

Schmarnica - Analitičen elucidator organskih spojin

Andraž Juvan, Jure Jakoš

Univerza v Ljubljani, Fakulteta za računalništvo in informatiko, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo

andraz.juvan@shekaj.si, jure.jakos@gmail.com

Povzetek

Schmarnica je ekspertni sistem za elucidacijo organskih spojin, ki ga razvijamo študenti in raziskovalci fakultete za računalništvo in informatiko ter fakultete za kemijo in kemijsko tehnologijo Univerze v Ljubljani. Deluje na podlagi nabora različnih surovih spektroskopskih podatkov in omogoča ekspertom hitrejšo in lažjo razpoznavo spojin. Za doseganje tega cilja je ekspertni sistem tudi javno dostopen preko spletnega vmesnika.

1. Problemi današnje rutinske elucidacije

Identifikacija in karakterizacija spojin je pomemben člen v širokem spektru različnih panog, od razvoja novih materialov, zdravilnih učinkovin v farmaciji do identifikacije prepovedanih substanc v forenziki. Pri tem se poslužujemo modernih spektroskopskih metod, ki zahtevajo ekspertno znanje in čas. Določanje struktur iz spektralnih podatkov za preprostejše primere traja od nekaj minut do ene ure, pri kompleksnejših spojinah (npr. zdravilih in drogah) pa se lahko proces identifikacije podaljša na več dni, vključujoč več ekspertov.

Med vsakodnevne primere uporabe elucidacije v ekspertnih analizah štejemo uporabo moderne organske sinteze, kjer se srečujemo s testiranjem uspešnosti reakcij in identifikaciji spojin pri razvoju snovi za različne aplikativne namene. Dokler obravnavamo preproste molekule lahko na ta vprašanja ekspert hitro (v roku nekaj minut) odgovori iz osnovnih spektroskopskih podatkov. Pri sintezi in analizi kompleksnejših spojin pa postane elucidacija strukture bistveno bolj kompleksna ter časovno zamudna. Prav tako se na dnevni ravni v kriminalističnih laboratorijih eksperti forenzike ukvarjajo z identifikacijo zaseženih substanc. Zaradi hitro rastočega črnega trga s prepovedanimi substancami je elucidacija spojin dandanes kompleksnejša kot v preteklih letih. Substance so pogosto še neidentificirane, zato sestava, vpliv na ljudi in stranski učinki niso znani. Elucidacija pa je dodatno otežena, saj je spojina popolnoma neznana, za razliko od prej omenjenih primerov. Za odkrivanje lastnosti takih substanc je elucidacija strukture spojin ključna za nadaljno karakterizacijo.

Zaradi naraščajoče potrebe po elucidaciji, cene in tudi pomanjkanja ekspertne delovne sile na tem področju je avtomatizacija elucidacije nujno potrebna.

2. Zmožnost Schmarnice

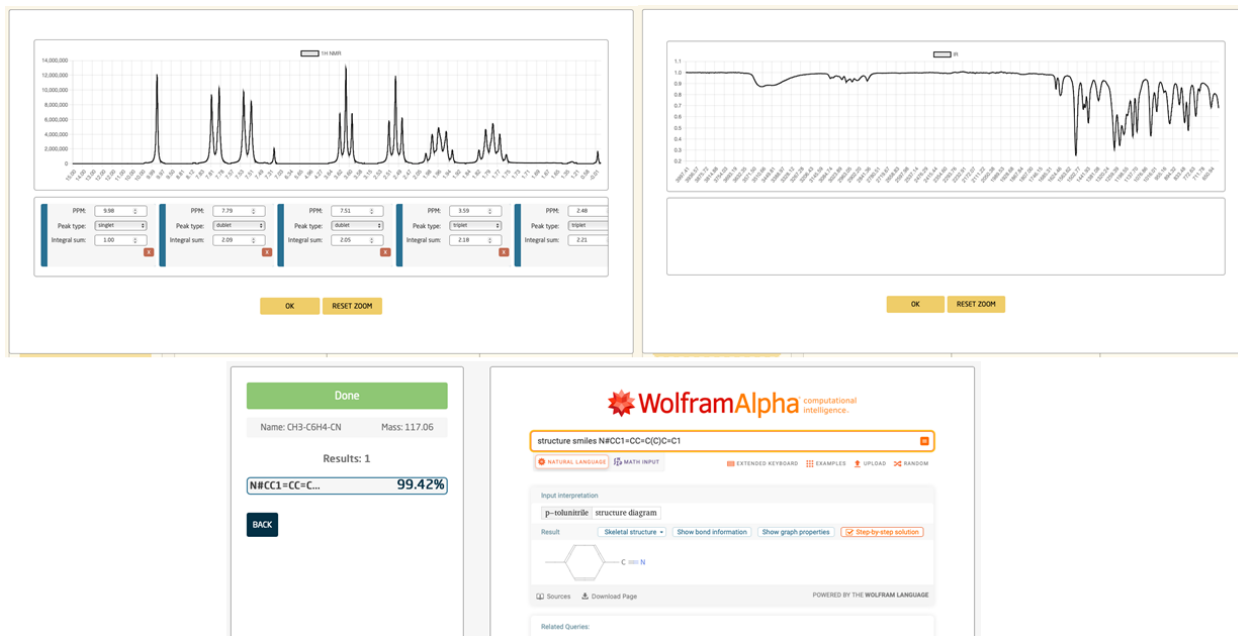
Schmarnica je ekspertni sistem za razpoznavo struktur organskih molekul na podlagi surovih spektroskopskih podatkov, pri čemer uporablja podatke infrardeče (IR) spektroskopije, jedrske magnetne resonance (NMR) ter masne spektrometrije (MS). Njena značilnost je, da deluje brez uporabe obširne iskalne podatkovne baze znanih spojin in s tem posnema delovanje izurjenega eksperta na področju spektroskopije pri razpoznavi. Tak pristop pripomore k bolj natančni elucidaciji neznanih spojin in s tem močno pripomore ekspertom pri hitrejši in lažji razpoznavi.

Ekpertni sistem je na voljo javnosti v obliki spletnega vmesnika, ki se nahaja na schmarnica.si. S preprostim vnosom tabelaričnih podatkov o zgoraj omenjenih spektrih, lahko eksperti dobijo identificirano spojino v standardnem kemijskem zapisu SMILES skupaj z vizualizacijo preko integracije z WolframAlpha.

3. Odzivi na Schmarnico

Delovanje sistema smo objavili kot članek v prestižni reviji *Journal of Chemical Information and Modeling* (<https://doi.org/10.1021/acs.jcim.0c01332>). Spletni vmesnik je po objavi pričelo uporabljati več skupin ekspertov za različne tipe spojin.

Ekspertni sistem trenutno testiramo v okviru potreb katedre za organsko kemijo, FKKT UL. Po preliminarnih rezultatih sistem bistveno skrajša čas in potrebno delo spektroskopista ter za velikostni razred pohitri njegovo delo. Glede na število laboratorijev po svetu, predvidevamo, da lahko s predstavljenim ekspertnim sistemom naslovimo približno 10000 ekspertov, kar v številu ekspertnih ur pomeni prihranek na nivoju več stotisoč evrov na organizacijo; na drugi strani hkrati uporaba sistema omogoča bistveno razbremenitev ekspertnih virov in omogoča bistveno višjo razpoložljivost le teh.



Slika 1: Primer uporabniškega vmesnika za vpis vhodnih podatkov in izpis prepoznane spojine.

4. Nadaljnji razvoj

Na področju spektroskopije se še vedno razvijajo nove metode za lažjo razpoznavo, katere imamo namen postopoma vgrajevati v Schmarnico za še hitrejše in bolj natančno reševanje. Trenutna omejitev je tudi ročno vpisovanje podatkov iz spektrov, za kar je odgovoren uporabnik. Za to smo že razvili izboljšavo kjer bo lahko uporabnik naložil datoteko in preko spletnega vmesnika dopolnil podatke, vendar pa je ta funkcionalnost trenutno še v fazi testiranja. Med izdelavo Schmarnice smo naleteli tudi na problem iskanja digitalno zapisanih spektrov, saj so pogosto zbirke interne ali pomanjkljive. V ta namen želimo tudi vzpostaviti novo javno dostopno zbirko, kjer bodo zbrani podatki iz Schmarnice, lahko pa jih bodo dodajale tudi druge raziskovalne ustanove. V prihodnjem letu pa prav tako nameravamo pričeti pogovore s proizvajalci spektrometriških naprav za neposredno vključitev sistema v programe za obdelavo podatkov analitično opremo naprav.