadar Bölge 2** olarak sınıflandırılması gerektiği değerlendirilebilir.

3 – Pompanın kurulu olduğu yerde, zeminde drenaj kanalı kurulmuş ise, kaçan solventin büyük kısmı ortamdaki uzaklaşarak bir atık tankında toplanacaktır. Bu nedenle kaçak bölgesinde etil asetatın yalnızca %2'sinin yanıcı bileşen olarak buharlaştığı varsayılırsa, kaçağın yanıcı buhar salım hızı:  $W_g = 3,2 \times 10^{-3} \text{ kg/sn}$

Tablo 4, Formül No:4 kullanılarak yapılan işlem sonucu, salım karakteristiği 'SK = 0,05 m³/sn'

Hesaplama sonucunda Şekil 1. kullanılarak seyrelme derecesi **Orta** bulunmuştur. Salım kaynağı kaçak ihtimali

olduğundan **ikincil** salım derecesine sahip olduğu ve havalandırma emre amadeliğinin ise **Vasat** olduğu değerlendirilmiştir. Tablo 5. kullanılarak kaçak ihtimalinin **Bölge 2** oluşturduğu tespit edilmiştir. Etil asetat buharı havadan ağırdır ve senaryomuzdaki şekliyle kaçan sıvının %2'sinin buharlaşması, düşük hızda püskürmeye işaret ettiğinden, salım tipinin **ağır gaz salımı** olarak değerlendirilmesi uygun bulunmuştur.

Şekil 2.'ye göre, Bölge 2 olarak sınıflandırılmış olan tehlikeli bölgenin mesafesi 2 metre okunmaktadır. Bu senaryoya göre, pompalardan etrafa doğru **2 metre yarıçapındaki alanın, zeminden 1 metre yüksekliğe kadar Bölge 2** olarak sınıflandırılması gerektiği değerlendirilebilir.

4 – Kaçağın damlayarak havuz oluşturacağı ve 15 dk. boyunca kaçağın fark edilmeyeceği varsayılırsa, toplam kaçak miktarı ve hızı hesabı şöyle yapılabilir;

$$\text{Toplam kaçağın hacmi} = W \times t / \rho = 0,16 \text{ m}^3$$

1 cm derinliğinde havuz oluşacağı varsayılarak, buharlaşma yüzey alanı  $A_p = 16 \text{ m}^2$

Tesisin bulunduğu coğrafyada, en sıcak aylarda olası en yüksek sıcaklıklar olan yaklaşık 40°C'de etil asetatın buhar basıncı  $P_v = 25,1 \text{ kPa}$ 'dır.

Tablo 4, Formül No:2 kullanılarak yapılan işlem sonucu, damlama sonucu oluşan havuzdan gerçekleşecek buharlaşma hızı  $W_e = W_g = 7,8 \times 10^{-3} \text{ kg/sn}$

Tablo 4, Formül No:4 kullanılarak yapılan işlem sonucu, salım karakteristiği 'SK = 0,13 m³/sn'

Hesaplama sonucunda Şekil 1. kullanılarak seyrelme derecesi **Orta** bulunmuştur. Salım kaynağı kaçak ihtimali olduğundan **ikincil** salım derecesine sahip olduğu ve havalandırma emre amadeliğinin ise **Vasat** olduğu değerlendirilmiştir. Tablo 5. kullanılarak kaçak ihtimalinin **Bölge 2** oluşturduğu tespit edilmiştir. Etil asetat buharı havadan ağırdır ve senaryomuzdaki şekliyle kendiliğinden buharlaşmanın salım tipi **ağır gaz salımı**dır. Şekil 2.'ye göre, Bölge 2 olarak sınıflandırılmış olan tehlikeli bölgenin mesafesi 3,5 metre okunmaktadır. Pompanın altında oluşacak 16 m²'lik etil asetat havuzunun kenarlarından (yaklaşık 2,5 metre yarıçapında havuz) itibaren etrafa doğru 3,5 metre yarıçapındaki alan tehlikeli bölge olacaktır. Buna göre, toplamda **pompanın etrafında 6 metre yarıçapındaki alanın, zeminden 2,5 metre yüksekliğe kadar Bölge 2** olarak sınıflandırılması gerektiği değerlendirilebilir.

Kurulmuş olan 4 senaryonun tümünde, olası patlayıcı atmosfer **Bölge 2** olarak sınıflandırılmış, senaryoların çoğunluğunda bu tehlikeli bölgenin yaklaşık 7 metre mesafede ve zeminden 2,5 metre yükseklikte olduğu değerlendirilmiştir.

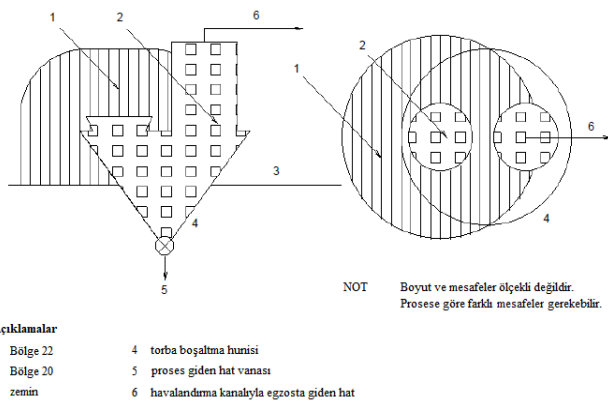


**Değerlendirme 3** – PVC tozunun patlayıcı ortam oluşturabildiği bilindiğinden, besleme hunilerine dökülmesi esnasında oluşabilecek patlayıcı toz atmosferi değerlendirilecektir.

PVC tozu üreticilerinin teknik ve güvenlik bilgi formlarına göre, tesiste kullanılacak PVC tozu taneciklerinin en az %90'ının çapı 0,063 mm ile 0,25 mm arasındadır. PVC tozu için doğrudan veri bulunamamış, ancak yüksek konsantrasyonda PVC içeren emülsiyonlar için bulunan verilere göre, tozun alt patlama limitinin  $125 \text{ g/m}^3$ ,  $dP/dt$  değerinin, dolayısıyla patlayıcılık özelliğininse düşük olduğu görülmektedir [13].

Besleme hunisinin ve toz emişi yapan havalandırma sisteminin içleri, tozun doğrudan boşaltıldığı ve aktarıldığı hacimler olduğundan, bu hacimler **Bölge 20** olarak sınıflandırılmalıdır.

Etkin havalandırma sistemi bulunmasından dolayı, normal çalışma koşullarında, besleme hunisinin etrafına toz yayılımı beklenmez. Ancak bazen insan hataları sonucu havalandırmanın etkin bölgesinden dışarıda boşaltım yapılabileceği veya havalandırma sisteminde hız/verim düşmeleri gerçekleşebileceği göz önüne alınarak, huninin etrafında belli bir alan **Bölge 22** olarak sınıflandırılmalıdır. Tesiste kullanılan PVC tozunun patlayıcılık özelliklerinin zayıf olduğu değerlendirilmesine dayanarak, tehlikeli bölgenin mesafesinin 1 metreyi aşmasının beklenmediği değerlendirilebilir. Dolayısıyla huninin etrafında **1 metre yarıçapındaki küresel hacim Bölge 22** olarak sınıflandırılır. Bu sınıflandırmanın tipik çizimi Şekil.6'da verilmiştir.



**Şekil 6.** Emiş (egzoz) havalandırması olan torba boşaltma istasyonu [4]

### 3.3 Mevcut ve/veya alınması gereken önlemler

Genel olarak tüm patlayıcı ortam riski bulunan yerler için mevcut veya alınması gereken birincil önlemleri aşağıdaki gibi sıralayabiliriz.

- Metal olan tüm tanklar, besleme hunileri, aktarım hatları ve makineler uygun ve yeterli şekilde topraklanmış olmalıdır.
- Tehlikeli bölgelere, kolayca okunur ve fark edilir şekilde “Ex Patlayıcı Ortam” ve “Ateşle Yaklaşma” gibi uyarı ve yasaklama işaretleri yerleştirilmelidir [1].
- Tehlikeli bölgelere giriş için yalnızca ilgili bölgelerde patlamadan korunma hususunda özel eğitim almış ve yetkilendirilmiş personele izin verilmeli, bu personele %100 pamuklu veya anti-statik özellikte tekstil malzemelerinden yapılmış, statik elektrik oluşumunu en az seviyeye indirecek iş kıyafetleri ve anti-statik iş ayakkabıları sağlanmalıdır [1].
- Kesme, kaynak, taşlama veya diğer sıcak çalışmalar, atölye dışında yapılacaksa, yetkili bir idari personel tarafından imzalı şekilde en az aşağıdaki bilgileri içeren çalışma izni formları uygulanmalıdır:
  - o Yapılacak işin tanımı
  - o Yapılacak işin süresi ve tarihi
  - o İşin yapılacağı yer
  - o İşten önce ve sonra ortamın nasıl güvenlik altına alınacağı
  - o İş esnasında karşılaşılabilecek tutuşturma kaynakları ve bunların nasıl önleneceği
  - o İş yapacak ve kontrol edecek kişilerin isimleri
- Sıcak çalışmalar esnasında gerekli minimum güvenlik önlemleri şöyledir:
  - o Uygun tip, boyut ve miktarda yangın söndürücü(ler) yakında olacaktır
  - o Zemin veya etraf temizlenecek ve işlem süresince ıslak tutulacaktır
  - o Ex-proof olmayan fan ve diğer emici/üfleme ekipmanları kapalı tutulacaktır
  - o Tüm yanıcı malzemeler en az 11 metre uzaklaştırılacak veya ısıya/yanmaya dayanıklı bir koruyucu perde/levha arkasına konulacaktır.
  - o Duvardaki ve zemindeki açıklıklar kapatılacaktır.
- Sıcak çalışma sonrasında alınacak güvenlik tedbirleri ise şöyledir:
  - o Yangın izleme; Kesme ve kaynak alanı, uygulanabilir olan yerlerde zeminin altı ve üst kısımları dahi 60 dakika boyunca gezilerek izlenecektir. Bina yanmaz

yapıdaysa, tüm yanıcı malzemeler en az 11 metre uzağa taşındıysa veya kablo, motor vb. kıvılcım kaynağı ortamda yoksa bu süre 30 dakikaya düşürülebilir

- o Yangın gözlemeleme; İzleme zamanı dolunca, 3 saate kadar olan bir süre ek bir gözlem yapılacaktır. Bu gözlem, şunlardan bir veya birkaçı ile yapılabilir; Otomatik duman detektörü, video kamera, rutin emniyet/bakım turları, sahadaki fabrika çalışanları, denetimler (iki denetim arası 20 dakikayı geçmeyecek)

Solvent tankları ve solvent pompası ile ilgili olarak mevcut veya alınması gereken birincil önlemleri aşağıdaki gibi sıralayabiliriz.

#### **Patlayıcı ortam oluşmasını önlemek için;**

- Etil asetat vb. yanıcı bir solvent kullanımından vazgeçilerek su bazlı mürekkep kullanımına geçilebilirse, risk tamamen bertaraf edilmiş olacaktır. Bu mümkün olmazsa;
- Solvent aktarımı için, manyetik tahrikli(salmastrasız), sızdırmaz halkalı salmastralı, kutulu vb. “dayanıklı geçirimsizlik” özelliğine sahip bir pompa kullanılması, kaçak riskini ihmal edilebilir seviyeye düşürerek pompa kaynaklı tehlikeli bölgeyi tamamen bertaraf edecektir. Ancak flanşlar, nefeslikler vb. diğer salım/ kaçak kaynakları değerlendirilmelidir. Bu uygulama da mümkün olmazsa;
- Pompanın çok daha iyi havalandırılmış bir noktaya kurulması, tehlikeli bölgenin sınıfını düşürebilir. Örneğin dış ortamda, pompa zeminden ne kadar yükseğe kurulursa, hava akış hızı o kadar yüksek olacaktır. (Bu değerlendirme için 60079-10-1:2015 standardındaki hava akış hızı tablosu temel alınmıştır.)

#### **Patlayıcı ortamın tutuşmasını önlemek için;**

- Pompanın ex-proof özellikte olması, ekipman kategorisinin en az “Ex II 3G” olması ve etil asetatın kendiliğinden tutuşma sıcaklığı 470°C ve gaz sınıfı IIA olduğundan, ekipmanın en az “IIA, T1” özelliklerine sahip olması gerekmektedir.
- Depolama tankları ve pompa topraklanmalı, topraklama direnci periyodik olarak en geç yılda 1 defa ölçülerek ortalama 1 ohm’dan düşük olması sağlanmalıdır. İletkenliği düşük olan başka yanıcı sıvılar depolanıyorsa, bu tür sıvıların statik elektrik oluşturma potansiyeli daha yüksek olduğundan,

topraklama direnci sınırı buna uygun olarak daha düşük belirlenebilir.

- Pompa, flanş vb. kaçak olabilecek kritik noktaların yakınına, acil durumda otomatik olarak uyarıcı ve sistemi güvenli bir duruma getiren (vanaları kapatan, alarm sinyali veren vb.) gaz detektörleri yerleştirilmesi düşünülebilir.

#### **Patlama etkilerini azaltmak için;**

- Tankların içerisine, patlama sensörlü ve hızlı tepki veren patlama bastırma sistemi kurulması düşünülebilir.
- Tanklara, olası bir patlamanın basıncını düşük riskli bir alana yöneltmek üzere “patlama tahliye kapakları” veya “basınç emniyet valfleri” (pressure relief valve) tesis edilmesi düşünülebilir.
- Tankların altında, olası patlama sonrası gerçekleşebilecek daha büyük sızıntı ve dökülmelerin uzaklara yayılmasını önlemek için bir set/bent görevi görecektir şekilde, yanmaya karşı dayanıklı bir havuz tesis edilmelidir.
- Tank sahasına girişin sınırlandırılması, yetkisi olmayanların girişini önlemek için kapısı kilitli tutulan tel çitlerle çevrilmesi düşünülebilir.

Toz besleme hunileri ile ilgili olarak mevcut veya alınması gereken birincil önlemleri aşağıdaki gibi sıralayabiliriz:

#### **Patlayıcı ortam oluşmasını önlemek için;**

- Toz hammadde yerine tamamen granül veya kalın parçacıklı diğer formlarda hammadde temin edilmesi halinde patlayıcı ortam riski tamamen bertaraf edilmiş olacaktır. Teknik olarak mümkünse bu yöntem uygulanmalıdır.

#### **Patlayıcı ortamın tutuşmasını önlemek için;**

- Toz emiş fanının ex-proof özellikte olması, ekipman kategorisinin en az “Ex II 1D” olması ve PVC’nin minimum tutuşma sıcaklığı 220°C ve toz sınıfı IIIB olduğundan, ekipmanın en az “IIIB, T145°C” özelliklerine sahip olması gerekmektedir.

Patlama etkilerini azaltmak için;

- Havalandırma kanallarının içerisine, patlama sensörlü ve hızlı tepki veren patlama bastırma sistemi kurulması düşünülebilir.
- Havalandırma kanallarında uygun noktalara, olası bir patlamanın basıncını düşük riskli bir alana yöneltmek üzere “patlama tahliye kapakları” veya “basınç emniyet valfleri” (pressure relief valve) tesis edilmesi düşünülebilir.

### 3.4 Tartışma

Etil asetatın normal ortam şartlarında kaynamamasından dolayı (kaynama sıcaklığı: 77°C) kaçağın buharlaşma hızının, 2. değerlendirme – 1. senaryodaki gibi sıvı kaçağı hızıyla aynı olma ihtimalinin oldukça düşük olduğu düşünülebilir. Ya da 1. Senaryodaki püskürmenin “difüzyonla yayılma” şeklinde değil, “ağır gaz yayılımı” şeklinde gerçekleşeceği yorumlanırsa, tehlikeli bölgenin mesafesi 7 metre değil, 15 metre olacağı değerlendirilebilir. Bu yorumlamalar için deneysel veriler kullanılabilirse, sonuçlar daha güvenilir olacaktır.

Etil asetat pompasından gerçekleşecek bir kaçağın püskürme/damlama biçimine ve çalışmayı yapan uzmanın yorumlarına bağlı olarak kurulan senaryoların, TS EN 60079-10-1 standardına göre yapılacak tehlikeli bölge değerlendirmelerine etkisinin yüksek olduğu görülmektedir. Bu nedenle, özellikle sıvı kaçakları ile ilgili olarak deneysel çalışmalar yapılarak sektörün faydalanabileceği şekilde yayınlanması, uzman yorumlarının hatalarını azaltmada etkili olacaktır.

Hayali tesiste kullanılan PVC tozunun patlayıcılık özelliklerinin tespiti için TS EN 14034 serisine uygun olarak yapılması gereken testleri yapabilecek akredite laboratuvar Türkiye’de bulunmamaktadır. Bu nedenle endüstride yapılan patlayıcı toz ortamı değerlendirmelerinin büyük kısmı, ancak literatür kaynaklardan edinilen bilgilerle yapılabilmektedir. Bu konuda Türkiye’de akredite test laboratuvarlarının kurulması, endüstrideki toz patlaması değerlendirmelerinde daha güvenilir sonuçlar elde edilmesine yardımcı olacaktır.

Depolama tankları, aktarım boru hatları, farklı iletkenliğe sahip yanıcı sıvılar vb. farklı statik elektrik kaynakları için gerekli topraklama direnci limitlerine dair literatürde kaynak bulmak oldukça güç olduğundan, bu konuda akademik çalışmalar yapılması, kimya endüstrisi için faydalı olacaktır.

### 3.5 Sonuç

İşyerlerindeki patlama ve yangın riskleri; yanıcı ve patlayıcı ortamların oluşmasını veya tutuşmasını önleyecek tedbirleri alarak veya bunlar yeterli olmazsa, patlamanın zararlı etkilerini azaltacak tedbirleri alarak azaltılabilir. Oluşma ihtimali

tamamen ortadan kaldırılamayan tehlikeli bölgeler, ilgili mevzuat ve standartlara uygun olarak sınıflandırılır ve bu bölgelerde kullanılacak elektrikli ekipmanlar veya tahrikli cihazlar; patlamaya karşı korunmuş tip (Ex-proof) olmalıdır. İlgili TSE standartları temel alınarak yapılabilen tehlikeli bölge sınıflandırma metodlarının bir kısmını, hayali vaka çalışmamızda inceledik ve alınması gerekebilecek tedbirlerle ilgili birçok örnek verdik. Patlama ve yangınların önlenmesi ile ilgili mevzuat ve standartları tamamen ve doğru bir şekilde anlayarak tesislerine uygulayan işyerlerinde, patlama ve yangın riskleri açısından büyük iyileşme öngörülebilmektedir. Aynı şekilde, Türkiye’de ki işyerlerinden bu mevzuat ve standartlara uygun çalışanlarının sayısı arttıkça, ülkenin patlama ve yangın istatistiklerinde iyileşme beklenecektir. İş sağlığı ve güvenliği ile ilgili resmi kurumların; deneysel veriler üreten akademik çalışmalara ve akredite laboratuvarların kurulmasına destek olması, kılavuz dokümanlar yayınlaması ve standartları güncelleyerek geliştirmesi, kimya endüstrisinin daha emniyetli, dolayısıyla daha güvenilir ve verimli bir hale gelmesi açısından önemlidir.

### KAYNAKLAR

- [1] Çalışanların Patlayıcı Ortamların Tehlikelerinden Korunması Hakkında Yönetmelik (30.04.2013)
- [2] TS EN 1127-1 Patlayıcı ortamlar – Patlamayı önleme ve korunma – Bölüm 1: Temel kavramlar ve metodoloji (2012)
- [3] TS EN 60079-20-1 Elektrikli Cihazlar – Patlayıcı Ortamlarda Kullanılan – Bölüm 20-1: Gaz ve Buhar Sınıflandırması İçin Malzeme Karakteristikleri – Deneysel Metodları ve Veriler (2012)
- [4] TS EN 60079-10-2 Explosive atmospheres – Part 10-2: Classification of areas – Explosive dust atmospheres (2015)
- [5] TS EN 13463-1 Potansiyel patlayıcı ortamlar için elektrikli olmayan donanımlar – Bölüm 1: Temel yöntem ve kurallar (2010)
- [6] NFPA 77 – Recommended Practice on Static Electricity (2014)
- [7] Muhtemel Patlayıcı Ortamda Kullanılan Teçhizat ve Koruyucu Sistemler İle İlgili Yönetmelik (2014/34/AB) (30.06.2016)
- [8] TS EN 60079-0 Patlayıcı ortamlar – Bölüm 0: Donanım – Genel kurallar (2013)
- [9] TS EN 60079-14 Elektrikli cihazlar – Patlayıcı ortamlarda kullanılan – bölüm 14: Elektriksel tesislerin tasarımı, seçimi ve monte edilmesi (2014)
- [10] Jérôme TAVEAU, (2014). Application of dust explosion protection systems. *Procedia Engineering*, 84, 297–305
- [11] Maria Mitua, Elisabeth Brandes, Werner Hirsch, (2018). Mitigation effects on the explosion safety characteristic data of ethanol/air mixtures in closed vessel. *Process Safety and Environmental Protection*, 117, 190–199
- [12] TS EN 60079-10-1 Patlayıcı ortamlar – Bölüm 10-1: Alanların sınıflandırılması – Patlayıcı gaz ortamları (2015)
- [13] <http://staubex.ifa.dguv.de/explokomplex.aspx?nr=461&lang=e> (18.08.2018)

# Determination of Increased Mental Workload Condition From EEG by the Use of Classification Techniques

## Sınıflandırma Teknikleri Kullanılarak EEG'den Artan Mental İşyükü Durumunun Belirlenmesi

Adil Deniz DURU<sup>1</sup> 

<sup>1</sup> Marmara University, Faculty of Sport Sciences, Department of Sports Coaching Education, İstanbul, Turkey

### Abstract

Extraction of the information hidden in the brain electrical signal enhances the classification of the current mental status. In this study, 16 channel electroencephalogram (EEG) data were collected from 15 volunteers under three conditions. Participants were asked to rest with eyes open and eyes closed states each with a duration of three minutes. Finally, a task has been imposed to increase the mental workload (MW). EEG data were epoched with a duration of one second and power spectrum was computed for each time window. The power spectral features of all channels in traditional bands were calculated for all subjects and the results were concatenated to form the input data to be used in classification. Decision tree, K-nearest neighbor (KNN) and Support Vector Machine (SVM) techniques were implemented in order to classify the one-second epochs. The accuracy value obtained from KNN was found to be 0.94 while it was 0.88 for decision tree and SVM. KNN was found to outperform the two methods when all channel and power spectral features were used. It can be concluded that, even with the use of input features formed by concatenating all subject's data, high classification accuracies can be obtained in the determination of the increased MW state.

**Keywords:** Mental Workload, Classification, Machine Learning, EEG

### Öz

Beyin sinyallerinin sınıflandırılması kişilerin mental durumu hakkında bilgi sahibi olmamızı kolaylaştırır. Bu çalışma kapsamında onbeş katılımcıdan 16 kanallı EEG verisi üç farklı durum için toplanmıştır. Katılımcılardan üçer dakika gözleri kapalı ve açık şekilde dinlenmeleri istenmiştir. Sonrasında mental işyükünü arttıracak bir ödevde uygulanmıştır. EEG verileri birer saniyelik pencereye ayrılmış ve her pencere için güç spektrumları hesaplanmıştır. Geleneksel frekans bantlarına ait güç spektrumları her katılımcı için hesaplanmış ve sonuçlar sınıflandırmada kullanılmak üzere arka arkaya getirilmiştir. Karar ağaçları, K-en yakım komşuluk (KNN) ve Destek Vektör Makinaları (DVM) teknikleri birer saniyelik pencere verilerinin sınıflandırılması için uygulanmıştır. KNN için doğruluk değeri 0.94 olurken karar ağaçları ve DVM için 0.88 değerine ulaşılmıştır. KNN yöntemi diğer iki yöntemle göre tüm kanalların güç spektrumu kullanıldığı durumda daha yüksek doğruluk oranı vermiştir. Sonuç olarak, tüm katılımcıların verilerinin bir havuza konulup sınıflandırma işlemi yapıldığında dahi yüksek mental işyükü durumunun ayrıştırılabildiği görülmüştür.

**Anahtar Kelimeler:** Mental İşyükü, Sınıflandırma, Makine Öğrenme, EEG

### 1. INTRODUCTION

Brain electrical activity includes relevant information about the current status of a subject. Electroencephalogram (EEG) with its high temporal resolution property enables researchers to monitor the underlying mechanisms of endogenous or exogenous stimulus. Besides this, EEG is used for diagnosis of mental diseases. EEG can provide quantitative information about memory loss, sleep disorder and stroke. Recently, the classification between healthy brain and illness were studied by many researchers. Mumtaz et al. performed a classification for the diagnosis of the major depressive disorder using synchronization likelihood metric computed from EEG as input feature and exhibited more than 90% accuracy values with the support vector machine (SVM), logistic regression (LR) and Naive Bayesian (NB) techniques [1]. SVM was used in the recognition of



Alzheimer's disease (AD) with the multi-channel features obtained through the use of wavelet transform on the eyes closed (EC) resting EEG data. In that study, linear and radial basis kernels were used and the linear kernel approach was shown to have 92% accuracy in the discrimination of the AD subjects from normal control ones [2]. In another study, classification rate was found to be higher than 80% in the discrimination between the AD and control group subjects, when the cortical source connectivity parameters were used after the solution inverse problem of EEG (measured from 19 channels) [3]. Both scalp level and source level features extracted from EEG yield researchers and clinicians to distinguish the healthy subjects from the subjects that are suffering from mental diseases. For instance, alpha band activity was used as a feature in order to discriminate the Huntington's disease using a supervised neural network [4]. These features can provide valuable information for the classification studies of mental diseases by eliminating irrelevant measurements. Besides this, scalp EEG measurements are subjected to various studies that explore the emotional state and the planned motion [5]. Obermaier et al. used Hidden Markov Models to distinguish whether the subject is performing a left-hand or right-hand imagination [6]. Similar to this study, left-hand/right-hand imagination and word generation tasks were tried to be identified by the use of principal component analysis as a preprocessing tool in order to reduce the input feature set and then a neural network based classifier was performed [7]. Moreover, the information content of the EEG was used to identify the object, that has been presented as visual stimuli [8]. In several studies explored above, the relation between the human behaviour and the EEG measurements has been investigated. One of the challenging problems of the design industry and behavioral science is the real time recognition of the human mental state. Nowadays there is an increased attention to control robotic systems by the thought of the human via the noninvasive measurement of the electrical activity originated from the brain tissue [9]. Classification techniques derived from machine learning can be used to estimate an instantaneous state of a subject based on EEG. Amin et al. achieved high classification accuracy in the identification of the human mental state in two conditions. In their study, Discrete Wavelet Decomposition (DWT) is applied to the EEG data in order to extract the relative band power of the time series measured during the eyes open (EO) and under increased mental workload (MW) conditions. Then, these relative band power values were used as input features for the classification [10].

From several neuroscience studies, it is well known that when the subject closes his eyes without falling asleep, parieto occipital alpha power spectral peak is observed.

Moreover, a clear difference in the power spectral alpha peak is expected to be present when the subject's mental workload increases. Generally, power spectral density is computed as an average of the power spectrum values computed using epoched data and the window length of each epoch is selected as 1 or 2 seconds where EEG data is assumed to be stationary. On the other hand, the autoregressive approximation can be used to compute the power spectrum as a parametric approach. But in both computation techniques, the whole signal or a large content of the signal is used to represent the power spectrum. Thus a relatively long duration of a measurement is needed to identify the current mental status of the subjects. In real-time applications, especially for brain-computer interfaces, the duration is a crucial parameter since their speed is on the order of 1 bit in a second. Thus, a decision should be given in a second in order to achieve this aforementioned speed.

The aim of this work is to classify the mental status of the subject among three cases, EO, EC and MW. EO, EC and increased MW conditions are used and epochs having a window length of a second are used as input to classifiers. KNN, SVM and Decision Tree classifiers are used as classifiers. Classifier performances have been computed and compared.

## II. METHODS

### 2.1 Experimental Paradigm and Data Preprocessing

Subjects were asked to rest in EO state for a duration of 3 minutes and then they were asked to rest in EC state for another 3 minutes. Finally, they were asked to perform a mental arithmetic task where an increase in their MW was aimed. In MW task, subjects counted starting from a given number (3 digit) backward by subtracting another one-digit number which was instructed just before start. After the process, the last number was asked to the subject to check the performance of the given task. During the experiments, 16 channel (F3, Fp1, Pz, O1, C3, Fz, T7, Cz, Fp2, F4, C4, T8, P3, P4, O2, Oz) EEG measurements were performed with a sampling rate of 1kHz using V-amp biopotential amplifier (Brain Products, GmbH). Active electrode cap was used and data was bandpass filtered with a low frequency cutoff of 0.5 Hz and a high frequency cutoff of 40 Hz. Fifteen subjects were voluntarily participated in the experiments. All of them approved and signed a written informed consent. The study had been approved by Ethical Review Board of the Medical Faculty, Marmara University (approval number: 2013-0191). The measurements have been performed in Marmara University, Faculty of Sport Sciences.



Three classes were named as EO (Class 0), EC (Class 1) and increased MW (Class 2) in the concept of this study. The power spectra of the EEG epochs have been computed using Eq. 1. For each channel (c), delta band (f1=1, f2=4), theta (f1=5, f2=7), alpha (f1=8, f2=13) and beta (f1=14, f2=30) power values were computed for each epoch (i), having a length (N) of 1 sec with a sampling rate (fs) of 1kHz. Thus, for each condition,  $Y_{band}$  parameter had a dimension of 16x180.

$$Y_{band}(c, i) = \sum_{w=f1}^{f2} \frac{1}{N^2} \left| \sum_{t=(N-1)*i+fs+1}^{(N-1)*i+fs} y(t, c) e^{-\frac{i2\pi w t}{N}} \right|^2 \quad (1)$$

The spectral features deduced from each epoch of EEG measurement for each band and channels were concatenated to form the input attributes of the classification.

$$X_i = [Y_{\delta}(1, i) Y_{\delta}(2, i) \dots Y_{\delta}(16, i) Y_{\theta}(1, i) Y_{\theta}(2, i) \dots Y_{\theta}(16, i) Y_{\alpha}(1, i) Y_{\alpha}(2, i) \dots Y_{\alpha}(16, i) Y_{\beta}(1, i) Y_{\beta}(2, i) \dots Y_{\beta}(16, i)] \quad (2)$$

Thus the input vector for an epoch had a dimension of 1x64. Since the measurements lasted for 3 minutes for a task, input matrix had the size of 180x64 for a subject. Each realization vector  $X_i$  was normalized in each band separately and all of the vectors computed for each subject were pooled to be used as input matrix for the classification process. The input matrix had the size of 8100x64. Prior to classification process, the artefacts occurred in the EEG due to eye movements have been marked and the epochs having these markers are removed from the input matrix. Finally, 7778 epochs remained in the input matrix; where randomly chosen 60% of it was used for training and 40% was used for testing.

### 2.2 Supervised Classification

In the concept of this paper, for the classification process, K-Nearest Neighbours (KNN), SVM and Decision Tree techniques were used. K-Nearest Neighbours (KNN) is a supervised algorithm such that for a test element ( $X_i$ ), the K – closest points between all elements in the training dataset are computed. Then, among the labeled K-points, the maximum probability of a label is searched and assigned for the test element. The number K that is used in the classifier can be selected experimentally by searching minimum error rate of the classifier. The second method that is used throughout the paper is the SVM. It can be used to classify multiple classes for both linear and nonlinear data. Training dataset is transformed into a higher dimension based on a nonlinear mapping. In SVM, it is aimed to find a decision boundary that is called as hyperplane (for n-dimensional input space)

which minimizes the classification error [11]. For three classes, one against one approach is adopted to construct 3 classifiers where each classifier is trained with the data of two classes. Thus, the class pairs (i.e., EC vs EO, EC vs MW, and EO vs MW) are used to train the classifiers. Finally, the output of each classification is used to count the labels of the input data set in order to find the most observed class label.

As a predictive modeling approach, classification trees are used to model an output value using input variables. A tree structure similar to a flowchart is formed to represent the rules for reaching a class label that is stored in the leaf nodes of the tree. In this structure, internal nodes correspond to a test on an attribute while each edge forms a sub-tree. When an input data enters the tree, the attribute values are used to find out its class label. Among the decision tree algorithms, Iterative Dichotomiser (ID3) is based on information gain metric that is used to select attributes [12]. Information gain is based on entropy metric and is defined as the difference between the information content of the training data tuples and the information content of those when separated with the given attribute (Eq. 5). For all attributes, information gain is computed and the attribute which has the maximum gain is termed as the splitting attribute. The same procedure is then repeatedly applied in order to select attributes using the grouped data.

$$I_X = - \sum_{i=1}^c p_i \log_2 p_i \quad (3)$$

In Eq.3, the amount of expected information required to classify a finite sequence of items in X is denoted with  $I_X$ , c is the number of classes and  $p_i$  stands for the probability that an arbitrary tuple in X belongs to class i.

$$I_{A,X} = \sum_{i=1}^v \frac{|X_i|}{|X|} I_{X_i} \quad (4)$$

$$Gain_A = I_X - I_{A,X} \quad (5)$$

In Eq.4, v is the number of unique values of attribute A,  $X_i$  is the weight of i.th part in X.  $I_{A,X}$  represents the amount of information needed to reach the exact classification. Finally, information gain is computed by the subtracting  $I_{A,X}$  from  $I_X$ . If the attributes are continuous values, which is the case for EEG measurements, a threshold is selected which minimizes the  $I_{A,X}$  such that the distinct values of the attribute are sorted and for each pair of adjacent values, a splitting point is computed by taking the average of their values. Then, the attribute is divided into two classes where the values that are lower than the splitting point is assigned to first class and the higher values are assigned to second

class. For each of possible splitting points,  $I_{A,X}$  is computed. However, the information gain computed by unique valued identifiers have a biased effect on the classification. This issue had been overcome by the use of gain ratio in the concept of the C4.5 algorithm [16]. C4.5 uses maximum value of the gain ratio for the splitting process. When the data is thought to include outliers, Classification and regression trees (CART) algorithm can perform better than the C4.5. CART algorithm uses Gini index that measures the impurity of X by using Eq. 6.

$$Gini_X = 1 - \sum_{i=1}^c p_i^2 \quad (6)$$

For each attribute, a binary separation is assumed by the Gini index. Thus, if an attribute has n distinct values, then all of the subsets of these values are considered. If an attribute divides X into two groups, the Gini index is going to be computed by Eq.7. The attribute having the maximum value of Gini differences is selected as the splitting parameter (Eq. 8). By the computation of this approach, leaves of the decision tree is constructed.

$$Gini_{A,X} = \sum_{i=1}^c \frac{|I_i|}{|I|} Gini_{I_i} \quad (7)$$

$$\Delta Gini_A = Gini_X - Gini_{A,X} \quad (8)$$

The above mentioned methods are implemented in Python and the performance of the classifiers are investigated using accuracy, precision, recall (sensitivity) and f1-score metrics by use of the confusion matrix (Table 1). Precision is defined as the ratio of number of true positives ( $T_p$ ) to the sum of  $T_p$  and false positives ( $F_p$ ). On the other hand, recall parameter is computed by dividing the number of  $T_p$  to the summation of  $T_p$  and false negatives ( $F_N$ ). The harmonic mean of precision and recall parameters are named as  $F_1$  score. In addition to these parameters, classification accuracy is termed as the ratio of the number of correct predictions to that of all predictions.

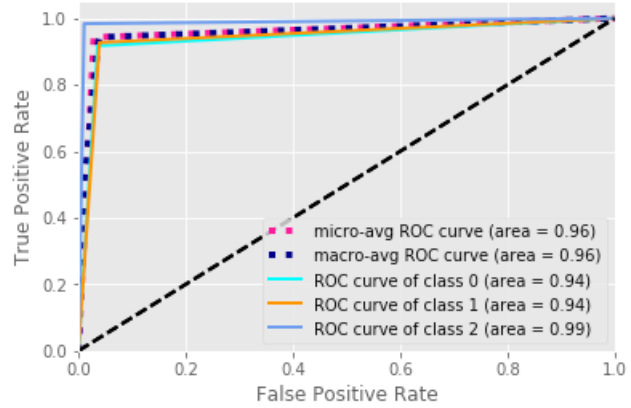
**Table 1.** Confusion matrix regarding to the case of three classes.

	True: EO	True: EC	True: MW
Predicted:EO	Correct	False EO->EC	False EO->MW
Predicted: EC	False EC->EO	Correct	False
Predicted: MW	False MW->EO	False	Correct

EO, EC and MW stand for eyes open, eyes closed and mental workload conditions, respectively.

### III.RESULTS

After the implementation of the KNN, performance metrics were computed using the randomly chosen training set. The mean accuracy was found as 0.94 as shown in Fig. 1. Values regarding to Precision, recall, F1-score and support parameters are summarized in Table 2 for each condition and for each classifier used in this study.



**Figure 1.** Receiver operating characteristics curves (ROC) computed after the implementation of KNN. The block diagonal black line indicates random classifiers.

**Table 2.** Classification performance metrics for KNN/SVC/ Decision Tree (DT) methods.

Case	Precision (%)	Recall (%)	F1-score (%)	Support
	KNN/SVC/DT	KNN/SVC/DT	KNN/SVC/DT	KNN/SVC/DT
EO	92/86/87	93/89/89	92/87/88	1039/1016/1031
EC	93/82/87	92/89/86	92/85/87	1019/933/1030
MW	98/94/93	98/85/93	98/90/93	1054/1163/1051
Avg/ Total	94/88/89	94/88/89	94/88/89	3112/3112/3112

The accuracy value of SVC with the radial basis function kernel was found to be 0.875 while it was 0.88 for the decision tree. The ROC curves for SVC and decision tree are visualized in Figure 2 and Figure 3, respectively. Decision tree classification was performed for several maximum depth level values (2-13) and the trees were tested using the remaining part of the data which has not been used to form the tree. Initial layers of the decision tree are shown in Figure. 4. Beta band power values of P3, T7, T8, F3, alpha band power value of right occipital and delta band power value of

C4 were found to discriminate the classes in the first three layers. From decision tree analysis, rules for discrimination between classes can be formed.

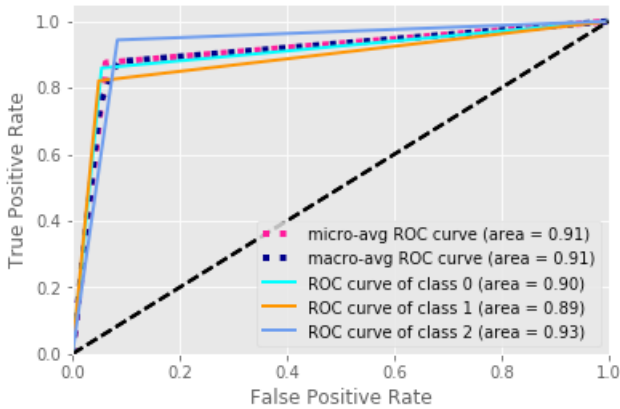


Figure 2. ROC curves computed after the implementation of SVC for each class.

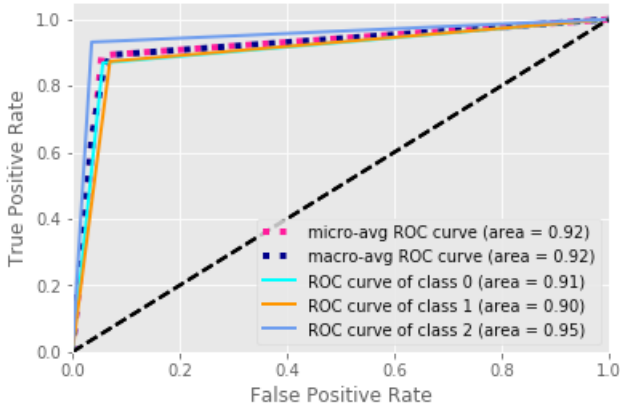


Figure 3. ROC curves computed after the implementation of Decision tree for each class.

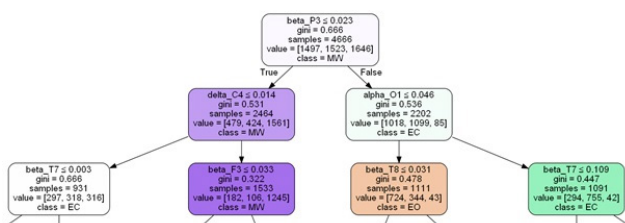


Figure 4. First three levels of the decision tree. Each node includes parameter name, gini value, number of samples, and number of items in each class.

IV.DISCUSSION

In this study, EO, EC, and increased MW states were tried to be identified using the scalp EEG measurements. Power spectrum values of the EEG signal were used as features as input parameters. Epochs having one-second time duration were selected to compute the power spectrum. In a recent study, one second epoch duration was found to have the best classification accuracy when the power spectrum of the EEG was used as input features [13]. However, in that study, classification has been performed using SVM for each subject’s data separately. Nevertheless, Wang et al. reported the classification accuracy as 88% on average among subjects when all the frequency bands were used as input features to discriminate the positive and negative emotion classes.

In our study, the classification accuracy was obtained higher than 96% when each subject’s data were used separately. Since the aim is to generalize the classification among the subjects by incorporating inter-subject variability, all of the data were pooled and the training/testing processes have been performed on the pooled data. The general idea behind the brain-computer interface techniques is to form a structure which uses a reduced amount of training data as well as less number of measurement sensors [14]. Thus, pooling the whole data of the subjects enables us to classify an epoch measured from a subject whose data has not been used in the training phase.

Selection of the features which are going to be used in classification can be performed either using preprocessing tools or using the physiological a priori information about the tasks. For instance, it is relatively easy to discriminate the subject’s cognitive level from the resting baseline. However, when several conditions (tasks) are present, the accuracy can decrease [10]. Amin et al. implemented time-frequency decomposition but the time information has been used in the classification. In the absence of rapidly changing stimuli, usage of the time-frequency components does not seem to be relevant for the classification.

In KNN, since the input attributes are assumed to be equally weighted, accuracy values can be observed low when the noisy attributes are present. But in the present study, eye movement-related artefacts were removed and the annotated tasks were accomplished by subjects successfully which decreased the level of noise. Average scores of precision, recall and f1-score values of all classes were found to be greater for KNN than SVC and decision tree. Parvinnia et al. proposed an adaptive weighted distance nearest neighbor algorithm which they used to classify schizophrenia and healthy subjects. In that study, they have reported higher accuracy values of the proposed method than the accuracy of

KNN. Moreover, they also reported that, nearest neighbor based methods outperform SVM and NaiveBayes [15]. Our results are in agreement with that finding.

In our further studies, decision trees are going to be used as a preprocessing tool for the selection of most relevant features. Then those reduced features are going to be used as input for the classification. Moreover, less number of channels and frequency components are going to be searched for the discrimination of several tasks.

### Acknowledgement

This work was supported by Research Fund of Marmara University. Project No: SAG-A-100.713.0296.

### References

- [1] Mumtaz W, Ali S.S.A., Yasin M.A.M. & Malik A.S., (2018) A machine learning framework involving EEG-based functional connectivity to diagnose major depressive disorder (MDD). *Med Biol Eng Comput.* Feb;56(2):233-246. doi: 10.1007/s11517.017.1685-z.
- [2] Kanda P.A.F.M., Trambaiolli L.R., Lorena A.C., Fraga F.J., Basile L.F.I., Nitrini R., & Anghinah R. (2014), Clinician's Road Map to Wavelet EEG as an Alzheimer's disease Biomarker, *Clinical EEG and Neuroscience*, doi: 10.1177/155.005.9413486272
- [3] Babiloni, C., Triggiani, A. I., Lizio, R., Cordone, S., Tattoli, G., Bevilacqua, V., Soricelli, A., Ferri, R., Nobili, F., Gesualdo, L., Millán-Calenti, J. C., Buján, A., Tortelli, R., Cardinali, V., Barulli, M. R., Giannini, A., Spagnolo, P., Armenise, S., Buena, G., Scianatico, G., Logroscino, G., Frisoni, G. B., ... Del Percio, C. (2016). Classification of Single Normal and Alzheimer's Disease Individuals from Cortical Sources of Resting State EEG Rhythms. *Frontiers in neuroscience*, 10(47). doi:10.3389/fnins.2016.00047
- [4] Bellotti R., De Carlo F., Massafra R, de Tommaso M., Sciruicchio V., (2004) Topographic classification of EEG patterns in Huntington's disease. *Neurol Clin Neurophysiol.* Nov 30;2004:37.
- [5] Cruz-Garza, J. G., Hernandez, Z. R., Nepal, S., Bradley, K. K., & Contreras-Vidal, J. L. (2014). Neural decoding of expressive human movement from scalp electroencephalography (EEG). *Frontiers in human neuroscience*, 8, 188. doi:10.3389/fnhum.2014.00188
- [6] OberMaier B., Guger C., Neuper C. & Pfurtscheller G., (2001) Hidden Markov models for online classification of single trial EEG data, *Pattern Recognition Letters*, 22, 1299-1309
- [7] Lin C.J. & Hsieh M.H., (2009) Classification of mental task from EEG data using neural networks based on particle swarm optimization, *Neurocomputing*, 72, 1121-1130
- [8] Nemrodov D., Niemeier M., Patel A., Nestor A., (2018) The Neural Dynamics of Facial Identity Processing: insights from EEG-Based Pattern Analysis and Image Reconstruction. *eNeuro* 29, ENEURO.0358-17.2018; DOI: 10.1523/ENEURO.0358-17.2018
- [9] Iturrate I., Chavarriaga R., Montesano L., Minguez J. & Millan J.D.R, (2015) Teaching brain-machine interfaces as an alternative paradigm to neuroprosthetics control, *Scientific Reports*, 5
- [10] Amin H. U., Mumtaz W., Subhani A. R., Saad M. N. M. & Malik A. S., (2017) Classification of EEG Signals Based on Pattern Recognition Approach, *Front. Comput. Neurosci.* 11(103) doi: 10.3389/fncom.2017.00103
- [11] V. N. Vapnik, (1999) An Overview of Statistical Learning Theory, *IEEE Transactions on Neural Networks* 10(5)
- [12] J. R. Quinlan. (1986) Induction of decision trees. *Machine Learning*, 1:81-106
- [13] Wang X.W., Nie D. & Lu B.L., (2014) Emotional state classification from EEG data using machine learning approach, *Neurocomputing* 129 94-106
- [14] Gutierrez D. & Escalona-Vargas D.I., (2010) EEG data classification through signal spatial redistribution and optimized linear discriminants, *Computer Methods and Programs in Biomedicine* 97, 39-47
- [15] Parvinnia E., Sabeti M., Jahromi M.Z. & Boostani R., (2014) Classification of EEG Signals using adaptive weighted distance nearest neighbor algorithm, *Journal of King Saud University – Computer and Information Sciences*, 26(1), Pages 1-6
- [16] Quinlan J.R., (1993) Programs for Machine Learning, Morgan Kaufman, San Francisco, USA

# Numerical Analysis and Experimental Validation of a Mono-block Type Natural Gas Burner

## Mono-Blok Tipte Bir Doğal Gaz Yakıcısının Sayısal Analizi ve Deneysel Doğrulanması

Barış YILMAZ<sup>1</sup> , Engin UZA<sup>2</sup> 

<sup>1</sup> Marmara University, Faculty of Engineering, Mechanical Eng. Dept., 34722, Kadıköy, Istanbul, Turkey

<sup>2</sup> ECOSTAR Combustion Systems, 59860 Çorlu, Tekirdag, Turkey

### Abstract

Fossil fuels are still one of the major sources of the energy production. Fuels, utilized in the power generation, especially in industrial scale applications, are almost hydrocarbons in gaseous, liquid or solid phases. In combustion of gaseous fossil fuels, besides the several other emissions carbon monoxide and nitric oxide which are identified as the main suspects of the environmental pollution are produced.

In this study, the flow field and the emission statistics of an industrial scale gas burner were investigated numerically. The burner and the assembled combustion chamber have been modelled using ANSYS-Fluent software. The standards for flue gas emissions of gas burners defined in TSE EN 676:2000 Class-3 have been taken into account. One of the most important emissions of NO<sub>x</sub> level given in that standard, limited to be less than 80 mg/kWh, has been initially computed for the existing burner and then for the modified burner designs. Both the velocity and temperature fields are calculated and represented in terms of contour plots. The emission results are collected at the exit of the combustion chamber and the chamber wall temperatures have been also computed. The numerical model results were validated with the available experimental measurements obtained from on-site test facilities.

**Keywords:** Combustion, NO<sub>x</sub>, CFD, Burner, Natural Gas

### Öz

Fosil yakıtlar halen enerji üretiminin en önemli ana kaynaklarıdır. Enerji üretiminde, özellikle endüstriyel ölçekte uygulamalarda kullanılan yakıtlar büyük oranda gaz, sıvı veya katı fazlarda bulunan hidrokarbonlardır. Gaz fazındaki fosil yakıtların yanmasında, diğer bazı emisyonların yanı sıra çevre kirliliğinin ana şüpheli olarak nitelendirilen karbon monoksit ve nitrik oksit de üretilmektedir.

Bu çalışmada, endüstriyel ölçekte bir gaz yakıcısının akış alanı ve emisyon istatistikleri sayısal olarak incelenmiştir. Yakıcı ve buna bağlı yanma odası ANSYS-Fluent yazılımı kullanılarak modellenmiştir. Gaz yakıcılarının gaz emisyonları için tanımlanan TSE EN 676:2000 Class-3 standardı göz önünde bulundurulmuştur. Bu standartta yer alan en önemli salımlardan birisi olan NO<sub>x</sub> seviyesi, ki 80 mg/kWh'den az olacak şekilde sınırlandırılmıştır, öncelikle varolan sonrasında ise iyileştirilen yakıcı tasarımları için hesaplanmıştır. Hız ve sıcaklık alan değerleri hesaplanmış ve kontur grafikleri olarak çizdirilmiştir. Salım sonuçları yanma odası çıkışında toplanmıştır ve ayrıca yanma odası duvar sıcaklıkları hesaplanmıştır. Sayısal model sonuçları firma bünyesinde var olan deneysel ölçme imkanları ile elde edilen verilerle doğrulanmıştır.

**Anahtar Kelimeler:** Yanma, NO<sub>x</sub>, HAD, Yakıcı, Doğal Gaz

### 1. INTRODUCTION

Fossil fuel usage remains still as the major method of energy utilization. Nowadays, most of the energy is still being generated by fossil fuel burning technologies both in household and industrial scale applications. The steady increase of energy demand and consumption results in the increase in the fossil fuels usage in, especially, energy production which causes unpleasant effects on the environment. Therefore, the utilization of energy more efficiently and the decrease in release of flue



gas emissions are the most important topics in combustion science and engineering [1-4].

In general, gaseous hydrocarbon fuels such as natural gas produce less emission compared to liquid and solid ones. Therefore, the use of gaseous fuels in power generation and household applications is promoted in many countries, in recent decades. These fuels are mainly burned in combustion chambers equipped with single or multiple burners[4].

In gas fuel combustion applications, combustion is classified in terms of state of reactants and oxidizers at the beginning. In premixed combustion, fuel and oxidizer are mixed before entering the combustion chamber. Therefore, it is also known as homogeneous combustion. On the other hand, they do not mix before the initiation of the combustion in non-premixed or diffusion (heterogeneous) combustion. There is also another mode, partially premixed; representing mixing of both types if there are some heterogeneous regions, rich in fuel or oxidizer, observed within the chamber. The combustion models vary for these modes due to involving different physical phenomena [4-6].

Several regulations are developed and deployed for the control of combustion products including CO, NO<sub>x</sub> and SO<sub>x</sub> etc. in combustion based applications such as power generation and internal combustion engines. The NO<sub>x</sub> limitations are varied depending on the type and the capacity of the application. The standard for automatic forced draught burners for gaseous fuels is defined by EN 676:2008[7]. The proposed emission classes in that standard are shown in Table 1 in line with the CO emission value of less than 100 mg/kWh.

**Table 1.** EN 676:2008 NO<sub>x</sub> Limitations-Emission Class

CLASS	mg/kWh	mg/m <sup>3</sup>	ppm
1	170	169.59	82.56
2	120	119.71	58.28
3	80	79.1	38.85

The level of emissions can be reduced by increasing the efficiency of the combustion. The efficiency is related to several factors such as flow field generated inside the combustion chamber, mixing level of reactants, geometry etc. In order to design and optimize the geometry of both the burner and the combustion chamber, CFD analysis becomes a very effective tool in recent decades with the increasing capabilities of the computers. Using CFD shortens the design time, easy to modify the geometry and reduces product development and testing costs. The developed model should be verified experimentally due to numerical and computational uncertainties in modeling studies. On the other hand, the agreement between the experimental and the computational

results relies on detailed knowledge of the utilized flow field and combustion models.

There are several studies in literature using CFD to examine the emission levels of burners having various capacities and the results are verified experimentally. Šarlej et al. [8] focused on CFD computation of an experimental low – NO<sub>x</sub> burner with a two-stage natural gas burner for capacities between 0.5 MW and 1 MW. Several alternatives were introduced to minimize NO<sub>x</sub> emissions. They utilized k- $\omega$  turbulence model and chemical reactions were modelled by two-step simple methane combustion reactions with Eddy-dissipation model (EDM) and radiative heat transfer was considered and solved with the discrete ordinates (DO) model.

Chacon et al. [9] studied on a new methodology for the design and optimization of a 2 MW low NO<sub>x</sub> – CO mono-block natural gas burner that is located in a superheated steam boiler using ANSYS-Fluent software. Numerical model was validated with experimental prototype burner. Several air/fuel ratios have been studied with hexahedral meshes of 350.000 cells. Turbulent flow was modelled with the well-known k- $\epsilon$  turbulence model. Flamelet combustion model and P-1 radiation model were used in the numerical studies. A prototype burner has been developed based on the results of numerical modeling studies.

Spangelo [10] investigated the influence of modifications of 20 kW burner geometry on the NO<sub>x</sub> emissions and fuel supply pressure on a swirl burner. The experimental, theoretical and numerical studies have been performed and the burner was solved with a 2D geometry assumption with k- $\epsilon$  turbulence model. Several combustion models including Eddy Dissipation Model, the Equilibrium PDF model and Flamelet PDF model were tried for combustion modeling. Flamelet PDF model was found to be most suitable model for combustion modelling. The NO<sub>x</sub> emission values corrected for 3% O<sub>2</sub> reference conditions have been measured to be 25 and 45 ppmv for methane and propane as fuel respectively for patented burner concept. Internal gas recirculation, rapid air and fuel mixing cases were also tested for NO<sub>x</sub> reduction. Optimized burner was scaled successfully to 200 kW and 370 kW by using constant velocity scaling criteria which is commonly used for industrial burners.

Saripalli [11] studied on the combustion and flow field statistics for industrial steam boiler application burning methane to identify how to increase the boiler efficiency and reduce the flue gas emissions. 3D computational geometry was modelled using ANSYS-Fluent. Turbulent flow was modelled by using k- $\epsilon$  turbulence model. Constant wall temperature was defined for the outer shells of the boiler. In

addition, radiation was modelled by using the Rosseland radiation model. A single step reaction with finite-rate chemistry model has been implemented for methane combustion. The simulations were performed for 19 industrial steam boilers.

Khanafer et al. [12] investigated effect of swirl velocity and burner wall temperature on the  $\text{NO}_x$  formation for an industrial swirl burner. It was found that swirl enhanced the mixing of air-fuel streams and was leading to reduce flue gas emissions. It was concluded that the level of emissions such as CO and unburned hydrocarbons can be reduced about 3-5 times depending on swirl velocity. In addition, it was observed that the concentration of  $\text{NO}_x$  at the outlet did not decrease with swirl.

Cellek and Pınarbaşı [13] have experimentally and numerically modelled the combustion in a natural gas industrial scale low swirl burner. The effect of the hydrogen addition to natural gas by varying  $\text{H}_2$  content from 25% to 100% on the combustion performance and the released emissions have been examined. It is concluded that using hydrogen-enriched natural gas instead of natural gas in the burner has decreased CO and  $\text{CO}_2$  emissions remarkably, as expected. However,  $\text{NO}_x$  emissions have significantly increased due to high temperature conditions.

Funke et al.[14] have worked experimentally and numerically on the optimization of a low  $\text{NO}_x$  combustion chamber of the Micromix gas turbine. The developed method was aimed to be applied to industrial scale gas turbine chambers. The  $\text{NO}_x$  reduction potential for operation with hydrogen fuel has been studied by modifying the combustion chamber. It is reported that 99% combustion efficiency has been reached and the  $\text{NO}_x$  emissions levels lower than 10% have been achieved under full-scale gas turbine conditions.

Enagi et al.[15] studied on design and development of a micro gas turbine combustion chamber numerically using ANSYS-Fluent 16.1 software. Various combustion models and parameters have been tested to obtain an optimum configuration. An experimental chamber has been also produced for validation. It has been reported that the low CO emissions of less than 100 ppm have been achieved by the optimized chamber geometry.

As summarized in previous paragraphs, there are still ongoing researches on reduction in the levels of emissions, especially  $\text{NO}_x$  and CO, by improving the combustion efficiency of the burners. CFD is utilized as a common method to test how the modifications on the geometry affect the combustion efficiency and the emissions. In addition, the parametric studies such as varying operation conditions, equivalence ratios etc. can be examined more comprehensively.

In the present study, the numerical analysis of an industrial scale natural gas burner has been performed in order to examine the outlet temperature and emission levels which are also measured experimentally. Both the flow field and flame statistics have been investigated. Moreover, using the validated numerical model, an optimized design is proposed to reduce  $\text{NO}_x$  levels.

## 1.METHODOLOGY

The flow and temperature fields of the non-premixed gas burner were investigated both numerically and experimentally.

### 1.1.Numerical Model

A modulating natural gas burner has been modelled numerically using CFD techniques. Ansys-Fluent software, a well-known commercial program, is utilized for simulations. Initially, the geometry of both the burner and the combustion chamber has been developed then it was meshed using the structured type cells. The modelling studies have started with the cold flow field analysis using k- $\epsilon$  turbulence model. Due to the complexity of the geometry, the flow is turbulent as in most of industrial applications. Then the reactive case studies have been performed to investigate the in-chamber temperature distribution and emission levels at the exit of the combustion chamber. The flamelet combustion model has been utilized in reactive flow analysis. The modeling results were validated by the experimental measurements obtained from the set up mentioned below. Moreover, a new burner design was proposed and modelled to achieve lower levels of  $\text{NO}_x$  emissions.

Burners have complicated components to obtain desired mixing of fuel and oxidizer and the flame shape and position. In order to model burner geometry, simplifications are needed to obtain converged solutions without affecting the flow field developed in the combustion chamber. Simplified burner and combustion chamber geometry are shown in Figure 1.

Simplifications made during modeling studies are as follows;

- Ignition electrode and ionization electrode were not modelled,
- Burner body and other equipment were not used in modelled geometry,
- Diffuser wings were modified,
- Fixing plates of the flame tube extension were not modelled.

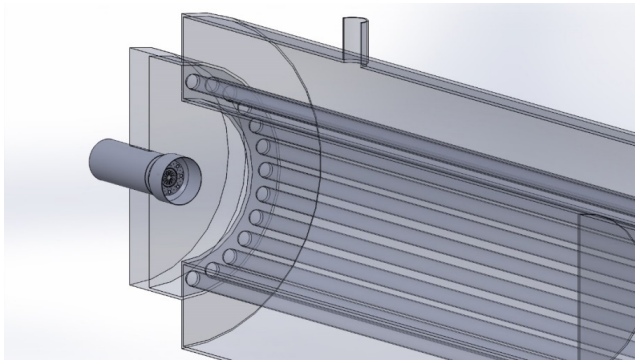


Figure 1. Simplified burner and combustion chamber geometry

Mesh independency studies were performed with four different mesh geometries. Details of the burner head were directly affected the mesh quality and total mesh number due to complexity in this part. During the mesh independency studies, element sizes in the burner head region and the adjacent combustion chamber parts where the combustion and high gradients occurred were varied. Details of the studied meshes are listed in Table 2.

Table 2. Mesh element number and mesh quality of the geometry

Mesh Name	Element Number	Skewness (Maksimum)	Orthogonal Quality (Minimum)
Mesh-1	5961246	0.84834	0.22609
Mesh-2	5522284	0.87171	0.21169
Mesh-3	4789363	0.89912	0.18363
Mesh-4	4399183	0.93495	0.08915

Initially, cold flow has been computed for the four-different mesh option given in Table 2. The comparison of the mean axial velocity in axial direction with four mesh cases is shown in Figure 2. The mean axial velocity profiles were found almost same when all flow domain is considered. However, some variations have been observed in the region near the exit of the burner corresponding to velocity core region. The mesh size and number coded as Mesh-3 is decided to be accurate enough and used in further studies. A detailed view of Mesh-3 is shown in Figure 3 where structured meshes were used in the combustion chamber and tetrahedral meshes were used in the region where the geometry is complex.

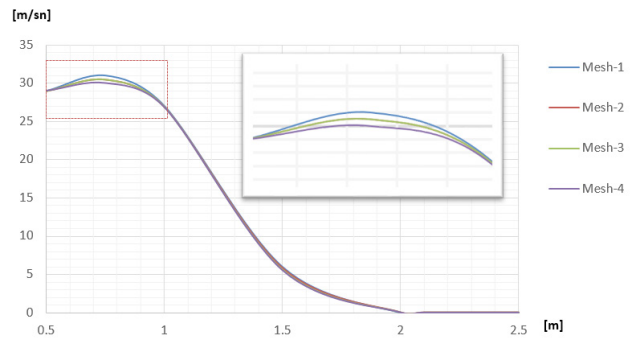


Figure 2. Axial velocity distribution in axial direction. [m]

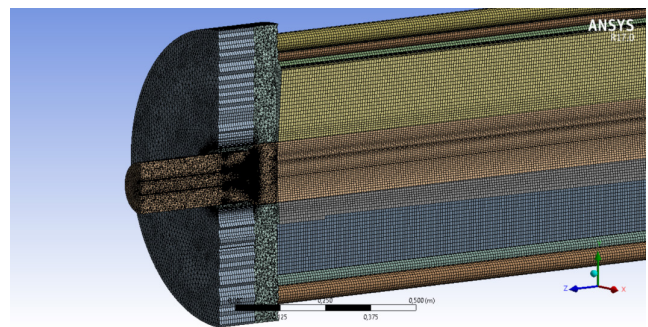


Figure 3. Detailed view of chosen mesh case, Mesh-3

For the boundary conditions, mass flow inlet condition was applied for both fuel inlet and air inlet. In addition, constant wall temperature was defined at the surface of the combustion chamber since heat is rejected by water flowing around the chamber. The pressure outlet was defined as the outlet boundary condition.

## 2.2. Experimental Setup

In this study, a commercial burner is considered. It is a, monoblock modulating, natural gas/LPG and non-premixed type since air and gas flow separately in the burner.



Figure 4. General view of the experimental setup

Experimental measurements were conducted to determine the emissions and the temperature at the outlet of the combustion chamber by varying several parameters. The air-flow ratio can be adjusted to examine the effect of the equivalence/excess air ratio. General view of the experimental setup and test burner is given in Figure 4.

The technical specifications of the experimental model are shown in Figure 5. The combustion chamber is cooled down by using a water jacket around it. The inlet and the outlet temperature of the water were monitored to determine amount of heat rejection through the chamber walls.

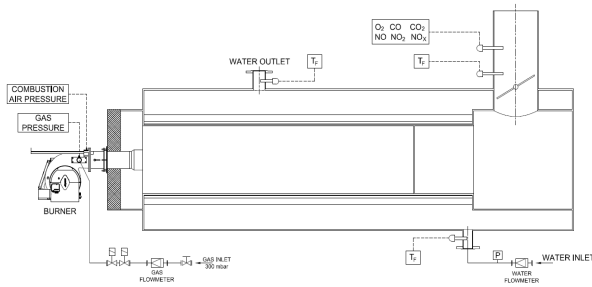


Figure 5. Test setup and measured operating parameters of the test setup

The natural gas burner is connected to the combustion chamber test set up equipped with several measurement devices. The following operating parameters are being measured during the tests in line with PLC controlled test units;

- Fuel flow rate, fuel supply temperature and pressure,
- Cooling water flow rate, cooling water inlet and outlet temperature,
- Flue gas emissions (CO, CO<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub>, SO<sub>x</sub>)
- Flue gas temperature,
- Boiler back pressure,
- Fuel and combustion air pressure,

Experimental test conditions are listed in Table 3. Measured experimental values were used for comparison with numerical studies.

Table 3. Test conditions for the experimental studies

Air/Gas Side			Water Side		
Air Temperature	10	°C	Water Inlet Temperature	30	°C
Gas Temperature	13	°C	Water Outlet Temperature	50	°C
Gas Inlet Pressure	300	mbar	Water Flow Rate	16.5	m <sup>3</sup> /h

General specifications of the burner and its modified versions based on the capacity are given in Table 4.

Table 4. Burner Technical Specifications

Fan Motor Power [kW]	1.5	Natural Gas Consumption High Load [Nm <sup>3</sup> /h]	125.1
Fuel Type	Natural Gas-LPG	Ignition	Direct Ignition
Operating Type	Modulating	Flame Control	Ionization

## II.RESULTS

### 1.2.Determination of Theoretical Amount of Air

The modeling of the burner has been performed after determination of the required flow rates operating at two different air to fuel ratio conditions.

The parameter Lambda ( $\lambda$ ) is defined to be the ratio of the actual air-fuel ratio to the stoichiometric air-fuel ratio.  $\lambda > 1$  corresponds to lean mixture in fuel and  $\lambda < 1$  refers to rich mixture in fuel. Increasing the excess air ratio decreases both the flame and combustion chamber temperatures. In order to establish the same load for excess air conditions, more fuel is needed to be burned. Lambda is also defined as the reciprocal of the equivalence ratio as given in following equation;

$$\lambda = \frac{(Air/Fuel)_{actual}}{(Air/Fuel)_{stoichiometric}} = \frac{1}{\phi} \quad (1)$$

Theoretical air-fuel and combustion product concentrations were calculated for methane at two air to fuel ratio conditions. They are also obtained for natural gas at the same operating conditions. Densities for both fuel types were calculated by using an online calculator [16,17]. Reference temperature and pressure were chosen to be 15°C 1.01325 bar, respectively. The density of natural gas at the same operating conditions and the required amount of air for these conditions are calculated similarly. The results of the calculations for both fuel types are given in Table 5.

Table 5. Density calculation for Methane and Natural Gas

		Methane	Nat. Gas
Temperature	°C	15	15
Pressure	MPa	0.101325	0.101325
Mass density	kg/m <sup>3</sup>	0.68	0.711
Compression factor	-	0.998	0.9979
Molar mass	kg/kmole	16.043	17.775
Molar density	kmole/m <sup>3</sup>	0.04238	0.0424



Natural gas composition that was used in calculations are shown in Table 6.

**Table 6.** Natural gas composition utilized in calculations

Methane	%	96.064
Ethane	%	2.133
Propane	%	0.748
Butane	%	0.233
Nitrogen	%	0.659
Carbon dioxide	%	0.163

The required amount of methane and air has been theoretically calculated for  $\lambda=1$  and  $\lambda=1.2$  conditions. Total air demand was found that for 1 m<sup>3</sup>/h methane, 9.52 m<sup>3</sup>/h of air was needed. On the other hand, for the latter condition, the required amount of air was 11.424 m<sup>3</sup>/h. Similarly, for the natural gas fuel case, the required amount of air for  $\lambda=1$  and  $\lambda=1.2$  conditions were also calculated which are 9.52 m<sup>3</sup>/h and 11.7 m<sup>3</sup>/h, respectively.

### 3.2. Reactive Flow Studies

Influence of several parameters on combustion characteristics in the chamber were examined both numerically and experimentally. Reactive flow analyses were performed for different excess air ratio values at high load conditions. It is accomplished by varying the air flow rate while the amount of natural gas fuel is kept constant. The numerical computations were performed for both the natural gas and 100% methane fuel conditions for 125.1 Nm<sup>3</sup>/h gas consumption flow rate. Similarly, the experiments were conducted for the same operating conditions of natural gas. The comparison of numerical and experimental results for the first reactive case study with natural gas is shown in Table 7, Figure 6 and Figure 7.

As seen in Table 7, O<sub>2</sub> and CO<sub>2</sub> emissions are predicted in a good agreement with the experiments. On the other hand, the difference is found slightly higher, however, within an acceptable range of less than 10% for NO<sub>x</sub> emissions.

**Table 7.** The comparison of the first reactive case studies with experiments

Case No/Type	Fuel Type	Gas Consumption (Nm <sup>3</sup> /h)	$\lambda$ (-)	O <sub>2</sub> (%)	CO <sub>2</sub> (%)	NO <sub>x</sub> (ppm)
1	Numerical	Natural Gas 125.1	1.1	1.61	10.7	61.2
	Exp.	Natural Gas 125.1	1.1	2	10.41	66

2	Numerical	Natural Gas 125.1	1.2	3.3	9.6	61.6
	Exp.	Natural Gas 125.1	1.2	3.5	9.76	63
3	Numerical	Natural Gas 125.1	1.3	4.26	9.03	53.32
	Exp.	Natural Gas 125.1	1.3	4.9	8.77	57
4	Numerical	Natural Gas 125.1	1.4	5.61	8.11	55.53
	Exp.	Natural Gas 125.1	1.4	6	8.18	51

In addition, the comparison of numerical and experimental studies at the same  $\lambda$  value of 1.2, corresponding to the second reactive case studies of natural gas and methane, is shown in Table 8. The results of numerical studies with natural gas are observed better than those of with the methane case when both are compared to the experimental data.

**Table 8.** The comparison of the emissions for the second reactive case numerical studies with experiments.

Case No /Type	Fuel Type	Gas Consumption (Nm <sup>3</sup> /h)	$\lambda$ (-)	O <sub>2</sub> (%)	CO <sub>2</sub> (%)	NO <sub>x</sub> (ppm)
2	Numerical	Natural Gas 125.1	1.2	3.3	9.6	61.6
5	Numerical	Methane 125.1	1.2	3.25	9.56	55.52
4	Experimental	Natural Gas 125.1	1.2	3.5	9.76	63

The influence of the load is investigated by keeping the excess air value constant, for  $\lambda=1.2$ , in the third reactive analysis with natural gas. The numerical and experimental results are compared in Table 9.

**Table 9.** The comparison of the third reactive case results with experiments for natural gas.

Case No	Gas Consumption Nm <sup>3</sup> /h	$\lambda$ -	O <sub>2</sub> %	CO <sub>2</sub> %	NO <sub>x</sub> ppm	
6	Numerical	50	1.2	3.5	9.48	46.54
	Experimental	50	1.2	3.5	9.44	57
7	Numerical	75	1.2	3.5	9.83	56.86
	Experimental	75	1.2	3.4	9.72	65
8	Numerical	100	1.2	3.5	9.5	49.7
	Experimental	100	1.2	3.5	9.55	61
2	Numerical	125.1	1.2	3.3	9.6	61.6
	Experimental	125.1	1.2	3.5	9.76	63

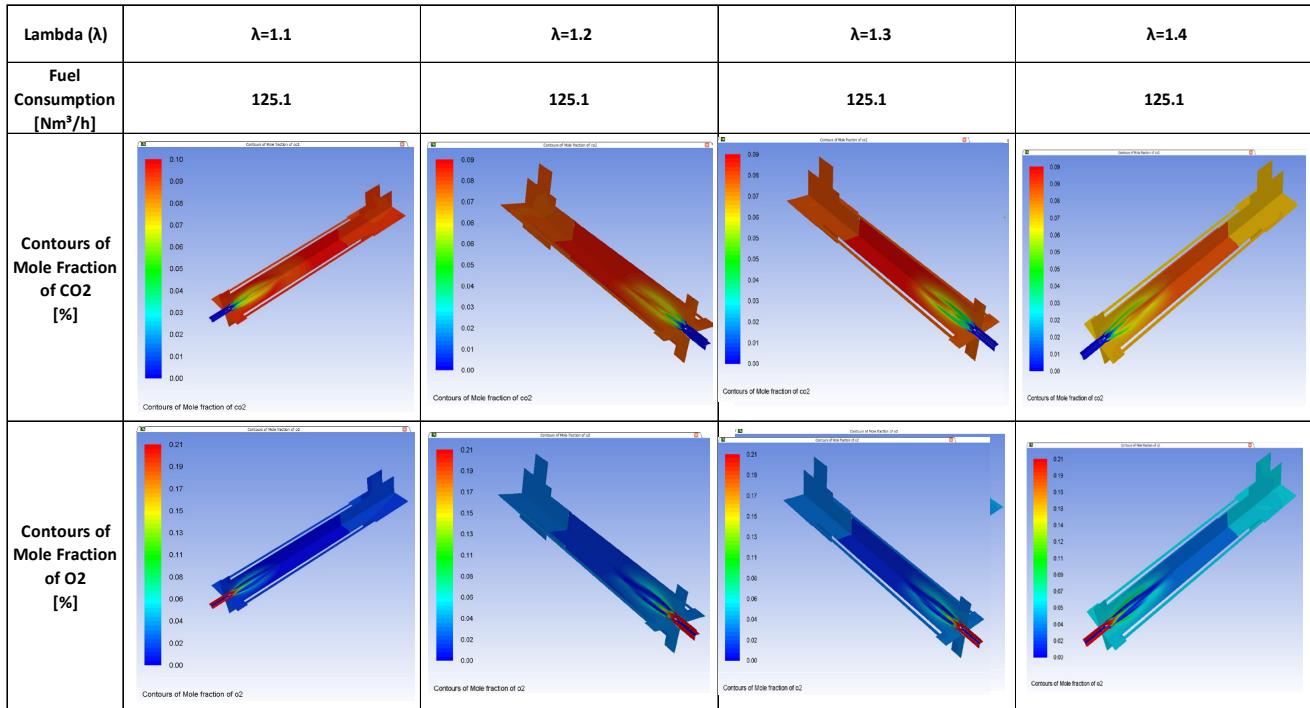


Figure 6. Contour plots of CO<sub>2</sub> and O<sub>2</sub> mole fraction distributions with varying excess air ratio.

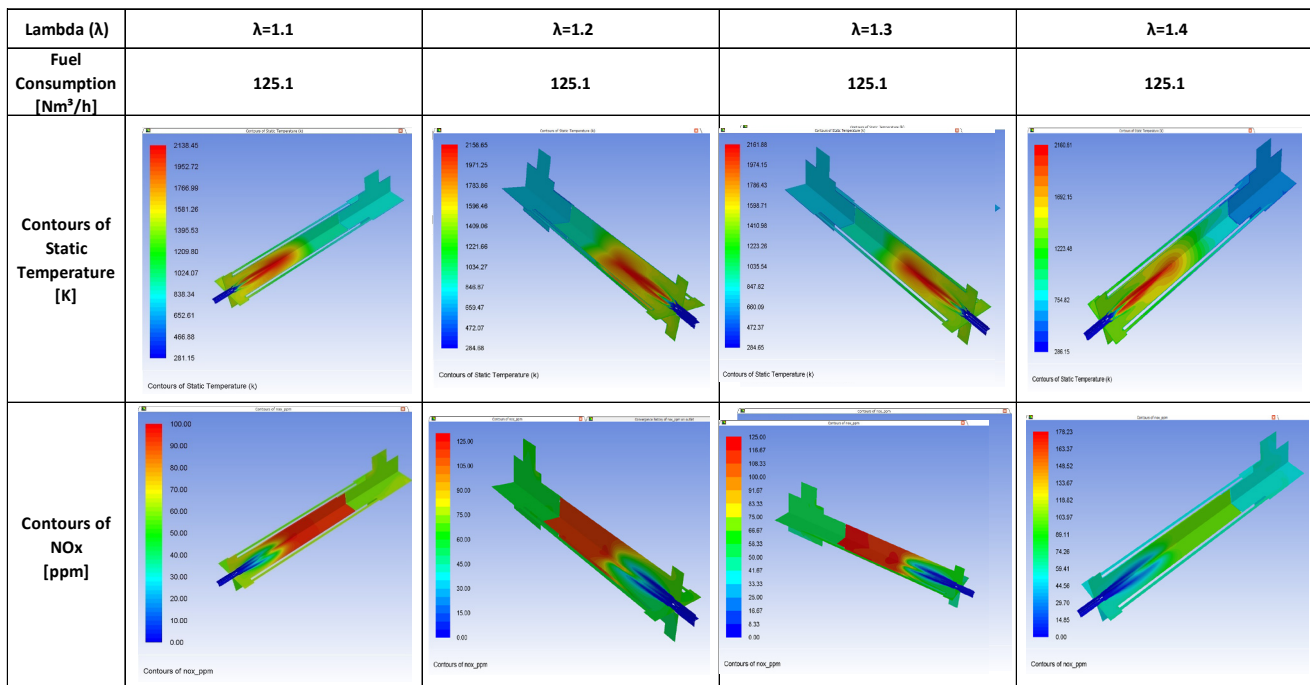


Figure 7. Contour plots of Static Temperature and NO<sub>x</sub> mole fraction distributions with varying excess air ratio.

Differences between the experiments and the numerical studies are observed to be 5%, 2%, 8% for  $O_2$ ,  $CO_2$  and  $NO_x$  emissions, respectively. As in the previous case,  $O_2$  and  $CO_2$  emission results are found similar to the experiments, less than 2%. Therefore, these emissions are predicted with a good agreement and the results are quite satisfactory. On the other hand,  $NO_x$  levels are computed slightly different than the experiments. Except for the case 2, for all other tabulated cases the difference is observed more than 10%. It is observed that  $NO_x$  emissions are predicted relatively more accurate at high load conditions.

Based on the results obtained from case studies, two new burner geometries were developed with modifications on some of the burner components. Then, the developed geometries were numerically modelled for the sake of decreasing  $NO_x$  emissions. New Geometry-1 (NG-1) was modelled to see how flame tube extension affect the flame shape and the modifications were done on the geometry for gas nozzles in which the nozzle shape is modified with radius form to decrease pressure lost.

With modified gas nozzles, pressure lost inside the combustion head was improved but without flame tube extension the resultant flame shape became too spherical and impinged to the combustion chamber wall. This may cause local temperature increase so that increase in  $NO_x$  emissions and damage on the chamber wall. Therefore, modifications needed to be applied to obtain a longer flame. Thus, another model, coded as New Geometry-2 (NG-2), has been developed based on NG-1 model. Modified gas nozzle in NG-1 was utilized and gas outlets were added in the center of the combustion head of the burner. A conical part was also added to the flame tube to improve the flame shape.

Mesh details of NG-2 is shown in Figure 8. Geometry has 2070285 elements with the maximum skewness of 0.87.

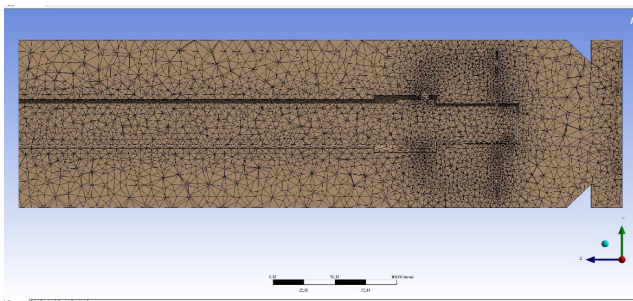


Figure 8. Mesh details of the NG-2 burner part

The reactive case simulations were performed with NG-2 for the natural gas consumption of 125.1  $Nm^3/h$  at  $\lambda=1.2$  air to fuel ratio. The modelling results are shown in Table 10.

It is found that with the modified geometry, coded as Case-9, nearly 25 ppm decrease in  $NO_x$  emissions for the same load conditions was observed compared to Case-2 in numerical studies.

Table 10. Reactive analysis results for the natural for the NG-2 in  $\lambda=1.2$ .

Case No	Fuel Type	Gas Consumption	$\lambda$	$O_2$	$CO_2$	$NO_x$
		$Nm^3/h$	-	%	%	ppm
9	Numerical Natural Gas	125.1	1.2	3.58	9.45	34.93

In addition, the flame position was found longer compared to the original geometry in length. Temperature contours of the reactive analysis result are presented in Figure 9. It is seen that the temperature levels are lower than the other cases verifying less level of  $NO_x$  emissions.

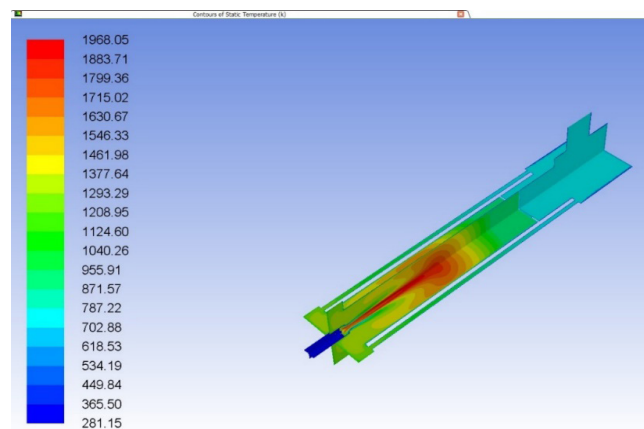


Figure 9. Temperature [K] contour plot of the NG-2

### III.CONCLUSIONS

An industrial scale burner and its modified geometries have been studied numerically. Experimental measurements are also conducted for the same burners. The numerical studies have been performed initially for the mesh independency. The accurate enough mesh number and size have been determined by comparing four mesh cases. Then reactive case studies have been performed with chosen mesh.

In the first reactive case analysis, the influence of the air to fuel ratio on the product emissions has been investigated with natural gas. It is observed that  $CO_2$  and  $O_2$  emissions are found in a good agreement with experimental data. In addition, the simulations were performed with 100% methane gas as well. It is observed that temperature distribution

and  $\text{CO}_2$ ,  $\text{O}_2$  emission values are almost similar when 100% methane and natural gas results are compared. However, calculated  $\text{NO}_x$  values with natural gas are found closer to the experimental data. In other cases, the simulations were performed with natural gas.

In the third reactive case analysis and experiments gas consumption ratios were varied to examine the effect of load on the emissions. From comparison of experiments and reactive studies it is observed that increasing the load increases slightly the  $\text{NO}_x$  emissions in experiments which is expected due to the increase in the temperature. Similar trend has been also observed in simulations however the difference between the measurements and the simulations is observed higher at lower load conditions.

Based on the results obtained from the burner a modified version has been developed. With the modified burner geometry pressure drop of combustion head was decreased but flame shape was not suitable for a burner application since the flame impinges on the combustion chamber wall and too spherical. With the improvement on the burner geometry,  $\text{NO}_x$  values were obtained less than the original geometry and the flame is found longer than the first modified geometry. In addition temperature levels are observed lower compared to the other cases.

## REFERENCES

- [1] Charles, E.B., (2013). The John Zink Hamworthy Combustion Handbook Fundamentals Vol.1, 2<sup>nd</sup> Edition, CRC Press, Oklahoma.
- [2] McAllister, S., Chen, J., Fernandez-Pello, A.C., (2011). Fundamentals of Combustion Processes, 1<sup>st</sup> Ed., Springer, New York.
- [3] Strehlow R.A., (1993). Combustion Fundamentals, 1<sup>st</sup> Ed., Krieger Pub Co.
- [4] Basu, P., Kefa C., Jestin, L. (2000). Boilers and Burners Design and Theory, 1<sup>st</sup> Ed., Springer, New York.
- [5] Poinso, T., Veynante, D., (2001). Theoretical and Numerical Combustion, 1<sup>st</sup> Ed., Edwards, Philadelphia
- [6] Ansys Inc. (2016). Fluent Combustion Training Notes, 1<sup>st</sup> Edition, Ansys Inc., Canonsburg
- [7] Standart EN 67 (2008) Automatic Forced Draught Burners for Gaseous Fuels.
- [8] Sarlej, M., Petr, P., Hajek, J., Stehlik, P. (2007). Computational Support in Experimental Burner Design Optimisation. *Applied Thermal Engineering* 27, 2727–2731.
- [9] Chacon J., Sala J.M., Blanco J.M., (2007). Investigation on the Design and Optimization of a Low  $\text{NO}_x$ -CO Emission Burner Both Experimentally and through Computational Fluid Dynamics (CFD) Simulations, *Energy&Fuels*, 21, 42-58.
- [10] Spangelo, O., (2004). Experimental and Theoretical Studies of a Low  $\text{NO}_x$  Swirl Burner, PhD Thesis, The Norwegian University of Science and Technology, Norway.
- [11] Saripalli, R., (2004). Simulation of Combustion and Thermal Flow Inside an Industrial Boiler, PhD Thesis, University of New Orleans, USA.
- [12] Khanafar, K., Aithal, S.M., (2011). Fluid-dynamic and  $\text{NO}_x$  Computation in Swirl Burners, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 54, 5030-5038.
- [13] Celtek, M.S. and Pınarbaşı, A., (2018). Investigations on performance and emission characteristics of an industrial low swirl burner while burning natural gas, methane, hydrogen-enriched natural gas and hydrogen as fuels, *Int. J. of Hydrogen Energy*, 43(2), 1194-1207.
- [14] Funke, H.H.W., Beckmann, N., Abanteriba, S.,(2019). An overview on dry low  $\text{NO}_x$  micromix combustor development for hydrogen-rich gas turbine applications, *Int. J. of Hydrogen Energy*, 44(13) 6978-6990.
- [15] Enagi, I. I., Al-attab, K.A., Zainal, Z.A.,(2017). Combustion chamber design and performance for micro gas turbine application, *Fuel Processing Technology*, 166, 258-268.
- [16] Natural Gas Density Calculator, <http://www.unitrove.com/engineering/tools/gas/natural-gas-density>. Erişim tarihi: Mayıs 2016.
- [17] Natural Gas Calorific Value Calculator, <http://www.unitrove.com/engineering/tools/gas/natural-gas-calorific-value>. Erişim tarihi: Mayıs 2016.



# Özel Bir Hamiltonyen Denklemi için $\lambda$ -Simetri ve Prolle-Singer Metodu

## $\lambda$ -Symmetry and Prolle-Singer Method for a Special Hamiltonian Equation

Gülden GÜN POLAT<sup>1</sup> 

<sup>1</sup>*İstanbul Teknik Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Matematik Mühendisliği Bölümü, Maslak, 34469, İstanbul*

### Öz

Lineer olmayan adi diferansiyel denklemler için mevcut olan indirgeme metotlarından önemli iki tanesi  $\lambda$ -simetri ve Prolle-Singer metodu-  
dur. Bu metotlar aynı zamanda bahsi geçen denklemlerin ilk integrallerini ve integrasyon çarpanlarını bulmak için oldukça elverişlidir. Bu  
çalışma Riemann sıfırlarının spektral realizasyonunu tanımlayan bir model olan özel bir Hamiltonyen denklemine, bu metotların uygulan-  
masını sunmayı amaçlamaktadır. Ayrıca  $\lambda$ -simetri ve Prolle-Singer metotları arasındaki bağlantıya yer verilerek, bu ilişkinin sağladığı ko-  
laylıklar detaylarıyla açıklanacak ve Hamiltonyen denklemine uygulamaları birçok farklı durum için sunulacaktır.

**Anahtar Kelimeler:** Lie simetrisi,  $\lambda$ -simetrisi, Prolle-Singer metodu, integrasyon çarpanı, ilk integral

### Abstract

Two of important methods that are used to reduce degree of nonlinear ordinary differential equation, are known as  $\lambda$ -symmetry and Prolle-  
Singer methods. These methods are also very suitable to find first integrals and integrating factors of mentioned equations. The purpose  
of this study is to present applications of these methods to a special Hamiltonian equation that is known as a model equation describing  
the spectral realization of the Riemann zeros. Furthermore, it has significant connection between  $\lambda$ -symmetry and Prolle-Singer methods,  
which provides some advantages that are explained in detail and implementations of a special Hamiltonian equation are illustrated for many  
different cases.

**Keywords:** Lie symmetries,  $\lambda$ -symmetries, Prolle-Singer method, integration factor, first integral

### 1.Giriş

Lineer olmayan diferansiyel denklemler matematik, fizik ve ekonomi gibi pek çok uygulamalı alanda var olan problemlerin  
modellenmesiyle; literatürde çözümü, pek çok araştırmacının ilgisini çekecek şekilde yer bulur. Diferansiyel denklemlerin  
çözümünün varlığına ve tekliline yönelik olan çalışmalar klasik olarak oldukça etkili bir şekilde devam etse de, çözümünün  
yapısını inceleyen çalışmalar da büyük ölçüde dikkat çekmektedir. Problemlerin çok çeşitli olması çözüme yönelik metotla-  
rın da çok yönlü ve detaylı şekilde araştırılmasını doğrudan etkiler. Bu çalışmalardan en eskiye dayanan ve sonrasında gelişt-  
tirilen metotların temeli niteliğinde olan araştırma 1870 li yıllarda Norveçli matematikçi Sophus Lie'nin kendi ismiyle anılan  
Lie grup teorisidir. Bu teori, dönüşüm grupları ile belirlenen Lie simetrisi yardımıyla, eğer çalışılan denklem kısmi dife-  
ransiyel denklem ise bu denklemi adi diferansiyel denkleme indirgemeye, ele alınan denklemin adi diferansiyel denklem ol-  
ması durumunda ise bu denklemin mertebesinin düşürülmesine olanak sağlar. Ayrıca Lie simetrisi kullanılarak ifade edilen  
yeni denklemler değişmezlik (invariantlık) şartı altında elde edildiğinden, bu denklemlerin çözümleri aynı zamanda orjinal  
denklemlerin de çözümüdür. Lie'nin bu köklü teorisi çok zahmetli işlem yükünden dolayı uzun yıllar araştırmacıların ilgisin-  
den uzak kalmıştır. Geçen zamanda, konu üzerinde Bluman, Kumei ve Olver tarafından yazılan kitaplar ve uygulamalar ile  
konu oldukça dikkat çekici hale gelmiştir [1-2]. Ayrıca gelişen bilgisayar teknolojisi ile ortaya çıkan Mathematica ve Maple

gibi programlar ile hesaplamaların daha elverişli ve algoritmik olmasıyla Lie grup teorisi arařtırmacıların ilgi odaklarından biri olmuřtur.

Lie'nin teorisi temel niteliğinde olsa da problemlerin çeřitliđi zaman içerisinde farklı simetri çeřitlerinin ortaya çıkmasına olanak sađlamıřtır. Örneđin her adi diferansiyel denklem Lie simetrisine sahip olmayabilir böyle durumlarda yeni bir yaklařım olarak Muriel ve Romero tarafından  $\lambda$ -simetrisi geliştirilmiřtir [3-5]. Bu simetrisinin mantığı ilk olarak vektör alanlarının üstel ifadeler içermesi fikriyle Olver tarafından kitabında ifade edilse de teorisi Muriel ve Romero tarafından genişletilmiřtir ve ismi onlar tarafından verilmiřtir. Aslında  $\lambda$  ifadesi simetrisinin bulunmasını sađlayan uzanım formülüne eklenen bir fonksiyondur. Bu fonksiyon yardımıyla sıfırdan farklı yada ařıkar olmayan yeni sonsuz küçük ifadeler (vektör alanlarının katsayıları) bulabilmek mümkün olur ve denklemleri sađlayan  $\lambda$ -fonksiyonuna aynı zamanda simetri denir. Lineer olmayan adi diferansiyel denklemlerin  $\lambda$ -simetrisi yardımıyla ilk integralleri ve integrasyon çarpanları bulunabilir ve bu ilk integraller kullanılarak denklemin analitik çözümlerine ulařılabilir [6-8]. Bu metod lineer olmayan denklemler kadar lineer olanlarda da oldukça etkindir.  $\lambda$ -simetrisi Lie simetrisine sahip olmayan denklemlerin çözüm arayıřı fikri ile dođmuş olsa da, eđer bir denklemin Lie simetrisi biliniyorsa, bu simetrisi kullanılarak  $\lambda$ -simetrisi belirlenebilir. Lie simetrisini kullanarak elde edilen  $\lambda$ -simetrisi ile bir adi diferansiyel denklemi indirgemek, integrasyon çarpanını ve ilk integralini elde etmek tamamen algoritmik bir metottur ve oldukça etkindir.

Adi diferansiyel denklemlerin benzer şekilde integrasyon çarpanı ve ilk integrallerini bulmak için bir diđer önemli metod Prolle-Singer olarak literatürde yer bulur. Temel olarak bir adi diferansiyel denklemin, genellikle rasyonel şekilde, basit fonksiyonlarla ifade edilen bir çözümü olduđu kabul edilir ve bu çözüm Prolle-Singer metodunun basamakları ile belirlenir. Bu basamaklar integrasyon çarpanı  $R$  ve null formu  $S$  'i içeren belirleyici denklemler olarak adlandırılan üç denklemin çözümüne yönelik ortaya çıkar. Eđer tüm bu denklemlerin çözümüne ulařılır ve  $R$  ve  $S$  fonksiyonları elde edilebilirse, bu fonksiyonlar kullanılarak çalıřılan denklemin ilk integrali belirlenebilir [9-10]. Fakat her zaman bu belirleyici denklemleri çözmek mümkün olmamaktadır. Böyle durumlarda  $\lambda$ -simetri ve Prolle-Singer metodları arasında keřfedilen, büyük ölçüde iřlem yükünü rahatlatan önemli bir iliřkiden yararlanılabilir. Bu bađlantı  $\lambda = -S$  ve  $\lambda$ -simetri metodundan elde edilen integrasyon çarpanı  $\mu$  olmak üzere  $\mu = -R$  şeklindedir.

### 1.1.Makalenin Amacı ve Problemin Tanımı

Neredeyse yüzyıl kadar önce Polya ve Hilbert, Riemann'ın hipotezini ispatlamak için spektrumunun sanal kısmı ařıkar olmayan Riemann sıfırları içeren kendine eřlenik bir operatör bulmak gerektiđini önerdiler. Michael Berry 2008 yılında kuantum versiyonu Polya-Hilbert hipotezini gerçekleştiren ve aynı zamanda bazı özel kořulları sađlaması gereken klasik bir Hamiltonyen'in varlıđını öneren bir fikir ortaya attı [11]. Berry, ilk klasik Hamiltonyen'i  $H_{cl} = y p$  şeklinde önerdi. Fakat daha sonra Berry ve Keating bu Hamiltonyen için sađlaması gereken özel kořullardan biri olan, kaotik ve asal sayılarla iliřkili izole edilmiř periyodik yörüngelerde olması şartını sađlamadıđını ifade ettiler [12]. Bu Hamiltonyen'e ait farklı bir modifikasyon Sierra ve çalıřma arkadaşları ile Berry ve Keating tarafından, sınırlı klasik yörüngelere ve ayrı kuantum spektrumuna sahip olması için 2011 yılında ařađıdaki şekilde önerildi

$$H_S = y \left( p + \frac{\ell_p}{p} \right), \quad (1)$$

$\ell_p$ , momentum boyutlarının eřleme sabiti olmak üzere (1) Hamiltonyen'nine karřılık gelen Lagrange fonksiyonu

$$L = -2\ell_p \sqrt{y(y - y')},$$

şeklindedir [13-14]. Bu Lagrange fonksiyonunun bilinen Euler-Lagrange denklemlerine koyulmasıyla, kendisine karřılık gelen ikinci mertebe diferansiyel denklem

$$\ddot{y} + \frac{\dot{y}^2}{y} - 6\dot{y} + 4y = 0, \quad (2)$$

olur. Bu denklemin Lie simetrisi ve denkleme Jacobi metodunun uygulaması Nucci tarafından yapılmıřtır [15]. Ayrıca denklemin ilk integralleri kendi eřleniklik ve karakteristik metodu ile literatürde yer bulmuřtur [16-17].

Bu çalıřmanın amacı ilk önce denklemin Lie simetrisinden hareketle  $\lambda$ -simetrisini belirleyerek  $\lambda$ -simetri metodunu uygulamak, bu metoda göre ilk integralleri ve integrasyon çarpanlarını bulmaktır. Ardından  $\lambda$ -simetri ve Prolle-Singer metodu arasındaki iliřki kullanılarak Prolle-Singer metodunun sonuçlarına göre farklı integrasyon çarpanları, null formları bu sonuçlara göre de farklı ilk integraller elde etmek planlanmaktadır.

Bu çalıřmanın 2. bölümünde bahsi geçen metodlarla ilgili temel bilgilere yer verilmiřtir. 3. bölüm ise (2) denklemine bu metodların uygulamasını ve elde edilen sonuçların deđerlendirilmesini içermektedir.

## II. Temel Bilgiler

### 2.1 $\lambda$ -Simetri Metodu

$n$ , mertebe bir adi diferansiyel denklem

$$\tilde{\Delta}(x, y^{(n)}) = 0, \quad (3)$$

$(x, y)$  değişkenleri  $M \subset X \times Y \simeq \mathbb{R}^2$  şeklinde bir  $M$  açık kümede olacak şekilde tanımlansın [5].  $k \in \mathbb{N}$  için,  $M^{(k)} \subset X \times Y^{(k)}$  jet uzayına karşılık gelen uzay  $M^{(k)}$  olarak verilsin. Bu kümenin elemanları  $(x, y^{(k)}) = (x, y, y_1, \dots, y_k)$  şeklinde ve  $i = 1, 2, \dots, k$  için  $y^{(i)}$  ler  $y$ 'nin  $x$ 'e göre  $i$ , mertebe türevini temsil etsin. (3) denkleminin integrasyon çarpanı,  $0 \leq k \leq n$  aralığındaki bazı  $k$ 'lar için  $\mu(x, y^{(k)})$  olsun. Eğer (3) denklemini  $\mu(x, y^{(k)})$  ile çarpılırsa,  $\Delta(x, y^{(n-1)})$  şeklindeki bazı fonksiyonlar için toplam türev operatörü  $D_x$  ile ifade edilebilir olarak

$$\mu(x, y^{(k)}) \cdot \tilde{\Delta}(x, y^{(n)}) = D_x(\Delta(x, y^{(n-1)})) \quad (4)$$

eşitliği belirlenir. Toplam türev operatörü aşağıdaki şekilde bir formülüzasyona sahiptir

$$D_x = \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} + \sum_{i=2}^n y^{(i)} \frac{\partial}{\partial y^{(i-1)}}. \quad (5)$$

(4) denklemindeki  $\Delta(x, y^{(n-1)})$  fonksiyonu (3) denklemini için bir ilk integraldir ve  $D_x(\Delta(x, y^{(n-1)}))$  bir korunum formudur.

Ayrıca (4) denklemini ile bağlantılı olarak  $D_x(\Delta(x, y^{(n-1)})) = 0$  tam diferansiyel denklemi için bir  $\lambda$  -simetrisi belirlenebilir ve aşikar olarak mertebe indirgemesi ile  $\Delta(x, y^{(n-1)}) = C, C \in \mathbb{R}$  sonucu elde edilir.

#### Tanım 1: [3] Yeni uzanım formülü

Her  $\lambda \in C^\infty(M^{(1)})$  keyfi fonksiyonu için yeni bir uzanım formülü  $v$  vektör alanı ile tanımlanır. Bu vektör alanı  $v = \xi(x, y) \frac{\partial}{\partial x} + \eta(x, y) \frac{\partial}{\partial y}$  şeklinde  $M$  üzerinde ifade edilsin.  $v$ 'nin  $n$ , mertebe  $\lambda$ -uzanımı

$v^{[\lambda, n]}$  ile ifade edilmek üzere  $M^{(n)}$  de tanımlanan bu vektör alanı  $\eta^{[\lambda, (i)]}(x, y) = \eta(x, y)$  olması durumunda

$$v^{[\lambda, n]} = \xi(x, y) \frac{\partial}{\partial x} + \sum_{i=1}^n \eta^{[\lambda, (i)]}(x, y^{(i)}) \frac{\partial}{\partial y_i}$$

şeklinde tanımlanır ve  $0 \leq i \leq n$  için  $\eta^{[\lambda, (i)]}(x, y^{(i)})$  ifadesinin açık formu toplam türev operatörü kullanılarak aşağıdaki gibidir

$$\eta^{[\lambda, (i)]}(x, y^{(i)}) = D_x \left( \eta^{[\lambda, (i-1)]}(x, y^{(i-1)}) \right) - D_x \left( \xi(x, y) \right) y_i + \lambda \left( \eta^{[\lambda, (i-1)]}(x, y^{(i-1)}) - \xi(x, y) y_i \right).$$

[2] kitabında karakteristik olarak adlandırılan ifade  $v = \xi(x, y) \frac{\partial}{\partial x} + \eta(x, y) \frac{\partial}{\partial y}$  vektör alanı için

$$Q = \eta(x, y) - \xi(x, y) y' \quad (6)$$

şeklinde. Bu karakteristik ile birlikte formülze edilen vektör alanı

$$v_Q^{[\lambda, (n)]} = \sum_{i=1}^n (D_x + \lambda)^i(Q) \frac{\partial}{\partial y_i}, \quad (7)$$

olsun. Böylece  $v^{[\lambda, n]}$  uzanım formülü

$$v^{[\lambda, (n)]} = v_Q^{[\lambda, (n)]} + \xi(x, y) D_x,$$

olarak da ifade edilebilir.

$0 \leq k \leq n - 1$  için  $D_x(\Delta(x, y^{(n-1)})) = 0$  sağlanması durumunda eğer  $\lambda \in C^\infty(M^{(k)})$ ,

$$\sum_{i=0}^{n-1} (D_x + \lambda)^i(1) \frac{\partial \Delta}{\partial y^{(i)}} = 0, \quad (8)$$

kısmi diferansiyel denkleminin herhangi bir çözümü ise, o zaman  $v = \partial_y$ , (3) denkleminin bir  $\lambda$ -simetrisidir.

(8) denklemini  $v = \partial_y$  simetrisi için  $\eta = 1$  ve  $\xi=0$  olmasından dolayı (7) denkleminin karakteristik  $Q = 1$  için ifade edilmiş formudur. (8) denklemini aynı zamanda bir diferansiyel denklem için  $\lambda$ -fonksiyonunu içeren uzanım formülüdür, bu denklemin açık formda yazılması ve türev katsayıları ile belirlenen belirleyici denklemlerin çözülmesiyle  $\lambda$ -fonksiyonu ve sonsuz küçük fonksiyonlar (vektör alanı katsayıları) elde edilir [18].

### 2.2 Lie ve $\lambda$ -Simetri İlişkisi

Bölüm 2.1de  $\lambda$  -simetrisinin teorisi genel çerçeve de  $n$ , mertebe denklemler için verilmiştir fakat Lie ve  $\lambda$  -simetri arasındaki direkt bağlantı Muriel ve Romero tarafından ikinci mertebe adi diferansiyel denklemler için detaylı bir şekilde açıklanmıştır [4]. İkinci mertebe bir adi diferansiyel denklem

$$\ddot{y} = \phi(x, y, \dot{y}), \quad (9)$$

formunda olsun. (9) denkleminin Lie simetrisi yada bir başka deyişle sonsuz küçük fonksiyonları  $\xi$  ve  $\eta$  olmak üzere bunlarla ifade edilen vektör alanı

$$X = \xi(x, y) \frac{\partial}{\partial x} + \eta(x, y) \frac{\partial}{\partial y},$$

şeklindedir.

**Teorem 1:** [4] Vektör alanı  $v = \partial_y$ , (9) denkleminin bir  $\lambda$ -simetrisidir ancak ve ancak bu  $\lambda$ -fonksiyonu

$$\lambda = \frac{A(Q)}{Q}, \quad (10)$$

ifadesi ile belirlenir.

$\lambda$ -simetri metodu lineer olmayan ve lineer denklemlerde oldukça etkili bir yöntemdir. Ancak bir önceki bölüm 2.1 de bahsedilen

şekilde (8) denklemini kullanarak bir denkleme  $\lambda$ -simetri metodunu uygulamak bazen çoklu belirleyici denklemleri çözmeyi gerektirebilir, bu da denklemlerin lineer olmamasından dolayı oldukça zahmetli hesaplar ortaya çıkarabilir. Böyle durumlarda

eğer çalışılan denklemin Lie simetrisi biliniyorsa, Lie ve  $\lambda$ -simetri ilişkisine dayanan basit bir algoritma ile denklemin ilk integrallerine ve integrasyon çarpanlarına ulaşılabilir. Bu algoritma aşağıdaki dört adımla özetlenebilir.

1.  $\lambda(x, y, \dot{y})$ , (8) denkleminin özel bir çözümü olsun.  $v = \partial_y$  simetrisi için birinci mertebe  $\lambda$ -uzanımı Tanım 1 de verilen yeni uzanım formülünde  $n = 1$  alınarak  $v^{[1, (1)]}$  ile ifade edilmek üzere,  $v^{[1, (1)]}$  nin birinci mertebe invaryantı yada ilk integrali

$$w_y + \lambda w_y = 0, \quad (11)$$

denkleminin özel bir çözümüdür.

2.  $\{x, y, \dot{y}\}$  kümesi  $v^{[1, (1)]}$  nin invaryantlarının tam bir sistemidir ve (9) denklemi  $\{x, y, \dot{y}\}$  cinsinden indirgenmiş birinci mertebe

bir adi diferansiyel denklem olarak yazılabilir.  $D_x(\Delta(x, w)) = 0$ , bu indirgenmiş birinci mertebe denklemin bir korunum formu

olsun. (11) denkleminin çözümünden  $\dot{y}$  ve  $\ddot{y}$  ifadeleri  $w$  cinsinden

yazılarak  $D_x(\Delta(x, w(t, y, \dot{y}))) = 0$  şeklinde orijinal denklemin bir korunum formu (ilk integrali)

belirlenir ve böylece (9) orijinal denklemi  $w$  cinsinden ifade edilmiş olur.

3.  $w$  ya bağlı indirgenmiş denklemin çözümüyle ilk integral  $(x, w)$  cinsinden  $\Delta(x, w) = G(x, w) = C, C \in \mathbb{R}$  olarak ifade edilir ve (9) denkleminin integrasyon çarpanı

$$\mu = G_w w_y,$$

formülizasyonu ile belirlenir.

4. Son olarak ilk integralin  $\{x, y, \dot{y}\}$  türünden ifadesi için yani  $G(x, w(x, y, \dot{y}))$  yazılmasıyla

$$I(x, y, \dot{y}) = G(x, w(x, y, \dot{y})),$$

(9) denkleminin  $D_x[I(x, y, \dot{y})] = 0$  eşitliğini sağlayan ilk integrallerine ulaşılır.

### 2.3 Prelle-Singer Metodu

İntegrasyon çarpanı ve ilk integrali bulmaya olanak sağlayan bir diğer metod Prelle-Singer metodudur. Bu metodun temelleri ilk defa birinci mertebe adi diferansiyel denklemler için Prelle ve Singer tarafından atılmıştır [19]. Ardından ikinci mertebe adi diferansiyel denklemlere uygulanabilirliği Duarte ve ark.

tarafından ispatlanmıştır [20]. Metodun en geniş anlamda  $n$ -mertebe adi diferansiyel denklemlere uygulanışı Chandrasekar ve ark. ile yapılmış ve pek çok metotla ilişkisi de detaylarıyla açıklanmıştır [9-10]. Metoda yönelik bazı temel özellikler aşağıda açıklanacaktır.

$M$  ve  $N, t$  zaman olmak üzere;  $t, y, \dot{y}$  nin analitik fonksiyonları ve kompleks polinomlar iken, ikinci mertebe bir adi diferansiyel denklem rasyonel şekilde bu fonksiyonlar kullanılarak

$$\ddot{y} = \frac{M}{N} = \phi, \quad M, N \in \mathbb{C}[t, y, \dot{y}], \quad (12)$$

ifade edilsin.

$C$ , çözümler üzerinde bir sabit olmak üzere (12) denkleminin bir ilk integrali  $I(t, y, \dot{y}) = C$  olsun. Bu ilk integrale (5) formuyla verilen toplam türev operatörü uygulanırsa

$$DI = I_t dt + I_y dy + I_{\dot{y}} d\dot{y} = 0, \quad (13)$$



1-formu elde edilir. Eğer (12) denklemi  $(M/N)dt - dy = 0$  olarak yeniden yazılır ve  $(M/N)dt - dy = 0$  şeklinde null terimi eklenirse aşağıdaki 1-form elde edilir

$$\left(\frac{M}{N} + S\dot{y}\right) dt - Sdy - d\dot{y} = 0. \quad (14)$$

Her ikisi de çözümler üzerinde tanımlandığından (13) ve (14) 1-formları orantılı olmalıdır ve (14) denkleminin  $R(t, y, \dot{y})$  integrasyon çarpanı ile çarpılmasıyla,

$$dI = R(\phi + S\dot{y})dt - RSdy - Rd\dot{y} = 0, \quad (15)$$

ifadesi elde edilir. (13) ve (15) denklemlerinin karşılaştırılmasıyla  $I$  ilk integral,  $R$  integrasyon çarpanı ve  $S$  null terimini içeren

$$I_t = R(\phi + \dot{y}S), I_y = -RS, \quad I_{\dot{y}} = -R,$$

ilişkiler elde edilir. Bu terimler arasındaki  $I_{ty} = I_{yt}, I_{t\dot{y}} = I_{\dot{y}t}, I_{t\dot{y}} = I_{\dot{y}t}, I_{yy} = I_{yy}$  uyumluluk (compatibility) koşulunun sağlanmasıyla  $S$  ve  $R$  yi içeren belirleyici denklemler

$$S_t + \dot{y} S_y + \phi S_{\dot{y}} = -\phi_y + S\phi_{\dot{y}} + S^2 \quad (16)$$

$$R_t + \dot{y} R_y + \phi R_{\dot{y}} = R(\phi + S\dot{y}), \quad (17)$$

$$R_y = R_y S + R S_y, \quad (18)$$

şeklinde. Hesaplamalar açısından (16) nolu denklemin çözümleriyle  $S$  bulunur ve (17) nolu denklemle de  $R$  elde edilir. Son olarak (18) denklemi  $S$  ve  $R$  ye ait kısıtlayıcı denklemdir ve bu denklemde sağlanması halinde (16)-(18) denklemini sağlayan en uygun çözümler bulunmuş olduğu gerçekleşir. Böylece  $R$  integrasyon çarpanı ve  $S$  null terimi ile belirlenebilen ilk integral

$$r_1 = \int R(\phi + S\dot{y})dt \quad \text{ve}$$

$$r_2 = \int (RS + \frac{d}{dy} r_1) dy, \quad (19) \text{ iken}$$

$$I(t, y, \dot{y}) = r_1 - r_2 - \int [R + \frac{d}{dy} (r_1 - r_2)] d\dot{y}, \quad (20)$$

denklemi ile verilir.

## 2.4 $\lambda$ -Simetri ve Prolle-Singer Metodu İlişkisi

Prolle-Singer metodunun algoritmasını belirleyen (16)-(18) belirleyici denklemlerinin çözümünü her zaman kolaylıkla bulmak mümkün olmayabilir. İlk olarak Muriel ve Romero  $\lambda$ -simetri ve Prolle-Singer metodu ilişkisine  $\lambda = -S$  ve  $\mu = -R$  şeklinde kısaca [4] makalesinde değinseler de, daha geniş çerçevede, uygulanabilirliğinin önemini göstermek için orijinal örneklerle Mohanasubha ve ark. tarafından detaylıca sunulmuştur [10].

**Sonuç 1:**  $\lambda$ -simetrisi ile null form arasında  $\lambda = -S$ , integrasyon çarpanı  $\mu$  ile  $R$  fonksiyonu arasında  $\mu = -R$  ilişkisi mevcuttur.

## III. $\lambda$ -SİMETRİ ve PRELLE-SİNGER METODUNUN (2) DENKLEMİNE UYGULANMASI

İkinci merteye lineer olmayan bir adi diferansiyel denklem olan (2) Lagrange fonksiyonu denkleminin  $sl(3, \mathbb{R})$  cebiri ile üretilen sekiz parametrelili Lie nokta simetrisi

$$X_1 = \partial_t, X_2 = y\partial_y, X_3 = \frac{e^{2t}}{y}\partial_y, X_4 = \frac{e^{4t}}{y}\partial_y,$$

$$X_5 = e^{-2t}y^2(\partial_t + 2y\partial_y),$$

$$X_6 = e^{-4t}y^2(\partial_t + y\partial_y), \quad (21)$$

$$X_7 = e^{2t}(\partial_t + 2y\partial_y),$$

$$X_8 = e^{2t}(\partial_t + 2y\partial_y), \quad \text{şeklinde [15].}$$

### 3.1 (2) Denklemi için $\lambda$ -Simetri Metodu

(21) denklemdeki (2) denkleminin Lie simetrisi kullanılarak aynı denklemin  $\lambda$ -simetrisi Bölüm 2.2 ye dayanarak belirlenecektir.

**Durum 1.**  $X_1$  vektör alanı bir diğer adı üreticisine göre  $\xi = 1$  ve  $\eta = 0$  dir. (6) denklemine göre elde edilen karakteristik  $Q = -\dot{y}$  olur ve (5) denklemdeki operatöre göre uygulanan Teorem 1'e dayanan, (10) denklemine göre elde edilen  $\lambda$ -simetrisi

$$\lambda_1 = 6 - \frac{4y}{\dot{y}} - \frac{\dot{y}}{y}, \quad (22)$$

olarak bulunur. Bölüm 2.2 ifade edilen dört basamaklı algoritma

aşağıdaki şekilde uygulanır. Öncelikle (22) ile verilen  $\lambda$ -fonksiyonu (11) denkleminde yerine konular ise bu denklemin çözümü

$$w = \ln \left[ \frac{y(2y - \dot{y})^2}{y - \dot{y}} \right] \quad (23)$$

şeklinde bulunur ve (23) çözümünden hareketle

$$\dot{y} = \frac{-e^w + 4y^2 - \sqrt{e^{2w} - 4e^w y^2}}{2y},$$

$$\ddot{y} = \frac{1}{2y^2 \sqrt{e^{2w} - 4e^w y^2}} \left( -e^{2w} \left( e^w + \sqrt{e^{2w} - 4e^w y^2} \right) - e^w y^2 \left( -e^{2w} \left( e^w + \sqrt{e^{2w} - 4e^w y^2} \right) \dot{w} + 2y^4 \left( 4\sqrt{e^{2w} - 4e^w y^2} + e^w (4 + \dot{w}) \right) \right) \right)$$

$\dot{y}$  ve  $\ddot{y}$  ifadeleri  $w$  ve  $y$  cinsinden ifade edilmiş olur. Algoritmadaki 2. adıma göre bu türevlerin orijinal denklem (2) de yerine konmasıyla

$$\dot{w} = 0 \quad (24)$$

indirgenmiş denklemi elde edilir. Algoritmanın 3. ve 4. adımına göre yukarıdaki (24) indirgenmiş denkleminin çözümünün aşikar

olması  $G$  ilk integralinin (23) ile verilen  $w$  'ya eşit olmasını gerektirir. Böylece (2) denkleminin integrasyon çarpanı ve ilk integrali

$$\mu_1 = \frac{\dot{y}}{2y^2 - 3y\dot{y} + \dot{y}^2},$$

$$I_1 = \ln \left[ \frac{y(2y - \dot{y}^2)}{y - \dot{y}} \right],$$

şeklinde belirlenir. Burada  $X_1$  vektör alanı için uygulanan Bölüm 2.2 ifade edilen dört basamaklı algoritma detaylarıyla açıklanmıştır. Diğer vektör alanları için de benzer işlemler aynı şekilde yapılmıştır ve elde edilen sonuçlar aşağıda verilmiştir.

**Durum 2.**  $X_2$  için ise Lie nokta simetrisi (sonsuz küçükler)  $\xi = 0$  ve  $\eta = y$  şeklindedir. Bu Lie simetrisi ile elde edilen  $\lambda$ -simetrisi, integrasyon çarpanı ve ilk integral sırasıyla

$$\lambda_2 = \frac{\dot{y}}{y}, \quad (25)$$

$$\mu_2 = \frac{y}{2y^2 - 3y\dot{y} + \dot{y}^2},$$

$$I_2 = \ln \left[ \frac{e^{2t} \left( \frac{\dot{y}}{y} - 2 \right)}{\frac{\dot{y}}{y} - 1} \right], \quad \text{bulunur.}$$

**Durum 3.**  $X_3$  üreticisine göre Lie nokta simetrisi (sonsuz küçükler)

$\xi = 0$  ve  $\eta = \frac{e^{2t}}{y}$  olur. Bu durumda elde edilen sonuçlar aşağıdaki gibidir

$$\lambda_3 = 2 - \frac{\dot{y}}{y}, \quad (26)$$

$$\mu_3 = e^{-4t} y, \quad I_3 = e^{-4t} y (\dot{y} - y).$$

**Durum 4.**  $X_4$  vektör alanına göre  $\xi = 0$  ve  $\eta = \frac{e^{4t}}{y}$  şeklinde olup

bu Lie nokta simetrisine göre elde edilen  $\lambda$ -simetrisi, integrasyon çarpanı ve ilk integral sırasıyla

$$\lambda_4 = 2 - \frac{\dot{y}}{y}, \quad (27)$$

$$\mu_4 = e^{-2t} y, \quad I_3 = e^{-2t} y (\dot{y} - 2y),$$

olarak belirlenir.

**Sonuç 2:**  $X_5$  üreticisi ile elde edilen  $\lambda_5 = \lambda_3$  olduğundan  $\mu_5 = \mu_3$  ve  $I_5 = I_3$  olur ve aynı şekilde  $X_6$  için  $\lambda_6 = \lambda_2, \mu_6 = \mu_2, I_6 = I_2$ ;  $X_7$  vektör alanı ile  $\lambda_7 = \lambda_4, \mu_7 = \mu_4, I_7 = I_4$ ; son olarak  $X_8$  üreticisi için  $\lambda_8 = \lambda_2, \mu_8 = \mu_2, I_8 = I_2$  olarak belirlenirler.

### 3.2 (2) Denklemini İçin Prolle-Singer Metodu

Bu bölümde (2) denkleminde Prolle-Singer metodu Bölüm 3.1 de denklemin Lie simetrisi yardımıyla elde edilen  $\lambda$ -simetrisi ile ilişkili olarak uygulanacak olup, (2) denkleminin null formları, integrasyon çarpanları ve ilk integralleri belirlenecektir. (12) ifadesinden  $S$  null formunun en genel şekli

$$S = -\frac{\phi}{\dot{y}} = -6 + \frac{4y}{\dot{y}} + \frac{\dot{y}}{y}, \quad (28)$$

olarak kabul edilebilir [9]. Sonuç 1.de vurgulanan Prolle-Singer

ve  $\lambda$ -simetri ilişkisi (22) denkleminin (28) denkleminin eksi işaretlisine eşit olmasıyla gerçekleşir. Fakat daha farklı ve geniş çerçevede integrasyon çarpanı ve ilk integral elde etmek üzere,  $A$ ,  $B$  ve  $C$  'ler  $y$ 'nin fonksiyonu ve  $r$  sabit olmak üzere integrasyon çarpanı olan  $R$  fonksiyonu  $t$  zaman parametresinden bağımsız olacak şekilde

$$R = \frac{\dot{y}}{(A(y) + B(y)\dot{y} + C(y)\dot{y}^2)^r}, \quad (29)$$

ansatz ile tanımlanabilir. (28) ve (29) denklemleri  $S$  ve  $R$ 'ye bağlı (16)-(18) belirleyici denklemlerine uygulanır ve  $\dot{y}$  türev katsayıları ile belirlenen kısmi diferansiyel denklemler çözümlerse  $A$ ,  $B$  ve  $C$  fonksiyonları bulunur ve  $\alpha$  ve  $\beta$  sabit olmak üzere

$$R = \frac{\dot{y}}{\left(\frac{\alpha y(\dot{y} - 2y)^2 + \beta(\dot{y} - y)}{y^{1/3}}\right)^{3/2}}, \quad (30)$$

integrasyon çarpanı elde edilir.  $R$  ve  $S$  kullanılarak (19)-(20) denklemleri uygulanmasıyla

$$\bar{I} = \frac{2 y^{1/3} (\dot{y} - 2y)}{\beta \sqrt{\left(\frac{\alpha y(\dot{y} - 2y)^2 + \beta(\dot{y} - y)}{y^{1/3}}\right)}}$$

(2) denklemine ait bir ilk integral Prolle-Singer metodu ile elde edilmiş olur. Prolle-Singer metodu ile belirlenen ilk integraller  $\bar{I}$  notasyonu ile gösterilmiştir.

Şimdi, Prolle-Singer ve  $\lambda$ -simetri metotları arasındaki ilişki temel alınarak Bölüm 3.1 verilen durumlara göre elde edilen  $\lambda$ -simetrikleri ile null form  $\lambda = -S$  bağlantıya göre Prolle-Singer metodunun uygulamaları incelenecektir.

**Durum 1.** (22) denklemleri kullanılarak  $\lambda_1 = -S_1$  şeklinde alınır. Fakat integrasyon çarpanına karşılık gelen  $R$  fonksiyonu için bu defa  $A$  ve  $B$   $t$  ve  $y$ 'ye bağlı ve  $r$  sabit olmak üzere, ayrıca  $S^d$  her durum için null formunun paydasını göstermek üzere

$$R = \frac{S^d}{(A(t, y) + B(t, y)\dot{y})^r}, \quad (31)$$

ansatz ı temel alınarak değerlendirilecektir. Bu durumda  $S$  ve  $R$ 'ye bağlı (16)-(18) belirleyici denklemleri ancak  $r$  nin

bazı özel değerleri için sağlanmaktadır. Bu durumlar aşağıdaki gibidir:

$r = 3$  olmak üzere elde edilen  $R$  ve ilk integral  $I$

$$R_{11} = \frac{y\dot{y}}{(2\alpha y^{5/3} + \alpha\dot{y}y^{2/3})^3},$$

$$\bar{I}_{11} = \frac{y - \dot{y}}{\alpha y(\dot{y} - 2y)^2},$$

$r = 3/2$  ye karşılık gelen  $R$  ve ilk integral  $I$

$$R_{12} = \frac{y\dot{y}}{(-2\alpha y^{4/3} + \alpha\dot{y}y^{1/3})^{3/2}},$$

$$\bar{I}_{12} = \frac{2y(y - \dot{y})(\dot{y} - 2y)}{(\alpha y^{1/3}(\dot{y} - y))^{3/2}}.$$

**Durum 2.** (25) denklemine göre  $\lambda_2 = -S_2$  alınarak ve (31) ifadesi kullanılarak belirlenen  $R$  ve ilk integral  $I$

$$R_2 = y\left(-\frac{1}{4}(2e^{-t}\alpha + e^t\beta)\right) + 6(2e^{-t}\alpha + e^t\beta)y + (2e^{-t}\alpha + e^t\beta)\dot{y}^{-2},$$

$$\bar{I}_2 = 1/\left(\alpha\beta + \frac{\beta e^{2t}(2y - \dot{y})}{y - \dot{y}}\right),$$

şeklinde olur.

**Durum 3.**  $\lambda_3 = -S_3$  olması halinde aynı işlem algoritmalarının yapılmasıyla

$$R_3 = -\mu = y(e^{4(\frac{1}{r}-1)t}(e^{4t}\beta + \alpha y(\dot{y} - y))^{-r},$$

$$\bar{I}_3 = \frac{e^{4(\frac{1}{r}-1)t}(e^{4(\frac{1}{r}-1)t}(e^{4t}\beta + \alpha y(\dot{y} - y))^{1-r}}}{\alpha(r - 1)},$$

elde edilir.

**Durum 4.**  $\lambda_4 = -S_4$  iken yapılan işlemler sonucunda belirlenen ifadeler bir önceki duruma benzer olarak

$$R_4 = -\mu = y(e^{2(\frac{1}{r}-1)t}(e^{2t}\beta + \alpha y(\dot{y} - 2y))^{-r},$$

$$\bar{I}_3 = \frac{e^{2(\frac{1}{r}-1)t} (e^{2(\frac{1}{r}-1)t} (e^{2t} \beta + \alpha y (y - 2y))^{1-r}}}{\alpha (r - 1)},$$

şeklinde bulunur.

#### IV. SONUÇ VE DEĞERLENDİRME

Bu çalışma Riemann sıfırlarının spektral realizasyonunu tanımlayan bir model olan özel bir Hamiltonyen der'klemine karşılık gelen (2) denkleminin Prolle-Singer ve  $\lambda$ -simetri metotlarına yönelik uygulamalarını içermektedir. (2) denklemini literatürde yer alan birçok metotla kolayca integre edilebilir, nonlinearitesi çok yüksek olmayan bir denklem olsa da, burada farklı metotlarla daha genel ilk integralleri ve integrasyon çarpanları bulunmuştur. Belirlenen tüm ilk integraller  $D_t I = 0$  eşitliğini gerçekleştirmekte ve (2) denklemini bu şekilde sağlamaktadır. Elde edilen sonuçlar açısından (2) denkleminin  $\lambda$ -simetrisi daha önce literatürde yer almamaktadır ayrıca Prolle-Singer metodu ile belirlenen ilk integraller ve integrasyon çarpanları literatürde denklemlerle ilgili çalışmalar incelendiğinde oldukça genel formda belirlenmiştir [15-17].

(2) denklemini fiziksel anlamda oldukça önemli olup, Nucci'nin denklemini Lie simetrisi ile değerlendirmesi, aslında [11] de verilen kuantum yaklaşımını Lie simetrisi bakış açısıyla ele almaktır. Bu çalışma fiziksel anlamda literatürde böylesine yer almış (2) denkleminin farklı yaklaşımlarla, literatürden farklı ilk integrallerini ve integrasyon çarpanlarını sunmaktadır.

#### TEŞEKKÜR

Çalışmayı, dikkatle okuyup, uyarılarda bulunan hakemlere teşekkürü borç bilirim. İstanbul Teknik Üniversitesi doktora sonrası araştırmacı programına da ayrıca teşekkürlerimi sunarım.

#### KAYNAKLAR

- [1] Bluman, G.W. ve Kumei, S. (1989). Symmetries and Differential Equations, Springer-Verlag, New York.
- [2] Olver, P.J., (1986). Applications of Lie Groups to Differential Equations, Springer-Verlag.
- [3] Muriel, C. ve Romero, J.L. (2001). New methods of reduction for ordinary differential equations. *IMA Journal of Applied Mathematics*, 66(2), 111-125.
- [4] Muriel, C. ve Romero, J.L. (2009). First integrals, integrating factors and symmetries of second order differential equations. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 42(36).
- [5] Muriel, C. ve Romero, J.L. (2008). Integrating Factors and  $\lambda$ -Symmetries, *Journal of Nonlinear Mathematical Physics*, 15(3), 300-309.

- [6] Gün Polat G. ve Özer, T. (2017). New conservation laws, Lagrangian forms and exact solutions of modified-Emden equation, *Journal of Computational and Nonlinear Dynamics*, 12(4), 041001.
- [7] Gün G. ve Özer, T. (2013), First integrals, integrating factors and invariant solutions of the path equation based on Noether and  $\lambda$ -symmetries, *Abstract and Applied Analysis*, Article ID 284653.
- [8] Gün Polat G. ve Özer, T. (2016). On analysis of nonlinear dynamical systems via methods connected with  $\lambda$ -symmetry, *Nonlinear Dynamics*, 85(3), 1571-1595.
- [9] Chandrasekar, V. K., Senthilvelan, M. Lakshmanan, M. (2005). Extended Prolle-Singer method and integrability/solvability of a class of nonlinear n.th order ordinary differential equations, *Journal of Mathematical Physics*, 12(1), 184-201.
- [10] Mohanasubha, R., Chandrasekar, V.K., Senthilvelan, M. Lakshmanan, M. (2014). Interplay of symmetries, null forms, Darboux polynomials, integrating factors and Jacobi multipliers in integrable second-order differential equations, *Proc. R. Soc. A*, 470(2163), 20130656.
- [11] Berry, M.V. (2008). Three quantum obsessions, *Nonlinearity*, vol. 21, T19-T26.
- [12] Berry, M.V. ve Keating, J.P. (1999).  $H = xp$  and the Riemann zeros, in *Supersymmetry and Trace Formulae: Chaos and Disorder* ed J P Keating and I V Lerner, Plenum, New York, 355-367.
- [13] Berry, M.V. ve Keating, J.P. (2011). A compact hamiltonian with the same asymptotic mean spectral density as the Riemann zeros, *J. Phys. A: Math. Theor.*, 44, 285000.
- [14] Sierre G. ve Rodriguez-Laguna, J. (2011). The  $H = xp$  model revisited and the Riemann zeros, *Phys. Rev. Lett.*, 106, 200201.
- [15] Nucci, M.C. (2014). Spectral realization of the Riemann zeros by quantizing  $H = w(x)(p + \frac{x}{p})$ : the Lie-Noether symmetry approach, *Journal of Physics*, 482.
- [16] Yaşar E. ve Yıldırım, Y. (2015). A procedure on the first integrals of second-order nonlinear ordinary differential equations, *Eur. Phys. J. Plus.*, 130(240).
- [17] Yıldırım, Y. (2015). İkinci Mertebe Adi Diferansiyel Denklemlerin İlk İntegralleri, *Yüksek Lisans Tezi*, Uludağ Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü.
- [18] Muriel, C. ve Romero, J.L. (2003).  $C^\infty$  symmetries and reduction of equations without Lie point symmetries, *J. Nonlinear Math. Phys.*, 13(1), 167-188.
- [19] Prolle M. ve Singer, M. (1983). Elementary First Integrals of Differential Equations, *Trans. Am. Math. Soc.*, 279(1), 215-229.
- [20] Duarte, L.G.S, Duarte, S.E.S, da Mota, L.A.C.P. (2001). Solving second-order ordinary differential equations by extending the Prolle-Singer method, *Journal of Physics A-Mathematical and General*, 34(14), 3015-3024.



# Türkiye’de Metal Sektöründe Meydana Gelen İş Kazalarının Analizi

## Analysis of Work Accidents Caused in the Metal Sector in Turkey

Esmâ Nur GÜLLÜOĞLU<sup>1,2</sup> , Arif Nihat GÜLLÜOĞLU<sup>1</sup> 

<sup>1</sup> Marmara Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, İş Güvenliği Anabilim Dalı, 34722, İstanbul, Türkiye

<sup>2</sup> İstanbul Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Tekstil Mühendisliği Anabilim Dalı, 34469, İstanbul, Türkiye

### Öz

Metal sektörü dünyada olduğu kadar ülkemizde de önemli bir sektör konumundadır. Üstün özellikleri nedeniyle, teknolojik gelişmelere bağlı olarak kullanım alanları hızla yaygınlaşan metaller endüstride geniş bir uygulama alanına sahiptir. Bütün sanayilerin lokomotifini temsil eden metal sektörü, barındırdığı iş gücü ve ekonomik büyüklüğü bakımından Türkiye’nin en önemli sanayi kolu durumundadır. Günümüzde her alanda yaşanan hızlı değişim ile üretim ve rekabet artmakta, iş kazaları sonucu çalışanların sağlığına ve iş güvenliğine yönelik tehlikelerde çoğalmaktadır. Ülkemizde yaşanan iş kazaları sayısı bakımından metal sanayi iş kazası yoğunluğunun en yüksek olduğu sektördür. Bu çalışmada 2007-2016 yılları arasında Türkiye genelinde meydana gelen iş kazaları ile metal sektöründe yaşanan kazalara ait veriler incelenerek analiz edilmiştir. Ayrıca, Türkiye metal sektörü iş kazaları verileri Avrupa birliği üye ülkeleri ile karşılaştırılmıştır.

**Anahtar Kelimeler:** Metal Sektörü, İş Güvenliği, İş Kazaları, Kaza İstatistikleri, İstihdam

### Abstract

Metal sector is an important sector in our country as well as in the world. Due to their superior properties, the use of metals which are rapidly spreading due to technological developments has a wide application area in industry. Metals sector, which are the locomotive of the whole industry, which is keeping in the case of the labor force and economic size in terms of Turkey’s most important industries. Today, with the rapid change experienced in every field, production and competition increase, and as a result of occupational accidents, and the risks to the health of workers and work safety are increasing. In terms of the number of occupational accidents in our country, metal industry is the sector with the highest occupational accident intensity. In this study, between the years 2007-2016 were analyzed by examining the data on occupational accidents in Turkey and in the metal industry. Besides, Turkey metal sector accidents at work were compared with data from member countries of the European Union.

**Keywords:** Metal Sector, Occupational Safety, Work Accidents, Accident statistics, Employment

### 1.GİRİŞ

İş Sağlığı ve güvenliği, insan hayatı söz konusu olduğunda küresel boyutta bir sorundur. Çalışma hayatının en önemli sorunu olan iş kazaları ve meslek hastalıklarını önlemede gerekli tedbirleri almak bir insanlık görevidir. Uluslararası Çalışma Örgütü (ILO) verilerine göre her yıl işle ilgili kaza ve hastalıklar sonucu 2,78 milyondan fazla kişi hayatını kaybetmektedir. Bu ise günde yaklaşık 7,6 bin kişinin iş kazaları ve meslek hastalıkları nedeniyle öldüğünü göstermektedir. Ayrıca her yıl dünyada 374 milyon kişinin ölümcül olmayan iş kazası ve meslek hastalığına maruz kaldığı ve bunların çoğunun işten uzun süreli geçici işgücü kaybıyla sonuçlandığı bildirilmektedir. İş kazaları ve meslek hastalıklarının yarattığı ekonomik yük, her yıl küresel gayri safi milli hasılanın (GSMH) %3,94’ünü teşkil etmektedir [1].

Metal sektörü, Gayri Safi Milli Hasılanın %3'üne, endüstriyel sektörlerdeki toplam istihdamın %2'sine ve toplam ihracatın %12' sine sahip bulunmaktadır. Bu yönü ile metal sektörü en çok ihracat yapan sektörler arasında 3'üncü sırada yer almaktadır [2].

Ana metal sanayi sektörü Türkiye'nin kalkınmasına katkı sağlayan en önemli sektörlerden biri olarak öne çıkmakta ve dış ticaret açısından rekabet gücü sıralamasına göre diğer 34 ana sektör içinde 9'uncu sırada yer almaktadır [3]. Demir çelik sektörü, 2017 yılında 18,3 milyon ton demir çelik ürünü ihracatı yaparak, ülkemize 13.8 milyar dolar gelir ile toplam ihracatımızın %8,5'ini teşkil etmektedir. Sektör, 2017 yılı itibarıyla net ihracatçı konumundadır. 2017 yılı verilerine göre çelik üretiminde dünyadaki 65 çelik üreten ülke arasında 8'inci, Avrupa'da ise Almanya'dan sonra 2'nci sırada bulunan ülkemiz, Ortadoğu ve Kuzey Afrika'nın en büyük çelik üreticisi konumundadır. Sektör, 45.000 kişiye istihdam sağlamaktadır. Demir çelik sektörü, diğer sektörlerle girdi sağlayan yapısı ile lokomotif rol üstlenmektedir [4].

Sektörün teknolojik açıdan sürekli gelişme göstermesi, dünya ticaretindeki payının yükselişi, büyük işgücü istihdam etmesi, dünya genelinde toplam ekonomik faaliyetlerin artması ve ülke ekonomilerindeki büyümenin bir yansıması olarak demir çelik ürünleri talebinin her geçen gün büyük bir hızla artması dünya toplam çelik üretimini de artırmaktadır [2].

Çalışma hayatında mevcut sektörler, tehlike ve riskler açısından değerlendirildiğinde metal, maden, inşaat ve tekstil sektörü ön sıralarda yer almaktadır. Metal sektörü, yoğun bir rekabetin yaşandığı ve esnek çalışma biçimlerinin yaygın olarak kullanıldığı demir – çelik, döküm, ham çelik, ferro alaşımlar, demir dışı metaller – alüminyum ve bakır başta olmak üzere ana sanayi kollarını içinde barındırması sebebiyle ülkemizde motor sektör olma özelliğini taşımaktadır. Yapısı gereği içerisinde bulundurduğu risk ve tehlikeler nedeniyle bilgi, deneyim, uzmanlık ve sürekli denetim gerektiren ağır ve tehlikeli sektörlerin başında gelmektedir [5].

Metal sektöründe yaygın olarak cevher ve hurda eritme ve arıtma, döküm işleri, sıcak veya soğuk dövme, presleme, kaynaklı birleştirme ve metal kesme, sinterleme, talaşlı imalat ve tornacılık gibi temel metal işleme teknikleri uygulanmaktadır. Son ürünü elde edinceye kadar taşlama, parlatma, zımparalama, yüzey işleme ve kaplama işlemleri (elektro-kaplama, galvanizleme, ısıl işlem, eloksal, toz boya ve benzeri) gibi çeşitli teknikler de kullanılmaktadır [6]. Metalin işlenmesi sırasında çeşitli zararlı tozlar, gazlar, dumanlar ve diğer kimyasallara maruziyet, sıcak stresi, gürültü, vibrasyon, sıkışma, kesici ve delici uçlardan kaynaklı yaralanmalar, parlama, iyonize ve kızılötesi radyasyon, elektrik

tehlikeleri, sırt ve üst ekstremitte hasarları, göz ve vücut yaralanmaları, yanıklar, tekrarlanan gerilme hasarları, akciğer hastalıkları, kas iskelet sistemi problemleri, solunum, cilt ve sistemik toksik etkileri ile oldukça sık karşılaşılır [7].

Yapılan bir çalışmada, metal işleme endüstrisindeki güvenlik önlemlerinin zamanla artırılması sonucu olarak, kaza göstergeleri değerlerinin azalan eğilimde gerçekleşmekte olduğu ifade edilmektedir. Yaz aylarında ve gece vardiyalarında kaza sayılarında artış olduğunu, genelde kazaların yaklaşık %62'sinin uzuvları etkilediği, %40,9'unun kesik sıyrık gibi yüzeysel yaralanmalara neden olduğu, %45,5'in yanlış hareketler ve küçük aletlerin kullanımından, %62,5'inde ise makinelerin kazalara katkıda bulunduğu belirtilmektedir. Yaralanma nedenleri ile ilgili olarak genç ve daha az deneyime sahip çalışanlar, sigara içme ve çiğneme alışkanlığı olanlar ile obez çalışanlar gibi bazı yüksek riskli grupların kaza riskini arttırdığı vurgulanmaktadır [8].

Türkiye İşverenleri Metal Sanayicileri Sendikası (MESS) iş sağlığı ve güvenliği kültürünü yaygınlaştırmak amacıyla her yıl üyeleri arasında gerçekleştirdiği İş Kazaları ve Meslek Hastalıkları İstatistikleri araştırmasının 2016 yılı sonuçlarına göre iş kazaları en fazla Mart ayında meydana gelmiştir. Gün bazında kaza en fazla Salı günleri yaşanırken, saat bazında 3'üncü iş saatinde meydana gelmiştir. Kazalı çalışanların dağılımında ise %66'sını evlilerin oluşturduğu, yaş ve işyerindeki kıdem açısından %28'inin 2-4 kıdem yılı aralığında, %48'inin ise 25-35 yaş aralığında olduğu belirlenmiştir [9].

2016 yılı istatistiklerine göre 20.616 iş kazası sayısı ile fabrikasyon metal ürünleri imalatı (makine ve teçhizat hariç) tüm gruplar içinde en çok kaza yaşanan faaliyet grubu olarak karşımıza çıkmaktadır. Bu sektörün en çok iş kazası yaşanan sektör olmasının sebepleri olarak, yoğun bir üretim alanını kapsamaması, tam otomasyonla vardiya usulü çalışılması, yoğun olarak makinelerle çalışılmasından kaynaklı arıza ve teknik hataların sık yaşanması gösterilmektedir [10].

Metal çalışanları üzerinde yapılan diğer bir çalışmada, iş kazalarının nedeni, %44 yetersiz kişisel koruyucu ekipman kullanımı, %38 dikkatsizlik, %18 kişisel nedenler ile makine ve tezgahlarda güvenlik önlemlerinin alınmaması olarak belirtilmiş, iş kazalarının çoğunlukla kişisel koruyucu ekipmanın kullanımındaki eksiklikten ve yetersiz mesleki eğitimden kaynaklandığı ortaya konulmuştur [11].

Norveç'te metal sektörü çalışanları arasında yapılan bir çalışmada göz yaralanmalarına karşı göz korumasının kullanılması zorunlu hale getirilmesi ile göz yaralanmalarını önlemede büyük katkısı olduğu tespit edilmiştir [12].

Metal sektöründe kişisel koruyucu donanımların kullanımını konusunda yapılan çalışmada yüz koruyucuları, göz

ve işleme koruyucuları ve ayak koruyucuları kullananların oranının diğer sektörler göre daha fazla olduğu tespit edilmiştir. Çalışmaya katılanların anket sonuçları değerlendirildiğinde; %92,6'sı işyerindeki risklerin farkında olduklarını, kişisel koruyucu donanım (KKD) seçiminde görüşlerinin alınma oranının %91,2 olduğu; KKD'lerin muhafazası ve saklanması özel bir dolap bulunma oranının %26,5 olduğu, çalışanların %95,6 'lık bölümü KKD kullanımının koruma sağladığına inandıklarını, KKD'nin doğru ve etkin kullanımına yönelik katılımcıların %94,1 oranında ilgili eğitimin alındığı ancak KKD'ların kullanım kılavuzunun okunma düzeyinin %52,9 kaldığı tespit edilmiştir. Ancak çalışma kapsamında gerçekleştirilen saha ziyaretlerinde anket sonuçlarında görüldüğü gibi daha düşük bir bilinç düzeyi ve kullanım oranı gözlemlendiği belirtilmiştir [13].

Bu çalışmada 2007 – 2016 yılları arasında SGK tarafından yayınlanan istatistikler incelenerek elde edilen veriler ile Türkiye geneli ve metal sektöründe meydana gelen iş kazalarının değerlendirilmesi, işyeri ve çalışan sayılarına göre ve uluslararası kabul görmüş ölçütlere göre gerekli hesaplamalar yapılarak analiz edilmiştir. İş teftişleri verilerine göre Türkiye geneli ve metal sektöründeki iş sağlığı ve güvenliği teftişleri de incelenmiştir. Metal sektöründe yaşanan iş kazası sıklık değeri Avrupa Birliği ülkeleri ile karşılaştırılmıştır.

## II.MATERYAL ve YÖNTEM

Bu çalışmada SGK tarafından her yıl yayınlanan istatistik yıllıkları kullanılarak 2007 – 2016 yılları arasında (10 yıllık veriler) Türkiye genelinde faaliyet gösteren sektörlerin toplamı ile metal sektöründe meydana gelen iş kazalarına ait istatistiksel bilgiler ve veriler uluslararası kabul görmüş parametreler açısından incelenerek analiz edilmiştir. Elde edilen veriler ile Uluslararası Çalışma Örgütü (ILO), Avrupa Birliği İstatistik Ofisi (EUROSTAT) ve Sosyal Güvenlik Kurumu (SGK) tarafından belirlenen genel kaza sıklığı, ölümlü kaza sıklığı, sürekli iş görmezlik kaza sıklığı, geçici iş görmezlik kaza sıklığı, standardize iş kazası oranı, iş kazası sıklık hızı ve iş kazası ağırlık hızı, ölçütlerine göre hesaplamalar yapılarak son 10 yıllık periyotta Türkiye geneli ve metal sektöründe meydana gelen değişimlerin durumu hem grafiksel hem de tablolar yardımı ile incelenerek değerlendirilme yapılmaya çalışılmıştır.

Metal sektörü, Avrupa Birliği İstatistik Ofisi tarafından oluşturulan NACE Rev.2 Altılı Ekonomik Faaliyet Sınıflamasına göre 01-99 arasındaki rakamlarla iki haneli olarak ifade edilen sınıflamada; 24-Ana metal sanayi sektörü ve 25-Fabrikasyon metal ürünleri imalatı (makine ve teçhizat hariç) sektörü olarak gruplandırılan bölümlerin toplamı

olarak değerlendirilmiş ve çalışmada bu alanlardaki veriler kullanılmıştır. 26/12/2012 tarihli ve 28509 sayılı Resmi Gazete' de yayımlanarak yürürlüğe giren "İş Sağlığı ve Güvenliğine İlişkin İşyeri Tehlike Sınıfları Tebliği"ne göre metal sektöründeki işyerlerinin ekonomik faaliyet alanlarına ilişkin tehlike sınıfları ve alt sektör sayıları Tablo 1'de verilmiştir [14].

**Tablo 1.** Metal Sektörü Ekonomik Faaliyet Sınıflaması ve Alt Sektörler Bazında Tehlike Sınıfları Dağılımı[14]

Ekonomik Faaliyet Sınıflaması (NACE Rev. 2)	Alt Sektörler Bazında Tehlike Sınıfları Dağılımı		
	Az Tehlikeli	Tehlikeli	Çok Tehlikeli
<i>24-Ana Metal Sanayi</i>	-	12	32
24.1 Ana demir ve çelik ürünleri ile ferro alaşımların imalatı	-	-	10
24.2 Çelikten tüpler, borular, içi boş profiller ve benzeri bağlantı parçalarının imalatı	-	1	1
24.3 Çeliğin ilk işlenmesinde elde edilen diğer ürünlerin imalatı	-	4	-
24.4 Değerli ana metaller ve diğer demir dışı metallerin imalatı	-	7	16
24.5 Metal döküm sanayii	-	-	5
<i>25-Fabrikasyon metal ürünleri imalatı (makine ve teçhizat hariç)</i>	-	53	13
25.1 Metal yapı malzemeleri imalatı	-	6	-
25.2 Metal tank, rezervuar ve muhafaza kapları imalatı	-	4	1
25.3 Buhar jeneratörü imalatı, merkezi ısıtma sıcak su kazanları (boylerleri) hariç	-	1	1
25.4 Silah ve mühimmat (cep-hane) imalatı	-	-	3
25.5 Metallerin dövülmesi, preslenmesi, baskılanması ve yuvarlanması; toz metalürjisi	-	1	1
25.6 Metallerin işlenmesi ve kaplanması; makede işleme	-	2	4
25.7 Çatal-bıçak takımı ve diğer kesici aletler ile el aletleri ve genel hırdavat malzemeleri imalatı	-	11	-
25.9 Diğer fabrikasyon metal ürünlerin imalatı	-	28	3

Aynı sektördeki çalışan sayısı her ülkede farklılık göstermektedir. Bu nedenle ülkelerin ekonomik faaliyetlerine

ilişkin istatistiki bilgilerinin birbirleri ile anlamlı karşılaştırma yapılabilmesi için istihdam boyutundaki farklılıkların, çalışan sayısındaki değişikliklerin ve çalışma saatlerindeki çeşitlilik gibi faktörlerin dikkate alınması gerekir. Önemli olan, meydana gelen iş kazası sayısı değil incelenen çalışma gurubundaki oranıdır. Bu farklılıkları dikkate alan, hem ulusal hem de uluslararası düzeydeki bilgilerin karşılaştırılmasında kullanılan oranlar, ILO, EUROSTAT ve SGK tarafından belirlenen aşağıdaki ölçütlere göre hesaplanarak [15-26] tablolar ve eğrisel değişim grafikler ile yorumlanmaya çalışılmıştır.

- **Kaza Sıklığı:** Bir yıl içerisinde, istihdamda yer alan her 100.000 çalışan başına düşen iş kazası sayısı olarak tanımlanmaktadır. Bu çalışmada, oluşan kazaların büyüklüğünü değerlendirebilmek için iş kazası sonucu oluşan; genel iş kazası, geçici iş görmezlik, sürekli iş görmezlik ve ölümlü iş kazası olmak üzere farklı kaza sıklığı ölçütleri hesaplanmıştır.
- **Standardize İş Kazası Oranı:** Bir yıl içerisinde, incelenen faaliyet kolunda meydana gelen iş kazası sayısının o faaliyet kolundaki beklenen kaza sayısına oranının yüzdesel ifadesi olarak tanımlanmaktadır.
- **İş Kazası Sıklık Hızı:** Bir yıl içerisinde çalışılan her 1.000.000 iş saatine karşılık gelen kaza sayısı olarak tanımlanmaktadır.

- **İş Kazası Ağırlık Hızı:** Bir yıl içerisinde çalışılan her 1.000.000 saatte iş kazası nedeniyle kaybedilen iş günü sayısı olarak tanımlanmaktadır.

Bu çalışmada 2007 – 2016 yılları arasında metal sektörünün işyeri sayısı ve çalışan sayısı bakımından işyeri büyüklüğüne göre dağılımı SGK tarafından yayınlanan istatistiki bilgiler ile değişim sonuçları tablo ve grafikler halinde değerlendirilmeye çalışılmıştır. Ayrıca Çalışma ve Sosyal Güvenlik Bakanlığı'nca yayınlanan "Çalışma Hayatı İstatistikleri"nde yer alan İş Teftişleri verilerine göre [27-33], Türkiye geneli ve metal sektöründe yıllar bazında yapılan iş sağlığı ve güvenliği teftiş sayıları işyeri ve çalışan sayısına göre incelenerek değerlendirilmiştir.

### III.BULGULAR ve TARTIŞMA

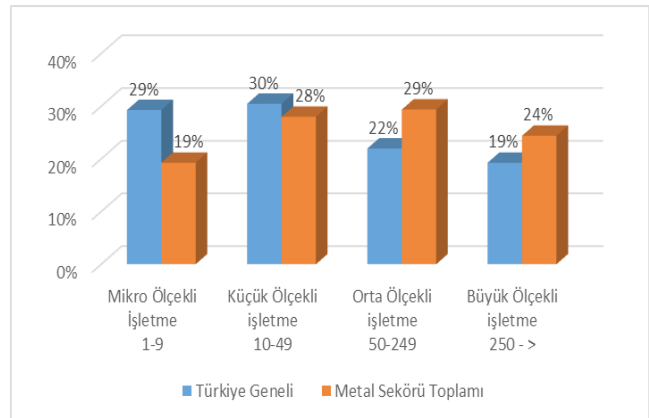
2007 – 2016 yılları arasında Sosyal Güvenlik Kurumunun yıllık istatistiki verilerinden elde edilen bilgilere göre, Türkiye geneli ve metal sektöründe istihdam edilen sigortalı çalışan sayıları Tablo 2'de verilmiştir. Tüm sektörlerin toplamını veren Türkiye geneli çalışan sayısında sürekli artış gözlenirken, ana metal sanayinde 2012 yılı ve sonrasında azalış göstermektedir. Fabrikasyon metal ürünleri imalatında ise genelde artış olmasına rağmen yıllar içinde değişiklik göstermektedir.

**Tablo 2.** Sigortalı Çalışan Sayıları [17-26]

Yıllar	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016
Ana metal sanayi	88.176	118.460	118.109	145.014	158.175	164.795	159.842	151.253	149.301	145.268
Fabrik.Metal Ürün. (Mak.Tec.Har)	307.991	354.262	324.756	323.651	357.757	357.841	376.076	395.114	393.638	383.438
Metal Sektörü Topl.	396.167	472.722	442.865	468.665	515.932	522.636	535.918	546.367	542.939	528.706
Türkiye Geneli	8.505.390	8.802.989	9.030.202	10.030.810	11.030.939	11.939.620	12.484.113	13.240.122	13.999.398	13.775.188

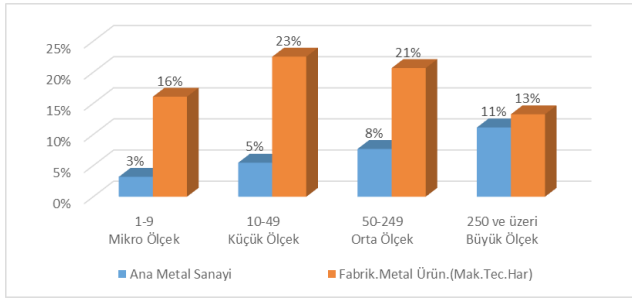
Şekil 1'de çalışan sayıları bakımından işyeri büyüklüğüne göre metal sektöründeki istihdam Türkiye geneli ile karşılaştırıldığında; sektördeki istihdamın %53'ünün çalışan sayısı elliden fazla olan orta ve büyük ölçekli işyerlerinden sağlanırken bu oranın Türkiye genelinde %41 olduğu görülmektedir.

Metal sektöründe istihdamın alt sektör dağılımı Şekil 2'de incelendiğinde, çalışanların %73'ü fabrikasyon metal ürünleri imalatı sanayinde, %27'si ise ana metal sanayinde yer almaktadırlar. Fabrikasyon metal ürünleri imalatı sanayinde en büyük istihdam küçük ve orta ölçekli işyerlerinden sağlanırken ana metal sanayinde istihdam orta ve büyük ölçekli işyerlerinde yoğunlaşmaktadır.



**Şekil 1.** Çalışanların İşyeri Büyüklüğüne Göre Dağılımı [26]

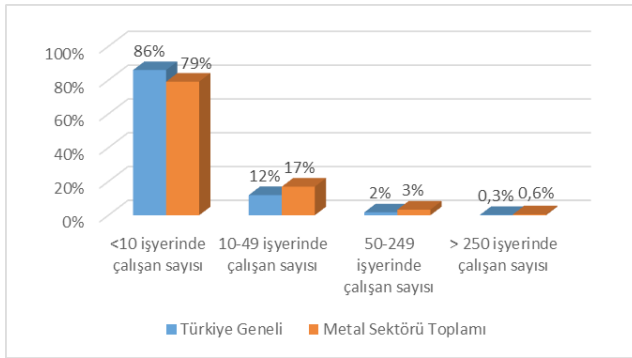




Şekil 2. Metal Sektöründe İstihdam Dağılımı [26]

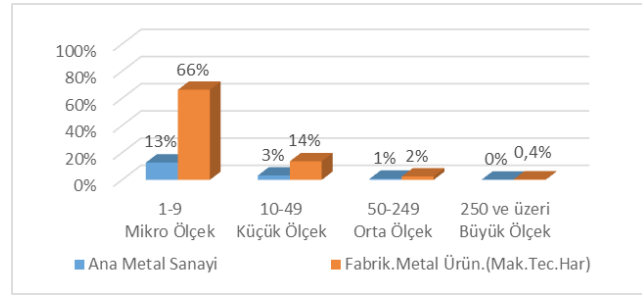
İşyeri sayıları bakımından, Sosyal Güvenlik Kurumunca yayımlanan yıllık istatistik verilerine göre 2007 – 2016 yılları arasında fabrikasyon metal ürünleri imalatı sanayinde son yıllarda artış gözlenirken, ana metal sanayinde 2012 yılından itibaren azalma gözlenmektedir. Türkiye geneli işyeri sayılarında ise sürekli artış görülmektedir (Tablo 3).

İşyerlerinin çalışan sayıları bakımından büyüklüklerini gösteren grafik Şekil 3’de verilmiştir. Buna göre Türkiye genelindeki işyerlerinin %98’i, metal sektördeki işyerlerinin ise %96’sı çalışan sayısı elliden az olan mikro ve küçük ölçekli işletme niteliğindedir. Metal sektörde bulunan işletmelerin %79’u bünyesinde 1-9 kişi çalışanı bulunan mikro ölçekli işletme niteliğinde iken, %17’si 10-49 arasında çalışanı bulunan küçük ölçekli işletme niteliğindedir.



Şekil 3. Çalışan sayısına göre işyeri büyüklüğü dağılımı [26]

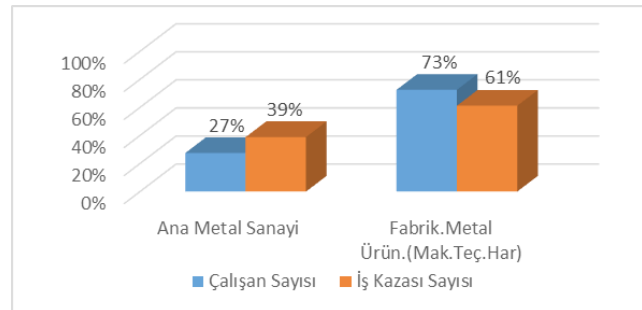
Metal sektörde işletme sayısı Şekil 4’de görüldüğü üzere en fazla fabrikasyon metal ürünleri imalatı sektöründe olup, sektör içerisindeki payı %82’dir. Bunun da %66’sı yapısında 1-9 çalışanı bulunan mikro ölçekli işletmelerden oluşmaktadır.



Şekil 4. Metal Sektöründe İşyeri Sayılarının Dağılımı [26]

2007 – 2016 yılları arasında Türkiye genelinde tüm sektörler toplamı ve metal sektörde çalışan sayısı, iş kazası sayıları ve hesaplanan iş kazası sıklığı ile yıllar bazındaki yüzdesel değişimleri Tablo 4’de verilmiştir. Tablo 4 incelendiğinde, verilen istatistiki bilgilere göre çalışan sayısında son 10 yılda Türkiye genelinde belli bir düzende %61,95’lik artış gerçekleşirken, metal sektörde dalgalanmalar göstererek %74,93’lük artış görülmektedir. 2016 yılı için metal sektörü 528.706 çalışanı ile tüm ülke işgücünün yaklaşık %3,84’sini istihdam ederken, 33.697 kaza sayısı ile ülke genelinin %11,78 ine tekabül etmektedir. Türkiye geneli ve metal sektörde 2011 yılına kadar iş kazası sayılarında genelde bir azalma görülmesine rağmen 2013 yılında metal sektörde % 132 ve Türkiye genelinde % 155’lik bir artış gerçekleşmiştir.

Metal sektörde çalışan sayıları ve iş kazaları Şekil 5 de görüleceği üzere kendi içinde değerlendirildiğinde, Ana Metal Sanayi dalında %27 çalışan olmasına rağmen kaza oranı %39 olarak gerçekleşmiştir.



Şekil 5. Metal Sektöründe İş Kazaları Dağılımı [26]

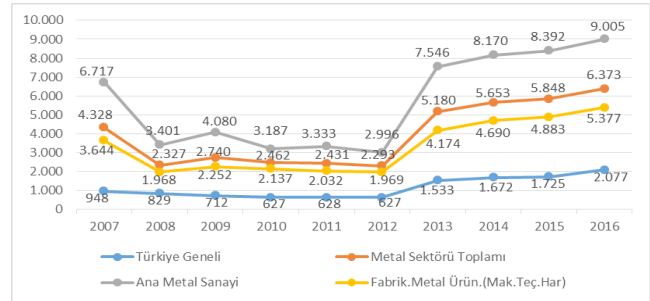
**Tablo 3.** Sektörlerde İşyeri Sayıları [17-26]

Yıllar	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016
Ana Metal Sanayi	2.437	6.054	7.046	8.612	9.059	9.063	8.918	7.830	7.607	7.270
Fabrik.Metal Ürün. (Mak.Tec.Har)	27.483	34.976	32.935	29.492	30.546	31.038	32.348	35.113	35.379	35.209
Metal Sektörü Topl.	29.920	41.030	39.981	38.104	39.605	40.101	41.266	42.943	42.986	42.479
Türkiye Geneli	1.116.638	1.170.248	1.216.308	1.325.749	1.435.879	1.538.006	1.611.292	1.679.990	1.740.187	1.749.240

**Tablo 4.** İş Kazası Sıklığı [17-26]

YILLAR	Türkiye Geneli						Metal Sektörü					
	Çalışan Sayısı	Değiş. %'si	İş Kazası Sayısı	Değiş. %'si	İş Kazası Sıklığı	Değiş. %'si	Çalışan Sayısı	Değiş. %'si	İş Kazası Sayısı	Değiş. %'si	İş Kazası Sıklığı	Değiş. %'si
2007	8.505.390		80.602		948		396.167		17.147		4.328	
2008	8.802.989	3%	72.963	-9%	829	-13%	472.722	19%	11.000	-36%	2.327	-46%
2009	9.030.202	3%	64.316	-12%	712	-14%	442.865	-6%	12.133	10%	2.740	18%
2010	10.030.810	11%	62.903	-2%	627	-12%	468.665	6%	11.539	-5%	2.462	-10%
2011	11.030.939	10%	69.227	10%	628	0%	515.932	10%	12.540	9%	2.431	-1%
2012	11.939.620	8%	74.871	8%	627	0%	522.636	1%	11.983	-4%	2.293	-6%
2013	12.484.113	5%	191.389	156%	1.533	144%	535.918	3%	27.760	132%	5.180	126%
2014	13.240.122	6%	221.366	16%	1.672	9%	546.367	2%	30.886	11%	5.653	9%
2015	13.999.398	6%	241.547	9%	1.725	3%	542.939	-1%	31.750	3%	5.848	3%
2016	13.775.188	-2%	286.068	18%	2.077	20%	528.706	-3%	33.697	6%	6.373	9%

Kaza Sıklığının yıllara göre değişimini gösteren grafik Şekil 6'da verilmektedir. Buna göre Türkiye geneli ve metal sektöründe 2012 yılına kadar kaza sıklığında yıllar bazında genelde azalma gözlenirken bu tarihten sonraki yıllarda ciddi artışlar görülmektedir. 2012 yılında metal sektöründe çalışan her 100.000 kişiden yaklaşık 2.293'ü iş kazasına maruz kalırken 2016 yılında bu değer yaklaşık üç kat artarak 6.373 çalışan iş kazasına maruz kalmıştır. Yine benzer şekilde Türkiye genelinde 2012 yılında 627 çalışan iş kazasına maruz kalırken 2016 yılında 2.077 çalışan iş kazasına uğramıştır. Metal sektöründeki kaza sıklık değerleri Türkiye genelinin çok üstünde olmakla beraber kaza sıklığı en çok ana metal sanayi alt sektöründe yaşanmıştır. İş kazası sayısındaki artışın 2012 yılında yayımlanan İş Sağlığı ve Güvenliği Kanunu ile yakından ilişkisi vardır. Yayımlanan bu kanunun uygulamasında, iş kazası bildirim formunun elektronik ortamda alınmaya başlanması ile iş kazası geçiren ve bildirim yapılan tüm sigortalı sayılarına ait veriler yayımlanmaya başlamıştır. Buna karşın 2012 ve öncesi yılları kapsayan uygulamada, iş kazası geçiren sigortalı sayılarına ait istatistikler verilirken ödemesi yapıp kapatılan iş kazası vaka sayıları esas alınmaktaydı [23].

**Şekil 6.** İş Kazası Sıklığı Dağılımı [17-26]

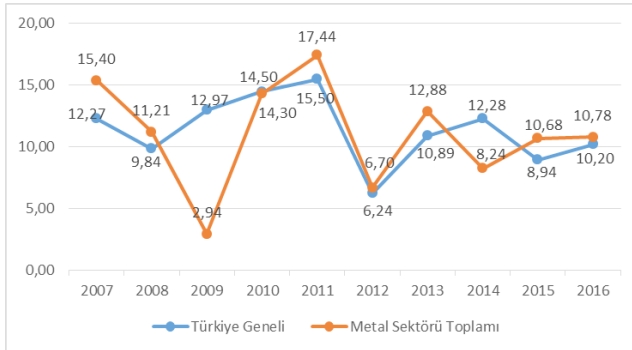
2007 – 2016 yılları arasında Türkiye geneli tüm sektörler toplamında ve metal sektöründe iş kazaları sonucu meydana gelen ölüm sayıları, sürekli iş göremezlik sayıları ve geçici iş göremezlik süreleri Tablo 5'de verilmiştir. Türkiye genelinde ve metal sektöründe ölüm sayıları yıllar bazında değişiklik gösterirken, 2014 yılından sonra sürekli iş göremezlik sayısı ve geçici iş göremezlik sürelerinde dikkat çekici bir artış olmuştur. İş kazaları nedeniyle metal sektöründe son on yılın ortalamasına göre her yıl 55 çalışan hayatını kaybederken 230 çalışan ömür boyu sakat kalmış, 321.903 işgünü kaybı yaşanmıştır. Metal sektörünün Türkiye geneli sektörler toplamı içindeki ortalama payı ölüm sayısında yaklaşık %4 iken sürekli iş göremezlik sayısı ve geçici iş göremezlik süresi içindeki payları sırasıyla % 11 ve % 15'dir.

**Tablo 5.** Ölüm, Sürekli İş Göremezlik ve Geçici İş Göremezlik İstatistikleri [17-26]

YILLAR	Ölüm Sayısı			Sürekli İş Göremezlik Sayısı			Geçici İş Göremezlik Süresi (gün)		
	Türkiye Geneli	Metal Sektörü	Oran %	Türkiye Geneli	Metal Sektörü	Oran %	Türkiye Geneli	Metal Sektörü	Oran %
2007	1.043	60	6%	1.550	182	12%	1.934.980	344.738	18%
2008	865	53	6%	1.452	146	10%	1.855.980	237.141	13%
2009	1.171	13	1%	1.668	126	8%	1.572.106	270.777	17%
2010	1.444	67	5%	1.976	185	9%	1.502.871	242.909	16%
2011	1.700	90	5%	2.093	202	10%	1.757.422	278.208	16%
2012	744	35	5%	2.036	202	10%	1.647.127	229.695	14%
2013	1.360	69	5%	1.660	208	13%	2.357.505	371.460	16%
2014	1.626	45	3%	1.421	184	13%	2.065.962	329.018	16%
2015	1.252	58	5%	3.433	395	12%	2.992.070	445.767	15%
2016	1.405	57	4%	4.447	465	10%	3.453.702	469.314	14%
Ortalama	1.261	55	4%	2.174	230	11%	2.113.973	321.903	15%

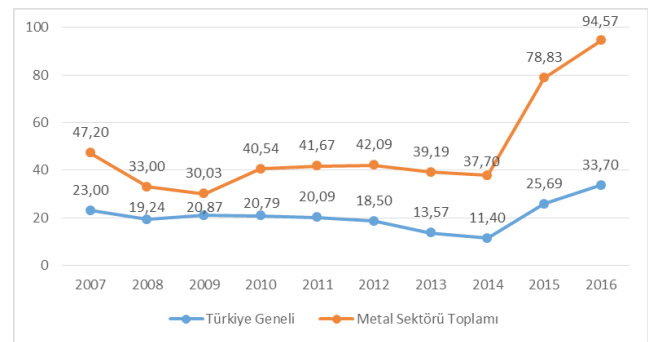
Çalışan sayısına oranla iş kazası sayısı ve sonuçları bakımından değerlendirildiğinde metal sektöründeki kazaların genelde orta şiddetli olduğu söylenilebilir.

Şekil 7’de verilen ve her 100.000 çalışana karşılık ölüm sayılarını belirleyen Ölümlü Kaza Sıklığı incelendiğinde, özellikle 2012 yılında belirgin bir düşüşün olduğu görülmektedir. 2016 yılında Türkiye genelinde her 100.000 çalışandan yaklaşık 10 kişi hayatını kaybederken metal sektöründe de 10 kişi yaşamını yitirmektedir. Bu da sektörde yaşanan ölüm vakaları sayısının Türkiye geneli ile benzer olduğunu göstermektedir.

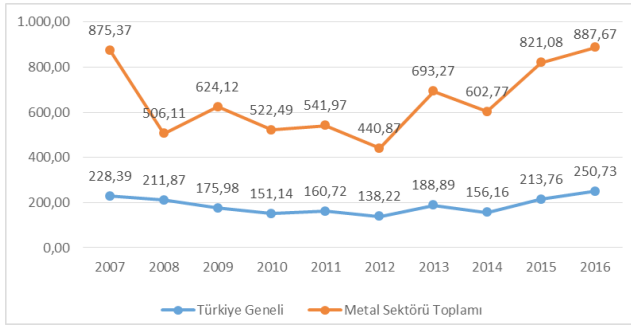
**Şekil 7.** Ölümlü Kaza Sıklığı Dağılımı [17-26]

Meydana gelen iş kazası ya da oluşan meslek hastalıkları neticesinde çalışanların meslekte kazanma gücünün en az % 10 oranında azalmış olması halinde sürekli iş göremezlik durumu ortaya çıkmaktadır. İstatistik verilerinden elde edilen bilgilere göre hesaplanan Sürekli İş Göremezlik Kaza Sıklığı Türkiye geneli ve metal sektörü için Şekil 8’de verilmiştir. Grafik incelendiğinde Türkiye geneli ve metal sektöründe

2012 yılından 2014 yılına kadar sürekli iş göremezlik kaza sıklığında dikkate değer bir iyileşmenin olduğu gözlenmektedir. 2014 yılından sonra ise her iki değerde yaklaşık %150-200 oranında ciddi bir artış olmuştur. Şöyleki 2014 yılında metal sektöründe çalışan her 100.000 kişiden yaklaşık 38’i iş kazası sonucu sürekli iş göremez hale gelirken, 2016 yılında bu değer 95’e yükselmiştir. Türkiye genelinde ise 11 olan sürekli iş görmez sayısı 34’e yükselmiştir. Metal sektöründe çalışanlar Türkiye geneli çalışanlardan yaklaşık üç kat daha fazla meslekte kazanma gücünün en az % 10’unu kaybederek sürekli iş görmez haline gelmektedir.

**Şekil 8.** Sürekli İş Göremezlik Kaza Sıklığı Dağılımı [17-26]

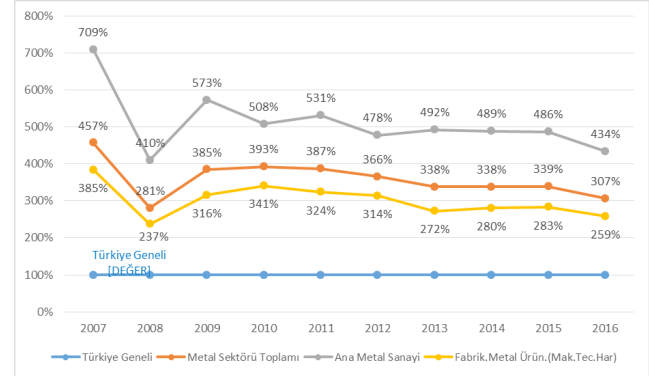
İş Kazası ya da meslek hastalıkları sonucu belirli sürelerde çalışılmaması durumu olarak ifade edilen Geçici İş Göremezlik süreleri için hesaplanan kaza sıklığı grafiksel olarak Şekil 9’da gösterilmektedir. Son on yıl içerisinde geçici iş göremezlik sürelerinde en büyük artış metal sektöründe %57, Türkiye genelinde %37’lik oranla 2012-2013 yılları arasında gerçekleşmiştir.



Şekil 9. Geçici İş Göremezlik Kaza Sıklığı Dağılımı [17-26]

Ülke genelinde meydana gelen iş kazalarının sayısı ile sektörde istihdam edilenlerin sayısının birlikte değerlendirildiği ve sektörler arasında karşılaştırma yapma imkanı sağlayan standardize iş kazası oranı hesaplamalarına ait değerler Şekil 10'da verilmiştir. Buna göre, Türkiye genelinde gerçekleşen iş kazalarını standardize oranı 100 olduğunda, metal sektöründe iş kazalarının yoğunluğu Türkiye geneline oranla genelde yaklaşık 3,5 kat fazla olup 2010 yılından

sonra azalma eğilimi göstermektedir. Alt sektörler düzeyinde değerlendirildiğinde ana metal sanayinde standardize iş kazası oranı Türkiye geneline göre oldukça yüksek değerlere sahiptir.



Şekil 10. Standardize İş Kazası Oranları Dağılımı [17-26]

Tablo 6'da Türkiye geneli ve metal sektörü için yıllar bazında istatistiki verilerden yararlanılarak hesaplanan İş Kazası Sıklık Hızı değerleri görülmektedir. Metal sektörü için

Tablo 6. İş Kazası Sıklık Hızı [17-26]

Yıllar	Çalışan Sayısı		İş kazası Sayısı		Pirim Tahakkuk eden gün sayısı		İş kazası sıklık hızı (1.000.000 iş saati)	
	Türkiye Geneli	Metal Sektörü	Türkiye Geneli	Metal Sektörü	Türkiye Geneli	Metal Sektörü	Türkiye Geneli	Metal Sektörü
2007	8.505.390	396.167	80.602	17.147	2.793.420.779	130.112.920	3,61	16,47
2008	8.802.989	472.722	72.963	11.000	2.945.664.020	158.182.657	3,10	8,69
2009	9.030.202	442.865	64.316	12.133	2.915.404.372	142.979.145	2,76	10,61
2010	10.030.810	468.665	62.903	11.539	3.190.289.762	149.058.466	2,46	9,68
2011	11.030.939	515.932	69.227	12.540	3.532.389.503	165.214.655	2,45	9,49
2012	11.939.620	522.636	74.871	11.983	3.855.795.100	168.780.692	2,43	8,87
2013	12.484.113	535.918	191.389	27.760	4.069.831.784	174.709.738	5,88	19,86
2014	13.240.122	546.367	221.366	30.886	4.248.428.182	175.315.678	6,51	22,02
2015	13.999.398	542.939	241.547	31.750	4.462.091.444	173.053.403	6,77	22,93
2016	13.775.188	528.706	286.068	33.697	4.524.501.578	173.655.062	7,90	24,26

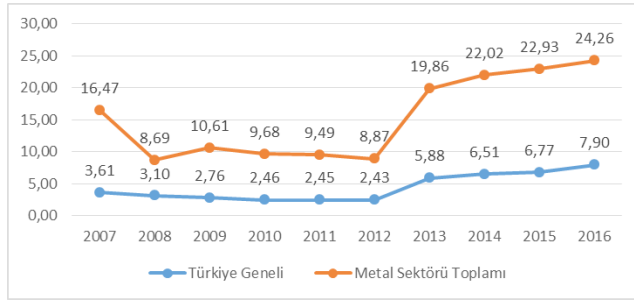
Tablo 7. İş Kazası Ağırlık Hızı [17-26]

Yıllar	Geçici İş Göremezlik Süresi (gün)		Sürekli İş Göremezlik (gün)		Sürekli İş Göremezlik Derecesi Toplamı		Ölüm Vaka Sayısı		İş kazası ağırlık hızı (gün)	
	Türkiye Geneli	Metal Sektörü	Türkiye Geneli	Metal Sektörü	Türkiye Geneli	Metal Sektörü	Türkiye Geneli	Metal Sektörü	Türkiye Geneli	Metal Sektörü
2007	1.934.980	344.738	1.550	182	59.457	6.981	1.043	60	636	1.267
2008	1.855.980	237.141	1.452	146	52.685	5.298	865	53	522	815
2009	1.572.106	270.777	1.668	126	61.300	4.631	1.171	13	641	626
2010	1.502.871	242.909	1.976	185	75.833	7.100	1.444	67	706	1.072
2011	1.757.422	278.208	2.093	202	78.054	7.533	1.700	90	721	1.149
2012	1.647.127	229.695	2.036	202	66.039	6.552	744	35	395	728
2013	2.357.505	371.460	1.660	208	52.825	6.619	1.360	69	507	991
2014	2.065.962	329.018	1.421	184	42.857	5.549	1.626	45	514	772
2015	2.992.070	445.767	3.433	395	103.833	11.947	1.252	58	565	1.283
2016	3.453.702	469.314	4.447	465	134.403	14.054	1.405	57	665	1.404



pirim tahakkuk gün sayısı, Türkiye genelinde o yıl çalışan başına düşen ortalama pirim tahakkuk eden gün sayısı bu-lunarak metal sektöründeki çalışan sayısı ile çarpılması so-nucu elde edilen değer olarak alınmıştır.

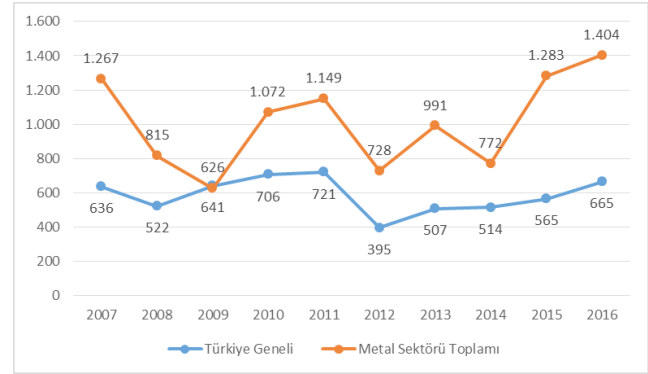
İş Kazası Sıklık Hızının düşük olması hedeflenir. Şekil 11’de İş Kazası Sıklık Hızı ve bunların yıllara göre değışi-mini gösteren eğrisel grafik incelendiğinde 2007 – 2012 yıl-ları arasında genelde düşüş eğilimi olurken, 2012 yılından sonra iki kattan fazla meydana gelen artış devam etmiştir. 2016 yılı içinde 1.000.000 iş saatinde Türkiye genelinde ortalama 8 iş kazası meydana gelirken metal sektöründe 25 iş kazası gerçekleşmiştir. Yıllar bazında metal sektöründe yaşanan iş kazası Türkiye geneli ile karşılaştırıldığında, kaza sıklık hız değerlerinin son on yıllık periyotta genelde üç kattan fazla olduğu görülmektedir.



Şekil 11. İş Kazası Sıklık Hızı Dağılımı [17-26]

Türkiye geneli ve metal sektörü için son on yıllık istatis-tiki verilerden yararlanılarak hesaplanan İş kazası ağırlık hızı değerleri Tablo 7’de verilmektedir. Türkiye geneli için verilen sürekli iş göremezlik sayısının sürekli iş göremezlik derecesi toplamına olan oranından faydalanılarak metal sektörü için sürekli iş göremezlik dereceleri hesaplanmıştır.

İş Kazası Ağırlık Hızı ülke geneli, sektör veya bir işyerindeki kazaların ciddiye önem derecesini göstermek-tedir. Türkiye geneli ve metal sektörü için Tablo 7’de hesap-lanan İş Kazası Ağırlık Hızı ve yıllara göre değışiminin eğ-risel grafik olarak gösterimi Şekil 12’de verilmiştir. Metal sektöründeki iş kazası ağırlık hızı 2009 yılı hariç neredeyse Türkiye genelinin iki katı seviyesindedir. 2012 yılında Tür-kiye genelinde 1.000.000 saatte iş kazası nedeniyle 395 iş günü kaybı olurken metal sektöründe 728 iş günü kaybe-dilmiştir. 2016 yılı içinde ise Türkiye genelinde 665 iş günü kaybı olurken metal sektöründe 1.404 iş günü kaybı yaşan-mıştır. İş kazası ağırlık hızındaki artış, yaşanan kazaların daha ağır şekilde sonuçlandığını göstermektedir.



Şekil 12. İş Kazası Ağırlık Hızı Dağılımı [17-26]

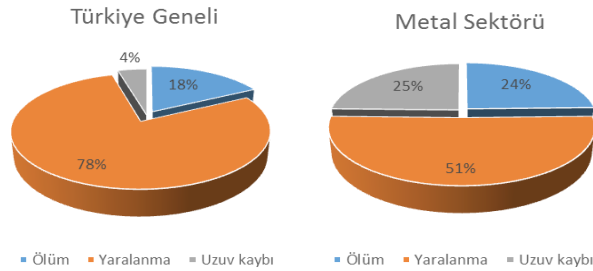
Çalışma ve Sosyal Güvenlik Bakanlığınca yayımla-nan Çalışma Hayatı İstatistiklerinden yararlanılarak elde edilen Türkiye geneli ve metal sektörü için son on yıl içinde gerçekleştirilen teftiş sayıları ve hesaplanan oranlar Tablo 8’de verilmiştir. Teftiş sayıları ve oranlarına bakıldığında;

Tablo 8. İş Sağlığı ve Güvenliği Teftişi [27-33]

YILLAR	Türkiye Geneli						Metal Sektörü							
	İşyeri Sayısı	Toplam Teftiş Sa-yısı	Oran	Çalışan Sa-yısı	Teftişle Çalı-şan Sayısı	Oran	İncelenen İş kazası sayısı	İşyeri Sayısı	Toplam Teftiş Sayısı	Oran	Çalışan Sa-yısı	Teftişle Çalışan Sayısı	Oran	İncelenen iş kazası sayısı
2009	1.216.308	23.446	2%	9.030.202	875.186	10%	5.599	45.503	5.251	12%	726.795	243.770	34%	1.605
2010	1.325.749	17.284	1%	10.030.810	2.211.717	22%	7.822	48.175	5.005	10%	792.780	540.707	68%	1.478
2011	1.435.879	15.902	1%	11.030.939	1.548.973	14%	4.222	52.054	3.890	7%	858.802	333.746	39%	698
2012	1.538.006	11.533	1%	11.939.620	1.069.622	9%	251	57.715	3.540	6%	945.558	296.368	31%	41
2013	1.611.292	8.858	1%	12.484.113	841.216	7%	286	59.659	2.249	4%	984.309	252.955	26%	57
2014	1.679.990	14.174	1%	13.240.122	1.101.484	8%	363	58.981	2.127	4%	1.005.882	314.053	31%	97
2015	1.740.187	13.296	1%	13.999.398	1.144.387	8%	285	56.865	1.879	3%	964.459	254.206	26%	37
2016	1.749.240	14.287	1%	13.775.188	1.123.146	8%	328	55.130	2.328	4%	935.654	279.105	30%	58
Ort.	1.537.081	14.848	1%	11.941.299	1.239.466	10%	2.395	54.260	3.284	6%	901.780	314.364	35%	509

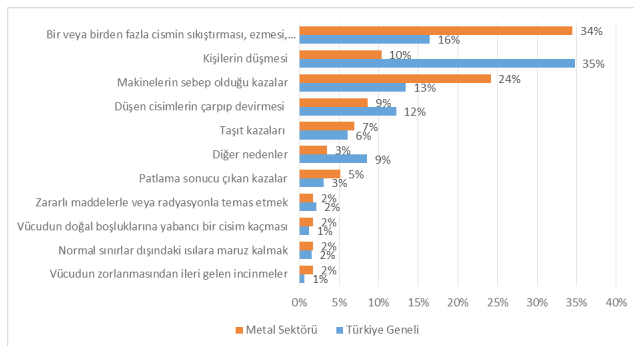
Türkiye genelinde işyeri teftiş sayılarında 2013 yılına kadar sürekli bir azalma gözlenirken teftiş edilen çalışan sayısı değişkenlik göstermekle birlikte genelde azalmıştır. Metal sektöründe teftiş edilen işyeri sayısı ve çalışan sayısında önemli miktarda azalma yaşanmıştır. 2009 yılında 5.251 adet işyeri teftiş edilirken 2016 yılında bu sayı 2.328'e düşmüş, 2010 yılında çalışanların %68'i teftiş edilirken 2016 yılında %30 çalışan teftiş edilmiştir. Teftişle incelenen iş kazası sayılarında da önemli miktarda azalma olmuştur.

Teftişle incelenen kazaların sonuçlarına göre dağılımı Şekil 13'de verilmektedir. Buna göre Türkiye genelinde teftişle incelenen kazaların %22'si ölüm ve uzun kaybı ile sonuçlanırken, metal sektöründe bu oran %49'dur.



Şekil 13. Teftişle İş Kazalarının Sonuçlarına göre Dağılımı [33]

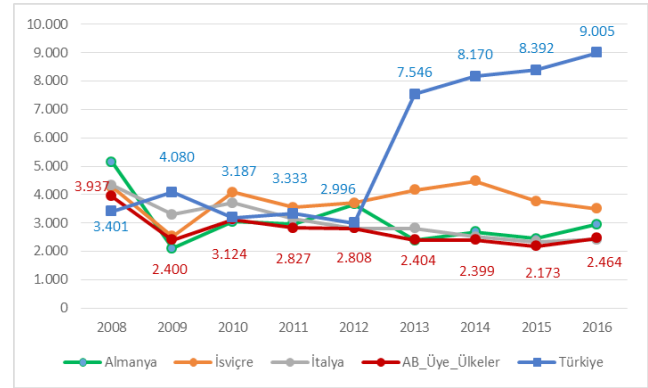
Türkiye geneli ve metal sektöründe teftişle incelenen iş kazalarının oluş nedenlerine göre oluşturulan grafik Şekil 14'de gösterilmektedir. En çok görülen kaza sebebi Türkiye genelinde %35 oranı ile kişilerin düşmesi sonucu olurken, metal sektöründe %34 oranı ile bir veya birden fazla cismin sıkıştırması, ezmesi, batması, kesmesi gibi sebeplerle oluşan kazalardır.



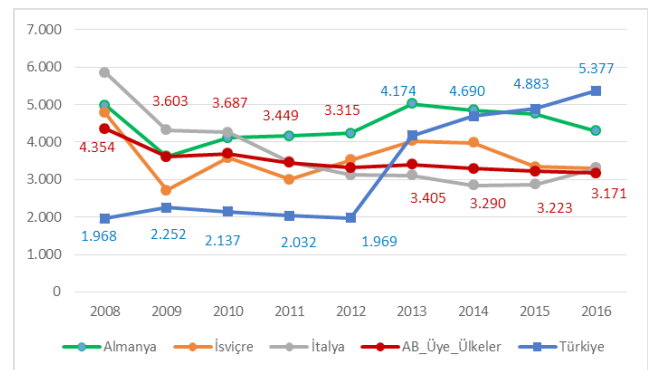
Şekil 14. Teftişle İncelenen İş Kazalarının Oluş Nedenleri [33]

Türk metal sektöründe yaşanan iş kazaları ile Avrupa genelindeki mevcut durumu mukayese etmek için, Avrupa Birliği geneli ile birliğe üye ülkelerden metal sektöründe ithalat

ve ihracat girdilerine göre dünya sıralamasında ilk on'a giren Almanya, İsviçre, İtalya [3] ile ülkemiz arasında iş kazası sıklığı verileri karşılaştırılmıştır (Şekil 15, Şekil 16). Buna göre Avrupa birliği ülke geneli ortalaması ile incelenen diğer üye ülkeler arasında ana metal sanayinde İsviçre, fabrikasyon metal ürünleri imalatı sanayinde ise Almanya daha yüksek kaza sıklığı oranı değerine sahiptir. Ülkemiz ise 2012 yılına kadar ana metal sanayinde Avrupa birliği üye ülkeleri ile yakın değerlerde olan kaza sıklığı oranında, bu yıldan sonra üye devletler ortalamasının yaklaşık 3,5 katı artış meydana gelmiştir. Fabrikasyon metal ürünleri imalatı sanayinde ise 2012 yılına kadar yarı değerlerde olan kaza sıklığı oranında bu yıldan sonra üye devletler ortalamasının üzerine çıkarak yaklaşık 1,7 kat artış meydana gelmiştir.



Şekil 15. Türkiye ve seçili AB ülkeleri ana metal sanayi iş kazası sıklık değerleri [34]



Şekil 16. Türkiye ve seçili AB ülkeleri fabrikasyon metal ürünleri imalatı sanayi iş kazası sıklık değerleri [34]

## IV.SONUÇ ve DEĞERLENDİRMELER

Bu çalışmada Türkiye geneli ve metal sektöründe 2007 – 2016 yıllarını kapsayan son on yıl içerisinde meydana gelen

iş kazası istatistikleri araştırılmış, elde edilen veriler uluslararası kabul görmüş çeşitli parametreler açısından incelenerek değerlendirilmeye çalışılmıştır. Buna göre;

Türkiye genelinde faaliyet gösteren işyerlerinin %98'i, metal sektöründe ise %96'sı çalışan sayısı elliden az olan mikro ve küçük ölçekli işletme niteliğinde iken Türkiye genelinde çalışanların %59'u, metal sektöründe ise %47'si bu işletmelerde görev yapmaktadır. Metal sektörü kendi içinde değerlendirildiğinde fabrikasyon metal ürünleri imalatının sektör içindeki payı %82 olup bunun da %66'sı bünyesinde 1-9 çalışanı bulunan mikro ölçekli işletme niteliğindedir. 6331 sayılı iş sağlığı ve güvenliği kanununa göre elliden az çalışanı bulunan işyerlerinde, iş sağlığı ve güvenliği kurulu oluşturulması zorunlu değildir. Ancak tehlike sınıfına göre kısmi zamanlı iş sağlığı ve güvenliği uzmanı ve işyeri hekimi bulundurma zorunluluğu getirildi ise de bu hizmetlerin süresi ve kalitesinin yeterli olmadığı düşünülmektedir.

İstatistiki verilerden 2013 yılında çalışan sayısında fazla bir artış olmamasına rağmen iş kazası sayılarında yaklaşık iki buçuk kat artış olduğu görülmüştür. Bunun sebeplerinden biri olarak 2012 yılında çıkan 6331 sayılı iş sağlığı ve güvenliği kanunu ile iş güvenliği profesyonellerinin iş yerlerinde istihdam edilmesiyle birlikte iş kazalarının kayıt altına alınma oranında artış olduğu gösterilebilir. Fakat ölümlü iş kazalarında bu denli farkın görülmemesi sebebi, bunların önceden de kayıt altına alınmasıdır.

Son 10 yıllık dönemde incelenen ve hesaplanan kaza sıklığı verileri Türkiye geneli ve metal sektörü için birlikte değerlendirilmiştir. Buna göre metal sektörü ölümlü kaza sıklığı bakımından Türkiye geneli ile çok yakın değerler seyretmesine rağmen genel kaza sıklığı, sürekli iş göremezlik sayısı ve geçici iş göremezlik süreleri kaza sıklığı bakımından Türkiye genelinin çok üzerinde yer almaktadır. 2016 yılı içerisinde ülkemizde gerçekleşen tüm iş kazalarının %11,78'i, sürekli iş göremezliklerin % 10,46'sı, geçici iş görmezliklerin %13,59'u ve ölümlü iş kazalarının % 4,06'sı metal sanayi işlerinde gerçekleşmiştir. Bu durum sektörde yaşanan iş kazalarının sayısal bakımdan çok ve şiddetli olmasına rağmen ölümlü kaza şiddeti bakımından daha hafif olduğunu göstermektedir. Kaza sıklıkları genelde 2012 yılında çıkan 6331 sayılı iş sağlığı ve güvenliği kanunundan sonra ciddi oranda artmasına rağmen, iş kazalarının SGK'ya bildiriminde, iş verenlerin isteksiz ve çekingen davranmaları nedeniyle resmi verilerin gerçek değerlerin altında olduğu da düşünülmektedir.

Türkiye genelinde gerçekleşen iş kazalarının standardize oranı 100 olarak alındığında metal sektörü Türkiye geneline göre kazaların yoğun yaşandığı bir sektör olma

özelliğini taşımaktadır. Metal iş kolu alt sektörler düzeyinde incelendiğinde ise ana metal sanayi iş kazalarının en yoğun yaşandığı kaza oranına sahiptir.

İş kazası sıklık değerleri bakımından incelendiğinde metal sektöründe çalışanların Türkiye genelinde çalışanların üç katından daha fazla değerlere sahip olduğu görülmektedir. 2012 yılında çıkan iş sağlığı ve güvenliği kanunu ile birlikte metal sektöründe 2012 yılında 8,87 olan 1.000.000 iş saatine karşılık gelen kaza sayısı 2013 yılında 19,86, 2016 yılında ise 24,26'ya ulaşmıştır. Türkiye geneli iş kazası sıklık hızı ise 2016 yılında 7,90 değerindedir. Kazaların ciddiyet önem derecesini gösteren kaza ağırlık hızında da yine metal sektörü Türkiye ortalamasının üstündedir. 2016 yılı içinde ise Türkiye genelinde 665 iş günü kaybı olurken metal sektöründe 1.404 iş günü kaybı yaşanmıştır. Bu durum yaşanan kazaların metal sektöründe daha ağır şekilde sonuçlandığını göstermektedir Tehlikeli ve çok tehlikeli sınıfta yer alan metal sektöründe gözlenen yüksek iş kazası sıklık ve ağırlık hızının nedenleri olarak küçük işletmelerin gerekli iş sağlığı ve güvenliği tedbirlerini almaması, düşük güvenlik kültürü, mesleki eğitimin ve kurumsal yapıların yetersizliği, koruyucusuz makine ve alet kullanımı, kişisel koruyucu ekipmanların kullanılmaması ve kayıt dışı istihdam gösterilebilir.

Diğer yandan iş sağlığı ve güvenliği teftiş sayılarına bakacak olursak, Türkiye geneli ve metal sektöründe teftiş edilen işyeri sayısı ve çalışan sayısında zaman içerisinde genelde azalma görülmektedir. 2009 yılında metal sektöründe 5.251 adet işyeri teftiş edilirken 2016 yılında bu sayı 2.328'e düşmüştür. Teftiş sayıları azalırken kaza sayılarının artması bize kazaları önlemede teftişin ne kadar önemli olduğunu göstermektedir. 2016 yılında Türkiye genelinde işyerlerin %1'i, çalışanların %8'i teftiş edilirken, metal sektöründe işyerlerin %6'sı, çalışanların %35'i teftiş edilmiştir. Buradan teftişlerin metal sektöründe daha çok orta ve büyük ölçekli işletmelerde yapıldığı anlaşılmaktadır. Metal sektöründe teftiş oranları Türkiye geneline göre daha iyi durumda olmakla birlikte, iş kazalarını önlemek amacıyla denetlenen işyeri ve çalışan sayısı açısından yetersiz düzeyde olan iş teftişi oranları artırılmalıdır.

Türkiye metal sektörü ve Avrupa Birliği üye ülkeleri ortalaması ile ithalat ve ihracatta birliğin önde gelen ülkeleri, iş kazası sıklığı açısından incelendiğinde Almanya ve İsviçre gibi metal sektöründe önde gelen ülkelerin kaza sıklık değerleri Avrupa birliği ortalamasının üstündedir. Bu durum diğer Avrupa birliği üye ülkelerinden düşük kaza sıklığı gösterenlerin yaşanan kazaların bir çoğunu bildirmedeği varsayımını ortaya koymaktadır. 2012 yılına kadar ülkemiz ana metal sanayinde ve fabrikasyon metal ürünleri imalatı sanayinde Avrupa birliği üye ülkeleri ile yakın ve hatta düşük

kaza sıklığı oranları gösterecek şekilde 2016 yılı verilerinde üye devletler ortalamasının üzerine çıkarak sırasıyla 3,5 ve 1,7 katı artış olduğu tespit edilmiştir. Görülen bu artışların 2012 yılında çıkan kanunla ve düzenlenen mevzuatlarla iş güvenliği uzmanlarının istihdam edilmesi ve kaza bildirimlerinin elektronik ortamda alınmaya başlanması ile alakalı olduğu düşünülsede, gerçeğe daha yakın değerlerin bildirilmesinde hala sorunlar yaşanmakta ve bu yönde çalışmalar yapılması gerekmektedir.

İş kazaları ve meslek hastalıkları sonucu meydana gelen maddi ve manevi kayıplar çalışan, işletme ve toplum üzerinde mali, sosyal ve psikolojik yük oluşturmakta, yaşam kalitesini sarsmakta, ülke ekonomisi içinde büyük zararlara yol açmaktadır. Kazaların çoğu önlenemez nitelikte olup, iş sağlığı ve güvenliği kültürünün yaşamın her alanında yaygınlaştırılması ile olası kazaların önüne geçilebilir. Öncelikli olarak güvenli çalışma ortamının sağlanması, iş sağlığı ve güvenliği koşullarının iyileştirilmesi, her kademedeki çalışanlara güvenlik eğitimlerinin verilmesi gerekmektedir. Günümüzde bilgi ve eğitimin önemi gün geçtikçe artmaktadır. Güvenlik kültürünün oluşabilmesi için eğitim, öncelikle ailede ve okullarda verilmeye başlanmalıdır. Kişinin çalıştığı iş koluna yönelik eğitim alması, karşılaşılabileceği iş kazası olasılığını düşürecektir. Eğitimin yanında denetimlerin de artırılarak düzenli şekilde devam etmesi ve tespit edilen hususlara riayet edilmesi iş kazaların önlenmesinde büyük önem arz etmektedir.

## KAYNAKLAR

- [1] ILO-International Labour Organization, <http://www.ilo.org/global/topics/safety-and-health-at-work> (Ağustos 2018).
- [2] T.C. Çalışma ve Sosyal Güvenlik Bakanlığı, İş Teftiş Kurulu Bakanlığı (2011). Metal sektöründe çalışan işçilerin çalışma koşullarının iyileştirilmesi programlı teftişi sonuç raporu, Yayın No:49, Ankara.
- [3] Özden, A., Haçikoğlu, M., (2017). Ana metal sanayi sektörü, A&T Bank Ekonomik Araştırmalar Departmanı, İstanbul.
- [4] T.C. Bilim Sanayi ve Teknoloji Bakanlığı. Demir çelik raporu (2018), Sanayi Genel Müdürlüğü, Sektörel Raporlar ve Analizler Serisi.
- [5] Demir, E., (2009). Metal iş kolunda meydana gelen iş kazaları ve iş kazalarının oluşturduğu, kayıpların ekonomik yönden analizi. Yüksek Lisans Tezi, Marmara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, İstanbul
- [6] T.C. Çalışma ve Sosyal Güvenlik Bakanlığı. İş Sağlığı ve Güvenliği Genel Müdürlüğü, KOBİ'ler için iş sağlığı ve güvenliği yönetim rehberi: risk değerlendirmesi, İSG performans izleme ve sağlık tehlikeleri Metal Sektörü.
- [7] T.C. Çalışma ve Sosyal Güvenlik Bakanlığı, İş Sağlığı ve Güvenliği Genel Müdürlüğü. Meslek hastalıkları ve iş ile ilgili hastalıklar tanı rehberi.
- [8] Saha, A., Kumar, S., Vasudevan, D.M., (2007). Occupational injury surveillance: a study in a metal smelting industry. *Indian Journal of Occupational and Environmental Medicine*, 11 (3), 103-107.
- [9] Türkiye Metal Sanayicileri Sendikası, MESS üyelerinde iş kazaları ve meslek hastalıkları istatistikleri 2016. <https://www.mess.org.tr/tr/haberler/is-sagligi-ve-guvenligi-alaninda-turkiyenin-en-kapsamli-arastirmasi-yayinlandi/> (Eylül 2018)
- [10] Yağimli, M., İzci, F.B., (2017). Türkiye’de makine ve teçhizatı hariç fabrikasyon metal ürünleri imalatı sektöründe yaşanan iş kazaları ve ölümlü iş kazası sayılarının tahmini. *Karadimas İş Sağlığı ve Güvenliği Dergisi*, 1 (1), 9-15.
- [11] Gülhan, B., İlhan M.N., Civil E.F., (2012). Occupational accidents and affecting factors of metal industry in a factory in Ankara. *Turkish Journal of Public Health*, 10 (2), 76-85.
- [12] Bull, N., (2007). Mandatory use of eye protection prevents eye injuries in the metal industry. *Occupational Medicine*, 57, 605-606.
- [13] T.C. Çalışma ve Sosyal Güvenlik Bakanlığı, İş Sağlığı ve Güvenliği Genel Müdürlüğü (2016). Metal sektörü kişisel koruyucu donanım rehberi. Ankara 2016.
- [14] T.C. Çalışma ve Sosyal Güvenlik Bakanlığı, (2012). İş sağlığı ve güvenliğine ilişkin işyeri tehlike sınıfları tebliği. Resmi Gazete Sayı:28602,
- [15] International Labour Office (ILO), (1998). 16th international conference of labour statisticians, Geneva,
- [16] Eurostat European Commission, (2013). European statistics on accidents at work (ESAW) – summary methodology. Eurostat Methodologies & Working Paper, 2013 Edition.
- [17] Sosyal Güvenlik Kurumu (SGK), 2007 SGK İstatistik Yıllıkları. 2007, Ankara
- [18] Sosyal Güvenlik Kurumu (SGK), “2008 SGK İstatistik Yıllıkları”, 2008, Ankara.
- [19] Sosyal Güvenlik Kurumu (SGK), “2009 SGK İstatistik Yıllıkları”, 2009, Ankara.
- [20] Sosyal Güvenlik Kurumu (SGK), “2010 SGK İstatistik Yıllıkları”, 2010, Ankara.
- [21] Sosyal Güvenlik Kurumu (SGK), “2011 SGK İstatistik Yıllıkları”, 2011, Ankara.
- [22] Sosyal Güvenlik Kurumu (SGK), “2012 SGK İstatistik Yıllıkları”, 2012, Ankara.
- [23] Sosyal Güvenlik Kurumu (SGK), “2013 SGK İstatistik Yıllıkları”, 2013, Ankara.
- [24] Sosyal Güvenlik Kurumu (SGK), “2014 SGK İstatistik Yıllıkları”, 2014, Ankara.
- [25] Sosyal Güvenlik Kurumu (SGK), “2015 SGK İstatistik Yıllıkları”, 2015, Ankara.



- [26] Sosyal Güvenlik Kurumu (SGK), “2016 SGK İstatistik Yıllıkları”, 2016, Ankara.
- [27] T.C. Çalışma ve Sosyal Güvenlik Bakanlığı, (2010), “Çalışma Hayatı İstatistikleri”, 2010, Ankara.
- [28] T.C. Çalışma ve Sosyal Güvenlik Bakanlığı, (2011), “Çalışma Hayatı İstatistikleri”, 2011, Ankara.
- [29] T.C. Çalışma ve Sosyal Güvenlik Bakanlığı, (2012), “Çalışma Hayatı İstatistikleri”, 2012, Ankara.
- [30] T.C. Çalışma ve Sosyal Güvenlik Bakanlığı, (2013), “Çalışma Hayatı İstatistikleri”, 2013, Ankara.
- [31] T.C. Çalışma ve Sosyal Güvenlik Bakanlığı, (2014), “Çalışma Hayatı İstatistikleri”, 2014, Ankara.
- [32] T.C. Çalışma ve Sosyal Güvenlik Bakanlığı, (2015), “Çalışma Hayatı İstatistikleri”, 2015, Ankara.
- [33] T.C. Çalışma ve Sosyal Güvenlik Bakanlığı, (2016), “Çalışma Hayatı İstatistikleri”, 2016, Ankara.
- [34] Eurostat – European Statistical Office <http://appsso.eurostat.ec.europa.eu/nui/submitViewTableAction.do> (Eylül 2018).

# Antikanser Aktivite Gösterebilecek Yeni Heterohalkalı Bileşiklerin Sentezlenmesi ve Karakterizasyonu

## Synthesis and Characterization of New Heterocyclic Derivatives as Possible Anticancer Agents

Ömer Tahir GÜNKARA<sup>1</sup> 

<sup>1</sup>Yıldız Teknik Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, Davutpaşa Kampüsü, Esenler/İstanbul

### Öz

Son yıllarda kanser hastalığı üzerinde yapılan çalışmaların sayısı oldukça artmaktadır. Çeşitli kanser türlerine karşı etkili olabilecek anti-kanser ilaçlarının yenilerinin elde edilmesi için çeşitli çalışmalar yapılmaktadır. Bu çalışmada anti-kanser aktivite gösterebilecek yeni bisiklik schiff bazı türevleri sentezlenmiş ve sentezlenen yeni bileşiklerin yapıları IR, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR, GC-MS gibi spektroskopik yöntemlerle karakterize edilmiştir.

**Anahtar Kelimeler:** Anti-kanser aktivite, Anti-kanser ilaçlar, Heck reaksiyonları, Heterohalkalı bileşikler, Trisiklik imidler.

### Abstract

The number of studies on cancer research has increased enormously during the last decade. Various studies have been carried out to obtain new anti-cancer drugs that may be effective against various types of cancer cells. In this work, new bicyclic schiff base derivatives were synthesized and all newly synthesized derivatives were structurally characterized by FTIR, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR and GC/MS spectroscopic analyses.

**Keywords:** Anticancer activity, Anticancer drugs, Heck reactions, Heterocyclic compounds, Tricyclic imides

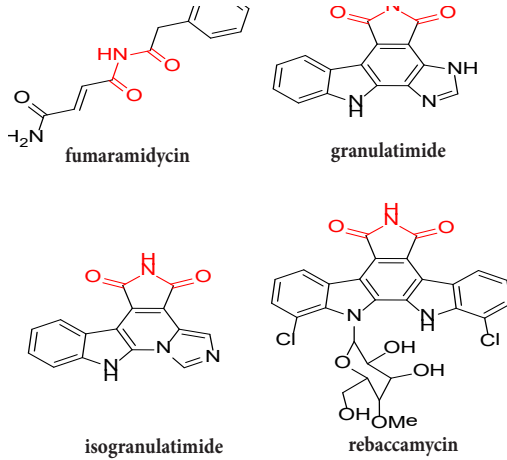
## I. GİRİŞ

Kanser ölüm nedenleri arasında dünya genelinde ilk sıralarda yer alan karmaşık bir hastalıktır ve bu hastalık çağımızın hastalığı olmuştur. Kanser sebebi ile gerçekleşen ölümlerin artması sonucu bu konu üzerine yapılan çalışmalar son yıllarda oldukça artmıştır [1]. Anti-kanser aktivite gösterecek yeni moleküllerin sentezlenmesi ve ilaç olarak kullanılabilmesi günümüzde büyük önem taşımaktadır bu sebeple anti-kanser çalışmaları günümüzde oldukça yaygın bir şekilde yürütülmekte olan bir araştırma konusudur. Bu sebeple birçok araştırma grubu kanser hücrelerini tamamen ortadan kaldırabilecek yeni etken maddeler aramaktadır.

Günümüzde birçok kanser çeşidi bulunmaktadır ve bu türler için yeni anti-kanser ilaç arayışları devam etmektedir [2]. Doğal bileşikler, küçük organik moleküller gibi yeni ajanlar anti-kanser aktiviteleri sebebiyle bu kanser hücrelerine karşı öldürme güçleri denenmektedir.

Benzamid türevleri dikkat çekici derecede anti-bakteriyel, anti-fungal, anti-kanser ve antialerjik aktiviteler göstermektedir [3-10] ve hala aromatik ligandların sentezi için kullanılan en yaygın ara bileşiklerdendir. Schiff bazları da potansiyel anti-kanser ilaçlarıdır ve metal kompleksleri de aktivite göstermektedir [11-17] ve medikal alanda ilaç olarak kullanılmaktadırlar.

İmid fonksiyonel grubu çeşitli önemli biyolojik aktif moleküllerde yer almaktadır. Literatür araştırmalarına göre, anti-kanser aktivite gösteren, DNA ile etkileşime girebilen, imid fonksiyonel grubuna sahip çeşitli moleküller belirlenmiştir. Örneğin fumaramidmycin, granulatimide, isogranulatimide ve rebeccamycin gibi moleküller imid fonksiyonel gruplarına sahiptir. Bu moleküllerin çeşitli anti-kanser, anti-mikrobiyal ve antiinflamatuvar aktivite gösterdiği rapor edilmiştir [18-22] (Şekil 1).



Şekil 1. Fumaramidmycin, granulatimide, isogranulatimide ve rebeccamycin molekül yapıları

Trisiklik halkanın da biyolojik aktivitede önemli rolü bulunduğu bilinmektedir. Örneğin cantharidin ve norcantharidin bileşikleri anti-kanser aktivite gösteren bilinen iki bileşiktir.

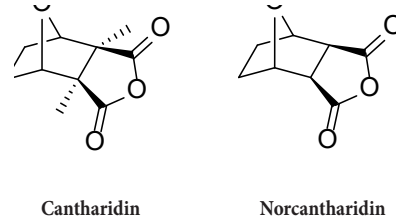
Geleneksel Çin tıbbi potansiyel anti-kanser ajanlar için zengin bir kaynaktır. Özellikle Çin Bilister böceğinin (Şekil 2), Mylabris, kurutulmuş gövdesinden elde edilen Cantharidin ve Norcantharidin (Şekil 3) hücre döngüsü ilerlemesinde anahtar rollere sahip olan protein fosfat 1 (PP1) ve 2A (PP2A) inhibitörüdür. Lösemi hücrelerinde, Cantharidin apoptozu p53 bağımlı bir mekanizma ile indükler.



Şekil 2. Bilister böceği

Norcantharidin türevinin sentezi çok daha kolaydır ve toksisitesi daha düşüktür bu sebeple bu bileşik üzerine çalışmalar çok daha yaygındır [23-29].

Ayrıca bu iki bileşiğin imid türevleri de son yıllarda çok büyük ilgi görmektedir.



Şekil 3. Cantharidin ve Norcantharidin

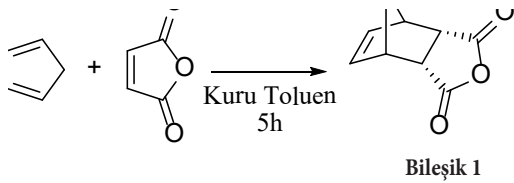
Cantharidin bir dizi kansere (lösemi, pankreas, kolon, serviks vb.) karşı etkili olduğu kanıtlanmıştır ve birçok olumlu özelliği vardır [29]. Potansiyel toksisitesine rağmen Cantharidin Çin tıbbında özellikle hepatoma ve özofageal karsinom tedavisinde 1264 yılından beri bir anti-kanser ajanı olarak kullanılmıştır. Norcantharidin, Cantharidin'in demetile edilmiş analogu olup nefrotoksisite olmadan benzer anti-kanser aktivite sergiler [27].

Bu moleküllerin çeşitli anti-kanser aktiviteleri göstermeleri sebebiyle aromatik halka fonksiyonel grubuna sahip bisiklik imid türevlerinin sentezine yöneldik.

Yeni türevleri sentezlemek için indirgen Heck reaksiyonlarından yararlandık. Trifenilarsinin ligand olarak kullanıldığı [30-33] paladyum katalizli reaksiyonları gerçekleştirerek yeni anti-kanser aktivite gösterebilecek bisiklik imid türevleri sentezledik ve yapılarını çeşitli spektroskopik yöntemler kullanarak aydınlatmayı başardık.

## II. SONUÇ ve TARTIŞMA

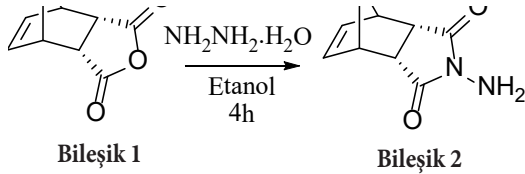
İlk olarak başlangıç maddesi olarak kullanılacak olan bisiklo[2.2.1]hept-5-en-endo-2,3-dikarboksilik anhidrit bileşiği (Bileşik-1) bilinen bir yöntem ile yüksek verimle elde edilmiştir [34]. Taze destillenmiş siklopentadien ve maleik anhidrit arasındaki Diels-Alder reaksiyonu sonucu Bileşik-1 sentezlenmiş (Şekil 4) ve sentezlenen bu bileşik etanol ile kristallendirilerek saflaştırılmıştır.



Şekil 4. Bileşik 1'in sentez yöntemi

Sentezlenen **Bileşik 1**'in yapısı, FTIR spektrumunun ve erime noktasının literatür verileri ile kıyaslanması ile doğrulanmıştır.

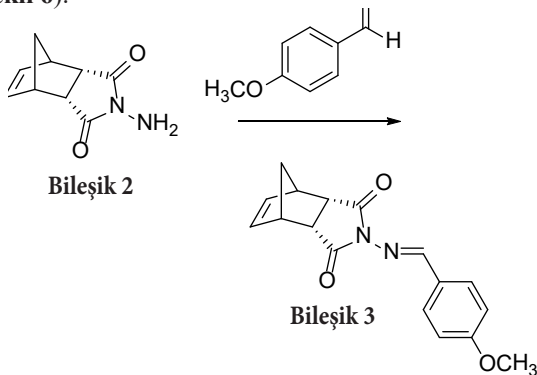
Elde edilen beyaz renkli kristallerden yola çıkarak *N*-aminobisiklo[2.2.1]hept-5-en-*endo*-2,3-dikarboksimid bileşiği (**Bileşik-2**) sentezlenmiş ve kristallendirme methodu ile saflaştırılmıştır [35] (Şekil 5).



Şekil 5. Bileşik 2'nin sentez yöntemi

Literatürde yer alan yöntemle göre sentezlenen **Bileşik-2**'nin yapısı FTIR spektrumu incelenerek doğrulanmıştır. Yapıda yer alan  $-NH_2$  grubuna ait N-H bağı gerilme bandı  $3300\text{ cm}^{-1}$ 'de gözlenmektedir. Erime noktası literatür verisi ile kıyaslanarak yapının doğruluğu teyit edilmiştir.

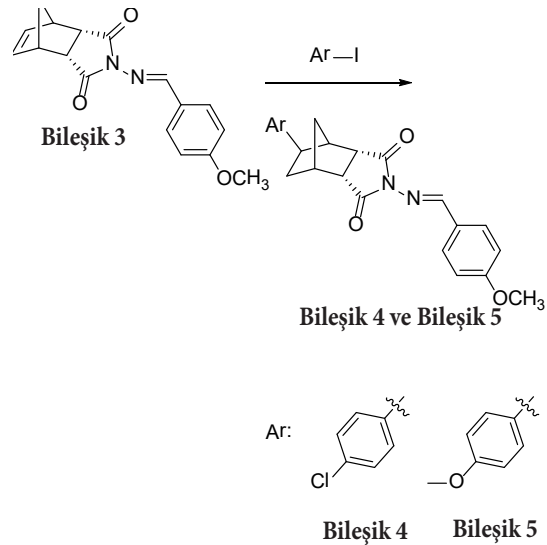
Saflaştırılan **Bileşik-2**'den yola çıkarak *p*-metoksibenzaldehit ile reaksiyonu sonucu **Bileşik-3** yüksek verimle sentezlenmiştir. Elde edilen bu bileşik kolon kromatografisi yöntemi kullanılarak saflaştırılmıştır. **Bileşik-2** ve *p*-metoksibenzaldehit kullanılarak bir schiff bazı oluşturulmuştur (Şekil 6).



Şekil 6. Bileşik 3'ün sentez yöntemi

Sentezlenen bu bileşik saflaştırıldıktan sonra FTIR,  $^1H$ -NMR,  $^{13}C$ -NMR ve GC-MS gibi çeşitli spektroskopik yöntemlerle yapısı aydınlatılmıştır. FTIR spektrumu incelendiğinde **Bileşik-2**'nin FTIR spektrumunda yer alan  $-NH_2$  grubundan kaynaklanan  $3300\text{ cm}^{-1}$ 'deki pikin kaybolduğu onun yerine  $3013\text{ cm}^{-1}$ 'de aromatik halkadaki  $=C-H$  bağının sebep olduğu gerilme bandının gözlemlendiği belirlenmiştir.  $^1H$ -NMR spektrumu incelendiğinde beklenen sayıda pik beklenen alanlarda sinyal verdiği gözlenmektedir. 4 aromatik protona ait pikler sırasıyla 6.84 ve 7.68 ppmde doublet olarak gözlenmiştir. Metoksi grubuna ait pik ise singlet olarak 3.77 ppm'de sinyal vermektedir. Alkenik bağı hidrojenlerine ait sinyaller ise 6.14 ppm'de singlet olarak gözlenmiştir. 8.75 ppm'de gözlemlenen singlet pik schiff bazının  $N=CH$  protonuna ait sinyaldir.  $^1H$ -NMR spektrumu yapıyı doğrulamaktadır.  $^{13}C$ -NMR spektrumu da yapıyı doğrulamaktadır, beklenen sayıda karbon atomu rezonans olmuştur.

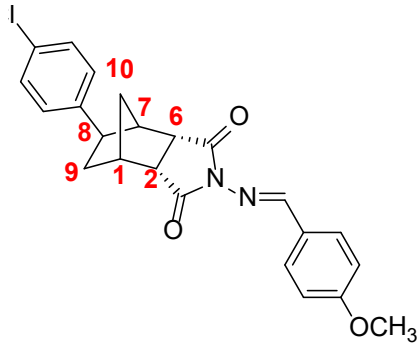
Elde edilen **Bileşik-3**'ün indirgen Heck reaksiyonları gerçekleştirilmiştir. Reaksiyonlar kuru DMF içerisinde azot atmosferinde gerçekleştirilmiştir. Katalizör olarak  $Pd(OAc)_2$  kullanılmıştır. Ligand olarak  $AsPh_3$  kullanıldığında en yüksek verimler elde edilebilmiştir. 4-kloro-1-iyodobenzen kullanılarak gerçekleştirilen reaksiyon sonucu **Bileşik 4** yüksek verimle elde edilmiştir (Şekil-7)



Şekil 7. Bileşik 4 ve Bileşik 5'in sentez yöntemi

**Bileşik 5**'in sentezi için aril halojenür olarak 4-metoksi-1-iyodobenzen kullanılmıştır. Sentezlenen her iki bileşik de kolon kromatografisi yapılarak saflaştırılmıştır. **Bileşik 4**'ün  $^1H$ -NMR spektrumu incelendiğinde; **Bileşik-3**'te yer

alan alkenik protonlara ait 6.14 ppmdeki singlet pikin gözlenmemiş onun yerinde dört tane daha aromatik protonun 7.24 ve 7.81 ppmde dublet olarak sinyal verdiği gözlemlenmiştir. Aynı şekilde **Bileşik 5**'in de  $^1\text{H-NMR}$  spektrumu incelendiğinde beklenen sayıda pik gözlenmiştir. İki bileşiğin de  $^{13}\text{C-NMR}$  spektrumları yapı ile uyumludur.



**Bileşik 4**

**Şekil 8.** Bileşik 4'ün molekül şekli

Bu schiff bazı türevi bisiklik bileşiklerin çeşitli kanser hücrelerine karşı anti-kanser aktivite göstermeleri beklenmektedir.

### III. DENEYSEL ÇALIŞMALAR

#### Genel Bilgi

Tüm reaksiyonlar aksi belirtilmediği sürece azot atmosferinde yürütülmüştür. Reaksiyon ilerleyişi ince tabaka kromatografisi (TLC) ile izlenmiştir. TLC renklendirmesinde UV ışık ya da  $\text{KMnO}_4$  çözeltisi kullanılmıştır. Sentezlenen ürünler kolon kromatografisi kullanılarak saflaştırılmıştır, yürütücü sistemi olarak çeşitli oranlarda etil asetat/n-hekzan çözücü karışımı kullanılmıştır

IR spektrumları Perkin Elmer FT-IR cihazı ile ölçülmüştür. Erime noktaları Gallenkamp dijital termometre cihazı ile belirlenmiştir. NMR ölçümleri "Bruker—500 MHz NMR" cihazı ile yapılmıştır. TMS (tetrametilsilan) internal standart olarak kullanılmıştır. Tüm NMR ölçümleri  $\text{CDCl}_3$  çözücüsü içerisinde gerçekleştirilmiştir. Sinyaller çeşitli kısaltmalar kullanılarak raporlanmıştır. Kütle ölçümleri Agilent 6890N GC-System-5973 IMSD cihazı ile yapılmıştır.

#### Sentez ve Karakterizasyon Çalışmaları

*Bisiklo[2.2.1]hept-5-en-endo-2,3-dikarboksilik anhidrit bileşiğinin (Bileşik 1) Sentezi:*

1 g maleik anhidrit tartılarak çift boyunlu balon içerisine konuldu ve 5 mL susuz toluen içerisinde çözünmesi sağlandı. 0.85 mL taze destillenmiş siklopentadien reaksiyon ortamına damla damla ilave edildi. Reaksiyon karışımı azot atmosferinde, geri soğutucu altında beş saat kaynatıldı. Oluşan beyaz kristaller süzülerek reaksiyon ortamından ayrıldı ve soğuk eter ile yıkandı [34].

*N-Aminobisiklo[2.2.1]hept-5-en-endo-2,3-dikarboksimid bileşiğinin (Bileşik 2) Sentezi:*

0.205 g **Bileşik 1** tartılarak iki boyunlu balona alındı, 10 mL susuz etanol içerisinde çözünmesi sağlandı. 0.07 mL hidrazin hidrat reaksiyon ortamına tek seferde ilave edildi. Reaksiyon karışımı azot atmosferinde, geri soğutucu altında beş saat boyunca kaynatıldı. Reaksiyonun çözücüsü uçuruldu. Elde edilen katı kristallendirme yöntemi ile saflaştırıldı. Beyaz renkli kristaller elde edildi [35].

*N-(4-Metoksibenziliden)bisiklo[2.2.1]hept-5-en-endo-2,3-dikarboksimid bileşiğinin (Bileşik 3) Sentezi ve Spektral Verileri:*

0.250 g **Bileşik 2** tartılarak iki boyunlu balon içerisine konuldu, 10 mL susuz etanol içerisinde çözünmesi sağlandı. Azot atmosferi altında, 0.100 mL p-metoksibenzaldehit reaksiyon ortamına damla damla ilave edildi. Reaksiyon karışımı geri soğutucu altında altı saat boyunca kaynatıldı. Yapılan TLC çalışması sonucunda reaksiyon sonlandırıldı ve döner buharlaştırıcıda çözücüsü uçuruldu. Elde edilen ham ürün 2:1 etilasetat/n-hekzan sisteminden kolon kromatografisi uygulanarak saflaştırıldı. Beyaz renkli kristaller elde edildi.

Beyaz renkli kristaller, en: 127.2-127.8°C, Rf: 0.45 (2:1 Etil asetat/n-hekzan), verim %50. FTIR (ATR): 3013 (aromatik =C-H gerilimi), 2963, 2930, 2860 ve 2840 (alifatik C-H gerilimleri), 1736 ve 1705 (C=O gerilimleri), 1598 ve 1570 (C=N, C=C gerilimleri), 1510, 1455, 1442 ve 1386 (alifatik, düzlem içi C-H eğilimleri), 1256 (C-O gerilimi), 1186 ve 1167 (C-O-C gerilimi), 1028 (C-N salınımı), 720 (p-disubstitue aromatik halka düzlem dışı C-H eğilimleri)  $\text{cm}^{-1}$ .  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ , 500 MHz): 1.49 (d,  $J= 7.32 \text{ Hz}$ , 1H,  $\text{H}_1$ ), 1.69 (d,  $J= 8.78 \text{ Hz}$ , 1H,  $\text{H}_7$ ), 3.25 (s, 2H,  $\text{H}_2$ ,  $\text{H}_6$ ), 3.41 (s, 2H,  $\text{H}_{\text{köprü}}$ ), 3.77 (s, 3H,  $\text{OCH}_3$ ), 6.14 (s, 2H, HC=CH), 6.84 (d,  $J= 8.79 \text{ Hz}$ , 2H, HAr), 7.68 (d,  $J= 8.79 \text{ Hz}$ , 2H, HAr), 8.75 (s, 1H, N=CH) ppm.  $^{13}\text{C-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ , 125 MHz): 46.1 (CH), 46.2 (CH), 49.6 (CH), 50.0 (CH), 52.1 ( $\text{CH}_2$ ), 52.9 ( $\text{OCH}_3$ ), 135.9 (2x=CH), 116.2 (2xCAr), 125.3 (Cq), 130.1 (2xCAr), 154.1 (N=CH), 169.1 (Cq), 179.2 (2xC=O) ppm. GC-MS (EI, 70eV): ( $\text{C}_{17}\text{H}_{16}\text{N}_2\text{O}_3$ ) m/z: 296 [M]<sup>+</sup>



*5-(4-Klorofenil)-N-(4-metoksibenziliden)bisiklo[2.2.1]hept-5-en-endo-2,3-dikarboksimid bileşiğinin (Bileşik 4) Sentezi ve Spektral Verileri:*

Paladyum (II) asetat [Pd(OAc)<sub>2</sub>, 2.8 mg, 0.0128 mmol] ve trifenilarsin (TPAs, 16,85 mg, 0.055 mmol) tartılarak schlenk tüpüne alındı ve 3 mL susuz DMF içerisinde çözünmesi sağlandı. 15dk boyunca azot atmosferi altında, 65°C sıcaklıkta kompleks oluşumu için karıştırıldı. Reaksiyon karışımına sırasıyla 0.5 mmol **Bileşik-3** (148 mg), 0.75 mmol p-kloroiodobenzen (179 mg), 1.75 mmol trietilamin (Et<sub>3</sub>N, 0.24 mL) ve 1.5 mmol formik asit (HCOOH, 0.055 mL) enjektörler yardımıyla ilave edildi. Reaksiyon karışımı bir gece boyunca 65°C sıcaklıkta karıştırıldı. Yapılan TLC kontrolleri sonucunda reaksiyon sonlandırıldı. Tuzlu su (50 mL) ve etil asetat (50 mL) sisteminden ekstraksiyon yapıldı, organik faz ayrılarak MgSO<sub>4</sub> üzerinde kurutuldu. Çözücü düşük basınç altında uzaklaştırıldı. Elde edilen ham ürün 1:1 etil asetat/*n*-hekzan sisteminden kolon kromatografisi yardımıyla saflaştırıldı. Kolon sonucunda **Bileşik-4** beyaz kristaller olarak elde edildi.

Beyaz renkli kristaller, en. 66.1-66.3°C, Rf: 0.40 (1:1 etilasetat/*n*-hekzan), verim %58. FTIR (ATR): 3013 (aromatik =C-H gerilimi), 2970 ve 2839 (alifatik C-H gerilimleri), 1770 ve 1709 (C=O gerilimleri), 1603 ve 1570 (C=N, C=C gerilimleri), 1514, 1493, 1460, 1422 ve 1375 (alifatik, düzlem içi C-H eğilimleri), 1255 (C-O gerilimi), 1169 (C-O-C gerilimi), 1029 (C-N salınımı), 741 (p-disubstitue aromatik halka düzlem dışı C-H eğilimleri) cm<sup>-1</sup>. <sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 500 MHz): 1.58 (d, *J* = 13.76 Hz, 1H, H<sub>10a</sub>), 1.85 (m, 2H, H<sub>10s</sub>, H<sub>9x</sub>), 1.94 (dd, *J* = 14.15; 2.93 Hz, 1H, H<sub>9n</sub>), 2.92 (d, *J* = 5.36 Hz, 2H, H<sub>1</sub>, H<sub>6</sub>), 2.98 (brds, 1H, H<sub>7</sub>), 3.18-3.22 (m, 1H, H<sub>2</sub>), 3.25 (dd, *J* = 5.37; 5.13 Hz, 1H, H<sub>8n</sub>), 3.86 (s, 3H, OCH<sub>3</sub>), 6.94 (d, *J* = 8.78 Hz, 2H, HAr), 7.11 (d, *J* = 8.30 Hz, 2H, HAr), 7.24 (d, *J* = 8.30 Hz, 2H, HAr), 7.81 (d, *J* = 8.78 Hz, 2H, HAr), 8.99 (s, 1H, N=CH) ppm. <sup>13</sup>C-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 125 MHz): 32.6 (CH<sub>2</sub>), 39.1 (CH), 40.0 (CH), 41.2 (CH), 46.0 (CH), 46.4 (CH), 46.9 (CH<sub>2</sub>), 55.4 (OCH<sub>3</sub>), 114.3 (2xCAr), 120.6 (2xCAr), 125.6 (Cq), 130.1 (2xCAr), 132.0 (2xCAr), 142.86 (Cq) 162.5 (Cq), 154.1 (N=CH), 169.1 (Cq), 174.2 (C=O), 174.3 (C=O) ppm. GC-MS (EI, 70eV): (C<sub>23</sub>H<sub>21</sub>N<sub>2</sub>O<sub>3</sub>Cl) m/z: 408 [M]<sup>+</sup>

*5-(4-Metoksifenil)-N-(4-metoksibenziliden)bisiklo[2.2.1]hept-5-en-endo-2,3-dikarboksimid bileşiğinin (Bileşik 5) Sentezi ve Spektral Verileri:*

Paladyum (II) asetat [Pd(OAc)<sub>2</sub>, 2.8 mg, 0.0128 mmol] ve trifenilarsin (TPAs, 16,85 mg, 0.055 mmol) tartılarak schlenk tüpüne alındı ve 3 mL susuz DMF içerisinde çözünmesi sağlandı. 15dk boyunca azot atmosferi altında, 65°C sıcaklıkta kompleks oluşumu için karıştırıldı. Reaksiyon

karışımına sırasıyla 0.5 mmol **Bileşik-3** (148 mg), 0.75 mmol p-metoksiiyodobenzen (175.5 mg), 1.75 mmol trietilamin (Et<sub>3</sub>N, 0.24 mL) ve 1.5 mmol formik asit (HCOOH, 0.055 mL) enjektörler yardımıyla ilave edildi. Reaksiyon karışımı bir gece boyunca 65°C sıcaklıkta karıştırıldı. Yapılan TLC kontrolleri sonucunda reaksiyon sonlandırıldı. Tuzlu su (50 mL) ve etil asetat (50 mL) sisteminden ekstraksiyon yapıldı, organik faz ayrılarak MgSO<sub>4</sub> üzerinde kurutuldu ve çözücü düşük basınç altında uzaklaştırıldı. Elde edilen ham ürün 1:1 etil asetat/*n*-hekzan sisteminden kolon kromatografisi yardımıyla saflaştırıldı. Kolon sonucunda **Bileşik-5** beyaz kristaller olarak elde edildi.

Beyaz renkli kristaller, en. 80.2-81.7°C, Rf: 0.38 (1:1 etilasetat/*n*-hekzan), verim %41. FTIR (ATR): 3015 ve 3013 (aromatik =C-H gerilimi), 2985 ve 2841 (alifatik C-H gerilimleri), 1772 ve 1711 (C=O gerilimleri), 1605 ve 1568 (C=N, C=C gerilimleri), 1515, 1493, 1460, 1421 ve 1381 (alifatik, düzlem içi C-H eğilimleri), 1256 ve 1250 (C-O gerilimi), 1171 (C-O-C gerilimi), 1026 (C-N salınımı), 741 ve 738 (p-disubstitue aromatik halka düzlem dışı C-H eğilimleri) cm<sup>-1</sup>. <sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 500 MHz): 1.61 (d, *J* = 13.8 Hz, 1H, H<sub>10a</sub>), 1.87 (m, 2H, H<sub>7s</sub>, H<sub>9x</sub>), 1.92 (dd, *J* = 14.15; 2.93 Hz, 1H, H<sub>9n</sub>), 2.91 (d, *J* = 5.4 Hz, 2H, H<sub>1</sub>, H<sub>7</sub>), 3.0 (brds, 1H, H<sub>2</sub>), 3.21-3.25 (m, 1H, H<sub>6</sub>), 3.25 (dd, *J* = 5.37; 5.13 Hz, 1H, H<sub>8n</sub>), 3.86 (s, 3H, OCH<sub>3</sub>), 3.88 (s, 3H, OCH<sub>3</sub>), 6.90 (d, *J* = 8.8 Hz, 2H, HAr), 7.10 (d, *J* = 8.28 Hz, 2H, HAr), 7.21 (d, *J* = 8.28 Hz, 2H, HAr), 7.83 (d, *J* = 8.8 Hz, 2H, HAr), 8.99 (s, 1H, N=CH) ppm. <sup>13</sup>C-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 125 MHz): 32.7 (CH<sub>2</sub>), 39.0 (CH), 41.0 (CH), 41.3 (CH), 45.8 (CH), 46.3 (CH), 46.9 (CH<sub>2</sub>), 55.4 (OCH<sub>3</sub>), 55.5 (OCH<sub>3</sub>), 116.3 (2xCAr), 121.5 (2xCAr), 126.8 (Cq), 130.1 (Cq) 131.1 (2xCAr), 132.0 (2xCAr), 159.9 (Cq) 161.5 (Cq), 154.1 (N=CH), 174.2 (C=O), 174.3 (C=O) ppm. GC-MS (EI, 70eV): (C<sub>24</sub>H<sub>24</sub>N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>) m/z: 404 [M]<sup>+</sup>.

## SONUÇ

Sonuç olarak, bisiklik yapıda schiff bazları sentezlenmiş ve indirgen Heck reaksiyonları kullanılarak türevlendirilmiştir. Sentezlenen bu yeni bileşiklerin yapıları FTIR, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR ve GC-MS kullanılarak aydınlatılmıştır. Bu sentezlenen yeni bileşiklerin çeşitli kanser hücre hatlarına karşı anti-kanser aktivite göstermesi beklenmektedir. Bir sonraki çalışmada MTT test yöntemi ile bu bileşiklerin anti-kanser aktiviteleri belirlenmesi planlanmaktadır.

## TEŞEKKÜR

Bu çalışmada desteklerini esirgemeyen rahmetli hocamız Prof.Dr. Nüket ÖCAL'a sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

## KAYNAKLAR

1. Dang, C. V. (2018). Convergence to Cure Cancer through Research. *Cancer Res*, 78 (1), 3-4.
2. Hait, W. N. (2011). Forty Years of Translational Cancer Research. *Cancer Discov*, 1 (7), 627-627.
3. Balaraman, S., Nayak, N., Subbiah, M. ve Elango, K. P. (2018). Synthesis and antiviral study of novel 4-(2-(6-amino-4-oxo-4,5-dihydro-1H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidin-3-yl)ethyl)benzamide derivatives. *Med Chem Res* 27 (11-12), 2538-2546.
4. Gujarati, N. A., Zeng, L. L., Gupta, P., Chen, Z. S. ve Korlipara, V. L. (2017). Design, synthesis and biological evaluation of benzamide and phenyltetrazole derivatives with amide and urea linkers as BCRP inhibitors. *Bioorg Med Chem Lett*, 27 (20), 4698-4704.
5. Kaur, A., Pathak, D. P., Sharma, V., Narasimhan, B., Sharma, P., Mathur, R. ve Wakode, S. (2018). Synthesis, biological evaluation and docking study of N-(2-(3,4,5-trimethoxybenzyl)benzoxazole-5-yl) benzamide derivatives as selective COX-2 inhibitor and anti-inflammatory agents. *Bioorg Chem*, 81, 191-202.
6. Lu, K., Cai, L. D., Zhang, X., Wu, G. D., Xu, C. J., Zhao, Y. F. ve Gong, P. (2018). Design, synthesis, and biological evaluation of novel substituted benzamide derivatives bearing a 1,2,3-triazole moiety as potent human dihydroorotate dehydrogenase inhibitors. *Bioorg Chem*, 76, 528-537.
7. Perin, N., Roskaric, P., Sovic, I., Bocek, I., Starcevic, K., Hranjec, M. ve Vianello, R. (2018). Amino-Substituted Benzamide Derivatives as Promising Antioxidant Agents: A Combined Experimental and Computational Study. *Chem Res Toxicol*, 31 (9), 974-984.
8. Thirumurugan, K., Lakshmanan, S., Govindaraj, D., Prabu, D. S. D., Ramalakshmi, N. ve Antony, S. A. (2018). Design, synthesis and anti-inflammatory activity of pyrimidine scaffold benzamide derivatives as epidermal growth factor receptor tyrosine kinase inhibitors. *J Mol Struct*, 1171, 541-550.
9. Vandyck, K., Rombouts, G., Stoops, B., Tahri, A., Vos, A., Verschueren, W., Wu, Y. M., Yang, J. M., Hou, F. L., Huang, B., Vergauwen, K., Dehertogh, P., Berke, J. M. ve Raboisson, P. (2018). Synthesis and Evaluation of N-Phenyl-3-sulfamoyl-benzamide Derivatives as Capsid Assembly Modulators Inhibiting Hepatitis B Virus (HBV). *J Med Chem* 61 (14), 6247-6260.
10. Wei, M. M., Peng, X., Xing, L., Dai, Y., Huang, R. M., Geng, M. Y., Zhang, A., Ai, J. ve Song, Z. L. (2018). Design, synthesis and biological evaluation of a series of novel 2-benzamide-4-(6-oxy-N-methyl-1-naphthamide)-pyridine derivatives as potent fibroblast growth factor receptor (FGFR) inhibitors. *Eur J Med Chem*, 154, 9-28.
11. Creaven, B. S., Duff, B., Egan, D. A., Kavanagh, K., Rossair, G., Thangella, V. R. ve Walsh, M. (2010). Anticancer and antifungal activity of copper(II) complexes of quinolin-2(1H)-one-derived Schiff bases. *Inorg Chim Acta*, 363 (14), 4048-4058.
12. Ghorab, M. M., Shaaban, M. A., Refaat, H. M., Heiba, H. I. ve Ibrahim, S. S. (2012). Anticancer and radiosensitizing evaluation of some new pyranothiazole-Schiff bases bearing the biologically active sulfonamide moiety. *Eur J Med Chem*, 53, 403-407.
13. Obeid, A., El-Shekeil, A., Al-Aghbari, S., Al-Shabi, J. (2012). Anticancer, DNA cleavage, and antimicrobial activity studies of some new Schiff-base titanium(IV) complexes. *J Coord Chem*, 65 (15), 2762-2770.
14. Pignatello, R., Panico, A., Mazzone, P., Pinizzotto, M. R., Garozzo, A. ve Furneri, P. M. (1994). Schiff-Bases of N-Hydroxy-N'-Aminoguanidines as Antiviral, Antibacterial and Anticancer Agents. *Eur J Med Chem*, 29 (10), 781-785.
15. Shukla, S., Srivastava, R. S., Shrivastava, S. K., Sodhi, A. ve Kumar, P. (2013). Synthesis, characterization, in vitro anticancer activity, and docking of Schiff bases of 4-amino-1,2-naphthoquinone. *Med Chem Res*, 22 (4), 1604-1617.
16. Sondhi, S. M., Arya, S., Rani, R., Kumar, N. ve Roy, P. (2012). Synthesis, anti-inflammatory and anticancer activity evaluation of some mono – and bis-Schiff's bases. *Med Chem Res*. 21 (11), 3620-3628.
17. Tabassum, S., Amir, S., Arjmand, F., Pettinari, C., Marchetti, F., Masciocchi, N., Lupidi, G. ve Pettinari, R. (2013). Mixed-ligand Cu(II)-vanillin Schiff base complexes; effect of coligands on their DNA binding, DNA cleavage, SOD mimetic and anticancer activity. *Eur J Med Chem*, 60, 216-232.
18. Berlinck, R. G. S., Britton, R., Piers, E., Lim, L., Roberge, M., da Rocha, R. M. ve Andersen, R. J. (1998). Granulatimide and isogranulatimide, aromatic alkaloids with G2 checkpoint inhibition activity isolated from the Brazilian ascidian *Didemnum granulatatum*: Structure elucidation and synthesis. *J Org Chem*, 63 (26), 9850-9856.
19. Lavrard, H., Rodriguez, F. ve Delfourne, E. (2014). Design of granulatimide and isogranulatimide analogues as potential Chk1 inhibitors: Study of amino-platforms for their synthesis. *Bioorgan Med Chem*, 22 (17), 4961-4967.
20. Loubinoux, B., Gerardin, P., Kunz, W. ve Herzog, J. (1991). Activity of Fumaramidmycin Mimics against Oomycetes. *Pestic Sci*, 33 (3), 263-269.
21. Moreau, P., Anizon, F., Sancelme, M., Prudhomme, M., Bailly, C., Carrasco, C., Ollier, M., Severe, D., Riou, J. F., Fabbro, D., Meyer, T. ve Aubertin, A. M. (1998). Syntheses and biological evaluation of indolocarbazoles, analogues of rebeccamycin, modified at the imide heterocycle. *J Med Chem*, 41 (10), 1631-1640.
22. Moreau, P., Anizon, F., Sancelme, M., Prudhomme, M., Severe, D., Riou, J. F., Goossens, J. F., Henichart, J. P., Bailly, C., Labourier, E., Tazzi, J., Fabbro, D., Meyer, T. ve Aubertin, A. M. (1999). Synthesis, mode of action, and biological activities of rebeccamycin bromo derivatives. *J Med Chem*, 42 (10), 1816-1822.

23. Browne, S. G. (1960). Cantharidin Poisoning Due to a "Blister Beetle". *Br Med J*, 2 (5208), 1290-1.
24. Feng, S., Zhu, J., Xia, K., Yu, W., Wang, Y., Wang, J., Li, F., Yang, Z., Yang, X., Liu, B., Tao, H. ve Liang, C. (2018). Cantharidin Inhibits Anti-Apoptotic Bcl-2 Family Proteins and Induces Apoptosis in Human Osteosarcoma Cell Lines MG-63 and MNNG/HOS via Mitochondria-Dependent Pathway. *Med Sci Monit*, 24, 6742-6749.
25. Liu, Y. P., Li, L., Xu, L., Dai, E. N. ve Chen, W. D. (2018). Cantharidin suppresses cell growth and migration, and activates autophagy in human non-small cell lung cancer cells. *Oncol Lett*, 15 (5), 6527-6532.
26. Mu, Z. ve Sun, Q. (2018). Cantharidin inhibits melanoma cell proliferation via the miR21mediated PTEN pathway. *Mol Med Rep*, 18 (5), 4603-4610.
27. Wang, G., Dong, J. ve Deng, L. (2018). Overview of Cantharidin and its Analogues. *Curr Med Chem*, 25 (17), 2034-2044.
28. Wang, W. J., Wu, M. Y., Shen, M., Zhi, Q., Liu, Z. Y., Gong, F. R., Tao, M. ve Li, W. (2015). Cantharidin and norcantharidin impair stemness of pancreatic cancer cells by repressing the beta-catenin pathway and strengthen the cytotoxicity of gemcitabine and erlotinib. *Int J Oncol*, 47 (5), 1912-22.
29. Li, C. C., Yu, F. S., Fan, M. J., Chen, Y. Y., Lien, J. C., Chou, Y. C., Lu, H. F., Tang, N. Y., Peng, S. F., Huang, W. W. ve Chung, J. G. (2017). Anticancer effects of cantharidin in A431 human skin cancer (Epidermoid carcinoma) cells in vitro and in vivo. *Environ Toxicol*, 32 (3), 723-738.
30. Gul, M., Kulu, I., Gunkara, O. T. ve Ocal, N. (2013). Reductive Heck Reactions and [3+2] Cycloadditions of Unsaturated N,N'-Bistryclic Imides. *Acta Chim Slov*, 60 (1), 87-94.
31. Gunkara, O. T., Kulu, I. ve Ocal, N. (2015). Aryl – and Heteroaryl Substituted Tandospirones as Possible Antidepressant Drugs. *Mini-Rev Med Chem*, 15 (9), 789-796.
32. Gunkara, O. T., Kulu, I., Ocal, N. ve Kaufmann, D. E. (2010). Synthesis of arylated norbornyl amino acid esters. *Monatsh Chem*, 141 (11), 1237-1243.
33. Gunkara, O. T. ve Ocal, N. (2015). Hydroarylation Reactions of N-Substituted Tricyclic Imides. *Mini-Rev Org Chem*, 12 (5), 424-434.
34. Niwayama, S., Cho, H., Zabet-Moghaddam, M. ve Whittlesey, B. R. (2010). Remote exo/endo selectivity in selective monohydrolysis of dialkyl bicyclo[2.2.1]heptane-2,3-dicarboxylate derivatives. *J Org Chem*, 75 (11), 3775-80.
35. Kas'yan, L. I., Tarabara, I. N., Bondarenko, Y. S., Shishkina, S. V., Shishkin, O. V. ve Musatov, V. I. (2005). Structure and reactivity of bicyclo[2.2.1]hept-2-ene-endo-5,endo-6-dicarboxylic (endic) acid hydrazide. *Russ J Org Chem+*, 41 (8), 1122-1131.

# Elucidating Structural Details of Ras-Effector Interactions

## Ras-Efektör Etkileşimlerinin Yapısal Detaylarının Açığa Çıkarılması

Serena MURATCIOGLU<sup>1,2</sup> , Saliha Ece ACUNER-OZBABACAN<sup>3</sup> 

<sup>1</sup> Department of Chemical and Biological Engineering, Koc University, Istanbul 34450, Turkey

<sup>2</sup> Department of Molecular and Cell Biology, University of California Berkeley, US

<sup>3</sup> Department of Bioengineering, Istanbul Medeniyet University, Istanbul 34700, Turkey

### Abstract

Small membrane-associated Ras proteins mediate a wide range of cellular functions, such as cell proliferation, migration, survival, and differentiation; through binding and activating numerous effectors. Constitutively active mutant Ras proteins are detected in various types of human cancer and Ras community seeks approaches other than small-molecule Ras inhibitors; such as targeting the protein-protein interactions in the downstream Ras effector pathways and preventing its membrane localization. Although the most studied effectors of Ras, i.e. Raf, PI3K and RalGDS, bind Ras through the same site, they elicit opposing signaling pathways and thus, the temporal and spatial decision of the cell among them is critical. Elucidating the structural details of Ras-effector interactions can help us understand the cell decision and target the protein-protein interactions precisely. However, only a few crystal structures of Ras in complex with an effector are deposited in PDB. Here, the 3D structures of Ras/effector complexes were modeled with the PRISM algorithm and important binding sites as well as hot spot residues on Ras were identified. The effectors were also classified according to the binding regions on Ras, to determine the competitive pathways and the binding regions other than the “effector lobe”. The modeled complexes reveal important information about the interfaces between Ras and its partners with the potential of guiding drug design studies to block oncogenic Ras signaling

**Keywords:** Ras effectors, oncogenic signaling, protein-protein interaction, protein-protein interface, hot spot, protein structure

### Öz

Hücre zarıyla ilintili küçük Ras proteinleri pek çok efektöre bağlanıp onları aktif hale getirerek hücre çoğalması, göçü, hayatta kalma ve farklılaşması gibi çeşitli hücresel işlevleri kontrol ederler. Ras üzerindeki mutasyonlar, yapısal olarak aktif proteine sebebiyet verir ve insandaki birçok kanser tipinde tespit edilmişlerdir ve Ras topluluğu Ras'ı hedef alan küçük moleküllü inhibitörler tasarlamak yerine Ras'ın efektör yollarındaki protein-protein etkileşimlerini hedef alarak Ras'ın zar üzerindeki lokalizasyonunu engellemeyi amaçlamaktadır. Ras'ın en çok çalışılan efektörleri, Raf, PI3K ve RalGDS, Ras'a aynı yüzeyden bağlanmasına rağmen karşıt sinyal yollarını ortaya çıkarırlar ve dolayısıyla hücrenin bu yollar arasındaki zamansal ve mekansal kararları kritik öneme sahiptir. Ras/efektör etkileşimlerinin yapısal detaylarını açığa çıkarmak, hücrenin karar mekanizmasını anlamamıza ve protein-protein etkileşimlerini hassas olarak hedeflememize yardımcı olabilir. Bununla birlikte, sadece birkaç Ras/efektör kompleksinin kristal yapısı PDB'de bulunmaktadır. Bu çalışmada, Ras/efektör komplekslerinin 3 boyutlu yapıları PRISM algoritması ile modellenmiştir ve Ras üzerindeki sıcak nokta kalıntılarının yanı sıra önemli bağlanma bölgeleri belirlenmiştir. Efektörler ayrıca, rekabetçi yolları ve “efektör lobu” dışındaki bağlayıcı bölgeleri belirlemek için Ras'daki bağlayıcı bölgelere göre sınıflandırılmıştır. Modellenen kompleksler, Ras ve ortakları arasındaki arayüzeyler hakkında onkolojik Ras sinyal iletimini bloke etmek için ilaç tasarım çalışmalarına rehberlik etme potansiyeli olan önemli bilgiler ortaya koymaktadır.

**Anahtar Kelimeler:** Ras efektörleri, onkolojik sinyal iletimi, protein-protein etkileşimi, protein-protein arayüzeyi, protein yapısı



## I. INTRODUCTION

### 1.1 Ras Family of Proteins

Ras-family proteins regulate diverse functions in the cell such as proliferation, migration, survival, and differentiation [1-2] and they are small membrane-associated GTPases that can activate multiple signaling pathways. Once getting activated by upstream regulators; they recruit and activate their downstream effectors such as Raf, phospho-inositol 3 kinase (PI3K), and Ral guanine nucleotide dissociation stimulator (RalGDS) [3-5], to the plasma membrane and initiate a signaling cascade leading to several responses within the cell. GTPases switch between GTP-bound active (on) and GDP-bound inactive (off) states. Ras can transmit signals in the GTP-bound active state but when GTP is hydrolyzed to GDP, it switches to an off state unable to relay a signal. The intrinsic replacement of GDP by GTP and hydrolysis of GTP to GDP processes are catalyzed within the cell by upstream regulators of Ras, i.e. guanine nucleotide exchange factors (GEFs) and GTPase activating proteins (GAPs), respectively [6-7].

### 1.2 Structure of Ras

The available crystal structures of H-Ras reveal that the catalytic domain of Ras is composed of six  $\beta$ -strands ( $\beta$ 1- $\beta$ 6), 4-to-7  $\alpha$ -helices (number of helices differs in structures) ( $\alpha$ 1- $\alpha$ 7) and around ten connecting loops. The functional regions on Ras are p-loop (residues between 10-17), switch I (between 30-38), and switch II (between 59-76) comprising the active nucleotide and effector binding sites (Figure 1) [8]. One of the dimer interfaces on Ras, which is majorly populated, is  $\beta$ -sheet dimer interface at the effector binding site and it overlaps with the binding surfaces of effectors such as Raf, PI3K and RalGDS [9-10]. The first half of the catalytic domain (residues 1-86, called “effector lobe”) is identical in Ras isoforms [11-12]. The rest of the molecule, residues 87-166, called “allosteric lobe”, contains a more variable sequence among Ras isoforms. This allosteric site (including the last three/four helices and  $\beta$ 5- $\beta$ 6 strands) serves as the second half of the catalytic domain [13] and overlaps with the Ras dimerization through the helical interface [10] (Figure 1).

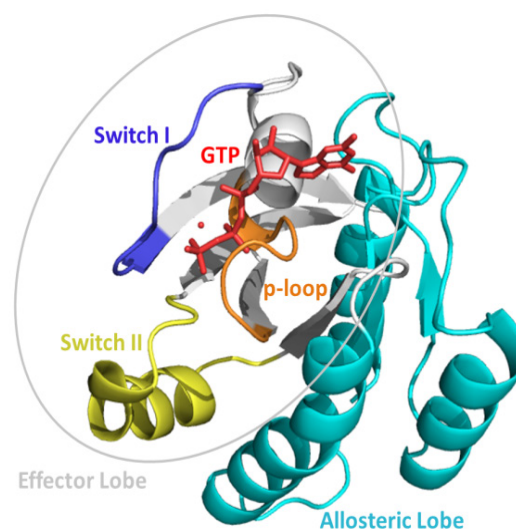


Figure 1. Structure of H-Ras (PDB ID: 1QRA).

### 1.3 Ras in Cancer

Majority of the oncogenic Ras mutations are at G12, G13 and Q61 residues and they result in impaired GTP hydrolysis, keeping the protein in the constitutively active GTP-bound state. Moreover, these mutant Ras genes are shown to be present in nearly 30% of metastatic cancers [14-15]. Four highly similar isoforms are encoded by human RAS genes: H-Ras, N-Ras, K-Ras4A and 4B [16]. However, the frequency of Ras mutations are not equally distributed between Ras isoforms according to the Catalog of Somatic Mutations in Cancer (COSMIC) database [17]: K-Ras with 86%, N-Ras with 11% and H-Ras with 3% mutation frequency [18]. After more than three decades of research, Ras proteins were classified as “undruggable” [19]. However, allosteric inhibitors that target Ras interactions have recently been reported [20-25] and subsequently, the challenging task of directly targeting Ras has shifted to the leading approach of Ras inactivation through protein-protein interaction disruption [26].

### 1.4 Effectors of Ras

Once activated, Ras interacts with a wide range of downstream proteins, called “Ras effectors” [27-29], and initiate several signaling pathways in the cell. Although the sequence homology of Ras effectors is low, the Ras Binding Domain (RBD) that binds to active Ras is conserved among the effectors [30]. However, attraction to these domains decreases approximately 1000-fold in the inactive state [31]. The structural details of the interaction between Ras and effector



RBDs are provided by the available crystal structures in PDB [32] (Table 1). The most studied downstream effector of Ras is the serine/threonine kinase Raf, which functions in the Ras-Raf-MEK-ERK signaling cascade [33]. The paralogs of Raf, expressed in mammals are A-, B - and C-Raf (Raf-1). Phosphatidylinositol 3-kinase (PI3K) [34-35] effector of Ras is also important and necessary for activating the Akt family Ser/Thr kinases, which promote apoptosis inhibition and cell survival [36-37]. Another well-known Ras effector is the Ral guanine nucleotide dissociation stimulator (RalGDS) [38-39] functioning in cell vesicular trafficking and NF- $\kappa$ B activation.

Active Ras contributes to the activation of Raf proteins by recruiting them to the plasma membrane [40]. Then, MEK proteins are phosphorylated and activated by Raf, leading to the subsequent phosphorylation and activation of ERK proteins. Ultimately, the propagating signal activates a couple of transcription factors that regulate and promote cell-cycle progression [41]. The C-Raf RBD (residues between 55-131, RafRBD) was shown to directly interact with the H-Ras-GTP [42-44] and the mutations (such as E31, T35, and E37) in switch I loop of H-Ras were shown to significantly impair the association with RafRBD, revealing the importance of the highly conserved switch I region among Ras isoforms for the stability of Ras/RBD of effector complexes [45-46]. Additionally, the crystal structures of wild-type and Q61L mutant H-Ras-GTP (PDB IDs: 4G0N and 4G3X, respectively) in complex with RBD of Raf kinase show that Switch II becomes more rigid upon oncogenic Q61L mutation [47].

## II. MATERIALS AND METHODS

### 2.1 Modeling the 3D structures of Ras complexes with their regulators/effectors and analysis of the interfaces

The effector binding regions on Ras were predicted using PRISM, a protein-protein complex structure prediction algorithm [48-50]. PRISM is a template-based algorithm and the templates used in the predictions are the protein-protein interface motifs that are observed to be conserved and used repeatedly in nature. This prediction algorithm has been tested for different pathways resulting in high accuracy [51]. To build protein-protein interaction complex models, PRISM uses the given target 3D structures of proteins of interest. The resulting models are ranked based on their binding energy scores (BES) computed by FiberDock [52].

Crystal structures of the H-Ras with Raf-1, PI3K $\gamma$ , RalGDS, PLC $\epsilon$ , Bry22, and RASSF5 are available in PDB (Table 1). Some effectors (RASSF1, RAIN, RGS12, RGL1, AFAD RA2, RIN1) do not have a tertiary structure in PDB, so the 3D models of these proteins were built using I-TASSER [53] (Table 2). G-domains (residues 4-166) of H - and K-Ras were used as targets and their complex structures with the binding partners were modeled. After modeling the complexes, the interface regions of the dimers and energetically important hot spot residues on them were identified using the HotRegion [54]. The results were compared with crystal structures for validation of predictions.

**Table 1.** Available complexes of human H – and K-Ras with their regulators/effectors in PDB.

Monomer 1	Monomer 2	PDB ID	
H-Ras	Sos1	1BKD, 1NVU, 4URU, 4URV, 4URW, 4URX, 4URY, 4URZ, 4US0, 4US1, 4US2,	
		p120GAP	1WQ1
		C-Raf	4G0N, 4G3X
		PI3Kgamma	1HE8
		RalGDS	1LFD
		PLCepsilon	2C5L
	Bry2	1K8R	
RASSF5 (Nore1A)	3DDC		
K-Ras	Raf	2MSE	

**Table 2.** The list of target protein structures used in PRISM calculations.

Protein	Domain	PDB ID
CDC42	Full-length	2NGR
Sos1	Catalytic domain (GEF fragment)	1BKD
p120GAP	Catalytic domain (GAP fragment)	1WQ1
Raf	Ras binding domain (RBD)	1C1Y
PI3Kalpha	Ras binding domain (RBD)	2RD0
RalGDS	Ras-associating domain (RA)	3KH0
PLCepsilon	Ras-associating domain (RA)	2C5L
Bry2	Ras binding domain (RBD)	1K8R
RASSF5	Ras-associating domain (RA)	3DDC
AFAD RA1	Ras-associating domain 1 (RA1)	6AMB
AFAD RA1 & RA2	Ras-associating (RA) or Ras binding domain (RBD)	Model
RAIN		
RGS12		
RASSF1		
RGL1		

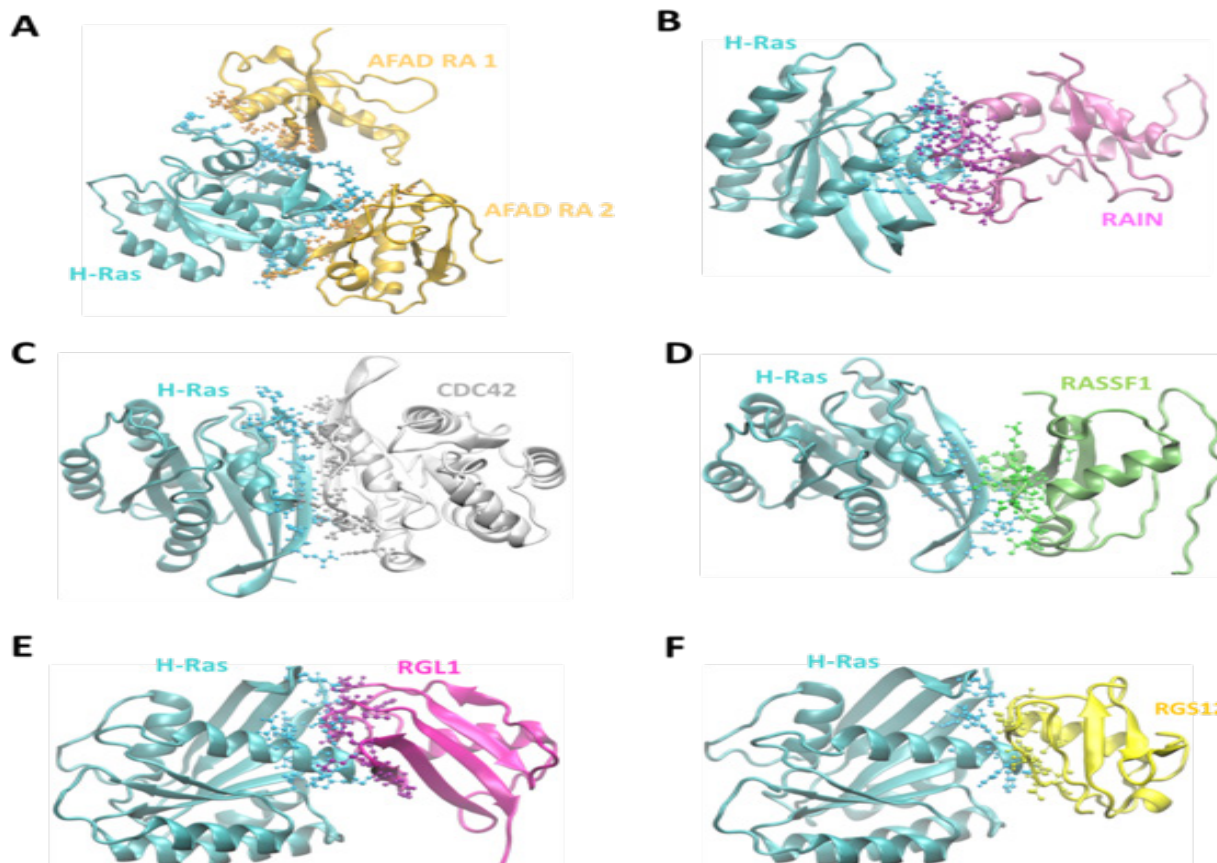
### III. RESULTS AND DISCUSSION

#### 3.1 Models of H - and K-Ras with their Effectors and Regulators

The crystal structures of H - and K-Ras with their regulator and effector proteins, available in PDB (Table 1), indicate that effector binding sites overlap  $\beta$ -sheet dimer interface of Ras [9]. Using PRISM we also identified the other regulator/effector binding regions on H - and K-Ras (Table 3). Figures 2 and 3 show the modeled complex structures of H-Ras and K-Ras4B proteins with their binding partners, respectively. After modeling the complex structures, HotRegion [54] is used to identify the hot spot residues and hot regions on modelled Ras-effector dimer interfaces (Table 4, Figures 2-4).

**Table 3.** H - and K-Ras complexes modeled by PRISM algorithm

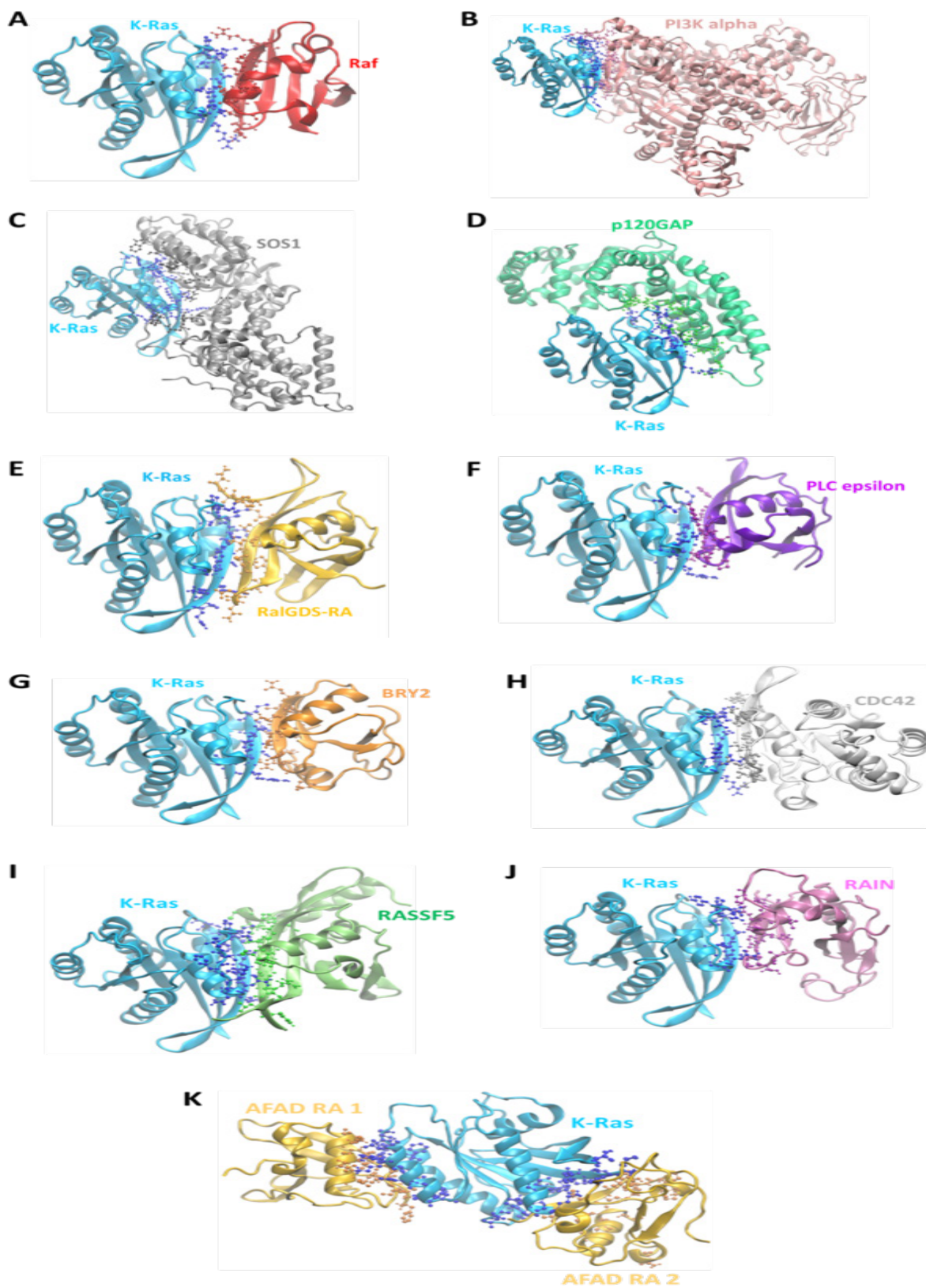
Ras Isoform (PDB ID)	Binding Partner (PDB ID)	Template Interface	Binding Energy Score (BES)
H-Ras (1QRA)	AFAD RA 1 (Model)	1lfdCD	-21.71
	AFAD RA 2 (Model)	1mo1AB	-17.80
	RAIN (Model)	3iicAB	-32.06
	RGS12 (Model)	1fr3AB	-14.28
	RASSF1 (Model)	1whmAB	-32.49
	RGL1 (Model)	1fr3AB	-35.40
	CDC42 (2NGR)	2erxAB	-26.56
K-Ras (3GFT)	Sos1 (1BKD)	1nvuQS	-37.47
	p120GAP (1WQ1)	1wq1GR	-23.16
	Raf (1C1Y)	1clyAB	-51.19
	PI3K $\alpha$ (2RD0)	1lfdCD	-23.24
	RalGDS (3KH0)	1lfdCD	-45.24
	PLC $\epsilon$ (2C5L)	1lfdCD	-37.26
	Bry2 (1K8R)	1k8rAB	-43.50
	AFAD RA1 (Model)	2pmcAB	-32.66
	AFAD RA2 (Model)	1mo1AB	-31.20
	RAIN (Model)	1lfdCD	-8.31
	RASSF5 (Nore1A) (3DDC)	1lfdCD	-51.49
	CDC42 (2NGR)	2erxAB	-18.29



**Figure 2.** Modeled complex structures of H-Ras. Residues participating in the interface are shown in ball-and-stick representation. See Table 4 for interface details.

**Table 4.** The list of interface and hot spot residues of the modeled Ras/effector complexes. Hot spot residues are shown with an asterisk (\*) and residues/domains at the allosteric lobe of Ras are underlined.

Complex (PDB IDs)	Ras residues in the interface (*hot spots)	Corresponding Ras domains in the interface	Effector residues in the interface (*hot spots)
H-Ras/AFAD RA1	E31, D33, I36*, E37, D38, S39, R41, Y64, A66, M67*	Switch I and II a3, b2	F55, T57, K58, C59*, I60*, R61, E77, K78, R80
H-Ras/AFAD RA2	M1, T2, E3, K5, T74, E76*, <u>K104, S106, D108, P110, H166*</u>	Switch II, <u>Allosteric Lobe</u> a3, <u>a5, a7</u> , b1, <u>b5</u>	S246, G247, G248, T249*, R251*, Y263*, T265, L267, D310
H-Ras/RAIN	Q22*, L23*, I24*, Q25*, N26, H27*, F28*, V29, D30, <u>K147, T148, R149*, V152*, E153, Y157*</u>	Switch I, <u>Allosteric Lobe</u> a1, <u>a7, b6</u>	L208*, R210, A211, H225, V238*, L241*, W242*, R243, A244, R245, P246, G247, W248, R250*
H-Ras/Cdc42	Q25*, N26, E31, D33, I36*, E37, D38, S39, Y40*, R41, K42, Q43, L52*, Y64*	Switch I and II a1, a2, b2, b3	M1, I21*, T24, T25, K27, E31, V33, V36*, F37*, D38, N39, Y40*, A41, V42, T43, T52*, Y64*
H-Ras/RASSF1	M1, E3, K5, I24*, S39, R41*, K42*, T50, D54, T74	Switch II a1, a3, b1, b2, b3	E250, A252*, R254*, H255, R261, K262, L263, L264, E267, Q268*, L272, L275*
H-Ras/RGL1	M1, T2*, E3, Y4*, E49, E76, <u>V160*, I163*, R164*, Q165, H166</u>	Switch II, <u>Allosteric Lobe</u> <u>a7, b1</u>	D648, E704, K706, E707, L708*, V709, F717*, Y718, A719, M720*, N721, S722*, Q723, V724
H-Ras/RGS12	T2, Y4*, E49, <u>I163*, R164*, Q165, H166</u>	<u>Allosteric Lobe</u> <u>a7, b1, b3</u>	S973, C974*, V975, V976*, L991*, E993, R994, H995*, G996
K-Ras/Raf	I21*, Q25, V29, D30, D33, I36, E37*, D38*, S39, Y40*, R41, D54, L56*	Switch I a1, b2, b3	T57, N64, K65, Q66*, R67, T68*, V69*, K84, V88, R89*, G90
K-Ras/PI3K p110 $\alpha$	I24*, Q25, D30, E31, D33, I36, E37*, D38, S39, Y40*, R41*, K42, Q43, M67, Q70	Switch I and II a1, a2, b2	W195*, N201, N202, D203, K204, Q205*, K206*, T208, K227, R230, S231, M232, L233, M282*, L792*
K-Ras/Sos1	Q22*, I24, Q25, N26*, Y32, D33, P34, T35, I36, E37, D38*, S39, Y40*, R41, L56*, H61, M67, Q70, <u>R149*</u>	Switch I and II, <u>Allosteric Lobe</u> a1, a2, b2, b3	H616, M617, Y618*, P621, N622, R625, P684, L687, R688*, N691, R694, H699, W729, S732, R739, I752, A965, E966, G969, Q973, N976, Q977
K-Ras/p120GAP	S17, I21*, Q25, H27, Y32, D33, P34, T35, I36*, E37*, D38*, S39*, Y40*, R41, H61, E63, A66, M67	Switch I and II a1, a2, b2	T785, R789*, E799, P832, S833, L902*, R903, C906*, L910*, N911, I931*, A934, K935*, Q938*, N942, V944, G947, A948, K949*, E950, Y952*
K-Ras/RalGDS	I24*, Q25, D33, P34, T35, I36*, E37, D38, S39, Y40*, R41	Switch I a1, b2	N787, L788, Y789, I801, R803, D809, N810, G811, N812, M813*, Y814*, K815, S816
K-Ras/PLC $\epsilon$	I24, Q25*, V29, I36, E37, D38*, S39, Y40*, R41, D54	Switch I a1, b2, b3	F2138, P2146, E2147, Q2148*, P2149, R2150, T2151, V2152*, Y2174, S2175*
K-Ras/Bry2	I36*, E37, D38, S39, Y40*, R41*, D54, M67, Q70	Switch I and II a2, b2, b3	I72, R74, G80, Q81, T82, R83*, A84, V85*, Q86, K101, D141, E156, R160, E165
K-Ras/Cdc42	Q25*, H27, E31, D33, I36, E37, D38, S39, Y40*, R41*, M67	Switch I and II a1, a2, b2	M1, T25, K27, S30, E31, V33, V36, F37, D38, N39, Y40*, A41, V42*, T43
K-Ras/RASSF5	I21*, I24, Q25*, N26, H27, V29, D30, D33, P34, T35, I36, E37*, D38, S39, Y40*, R41, S65, A66, M67, Q70	Switch I and II a1, a2, b2	E217, K218, C220, L221*, F234*, R243*, L277, P278, L279*, D280, A281*, I282, K283, Q284*, K303, F304*, M305
K-Ras/RAIN	I21*, I24*, Q25, E31, Y32, D33, P34, T35, I36, E37, D38, S39, Y40*	Switch I a1, b2	A156, S157, G158, A159*, N160, Y161*, K162*, S163, L165, E181, R182*, G184, P189
K-Ras/AFAD RA1	<u>T87, K88, F90*, E91, H94, T124, V125*, D126, K128, Q129*, D132, L133*, S136, Y137*</u>	<u>Allosteric Lobe</u> <u>a3, a4, a5</u>	F39, H40*, G41, V42, C59*, I60*, R61*, V62*, S63, D70, E73, T74*, E77, K78
K-Ras/AFAD RA2	M1, T2, E3*, Y4*, K5, T50, T74, E76*, <u>K104, D108, I163*, H166, K167</u>	Switch II, <u>Allosteric Lobe</u> <u>a4, a6</u>	S246, G247, G248, T249*, L250*, R251, Y253*, Y263, T265, L267, D310, L326*, F329*, R330, I338, L339

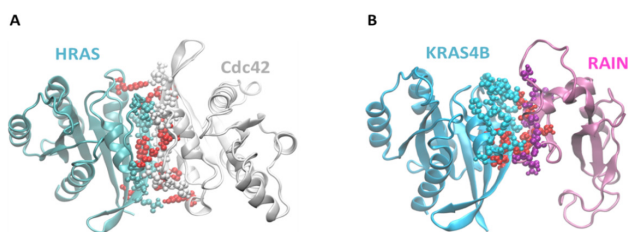


**Figure 3.** Modeled complex structures of K-Ras. Residues participating in the interface are shown in ball-and-stick representation. See Table 4 for interface details.



### 3.1.1 Case study (H-Ras/Cdc42, K-Ras4B/RAIN complexes)

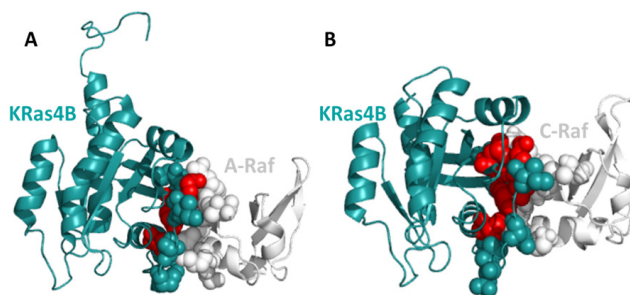
One of the dimer interfaces on Ras, which is majorly populated, is  $\beta$ -sheet dimer interface at the effector binding site and it overlaps with the binding surfaces of effectors such as Raf, PI3K and RalGDS [9-10]. From the identified interface and hotspot residues on modeled Ras-Ras homodimer and Ras-effector heterodimer interfaces, this similarity can be deduced (Table 4) and a case study comparison is depicted in Figure 4. Ras-Ras homodimer H-Ras/Cdc42 model is aligned with the modeled complex of K-Ras4B with its effector Ras associating (RA) domain of Ras interacting protein 1 (RAIN), showing the shared binding interface and hot spots.



**Figure 4.** Comparison of Ras-Ras homodimer and Ras-effector heterodimer interfaces **A)** H-Ras (1QRA) / Cdc42 (2NGR). **B)** K-Ras4B (3GFT) / RAIN(Model). Interfaces are shown as ball-and-stick, hot spots in red.

### 3.1.2 Case study (Ras/RASSF, Ras/Raf complexes)

The modeling results indicate that Ras interacts with Ras association domain-containing protein (RASSF) and Raf through a similar interface, involving the  $\beta$ -sheet extension region (Table 4). RASSF is a potential tumor suppressor that promotes Ras induced apoptosis and cell cycle arrest [55]. Raf, on the other hand, is a proto-oncogene that induces cell proliferation. The models suggest that these two effectors with opposing functions use the same interaction surface on Ras and thus compete for same binding site to perform their function. So we may speculate that only one of the pathways is activated at a time, and the cell undergoes either an apoptosis or cell proliferation. As a case study validation of the modeling accuracy, the modeled K-Ras/C-Raf complex is compared with the experimentally determined K-Ras/A-Raf (PDB ID: 2MSE) and they are found to be perfectly aligned (with RMSD 0.557 Å) having similar interface and hot spot residues (Figure 5 and Table 5).



**Figure 5.** K-Ras/Raf complexes. **A)** K-Ras4B/A-Raf (PDB ID: 2MSE). **B)** Modeled complex: K-Ras4B (PDB ID: 3GFT)/C-Raf (PDB ID: 1C1Y) Interface residues are displayed as spheres; hot spots are shown in red.

**Table 5.** Interface and hot spot residue comparison of the modeled and experimentally determined KRas-Raf complexes

Complex (PDB IDs)	Ras residues in the interface (*hot spots)	Effector residues in the interface (*hot spots)
K-Ras/A-Raf (PDB ID: 2MSE)	I21*, Q25, E31, D33, I36, E37*, D38, S39, Y40*, R41, D54	T809, N816, Q818*, R819, T820, V821, K836, K839, V840*, R841
K-Ras/C-Raf (modeled)	I21*, Q25, V29, D30, D33, I36, E37*, D38*, S39, Y40*, R41, D54, L56*	T57, N64, K65, Q66*, R67, T68*, V69*, K84, V88, R89*, G90

### 3.1.3 Interactions of non-canonical effectors with Ras through the allosteric lobe

Most of the effectors bind Ras through effector lobe (involving mainly Switch I and partially Switch II and the  $\beta$ -sheet extension) and thus competes with Ras dimerization through  $\beta$ -sheet interface (Figure 5, Tables 4 and 5). However, importantly, some interfaces between Ras and its non-canonical effectors include residues from the allosteric lobe (the last three or four helices on Ras) and these interactions are namely, H-Ras/AFAD (Adherens Junction Formation Factor Ras associationg (RA) 2 domain); H-Ras/RAIN (Ras interacting protein also called as RasIP1); H-Ras/RGL1 (Ral guanine nucleotide dissociation stimulator-like 1); H-Ras/RGS12 (Regulator of G-protein signaling 12); K-Ras4B/AFAD RA1 and AFAD RA2.

According to the models, H-Ras interacts with RAIN with a much favorable binding energy score than K-Ras4B (Table 3, BES values – 32.06 and – 8.31). When the interface residues are analyzed, the main difference is the participation of allosteric lobe in H-Ras/RAIN but not in K-Ras4B/



RAIN complex (Table 4). Effectors such as Raf, PI3K and RalGDS are well-established effectors of plasma membrane-localized Ras but only a distinct set of Ras effectors is involved in mediating endomembrane Ras signaling and RAIN was experimentally identified as an effector recruiting to Golgi and colocalizing with Ras-GTP *in vivo* [56]. It was also shown that H-Ras and N-Ras can localize to intracellular membranes of the endoplasmic reticulum and Golgi, in addition to the extracellular plasma membrane; however, K-Ras is incapable of intracellular membrane localization [57]. Therefore, the involvement of the allosteric lobe in the interface may explain why RAIN specifically binds to H-Ras but not K-Ras. More interestingly, A146T at the allosteric lobe is the most frequent oncogenic Ras mutation after G12, G13 and Q61 [17] and it is in close proximity to H-Ras-RAIN interface which includes residues K147, T148, R149, V152, E153 and Y157 from the allosteric lobe (Table 4).

Although GTP-bound Ras interacts with AFAD/Afadin (AF6) RA1 domain, mutations at the interface that are known to block the AF6-Ras interaction did not abolish Mixed Lineage Leukemia (MLL)-AF6-mediated oncogenesis [58]. The AF6 RA1 domain rather still mediated the oncogenic self-association of MLL [58]. Thus, it is critical to understand the underlying mechanism. We modeled complexes of RA1 and RA2 domains of AF6 with H-Ras and K-Ras. The interface of the modeled H-Ras/AFAD RA1 complex agrees with the experimentally determined structure and does not involve the allosteric lobe in the interface [59]. Interestingly, however, the interfaces of the modeled H-Ras/AFAD RA2, K-Ras4B/AFAD RA1 and K-Ras4B/AFAD RA2 are largely composed of the allosteric lobe and further experimental analysis may provide more information about the functional outcome of this difference between the isoforms.

### 3.2 Conclusions

The recent leading approach of targeting the oncogenic Ras signaling is through the disruption of protein-protein interactions. Thus, elucidating the structural details of these protein-protein complexes is of crucial importance. However, only a small portion of Ras/effector complexes is experimentally determined and available in PDB. Computational tools for modeling protein-protein interactions help in filling the experimental gap by enriching the available structural data in literature. In this study, a powerful structural prediction algorithm, PRISM, is applied to model the interactions of H-Ras and K-Ras4B with their regulator/effector proteins. The results indicate that, expectedly, most of the

effectors bind to the effector binding region that involves mainly Switch I and partially Switch II on Ras; thus competes with Ras dimerization through  $\beta$ -sheet interface. However, importantly, some effectors – especially the non-canonical ones – bind Ras through the allosteric region involving the last three or four helices on Ras and overlap with the helical Ras dimerization interface, suggesting a role for the “allosteric lobe” that could guide therapeutic studies targeting oncogenic Ras signaling.

### ACKNOWLEDGMENT

This work has been supported by TUBITAK grant number 114M196.

### REFERENCES

- [1] Campbell, S. L., Khosravi-Far, R., Rossman, K. L., Clark, G. J., & Der, C. J. (1998). Increasing complexity of Ras signaling. *Oncogene*, 17(11 Reviews), 1395-1413.
- [2] Reuther, G. W., & Der, C. J. (2000). The Ras branch of small GTPases: Ras family members don't fall far from the tree. *Curr Opin Cell Biol*, 12(2), 157-165.
- [3] Cherfils, J., & Zeghouf, M. (2013). Regulation of small GTPases by GEFs, GAPs, and GDIs. *Physiol Rev*, 93(1), 269-309.
- [4] Geyer, M., & Wittinghofer, A. (1997). GEFs, GAPs, GDIs and effectors: taking a closer (3D) look at the regulation of Ras-related GTP-binding proteins. *Curr Opin Struct Biol*, 7(6), 786-792.
- [5] Sprang, S. R. (1997). G proteins, effectors and GAPs: structure and mechanism. *Curr Opin Struct Biol*, 7(6), 849-856.
- [6] Reuther, G. W., & Der, C. J. (2000). The Ras branch of small GTPases: Ras family members don't fall far from the tree. *Current opinion in cell biology*, 12(2), 157-165.
- [7] Takai, Y., Sasaki, T., & Matozaki, T. (2001). Small GTP-binding proteins. *Physiological reviews*, 81(1), 153-208.
- [8] Muegge, I., Schweins, T., Langen, R., & Warshel, A. (1996). Electrostatic control of GTP and GDP binding in the oncoprotein p21ras. *Structure*, 4(4), 475-489.
- [9] Muratcioglu, S., Chavan, T. S., Freed, B. C., et al. (2015). GTP-Dependent K-Ras Dimerization. *Structure*, 23(7), 1325-1335.
- [10] Lu, S., Jang, H., Muratcioglu, S., et al. (2016). Ras Conformational Ensembles, Allosterity, and Signaling. *Chem Rev*, 116(11), 6607-6665.
- [11] Gorfe, A. A., Grant, B. J., & McCammon, J. A. (2008). Mapping the nucleotide and isoform-dependent structural and dynamical features of Ras proteins. *Structure*, 16(6), 885-896.
- [12] Buhrman, G., O'Connor, C., Zerbe, B., et al. (2011). Analysis of binding site hot spots on the surface of Ras GTPase. *J Mol Biol*, 413(4), 773-789.

- [13] Buhrman, G., Holzapfel, G., Fetics, S., & Mattos, C. (2010). Allosteric modulation of Ras positions Q61 for a direct role in catalysis. *Proc Natl Acad Sci U S A*, 107(11), 4931-4936.
- [14] Barbacid, M. (1987). ras genes. *Annu Rev Biochem*, 56, 779-827.
- [15] Bos, J. L. (1989). ras oncogenes in human cancer: a review. *Cancer Res*, 49(17), 4682-4689.
- [16] Rojas, A. M., Fuentes, G., Rausell, A., & Valencia, A. (2012). The Ras protein superfamily: evolutionary tree and role of conserved amino acids. *J Cell Biol*, 196(2), 189-201.
- [17] Forbes, S. A., Bindal, N., Bamford, S., et al. (2011). COSMIC: mining complete cancer genomes in the Catalogue of Somatic Mutations in Cancer. *Nucleic Acids Res*, 39(Database issue), D945-950.
- [18] Karnoub, A. E., & Weinberg, R. A. (2008). Ras oncogenes: split personalities. *Nat Rev Mol Cell Biol*, 9(7), 517-531.
- [19] Cox, A. D., Fesik, S. W., Kimmelman, A. C., Luo, J., & Der, C. J. (2014). Drugging the undruggable RAS: Mission possible? *Nat Rev Drug Discov*, 13(11), 828-851.
- [20] Maurer, T., Garrenton, L. S., Oh, A., et al. (2012). Small-molecule ligands bind to a distinct pocket in Ras and inhibit SOS-mediated nucleotide exchange activity. *Proc Natl Acad Sci U S A*, 109(14), 5299-5304.
- [21] Ostrem, J. M., Peters, U., Sos, M. L., Wells, J. A., & Shokat, K. M. (2013). K-Ras(G12C) inhibitors allosterically control GTP affinity and effector interactions. *Nature*, 503(7477), 548-551.
- [22] Shima, F., Yoshikawa, Y., Ye, M., et al. (2013). In silico discovery of small-molecule Ras inhibitors that display antitumor activity by blocking the Ras-effector interaction. *Proc Natl Acad Sci U S A*, 110(20), 8182-8187.
- [23] Sun, Q., Burke, J. P., Phan, J., et al. (2012). Discovery of small molecules that bind to K-Ras and inhibit Sos-mediated activation. *Angew Chem Int Ed Engl*, 51(25), 6140-6143.
- [24] Athuluri-Divakar, S. K., Vasquez-Del Carpio, R., Dutta, K., et al. (2016). A Small Molecule RAS-Mimetic Disrupts RAS Association with Effector Proteins to Block Signaling. *Cell*, 165(3), 643-655.
- [25] Cruz-Migoni, A., Canning, P., Quevedo, C. E., et al. (2019). Structure-based development of new RAS-effector inhibitors from a combination of active and inactive RAS-binding compounds. *Proc Natl Acad Sci U S A*.
- [26] Engin, H. B., Carlin, D., Pratt, D., & Carter, H. (2017). Modeling of RAS complexes supports roles in cancer for less studied partners. *BMC Biophys*, 10(Suppl 1), 5.
- [27] Wittinghofer, A., & Herrmann, C. (1995). Ras-effector interactions, the problem of specificity. *FEBS Lett*, 369(1), 52-56.
- [28] Marshall, C. J. (1996). Ras effectors. *Curr Opin Cell Biol*, 8(2), 197-204.
- [29] McCormick, F., & Wittinghofer, A. (1996). Interactions between Ras proteins and their effectors. *Curr Opin Biotechnol*, 7(4), 449-456.
- [30] Koide, H., Satoh, T., Nakafuku, M., & Kaziro, Y. (1993). GTP-dependent association of Raf-1 with Ha-Ras: identification of Raf as a target downstream of Ras in mammalian cells. *Proc Natl Acad Sci U S A*, 90(18), 8683-8686.
- [31] Spoerner, M., Herrmann, C., Vetter, I. R., Kalbitzer, H. R., & Wittinghofer, A. (2001). Dynamic properties of the Ras switch I region and its importance for binding to effectors. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 98(9), 4944-4949.
- [32] Mott, H. R., & Owen, D. (2015). Structures of Ras superfamily effector complexes: What have we learnt in two decades? *Crit Rev Biochem Mol Biol*, 50(2), 85-133.
- [33] Kolch, W. (2000). Meaningful relationships: the regulation of the Ras/Raf/MEK/ERK pathway by protein interactions. *Biochem J*, 351 Pt 2, 289-305.
- [34] Pacold, M. E., Suire, S., Perisic, O., et al. (2000). Crystal structure and functional analysis of Ras binding to its effector phosphoinositide 3-kinase  $\gamma$ . *Cell*, 103(6), 931-944.
- [35] Rodriguez-Viciana, P., & McCormick, F. (2005). RalGDS comes of age. *Cancer Cell*, 7(3), 205-206.
- [36] Datta, S. R., Brunet, A., & Greenberg, M. E. (1999). Cellular survival: a play in three Acts. *Genes & development*, 13(22), 2905-2927.
- [37] Khwaja, A., Rodriguez-Viciana, P., Wennström, S., Warne, P. H., & Downward, J. (1997). Matrix adhesion and Ras transformation both activate a phosphoinositide 3-OH kinase and protein kinase B/Akt cellular survival pathway. *The EMBO journal*, 16(10), 2783-2793.
- [38] Feig, L. A., Urano, T., & Cantor, S. (1996). Evidence for a Ras/Ral signaling cascade. *Trends in biochemical sciences*, 21(11), 438-441.
- [39] Hofer, F., Fields, S., Schneider, C., & Martin, G. S. (1994). Activated Ras interacts with the Ral guanine nucleotide dissociation stimulator. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 91(23), 11089-11093.
- [40] Marais, R., Light, Y., Paterson, H., & Marshall, C. (1995). Ras recruits Raf-1 to the plasma membrane for activation by tyrosine phosphorylation. *The EMBO journal*, 14(13), 3136-3145.
- [41] Yordy, J. S., & Muise-Helmericks, R. C. (2000). Signal transduction and the Ets family of transcription factors. *Oncogene*, 19(55), 6503.
- [42] Vojtek, A. B., Hollenberg, S. M., & Cooper, J. A. (1993). Mammalian Ras interacts directly with the serine/threonine kinase Raf. *Cell*, 74(1), 205-214.
- [43] Chuang, E., Barnard, D., Hettich, L., Zhang, X. F., Avruch, J., & Marshall, M. S. (1994). Critical binding and regulatory interactions between Ras and Raf occur through a small, stable N-terminal domain of Raf and specific Ras effector residues. *Mol Cell Biol*, 14(8), 5318-5325.
- [44] Ghosh, S., & Bell, R. M. (1994). Identification of discrete segments of human Raf-1 kinase critical for high affinity binding to Ha-Ras. *J Biol Chem*, 269(49), 30785-30788.

- [45] Gohlke, H., Kiel, C., & Case, D. A. (2003). Insights into protein-protein binding by binding free energy calculation and free energy decomposition for the Ras-Raf and Ras-RalGDS complexes. *J Mol Biol*, 330(4), 891-913.
- [46] Krygowska, A. A., & Castellano, E. (2018). PI3K: a crucial piece in the RAS signaling puzzle. *Cold Spring Harbor perspectives in medicine*, 8(6), a031450.
- [47] Fetits, S. K., Guterres, H., Kearney, B. M., et al. (2015). Allosteric effects of the oncogenic RasQ61L mutant on Raf-RBD. *Structure*, 23(3), 505-516.
- [48] Aytuna, A. S., Gursoy, A., & Keskin, O. (2005). Prediction of protein-protein interactions by combining structure and sequence conservation in protein interfaces. *Bioinformatics*, 21(12), 2850-2855.
- [49] Ogmen, U., Keskin, O., Aytuna, A. S., Nussinov, R., & Gursoy, A. (2005). PRISM: protein interactions by structural matching. *Nucleic Acids Res*, 33(Web Server issue), W331-336.
- [50] Tuncbag, N., Gursoy, A., Nussinov, R., & Keskin, O. (2011). Predicting protein-protein interactions on a proteome scale by matching evolutionary and structural similarities at interfaces using PRISM. *Nat Protoc*, 6(9), 1341-1354.
- [51] Tuncbag, N., Keskin, O., Nussinov, R., & Gursoy, A. (2012). Fast and accurate modeling of protein-protein interactions by combining template-interface-based docking with flexible refinement. *Proteins*, 80(4), 1239-1249.
- [52] Mashlach, E., Nussinov, R., & Wolfson, H. J. (2010). FiberDock: Flexible induced-fit backbone refinement in molecular docking. *Proteins*, 78(6), 1503-1519.
- [53] Zhang, Y. (2008). I-TASSER server for protein 3D structure prediction. *BMC Bioinformatics*, 9, 40.
- [54] Cukuroglu, E., Gursoy, A., & Keskin, O. (2012). HotRegion: a database of predicted hot spot clusters. *Nucleic Acids Res*, 40(Database issue), D829-833.
- [55] Feig, L. A., & Buchsbaum, R. J. (2002). Cell signaling: life or death decisions of ras proteins. *Curr Biol*, 12(7), R259-261.
- [56] Mitin, N., Konieczny, S. F., & Taparowsky, E. J. (2006). RAS and the RAIN/RasIP1 effector. *Methods Enzymol*, 407, 322-335.
- [57] Choy, E., Chiu, V. K., Silletti, J., et al. (1999). Endomembrane trafficking of ras: the CAAX motif targets proteins to the ER and Golgi. *Cell*, 98(1), 69-80.
- [58] Liedtke, M., Ayton, P. M., Somerville, T. C., Smith, K. S., & Cleary, M. L. (2010). Self-association mediated by the Ras association 1 domain of AF6 activates the oncogenic potential of MLL-AF6. *Blood*, 116(1), 63-70.
- [59] Smith, M. J., Ottoni, E., Ishiyama, N., et al. (2017). Evolution of AF6-RAS association and its implications in mixed-lineage leukemia. *Nat Commun*, 8(1), 1099.