



Düzce Üniversitesi Bilim ve Teknoloji Dergisi

Araştırma Makalesi

Ni(II)Pc ve CdSeS/ZnS Kuantum Nokta Katkılı Sıvı Kristal Yapıların Dielektrik Sabitinin Makine Öğrenmesi Algoritmaları ile Tahminlenmesi

Mustafa AKSOY ^a, Gülnur ÖNSAL ^{b,*}, Onur UĞURLU ^b

^a Akıllı Sistemler Mühendisliği Bölümü, Lisansüstü Eğitim Enstitüsü, İzmir Bakırçay Üniversitesi, İzmir, TÜRKİYE

^b Temel Bilimler Bölümü, Mühendislik ve Mimarlık Fakültesi, İzmir Bakırçay Üniversitesi, İzmir, TÜRKİYE
* gulnur.onsal@bakircay.edu.tr

DOI: 10.29130/dubited.1091499

ÖZ

Bu çalışmada, Ni(II)Pc (nikel(II)ftalosiyenin) ve CdSeS/ZnS (cadmium selenide sulfide/zinc sulfide) kuantum nokta katkılı 5CB (4-pentyl-4'-cyanobiphenyl) nematik sıvı kristal kompozit yapıların dielektrik özellikleri ile birlikte bu özelliklerin makine öğrenmesi algoritmaları ile tahminlenmesi rapor edilmektedir. Konsantrasyon oranının dielektrik özelliklere etkilerini saptamak için 5CB nematik sıvı kristal yapıya ağırlıkça %2 ve %5 oranında Ni(II)Pc ve CdSeS/ZnS kuantum nokta katkılanmıştır. Numunelerin dielektrik ölçümleri, dielektrik spektroskopi yöntemi kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Ayrıca, dielektrik sabitinin reel (ϵ') ve sanal bileşenlerinin (ϵ'') tahmini için *k*-En Yakın Komşu, Karar Ağacı, Rastgele Orman algoritmaları kullanılmış ve algoritmaların tahmin performansları karşılaştırmalı olarak incelenmiştir. Algoritmalarda girdi parametreleri frekans, voltaj ve katkı oranı; çıktı parametreleri ise, dielektrik sabitinin reel (ϵ') ve sanal bileşenleri (ϵ'') olarak belirlenmiştir. Elde edilen sonuçlara göre dielektrik sabitinin en iyi tahmin performansına Rastgele Orman algoritması ile ulaşılmıştır.

Anahtar Kelimeler: Nematik sıvı kristal, Dielektrik özellikler, Makine öğrenmesi

Estimation of Dielectric Constant of Ni(II)Pc and CdSeS/ZnS QDs Dope Liquid Crystal Structures by Machine Learning Algorithms

ABSTRACT

In this study, the dielectric properties of Ni(II)Pc (nickel(II)phthalocyanine) and CdSeS/ZnS (cadmium selenide sulfide/zinc sulfide) quantum dot-doped 5CB (4-pentyl-4'-cyanobiphenyl) nematic liquid crystal composite structures along with the prediction of these properties by machine learning algorithms are reported. In order to determine the effects of the concentration ratio on the dielectric properties, 2% and 5% wt/wt Ni(II)Pc and CdSeS/ZnS quantum dots were doped into the 5CB nematic liquid crystal. The dielectric measurements of the samples were carried out using the dielectric spectroscopy method. Moreover, *k*-Nearest Neighbor, Decision Tree and Random Forest algorithms were used for the estimation of the real (ϵ') and imaginary components (ϵ'') of the dielectric constant, and the prediction performances of the algorithms were examined comparatively. According to the results obtained, the best estimation performance of the dielectric constant was obtained with the Random Forest algorithm.

Keywords: Nematic liquid crystal; Dielectric properties, Machine learning

I. GİRİŞ

Sıvı kristaller maddenin katı ve sıvı halleri arasındaki özel bir faz olarak tanımlanır [1]. Elektrik alan, manyetik alan, ısı ve ışık gibi dış etkilere oldukça duyarlı oldukları için ekran teknolojisi, optik anahtarlama, uzaysal ışık modülatörü ve holografik veri depolama gibi çeşitli uygulama alanlarına sahiptir [2]-[4]. Kuantum noktaları [5], ftalosiyanınlar [6], polimerler [7] ve karbon nanotüpler [8] gibi malzemelerin sıvı kristal yapıya katkılanmasıyla yapının özellikleri geliştirebilmektedir.

Bu katkı malzemeleri içerisinde Ftalosiyanınlar aromatik, makrosiklik [9], [10] bileşiklerdir. Ftalosiyanınların moleküler yapısı iki boyutlu 18π -elektron konjuge sistemine sahiptir; bu özelliklerinden dolayı elektron transfer kabiliyetine sahiptir [11]. Bu özellikler ftalosiyanınların boyarmadde, mürekkep [12], [13], organik güneş pilleri [14], sıvı kristallerle birleştirilmiş görüntüleme teknolojileri [15] gibi birçok uygulamada kullanılmasına olanak sağlar. Son yıllarda sıvı kristal yapılarda katkı malzemesi olarak tercih edilen bir diğer malzeme de kuantum noktalarıdır. Yarı iletken kuantum noktaları, boyut homojenliği açısından bilimsel ve teknolojik uygulamalar için bir avantaj sağlamaktadır. Ayrıca katkı oranlarında yapılan değişiklik ile sıvı kristal yapıların yönelimlerini değiştirebilmektedir [16]. Yüksek yük taşıyıcı özellik sergilemesi, kuantum nokta ve sıvı kristal molekülleri arasında ekstra dipol oluşumu gibi benzersiz özellikleri nedeniyle, katkılı olduğu kompozit malzemelerin elektriksel, dielektrik ve optik özelliklerini geliştirirler.

DeneySEL çalışmalarında kullanılacak olan kompozit malzemelerin hazırlanma aşaması, yorucu, maliyetli ve zahmetlidir [17]. İstenilen özelliklere sahip kompozit malzemenin oluşturulabilmesi için oldukça fazla sayıda numune hazırlanması ve çok fazla sayıda zahmetli ve maliyetli deney süreçlerinin tekrarlanması gerekir. Bu durum deneySEL çalışmalarda hem zaman hem de maliyet açısından dezavantajdır. Bu çalışmada, son yıllarda araştırmacılar tarafından tercih edilen, deneyleri ve güçlü tahmin algoritmalarını bir arada kullanan yarı deneySEL bir yaklaşım kabul edilmiştir [18]. Elde edilen malzemelerin deney çıktıları dikkate alınarak, üretilmemiş numuneler için olası ve güvenilir sonuçlar üretebilecek matematiksel modeller ve algoritmalar geliştirmek, yukarıda bahsedilen deneySEL dezavantajların üstesinden gelmenin önemli bir yoludur [19].

Karmaşık veriler için yüksek tahmin yeteneği nedeniyle makine öğrenimi tekniklerinin malzeme bilimindeki rolü son yıllarda hızla artmaktadır [20]. Son on yılda, araştırmacıların polimerler gibi farklı malzemelerin fiziksel özelliklerini ve dielektrik sabitlerini tahmin etmek için makine öğrenme algoritmalarını kullandığı çok sayıda çalışma bulunmaktadır. Umeda ve arkadaşları malzemelerin dielektrik sabitini tahmin etmek için Doğrusal Ridge yöntemi (Linear Ridge Method), Gauss süreci tekniğini (Gaussian Process Method) ve Rasgele Orman algoritmasını (Random Forest Algorithm) kullanmış ve Rastgele Orman algoritmasının dielektrik sabiti için en iyi tahmin değerlerine sahip olduğunu raporlamışlardır [17]. Pıllania ve arkadaşları, birkaç polimerin dielektrik sabitleri de dahil olmak üzere çeşitli parametreleri tahmin etmek için Kernel Ridge Regresyonunu kullanmış ve bu parametreler için tahmin hatalarının %10'dan az olduğunu bildirmişlerdir [18]. Mannodi-Kanakkithodi ve arkadaşları, polimerlerin elektronik dielektrik sabiti, iyonik dielektrik sabiti ve bant aralığını tahmin etmek için Kernel Ridge Regresyonu, Destek Vektör Regresyonu (Support Vector Regression) ve AdaBoost yöntemlerinin performanslarını araştırmışlardır [21]. Benzer bir çalışma Mannodi-Kanakkithodi ve arkadaşları tarafından da yapılmıştır [22]. Araştırmacılar bu çalışmada istenilen özelliklerde malzeme üretimi için Kernel Ridge Regresyonunu ile bir tahmin modeli geliştirmiş, elektronik ve iyonik dielektrik sabitleri tahmini için maksimum %10 tahmin hatası bildirmişlerdir. Ulusal literatür incelendiğinde de son yıllarda bu kapsamda çalışmaların olduğu görülmektedir. Eyecioglu ve arkadaşları, kütlece farklı polianilin katkılı polipropilen (PP) polimerinin dielektrik fonksiyonlarının gerçek ve sanal bileşenlerinin frekansa bağlı değerlerinin Yapay Sinir Ağları ile tahminlenebileceğini göstermiştir [19]. Kılıç ve arkadaşları polietilenin hem polianilin katkısına hem de sıcaklığa bağlı değişimlerinin, genelleştirilmiş regresyon sinir ağları yöntemiyle %93-%99 arasında değişen doğruluk değeriyle tahmin edildiğini raporlamıştır [23]. Son olarak, Eyecioglu farklı bazalt türü ile katkılanmış polianilin polimer kompozitlerinin frekansa bağlı kompleks dielektrik fonksiyonlarının gerçek ve sanal bileşenlerinin tahminlemede doğrusal regresyon, *k*-En Yakın Komşu regresyon ve

Karar Ağacı regresyonu algoritmalarının performanslarını karşılaştırmıştır. Çalışmada Karar Ağacı regresyonu algoritmasının hem gerçek hem de sanal bileşenlerinin tahminlenmesinde en başarılı algoritma olduğu gösterilmiştir [24].

Bu çalışmanın birincil amacı, ftalosiyanın ve kuantum nokta katkılı 5CB (4-pentyl-4'-cyanobiphenyl) sıvı kristal kompozit yapıların dielektrik özelliklerini detaylı olarak araştırmak, ikincil amacı, deneysel verilere makine öğrenme algoritmaları uygulayarak malzemelerin dielektrik sabitlerini tahmin etmek için güvenilir tahmin modelleri oluşturmaktır. Makalenin geri kalanı şu şekilde düzenlenmiştir: ikinci bölümde çalışmada kullanılan materyaller ve makine öğrenmesi algoritmaları açıklanmıştır. Materyallerin deneysel sonuçları ve algoritmaların tahmin sonuçları üçüncü bölümde verilmiştir. Son bölümde çalışmanın genel değerlendirilmesi yapılmış ve gelecek dönemde yapılması planlanan çalışmalardan bahsedilmiştir.

II. MATERYAL VE METOD

A. KOMPOZİT MALZEMENİN HAZIRLANMASI

Bu çalışmada düşük frekans bölgesinde pozitif dielektrik anizotropiye ($\Delta\epsilon' \geq 0$) sahip, %98 saflıkta 5CB (4-pentyl-4'-cyanobiphenyl) nematik sıvı kristal kullanılmıştır. Katkı malzemesi olarak Ni(II)Pc (nikel(II)ftalosiyanın) ve CdSeS/ZnS (cadmium selenide sulfide/zinc sulfide) kuantum nokta kullanılmıştır. Çalışmada kullanılan sıvı kristal, ftalosiyanın ve kuantum nokta Sigma Aldrich Chemical Company'den temin edilmiştir. 5CB nematik sıvı kristal oda sıcaklığında nematik fazdadır ve basit bir moleküler yapıya sahiptir. Ayrıca kimyasal kararlılığı, yüksek dielektrik ve optik anizotropiye sahip olmasından dolayı günümüzde modern cihazlar için yeni fonksiyonel malzemelerin geliştirilmesinde yaygın olarak kullanılmaktadır. Çalışmada katkı malzemesi olarak seçilen kuantum noktalar yüksek yük transfer özelliklerinden dolayı sıvı kristal moleküllerinin yönelimini kolaylaştırmaktadır. Kullanılan diğer katkı malzemesi ftalosiyanınlar da yüksek elektron transfer kabiliyetine sahiptir. Bu üstün özellikleri sebebiyle çalışmada 5CB nematik sıvı kristal yapı ve katkı malzemesi olarak da kuantum nokta ve ftalosiyanın seçilmiştir.

İlk olarak Ni(II)Pc ve CdSeS/ZnS kuantum nokta (10:1 molar oran) ile homojen bir karışım hazırlanmıştır. Elde edilen karışım saf 5CB sıvı kristale ağırlıkça %2 ve %5 oranında katkılanmıştır. Homojen dağılım için tüm numuneler 6 saat 40°C'de ultrasonik banyo kullanılarak karıştırılmıştır. Dielektrik ölçümler için hazırlanan örnekler, kılcallık yöntemi kullanılarak Indium Tin Oxide (ITO) kaplı, 14,6 µm kalınlığında, düzlemsel hizalanmış sıvı kristal hücrelerine enjekte edilmiştir. Sıvı kristal hücreleri Instec, ABD tarafından temin edilmiştir. Numunelerin dielektrik ölçümleri, Novocontrol Alpha A Dielektrik/Empedans Analizörü ile 100 Hz – 10 MHz frekans aralığında oda sıcaklığında gerçekleştirilmiştir.

B. MAKİNE ÖĞRENMESİ ALGORİTMALARI

Makine öğrenmesi algoritmaları, belirli bir girdi verisi ile çıktı verisi arasındaki ilişkiyi tanımlayan bir model oluşturmak için bir öğrenme süreci gerçekleştiren yöntemlerdir. Bu öğrenme süreci, girdi ve çıktı arasındaki parametrelerin doğrusal olmayan davranışını tespit etmek yerine, bağımsız bir doğrulama veri kümesinde tahmin hatasını en aza indirecek şekilde modelin hiper parametrelerinin ayarlanması ile gerçekleştirilir. Toplu öğrenme yöntemleri, tek bir öğrenme modeli kullanmak yerine birden fazla öğrenme modelini birleştiren makine öğrenimi alanındaki yeni yaklaşımlardan biridir ve yöntemleri, genellikle tek bir öğrenme modeli kullanan geleneksel öğrenme yöntemlerinden daha yüksek tahmin performansı sağlar [25].

Bu çalışmada, dielektrik sabitlerinin gerçek ve sanal kısımlarını (ϵ' ve ϵ'') tahmin etmek için Ni(II)Pc ve CdSeS/ZnS kuantum nokta katkılı 5CB kompozit yapı veri setleri üzerinde geleneksel regresyon algoritmalarından *k*-En Yakın Komşu Regresyonu (*k*-Nearest Neighbor Regression) ve Karar Ağacı Regresyonu (Decision Tree Regression) kullanılmıştır. Bu iki algoritmaya ek olarak, topluluk tabanlı

regresyon algoritmalarından Rastgele Orman Regresyonu (Random Forest Regression) deney verileri üzerinde uygulanmıştır.

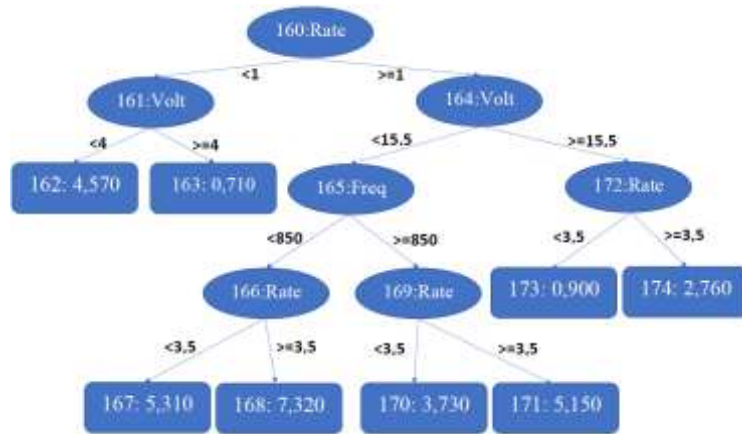
Çalışmada ilk olarak, kompozit yapıların üç girdi parametresi (frekans, voltaj değeri ve katkı oranı) ve iki çıktı parametresi (ε' ve ε'') kullanılarak deneysel veri seti oluşturulmuştur. Daha sonra eğitim adımında ε' ve ε'' değerlerini tahmin etmek için veri setine üç farklı makine öğrenmesi algoritması uygulanmıştır. Bir sonraki adımda, uygulanan algoritmaların tahmin performansları, $k=10$ olarak seçilerek tekrarlı k -kat çapraz doğrulama yöntemi (k -fold cross-validation) kullanılarak değerlendirilmiştir.

k -En Yakın Komşu (kNN), makine öğrenmesi teknikleri arasında en basit ve yaygın olarak kullanılan yöntemlerden biridir. Bu yöntem 1967 yılında T.M. Cover ve P.E. Hart tarafından önerilmiştir. kNN algoritmasında, herhangi bir verinin hangi sınıfa dahil edileceğine k sayıda yakın komşunun mesafesi dikkate alınarak karar verilir [26]. kNN regresyon için kullanıldığında, verinin değeri kendisine en yakın k eğitim noktasının ortalaması alınarak tahminlenir. Noktalar arasındaki mesafeyi hesaplamak için Öklid, Manhattan, Hamming gibi farklı metrikler kullanılabilir. Bu çalışmada uzaklık ölçüsü olarak Öklid metriği kullanılmıştır. $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$, her biri M özellikten ve N noktadan oluşan bir veri seti için, x_t test noktası ile x_i eğitim noktası arasındaki öklid mesafesi Eşitlik 1. ile hesaplanır:

$$d(x_t, x_i) = \sqrt{\sum_{m=1}^M (x_{t,m} - x_{i,m})^2} \quad (1)$$

Eşit. 1'de $x_{t,m}$ ve $x_{i,m}$ sırasıyla x_t ve x_i 'nin m 'nci özellik değerleridir.

İlk olarak Quinlan tarafından 1986 önerilen Karar ağacı yapısı, hiyerarşik bir böl ve yönet yöntemini uygulayan bir veri yapısı olarak tanımlanabilir [27]. Karar düğümleri ve yaprak düğümlerden oluşan bir karar ağacı, verilerin bir segmentasyonunu temsil eder. Karar ağaçları, standart sapma azaltma (standard deviation reduction) tekniği ile regresyon için kullanılabilir. Karar ağacında bir karar düğümünün, her biri test edilen öznelik değerlerini temsil eden iki veya daha fazla dalı vardır. Yaprak düğümleri ise sayısal hedefi belirler. Bir karar ağacında en üstteki karar düğümüne kök düğüm denir. Karar Ağacı Regresyonu (DT-R), tekrarlayan bölme işlemi yoluyla bağımlı değişkenin sayısal sonuçlarını tahmin etmek için karar ağaçlarını kullanır. Çalışmada kullanılan veri seti ile modellenen bir karar ağacı örneği Şekil 1. ile verilmektedir.



Şekil 1. Karar Ağacı.

Rastgele Orman regresyonu (RF) 2001 yılında Leo Breiman tarafından önerilmiştir. RF birden fazla karar ağacı üretmek doğruluk değerini yükseltmeyi hedefler [28]. Rastgele orman regresyon algoritması, eğitim veri setinin farklı alt kümeleriyle eğitilmiş regresyon ağaçlarının bir araya getirilmesiyle oluşur. RF'nin son tahmini, bireysel regresyon ağaçlarının regresörlerinin ortalamasıdır. Ormandaki ağaç sayısı RF için önemli bir parametredir.

C. HATA METRİKLERİ

Ni(II)Pc ve CdSeS/ZnS kuantum nokta katkılı 5CB kompozit yapıların dielektrik özelliklerinin tahmini için kullanılan makine öğrenmesi regresyon algoritmalarının başarı performanslarının karşılaştırılmasında Ortalama Mutlak Hata (Mean Absolute Error-OMH), Karekök Ortalama Karesel Hata (Root Mean Square Error-KOKH) ve Belirleme Katsayısı (R^2) metrikleri kullanılmıştır.

$$OMH = \frac{\sum_{i=1}^N |\bar{y}_i - y_i|}{N} \quad (2)$$

$$KOKH = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (\bar{y}_i - y_i)^2}{N}} \quad (3)$$

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (4)$$

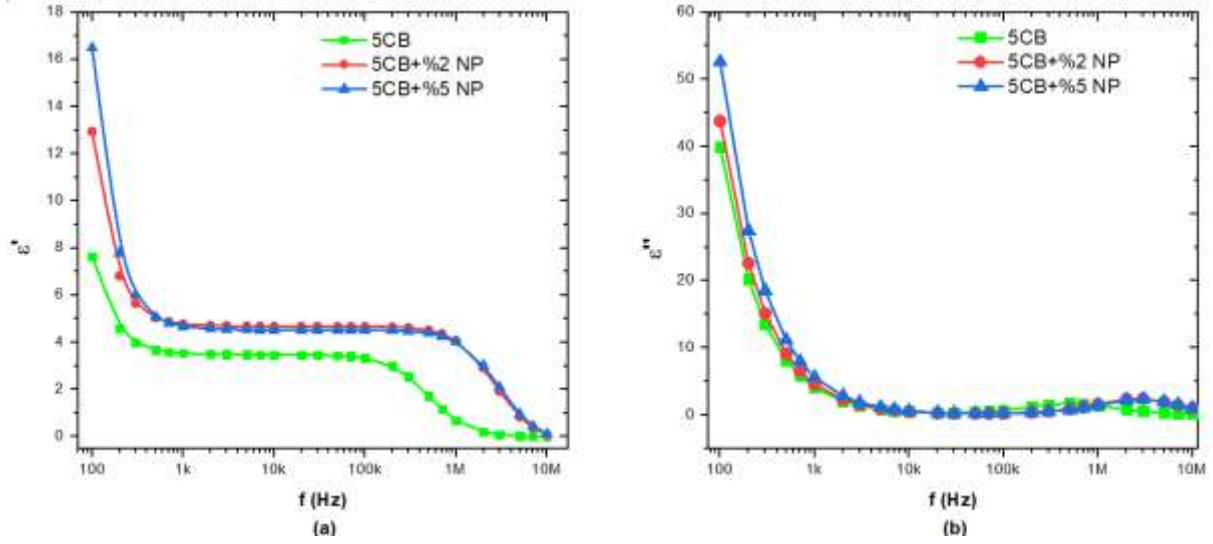
Eşit. 2, 3 ve 4'te \bar{y}_i i 'nci tahmin edilen değeri; \hat{y}_i , y değerlerinin ortalamasını; y_i i 'nci örneğin deneyde gözlemlenen gerçek değerini; N ise toplam örnek sayısını ifade etmektedir.

III. BULGULAR VE TARTIŞMA

A. DİELEKTRİK BULGULAR

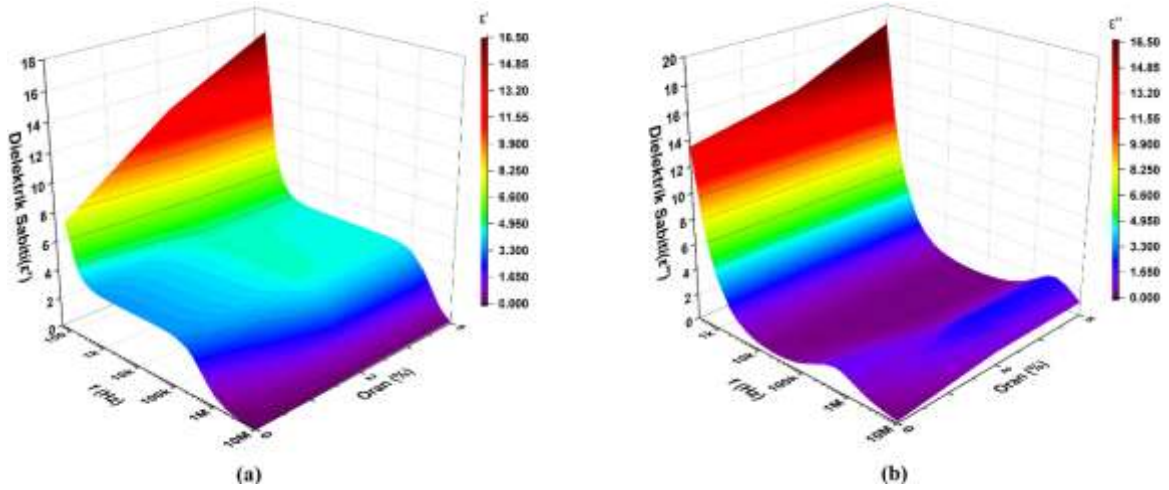
Bu çalışmada, saf 5CB ve Ni(II)Pc ve CdSeS/ZnS kuantum nokta katkılı sıvı kristal kompozit yapıların dielektrik özellikleri, dielektrik spektroskopi teknikleri (DST) ile belirlenmiştir. Bu teknik ile sıvı kristal yapılarda önemli parametreler olan dielektrik sabitinin reel ve sanal kısmı frekansa bağlı olarak tüm örnekler için belirlenmiştir. ϵ' dielektrik sabitinin reel kısmını ifade eder ve malzemelerde depolanan enerji ile ilgilidir; ϵ'' dielektrik sabitinin sanal kısmını ifade eder ve malzemelerde dağılan enerji ile ilgilidir.

Şekil 2 (a), saf ve farklı oranlarda Ni(II)Pc ve CdSeS/ZnS kuantum nokta katkılı 5CB sıvı kristal kompozit yapıların dielektrik sabitinin reel kısmının (ϵ') frekansa bağlı değişimini göstermektedir. Ni(II)Pc ve CdSeS/ZnS kuantum nokta katkısı beraber, şekildeki gibi nanoparçacık (NP) olarak, 5CB+%2 NP ve 5CB+%5 NP olarak ifade edilmiştir. Şekilde görüldüğü gibi, düşük frekans bölgesinde saf sıvı kristale katkı yapılmasıyla ϵ' değeri önemli ölçüde artmaktadır. Bu artışın konsantrasyondaki artış ile de devam ettiği görülmektedir. ϵ' değerindeki artış, Ni(II)Pc, CdSeS/ZnS kuantum nokta ve 5CB sıvı kristal arasındaki moleküler etkileşimlere bağlanabilir. Elektrik alan uygulanmasıyla moleküller elektrik alana paralel olarak hizalanır ve böylece kompozit yapıların net dipol momentini artırır, bunun sonucunda da ϵ' değerinde bir artış görülmektedir. Ayrıca frekansın artmasıyla dipoller test sinyalinin takip edemez ve dipoller ile elektrik alan arasında bir faz gecikmesi meydana gelir. Bunun sonucunda da polarizasyon azalır. Bu sebeple tüm örnekler için artan frekansla ϵ' değerinin azaldığı görülmektedir.



Şekil 2. Kompozit yapıların 1 Volt gerilimde a) ϵ' - f b) ϵ'' - f grafiği.

Şekil 2 (b), saf ve farklı oranlarda Ni(II)Pc ve CdSeS/ZnS kuantum nokta katkılı 5CB sıvı kristal kompozit yapıların dielektrik sabitinin sanal kısmının (ϵ'') frekansa bağlı değişimini göstermektedir. Kompozit yapıların relaksasyon davranışlarını araştırmak için kullanılan $\epsilon'' - f$ grafiğinin tepe noktasına karşılık gelen frekans değerine relaksasyon frekansı (f_R) denir. Relaksasyon frekansı, incelenen sistemlerin moleküler hareketleri hakkında bilgi veren bir parametredir. 5CB, 5CB+%2 NP ve 5CB+%5 NP kompozit yapılarının relaksasyon frekans değerleri sırasıyla 526 kHz, 2,58 MHz ve 2,82 MHz'dir. Şekilde görüldüğü gibi Ni(II)Pc ve CdSeS/ZnS kuantum nokta katkısıyla f_R değerinin yüksek frekans bölgesine doğru kaydığı gözlemlenmektedir. Bu sonuç Ni(II)Pc ve CdSeS/ZnS kuantum nokta katkısının kompozitlerin çalışma frekans aralığını genişlettiğini göstermektedir.



Şekil 3. Kompozit yapıların sabit 1 V geriliminde dielektrik sabitinin a) gerçek (ϵ') b) sanal (ϵ'') kısmının frekans ve katkı yüzdesiyle değişimi.

Deneysel veriler kullanılarak, 1 V gerilim değerinde dielektrik sabitinin gerçek ve sanal kısmının değişimi 100 Hz-10MHz frekans aralığında ve farklı katkı yüzdeleri için beraber incelenmiştir. Bu değişim Şekil 3'te üç boyutlu grafik ile verilmiştir. Grafikte görüldüğü gibi en yüksek ϵ' ve ϵ'' değerinin %5 katkı oranına sahip kompozit yapı için 100 Hz frekans değerinde olduğu tespit edilmiştir.

B. MAKİNE ÖĞRENMESİ ALGORİTMALARI İLE DİELEKTRİK SABİTİ TAHMİNİ

B. 1. Veri Seti

DeneySEL veri seti, üç girdi parametresi (frekans, voltaj değeri ve dağılım oranı) ve iki çıktı parametresi (ϵ' ve ϵ'') olan 1953 veri içerir. DeneySEL veri kümesinin parametrelerinin temel özellikleri Tablo 1'de verilmiştir.

Tablo 1. Veri setinin özellikleri.

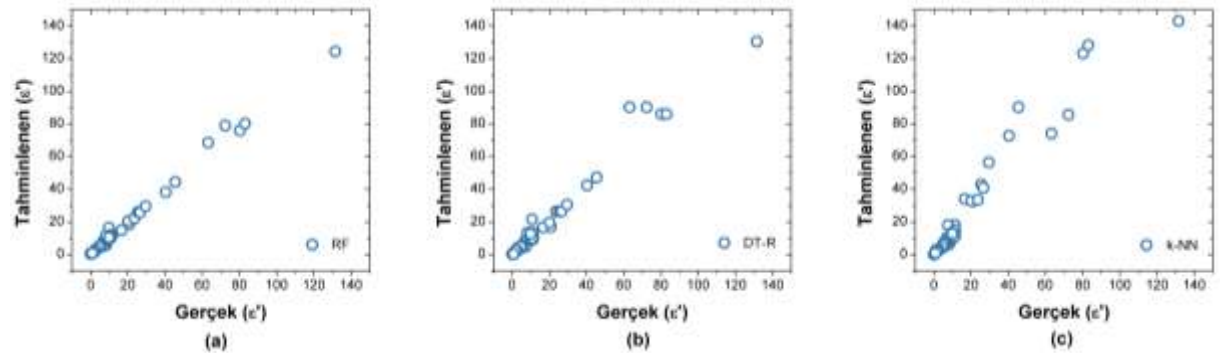
Parametre	Frekans (Hz)	Voltaj (V)	Katkı Oranı (%)	ϵ' (ϵ)	ϵ'' (ϵ)
Minimum	10	0	0	0,002	0,095
Maksimum	10000000	20	5	206,655	233,065
Ortalama	967741,29	10	2,333	12,065	12,537
Standart Sapma	2271411,12	6,057	2,055	27,135	29,012

B. 2. Hiper Parametrelerin Belirlenmesi

Bu çalışmanın regresyon algoritmaları WEKA (Waikato Environment for Knowledge Analysis) yazılımı kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Regresyon algoritmalarının hiper parametrelerinin, aşırı öğrenmeyi önleme ve tahmin performansları artırma üzerinde önemli bir etkisi vardır. Ağaç tabanlı topluluk yöntemi olan RF'nin en önemli üç temel hiper parametresi; tahmin edici sayısı, bir iç düğümü bölmek için minimum örnek sayısı ve ağaç yapısı için özellik sayısıdır. RF algoritmasında tahminci sayısı 100 olarak seçilmiştir. Seed sayısı 1, iterasyon sayısı 100 olarak seçilmiştir. Diğer iki hiper parametre, en yüksek tahmin performansına sahip olduğu gözlemlenen varsayılan değer olarak seçilmiştir. kNN algoritmasında, regresyon modelinin başarısında komşu sayısı k ve uzaklık ölçütleri önemli rol oynamaktadır. Bu çalışmada varsayılan değer olan Öklid metriği seçilirken k parametresi 3 olarak seçilmiştir. DT-R algoritması için ise tahminci sayısı 100 olarak belirlenmiştir.

B. 3. Tahmin Sonuçları

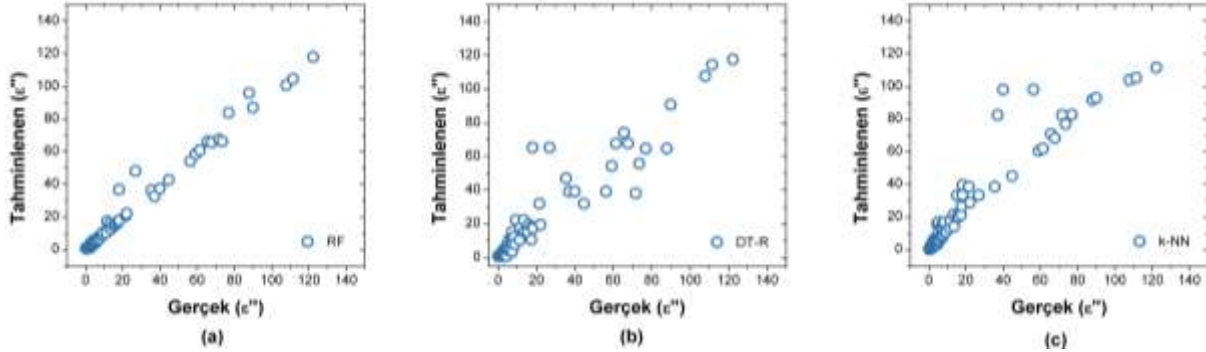
Regresyon algoritmaları, $k=10$ olarak ayarlanarak k -kat çapraz doğrulama tekniği kullanılarak birbirleriyle karşılaştırılmıştır. Algoritmaların ϵ' ve ϵ'' değerleri için tahmin performansları OMH, KOKH ve R^2 hata metrikleri kullanılarak ayrı ayrı test edilmiştir.



Şekil 4. Dielektrik sabitinin Reel kısmının (ϵ') a) Random Forest (RF), b) Decision Tree Regression (DT-R) ve c) k -En Yakın Komşu (k -NN) algoritmaları ile karşılaştırmalı tahmin performansı grafiği.

Şekil 4'te dielektrik sabitinin reel kısmının (ϵ') RF, DT-R ve k -NN algoritmaları ile tahmin performanslarına ait grafik verilmiştir. Yatay eksen dielektrik sabitinin reel kısmının gerçek değeri,

düşey eksen ise dielektrik sabitinin reel kısmının algoritmalar tarafından tahmin edilen değerlerini göstermektedir. Grafikler incelendiğinde RF algoritmasının daha doğru tahminler yaptığı açıkça görülmektedir. Buna karşın DT-R algoritmasının dielektrik sabitinin düşük değerleri için daha doğru sonuçlar üretirken nispeten daha yüksek değerler için tahminde daha yüksek hatalarla karşılaştığı görülmektedir. Son olarak k -NN algoritmasının dielektrik sabitinin reel kısmının tahmininde en kötü performansa sahip olduğu görülmektedir.



Şekil 5. Dielektrik sabitinin Sanal kısmının (ϵ'') a) Random Forest(RF), b) Decision Tree Regression (DT-R) ve c) k -En Yakın Komşu (k -NN) algoritmaları ile karşılaştırmalı tahmin performansı grafiği.

Şekil 5'te dielektrik sabitinin sanal kısmının (ϵ'') RF, DT-R ve k -NN algoritmaları ile tahmin performanslarına ait grafik verilmiştir. Yatay eksen dielektrik sabitinin sanal kısmının gerçek değerini, düşey eksen ise dielektrik sabitinin sanal kısmının algoritmalar tarafından tahmin edilen değerlerini göstermektedir. Grafikler incelendiğinde RF algoritmasının daha doğrusal ve isabetli tahminler yaptığı açıkça görülmektedir. DT-R algoritmasının dielektrik sabitinin reel kısmının tahminine benzer bir performans gösterdiği ve düşük değerler için daha doğru sonuçlar ürettiği görülmektedir. k -NN algoritmasının ise, dielektrik sabitin reel kısmının tahmininin aksine sanal kısmının tahmininde daha iyi performans gösterdiği görülmektedir.

Tablo 2. ϵ' ve ϵ'' tahmini değeri için algoritma performanslarının karşılaştırılması

Algoritma	ϵ'			ϵ''		
	OMH	KOKH	R ²	OMH	KOKH	R ²
RF	0,848	2,629	0,994	1,121	3,032	0,990
DT-R	1,916	7,057	0,933	2,493	7,474	0,934
k -NN	3,727	12,739	0,885	3,049	9,278	0,949

Tablo 2'de dielektrik sabitinin reel ve sanal kısımlarının RF, DT-R ve k -NN algoritmaları ile tahmin performanslarının OMH, KOKH ve R² hata sonuçlarının karşılaştırması verilmiştir. Tablo 2 incelendiğinde RF algoritmasının R² değerlerinin %99'un üzerinde olduğu görülmektedir. Ayrıca deneysel veri kümesinde dielektrik sabitinin reel ve sanal kısımlarının ortalamalarının 12,065 ve 12,537 olduğu dikkate alındığında, RF algoritmasının OMH değerlerinin kabul edilebilir bir seviyede olduğu söylenebilir. Buna karşın, k -NN algoritmasının özellikle dielektrik sabitinin reel kısmının tahmininde başarısız bir performansa sahip olduğu açıktır.

Tüm sonuçlar dikkate alındığında RF algoritmasının en iyi tahmin performansına sahip olduğu görülmektedir. DT-R algoritmasının da nispeten gerçek değerlere daha uygun olduğu görülmesine karşın k -NN algoritmasının dielektrik sabitin tahmininde oldukça kötü bir performansa sahip olduğu görülmektedir. RF algoritması, veri setinin farklı bölümleri ile oluşturulan çok sayıda karar ağacının sonuçlarının ortalamasını aldığından dolayı gerek aşırı öğrenmenin önlenmesi gerekse doğru tahmin konusunda, geleneksel makine öğrenmesi yöntemlerine göre daha başarılıdır.

IV. SONUC

Çalışmada 5CB Sıvı Kristal yapıya ağırlıkça %2 ve %5 oranlarında Ni(II)Pc ve CdSeS/ZnS kuantum nokta katkılanarak yeni kompozit yapıların dielektrik özellikleri araştırılmıştır. Hem katkının hem de artan katkı konsantrasyon oranının saf sıvı kristalin dielektrik özelliklerini etkilediği görülmüştür. Moleküler etkileşimlere bağlı olarak, artan katkı oranı ile ϵ' değeri artmıştır. Ayrıca relaksasyon frekansı değerinin de katkı ile yüksek frekans bölgesine kaydığı görülmektedir. Bu sonuçlar Ni(II)Pc ve CdSeS/ZnS kuantum nokta katkısının saf sıvı kristalin dielektrik özelliklerini geliştirdiğinin bir göstergesidir. Ayrıca bu çalışmada örneklerden elde edilen dielektrik sabitinin sanal ve reel kısımlarının tahminlenmesinde 3 farklı makine öğrenmesi algoritmasının (*k*-En Yakın Komşu, Karar Ağacı, Rastgele Orman) tahmin performansları karşılaştırılmıştır. Algoritmalarının tahmin performansları, Ortalama Mutlak Hata, Karekök Ortalama Karesel Hata ve Belirleme Katsayısı istatistiksel performans metrikleri ile karşılaştırılmış ve bilinmeyen değerlerin tahmini için en uygun modelin belirlenmesi amaçlanmıştır. Elde edilen sonuçlar, dielektrik sabitinin tahmininde en yüksek performansa sahip algoritmanın Rastgele Orman algoritması olduğunu göstermektedir. Gelecek çalışmalarda 5CB Sıvı Kristal yapıya ağırlıkça farklı oranlarda Ni(II)Pc ve CdSeS/ZnS kuantum nokta katkılanarak elde edilen kompozit yapıların elektro-optik özellikleri araştırılacaktır.

V. KAYNAKLAR

- [1] S. Kasap, P. Capper, F. Pascal, and M. J. Deen, *Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials*, Springer-Verlag, Boston, 2017.
- [2] P. Malik, A. Chaudhary, R. Mehra, and K. K. Raina, "Electrooptic and dielectric studies in cadmium sulphide nanorods/ferroelectric liquid crystal mixtures," *Advances in Condensed Matter Physics*, vol. 2012, p. 853160, 2012.
- [3] Y. Huang, E.-L. Hsiang, M.-Y. Deng, and S.-T. Wu, "Mini-LED, Micro-LED and OLED displays: Present status and future perspectives," *Light: Science & Applications*, vol. 9, no. 1, pp. 1–16, 2020.
- [4] H.-W. Chen, J.-H. Lee, B.-Y. Lin, S. Chen, and S.-T. Wu, "Liquid crystal display and organic light-emitting diode display: present status and future perspectives," *Light: Science & Applications*, vol. 7, no. 3, pp. 17168–17168, 2018.
- [5] C. Cirtoaje, E. Petrescu, C. Stan, and A. Rogachev, "Electric Freedericksz transition in nematic liquid crystals with graphene quantum dot mixture," *Applied Surface Science*, vol. 487, pp. 1301–1306, 2019.
- [6] A.N. Gowda, M. Kumar, A.R. Thomas, R. Philip, S. Kumar, "Self-Assembly of Silver and Gold Nanoparticles in a Metal-Free Phthalocyanine Liquid Crystalline Matrix: Structural, Thermal, Electrical and Nonlinear Optical Characterization," *Chem. Sel.* Vol. 1, pp. 1361–1370, 2016.
- [7] M. Pande, P. K. Tripathi, S. K. Gupta, R. Manohar, and S. Singh, "Enhancement of birefringence of liquid crystals with dispersion of poly (n-butyl methacrylate)(PBMA)," *Liquid Crystals*, vol. 42, no. 10, pp. 1465–1471, 2015.
- [8] R. K. Shukla, A. Chaudhary, A. Bubnov, and K. K. Raina, "Multi-walled carbon nanotubes-ferroelectric liquid crystal nanocomposites: effect of cell thickness and dopant concentration on electro-optic and dielectric behaviour," *Liquid Crystals*, vol. 45, no. 11, pp. 1672–1681, 2018.
- [9] D. Bonegardt, D. Klyamer, B. Köksoy, M. Durmuş, and T. Basova, "Hybrid materials of carbon nanotubes with fluoroalkyl-and alkyl-substituted zinc phthalocyanines," *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, vol. 31, pp. 11021–11028, 2020.

- [10] S. Moradian, H. Dezhmpanah, J. B. Ghasemi, and H. Behnejad, "Spectrophotometric-chemometrics study of the effect of solvent composition and temperature on the spectral shape and shift of copper and nickel phthalocyanines in different aqueous-nonaqueous mixed solvents," *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, vol. 227, p. 117621, 2020.
- [11] K. Sakamoto and E. Ohno-Okumura, "Syntheses and functional properties of phthalocyanines," *Materials*, vol. 2, no. 3, pp. 1127–1179, 2009.
- [12] Ö. Bekaroğlu, Y. Bian, G. Bottari, X. Cai, G de la Torre, U. Hahn, N. Ishikawa, J. Jiang, N. Kobayashi, X. Li, Y. Liu, J-Y. Liu, P-C. Lo, Q. Luo, D.K.P. Ng, T. Nyokong, H. Tian, T. Torres, H. Wang, H. Wu, S. Yoshimoto and Y. Zhang, *Functional phthalocyanine molecular materials*, vol. 135, Heidelberg, Germany: Springer Science & Business Media, 2010, pp. 9.
- [13] S. Moradian, H. Dezhmpanah, J. B. Ghasemi, and H. Behnejad, "Spectrophotometric-chemometrics study of the effect of solvent composition and temperature on the spectral shape and shift of copper and nickel phthalocyanines in different aqueous-nonaqueous mixed solvents," *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, vol. 227, p. 117621, 2020.
- [14] F. Ghani, J. Kristen, and H. Riegler, "Solubility properties of unsubstituted metal phthalocyanines in different types of solvents," *Journal of Chemical & Engineering Data*, vol. 57, no. 2, pp. 439–449, 2012.
- [15] E. Güzel, B. S. Arslan, G. Y. Atmaca, M. Nebioğlu, and A. Erdoğan, "High Photosensitized Singlet Oxygen Generating Zinc and Chloroindium Phthalocyanines Bearing (4-isopropylbenzyl) oxy Groups as Potential Agents for Photophysics Applications," *ChemistrySelect*, vol. 4, no. 2, pp. 515–520, 2019.
- [16] A. Rastogi, G. Pathak, A. Srivastava, J. Herman, and R. Manohar, "Cd1- X ZnXS/ZnS core/shell quantum dots in nematic liquid crystals to improve material parameter for better performance of liquid crystal based devices," *Journal of Molecular Liquids*, vol. 255, pp. 93–101, 2018.
- [17] Y. Umeda, H. Hayashi, H. Moriwake, and I. Tanaka, "Prediction of dielectric constants using a combination of first principles calculations and machine learning," *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 58, no. SL, p. SLLC01, 2019.
- [18] G. Pilania, C. Wang, X. Jiang, S. Rajasekaran, and R. Ramprasad, "Accelerating materials property predictions using machine learning," *Scientific reports*, vol. 3, no. 1, pp. 1–6, 2013.
- [19] Ö. Eyecioglu, M. Kılıç, ve Z. G. Özdemir, "Polipropilen/Polianilin Kompozit Filmlerin Dielektrik Özelliklerinin Yapay Sinir Ağları Modeli İle Tahmini," *Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi Part C: Tasarım ve Teknoloji*, c. 6, s. 4, ss. 787-802, 2018.
- [20] J. Wei *et al.*, "Machine learning in materials science," *InfoMat*, vol. 1, no. 3, pp. 338–358, 2019.
- [21] A. Mannodi-Kanakkithodi, G. Pilania, and R. Ramprasad, "Critical assessment of regression-based machine learning methods for polymer dielectrics," *Computational Materials Science*, vol. 125, pp. 123–135, 2016.
- [22] A. Mannodi-Kanakkithodi, G. Pilania, T. D. Huan, T. Lookman, and R. Ramprasad, "Machine learning strategy for accelerated design of polymer dielectrics," *Scientific reports*, vol. 6, no. 1, pp. 1–10, 2016.
- [23] M. Kılıç, Ö. Eyecioglu, Z. Özdemir, and Ü. Alkan, "Estimation of dielectric parameters of LDPE/PANI composite films depending on temperature and PANI additive concentration by GRNN,"

Journal of the Faculty of Engineering and Architecture of Gazi University, vol. 35, no. 2, pp. 1077–1088, 2020.

[24] Ö. Eyeciođlu, “Bazalt/PANI Kompozitlerinin Dielektrik Özelliklerinin Tahmini için Makine Öğrenmesi Modellerinin Karşılaştırılması,” *Avrupa Bilim ve Teknoloji Dergisi*, s 23, ss. 817-826, 2021.

[25] J. Mendes-Moreira, C. Soares, A. M. Jorge, and J. F. D. Sousa, “Ensemble approaches for regression: A survey,” *Acm computing surveys (csur)*, vol. 45, no. 1, pp. 1–40, 2012.

[26] L. E. Peterson, “K-nearest neighbor,” *Scholarpedia*, vol. 4, no. 2, pp. 1883, 2009.

[27] E. Alpaydin, *Introduction to machine learning*. MIT press, 2020.

[28] Y. L. Pavlov, *Random forests*. De Gruyter, 2019.