



ANADOLU ÜNİVERSİTESİ

EISSN: 2146-0191

**ANADOLU ÜNİVERSİTESİ BİLİM VE TEKNOLOJİ
DERGİSİ
B - Teorik Bilimler**

**ANADOLU UNIVERSITY JOURNAL OF SCIENCE AND TECHNOLOGY
B - Theoretical Sciences**

Cilt / Volume **5** Sayı / Number **1** 2017

ANADOLU ÜNİVERSİTESİ BİLİM VE TEKNOLOJİ DERGİSİ

B- Teorik Bilimler

Cilt: 5 / Sayı: 1 2017

ANADOLU UNIVERSITY JOURNAL OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

B-Theoretical Sciences

Volume: 5 / No: 1 - 2017

SAHİBİ / OWNER

Anadolu Üniversitesi Rektörü Prof. Dr. Naci GÜNDOĞAN

Prof. Dr. Naci GÜNDOĞAN, the Rector of Anadolu University

BAŞ EDİTÖR / EDITOR-IN-CHIEF

Prof. Dr. Nedim DEĞİRMENÇİ

Anadolu Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, 26470 Eskişehir, Türkiye

Telefon / Phone: +90-222-335 05 80 dahili / ext01755

Fax: +90-222 3354122

e-posta / e-mail: ndegirmenci@anadolu.edu.tr

BAŞ EDİTÖR YARDIMCISI / CO-EDITOR IN CHIEF

Prof. Dr. Müfide BANAR

Anadolu Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, 26470 Eskişehir, Türkiye

Telefon / Phone: +90-222-335 05 80 dahili / ext01755

Fax: +90-222 3354122

e-posta / e-mail: mbanar@anadolu.edu.tr

BAŞ EDİTÖR YARDIMCISI / CO-EDITOR IN CHIEF

Doç. Dr. Yunus ÖZDEMİR

Anadolu Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, 26470 Eskişehir, Türkiye

Telefon / Phone: +90-222-335 05 80 dahili / ext01755

Fax: +90-222 3354122

e-posta / e-mail: yunuso@anadolu.edu.tr

İLETİŞİM BİLGİLERİ / CONTACT INFORMATION

Anadolu Üniversitesi Bilim ve Teknoloji Dergisi

Anadolu Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, 26470 Eskişehir, Türkiye

Telefon / Phone: +90-222-335 05 80 dahili / ext. 1767

Fax: +90-222 3354122

e-posta / e-mail: btbd@anadolu.edu.tr, btd@anadolu.edu.tr

ANADOLU ÜNİVERSİTESİ BİLİM VE TEKNOLOJİ DERGİSİ
B- Teorik Bilimler
Cilt: 5 / Sayı: 1 - 2017

ANADOLU UNIVERSITY JOURNAL OF SCIENCE AND TECHNOLOGY
B-Theoretical Sciences
Volume: 5 / No: 1 - 2017

STİL EDİTÖRÜ / STYLE EDITOR

Aysun ÖZKAN

Anadolu Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Eskişehir, Türkiye
aysunozkan@anadolu.edu.tr

İNGİLİZCE DİL EDİTÖRÜ / LANGUAGE EDITOR-ENGLISH

Barış ERBAŞ

Anadolu Üniversitesi, Fen Fakültesi, Eskişehir, Türkiye
berbas@anadolu.edu.tr

ALAN EDİTÖRLERİ / SECTION EDITORS

- Dilek AK** (Faculty of Pharmacy, Anadolu University, Turkey)
Uğur AVDAN (Research Institute of Earth and Space Sciences, Anadolu University, Turkey)
Erhan AYAS (Dept. of Materials Science and Engineering, Anadolu University, Turkey)
Aydın AYBAR (Dept. of Electrical and Electronics Eng., Anadolu University, Turkey)
Recep BAKIŞ (Dept. of Civil Engineering, Anadolu University, Turkey)
Henry BERGMAN (Anhalt University, Germany)
Karel BOUZEK (University of Chemistry and Technology, Czech Republic)
Berrin BOZAN (Dept. of Chemical Engineering, Anadolu University, Turkey)
Harun BÖCÜK (Dept. of Biology, Anadolu University, Turkey)
Vakıf CAFER (Dept. of Mathematics, Anadolu University, Turkey)
Aydan CAVCAR (Faculty of Aeronautics and Astronautics, Anadolu University, Turkey)
Müjdat ÇAĞLAR (Dept. of Physics, Anadolu University, Turkey)
Yunus Ali ÇENGEL (Adnan Menderes University, Turkey)
Feyza ÇİNİCİOĞLU (İstanbul University, Turkey)
Fatih DEMİRCİ (Faculty of Health Sciences, Anadolu University, Turkey)
Nihal ERGİNEL (Dept. of Industrial Engineering, Anadolu University, Turkey)
Eftade GAGA (Dept. of Environmental Engineering, Anadolu University, Turkey)
Hasan Ferdi GERÇEL (Dept. of Chemical Engineering, Anadolu University, Turkey)
Ömer Neziğ GEREK (Dept. of Electrical and Electronics Eng., Anadolu University, Turkey)
Emrah GÖKALTUN (Faculty of Architecture and Design, Anadolu University, Turkey)
Serdar GÖNCÜ (Dept. of Environmental Engineering, Anadolu University, Turkey)
Zerrin AŞAN GREENACRE (Dept. of Statistics, Anadolu University, Turkey)
Cihan KALELİ (Dept. of Computer Engineering, Anadolu University, Turkey)
Refail KASIMBEYLİ (Dept. of Industrial Engineering, Anadolu University, Turkey)
Süleyman KAYTAKOĞLU (Dept. of Chemical Engineering, Anadolu University, Turkey)
Ali Savaş KOPARAL (Dept. of Environmental Engineering, Anadolu University, Turkey)
Semra KURAMA (Dept. of Materials Science and Engineering, Anadolu University, Turkey)
Susumu NII (Nagoya University, Japan)
Asiye Safa ÖZCAN (Dept. of Chemistry, Anadolu University, Turkey)
Emrah PEKKAN (Research Inst. of Earth and Space Sciences, Anadolu University, Turkey)
Mustafa TOMBUL (Dept. of Civil Engineering, Anadolu University, Turkey)
Önder TURAN (Faculty of Aeronautics and Astronautics, Anadolu University, Turkey)

ANADOLU ÜNİVERSİTESİ BİLİM VE TEKNOLOJİ DERGİSİ
B - Teorik Bilimler
Cilt: 5 / Sayı: 1 -2017

ANADOLU UNIVERSITY JOURNAL OF SCIENCE AND TECHNOLOGY
B -Theoretical Sciences
Volume: 5 / No: 1 - 2017

İÇİNDEKİLER / CONTENTS

Sayfa / Page

A NEW METHOD OF APPROXIMATION FOR FUZZY MEMBERSHIP FUNCTION WITH APPLICATION <i>A. Shamilov, N. İnce</i>	1
ÇİZGE-YÖNLENDİRİLMİŞ FRAKTALLARIN ÇAPLARI ÜZERİNE <i>A. Deniz</i>	13
ESKİŞEHİR İLİNDE HAVAYOLU YOLCU POTANSİYELİNİN BELİRLENMESİ ÜZERİNE BİR KARAR AĞACI UYGULAMASI <i>A. Küçük Yılmaz, M. Ş. Durak, E. Özdemir, K. Kiracı, G. Tanrıverdi</i>	22
8-BOYUTTA HİPERBOLİK UZAYLARDA SEIBERG –WITTEN DENKLEMLERİ <i>S. Eker, Ş. Bulut, N. Değirmenci</i>	34
A NOTE ON CONNECTION FORMS ON THE QUATERNIONIC HOPF BUNDLE <i>N. Özdemir</i>	49
INVESTIGATION OF ELECTRONIC AND MOLECULAR PROPERTIES OF 5-(3-METHYL-3-PHENYLCYCLOBUTYL)-N-PHENYL-3,6-DIHYDRO-2H-1,3,4-THIADIAZIN-2-IMINE BY EXPERIMENTAL AND THEORETICAL METHODS <i>B. Ferah, İ. Yılmaz, M. Dinçer, A. Çukurovalı</i>	56
CALCULATION OF CUTOFF FREQUENCY FOR POLYNOMIAL FAMILIES <i>T. Büyükköroğlu, G. Çelebi</i>	70
SURFACE DISPLACEMENT FIELD OF A COATED ELASTIC HALF-SPACE UNDER THE INFLUENCE OF A MOVING DISTRIBUTIONAL LOAD <i>O. Şahin, N. Ege</i>	77
A MECHANISTIC STUDY ON THE REACTIONS OF VINYL CARBENE WITH HYDROGEN, CARBON MONOXIDE AND CARBON DIOXIDE: SHED LIGHT ON FURTHER MANIPULATIONS <i>C. B. Yıldız</i>	91
ÇİFT TARAFLI TİP II SANSÜRLENMİŞ ÖRNEKLEMLER İÇİN JONES VE FADDY' NİN ÇARPIK t DAĞILIMININ KONUM VE ÖLÇEK PARAMETRELERİNİN TAHMİNİ <i>M. S. T. Arslan, B. Şenoğlu</i>	100

A NEW METHOD OF APPROXIMATION FOR FUZZY MEMBERSHIP FUNCTION WITH APPLICATION

Aladdin SHAMILOV¹, Nihal İNCE^{1,*}

¹ Department of Statistics, Faculty of Science, Anadolu University, 26470, Eskişehir, Turkey

ABSTRACT

In the present study we have formulated a new Maximum Fuzzy Entropy Problem (Max(F)EntP) for fuzzy membership function and proposed sufficient conditions for existence of its solution. Mentioned problem consists of approximation fuzzy membership function by maximizing Maximum Fuzzy Entropy (Max(F)Ent) measure with respect to membership functions with finite number of the fuzzy values subject to constraints generated by given moment functions. The existence of solution of mentioned problem is proved by virtue of convexity property of Max(F)Ent measure, the implicit function theorem and Lagrange multipliers method. Moreover, by using MATLAB programme one application of suggested method on fuzzy data analysis is given.

Keywords: Fuzzy entropy measure, Maximum fuzzy entropy problem, Membership function, Fuzzy data analysis

BULANIK ÜYELİK FONKSİYONUNUN YAKLAŞIMI İÇİN BİR YENİ METOT VE UYGULAMA

ÖZET

Bu çalışmada, tarafımızdan bulanık üyelik fonksiyonu için yeni bir maksimum bulanık entropi problemi (Max(F)EntP) geliştirilmiş ve bu problemin çözümünün varlığı için yeterli koşullar belirlenmiştir. Söz konusu problem sonlu sayıda bulanık değerlere sahip üyelik fonksiyonunu bulanık entropi ölçümünü verilmiş moment fonksiyonları yardımıyla üretilen moment koşulları altında maksimize etmekle yaklaşık olarak elde etme problemidir. Söz konusu problemin çözümünün varlığı Max(F)Ent ölçümünün konvekslik özelliği, kapalı fonksiyon teoremi ve Lagrange çarpanları yardımıyla ispatlanmıştır. Buna ek olarak, bulanık veri analizi üzerine sunulmuş yöntemin bir uygulaması MATLAB programı kullanılarak verilmiştir.

Anahtar Kelimeler: Bulanık entropi ölçümü, Maksimum bulanık entropi problemi, Üyelik fonksiyonu, Bulanık veri analizi

1. INTRODUCTION

The concept of entropy and many problems concerned with its applications are given in [1]. Zadeh [2] has introduced the concept of fuzzy sets and developed his own theory to measure the uncertainty of a fuzzy set. It is known that a fuzzy set A is defined in the universal set X by a membership function $\mu_A(x)$ and represented as

$$A = \{x_i \mid \mu_A(x_i) : i = 0, 1, 2, \dots, n\}.$$

μ_A in crisp set maps whole members in universal set X to $\{0, 1\}$, $\mu_A: X \rightarrow \{0, 1\}$. However, in fuzzy sets, each element is mapped to $[0, 1]$ by membership function, $\mu_A: X \rightarrow [0, 1]$. For this reason, fuzzy set can be described as “vague boundary” set comparing with crisp set in [3, 4].

By starting from the concept of fuzzy sets De Luca and Termini [5] suggested that corresponding to Shannon's [6] probabilistic entropy the fuzzy entropy measure $H(A)$ for fuzzy set A containing finite number elements can be expressed by formula

$$H(A) = -\sum_{i=0}^n [\mu_A(x_i) \log \mu_A(x_i) + (1 - \mu_A(x_i)) \log(1 - \mu_A(x_i))],$$

where A is a fuzzy set, $\mu_A(x)$ is membership function and $\mu_A(x_i)$ are the fuzzy values.

After the development of fuzzy entropy measure formula $H(A)$ given in [5], a large number of measures of fuzzy entropy were discussed, characterized and generalized by various authors. Some other interesting findings are related with theoretical measures of fuzzy entropy and their applications have been provided by Kapur [7], Parkash and Sharma [8], Yager [9], Bhandari and Pal [10], Parkash, Sharma and Kumar [11] etc. In [12], Parkash, Sharma and Mahajan introduced new measures of weighted fuzzy entropy including two moment conditions.

The aim of this study consists of developing a new Generalized Maximum Fuzzy Entropy Methods in the form of MinMax(F)EntM and MaxMax(F)EntM on the basis of entropy optimization theory [13-15] and present an application.

The suggested paper is formed as follows. In Section 2, a complete definition of Maximum Fuzzy Entropy Problem, Method and Distribution are proposed. In Section 3, the convexity of Max(F)Ent measure is introduced. In Section 4, the existence of Maximum Fuzzy Entropy Problem (Max(F)EntP) is proved by using Lagrange multipliers methods [16] and implicit function theorem [17]. In Section 5, the evaluation of Lagrange multipliers for Maximum Fuzzy Entropy Problem (Max(F)EntP) is formulated by Existence theorem. In Section 6, the maximum fuzzy entropy value is achieved. In Section 7, new Generalized Maximum Fuzzy Entropy Problems (MinMax(F)Ent)_m, (MaxMax(F)Ent)_m and methods of solving these problems are developed [18-20]. In Section 8, it is given an application about GMax(F)EntM. Finally, the main results obtained in this study are summarized.

2. MAXIMUM FUZZY ENTROPY PROBLEM (MAX(F)ENTP)

On the basis of entropy optimization theory we have suggested a new Generalized Maximum Fuzzy Entropy Methods (GMax(F)EntM) in the form of MinMax(F)EntM and MaxMax(F)EntM. These methods are based on primary maximizing Max(F)Ent measure for fixed moment vector function in order to define the special functional with maximum values of Max(F)Ent measure and secondary optimization of mentioned functional with respect to moment vector functions. Distribution, in other words a set of successive values of estimated membership function closest to (furthest from) the given membership function in the sense of Max(F)Ent measure, for the first time, obtained by mentioned methods is defined as (MinMax(F)Ent)_m ((MaxMax(F)Ent)_m) distribution which can be applied in many problems of fuzzy data analysis. One of mentioned applications is approximately obtaining fuzzy membership function according to given fuzzy data.

In formula for fuzzy set A containing finite number elements suggested by De Luca and Termini [5] we write "ln" instead of "log" in order to simply operations. Therefore, we shall consider the following formula

$$H(A) = -\sum_{i=0}^n [\mu_A(x_i) \ln \mu_A(x_i) + (1 - \mu_A(x_i)) \ln(1 - \mu_A(x_i))]. \quad (1)$$

Maximum Fuzzy Entropy Problem (Max(F)EntP) consists of maximizing Max(F)Ent measure (1) with respect to membership functions $\mu_A(x)$ with finite number of the fuzzy values $\mu_A(x_i), i = 0, 1, \dots, n$ subject to constraints

$$\sum_{i=0}^n \mu_A(x_i) g_j(x_i) = \mu_j, \quad j = 0, 1, 2, \dots, m \quad (2)$$

where $g_0(x) \equiv 1$; $\mu_j, j = 0,1,2, \dots, m$ are moment values of $\mu_A(x_i), i = 0,1,\dots,n$ with respect to moment functions $g_j(x), j = 0,1,2, \dots, m; m < n$.

The distribution of fuzzy values $(\mu_A(x_0), \mu_A(x_1), \dots, \mu_A(x_n))$ maximizing function (1) subject to constraints (2) (briefly stated problem (1),(2)) we call Maximum Fuzzy Entropy Distribution (Max(F)EntD) just as Maximum Entropy Distribution (MaxEntD) of probabilistic entropy optimization problem.

Fuzzy Entropy Optimization Problem (1),(2) is a conditional extremum problem. The solvability of this problem requires to fulfillment of several conditions. Mentioned conditions are following:

- 1) Moment functions $g_j(x), j = 0,1,2, \dots, m$ are linearly independent;
- 2) The inequality $n > m$ is satisfied;
- 3) Moment values $\tilde{\mu}_j, j = 0,1,2, \dots, m$ are obtained by virtue of given fuzzy values $\tilde{\mu}_A(x_i), i = 0,1, \dots, n$ and moment functions $g_j(x), j = 0,1, \dots, m$ in the form of equalities

$$\sum_{i=0}^n g_j(x_i) \tilde{\mu}_A(x_i) = \tilde{\mu}_j, j = 0,1, \dots, m. \quad (2_1)$$

Remark. (2_1) means that there are linear dependency between the column $\tilde{\mu} = (\tilde{\mu}_0, \tilde{\mu}_1, \dots, \tilde{\mu}_m)^T$ and all columns of matrix $A = (g_j(x_i))_{\substack{j=0,1,\dots,m \\ i=0,1,\dots,n}}$. Consequently, $rank A$ is equal to $rank(A; \tilde{\mu})$, where $(A; \tilde{\mu})$ is augmented matrix for system (2) as the matrix A with column $\tilde{\mu}$ added to it. Therefore, system (2) with respect to $\mu_A(x_i), i = 0,1,\dots,n$ has a solution. Note that from condition 1) follows that $rank A = m + 1$.

3. CONVEXITY OF MAX(F)ENT MEASURE

In order to simplify mathematical operations constrained with (1) we use conventional signs $\mu_A(x_i) = X_i, i = 0,1,\dots,n$ and write (1) in the form

$$H = -\sum_{i=0}^n [X_i \ln X_i + (1 - X_i) \ln(1 - X_i)]. \quad (1')$$

From (1') follows that

$$\frac{\partial H}{\partial X_i} = \ln\left(\frac{1-X_i}{X_i}\right);$$

$$\frac{\partial^2 H}{\partial X_i \partial X_j} = \begin{cases} -\frac{1}{X_j(1-X_j)}, & i = j \\ 0, & i \neq j. \end{cases}$$

Consequently, Hessian matrix \mathcal{H} is defined in the following form

$$\mathcal{H} = \left(\frac{\partial^2 H}{\partial X_i \partial X_j} \right)_{\substack{j=0,1,\dots,n \\ i=0,1,\dots,n}}$$

Since eigenvalues of \mathcal{H} matrix are negative : $-\frac{1}{X_i(1-X_i)} < 0, i = 0,1, \dots, n$, therefore this matrix is negative defined. This result shows that function H is convex and at critical point $(X_0^0, X_1^0, \dots, X_n^0), X_i^0 = \frac{1}{2}$ for which $\frac{\partial H}{\partial X_i} = 0$ function H reaches maximum value.

4. THE EXISTENCE OF SOLUTION OF MAX(F)ENTP

Maximum Fuzzy Entropy Problem (1),(2) is a conditional extremum problem and can be solved by Lagrange multipliers method. According to Lagrange multipliers method firstly the new auxiliary function U is constructed:

$$U = -\sum_{i=0}^n [\mu_A(x_i) \ln \mu_A(x_i) + (1 - \mu_A(x_i)) \ln(1 - \mu_A(x_i))] - \sum_{j=0}^m \lambda_j (\sum_{i=0}^n \mu_A(x_i) g_j(x) - \mu_j), \quad (3)$$

where λ_j are certain constant factors and the function U is now investigated for an unconditional extremum; we form a system of equations $\frac{\partial U}{\partial \lambda_j} = 0, j = 0, 1, \dots, m$ supplemented by the constraint equations (2) from which all the $n + m + 2$ unknowns $\mu_A(x_i), i = 0, 1, \dots, n$ and $\lambda_j, j = 0, 1, \dots, m$ are determined.

From (3) follows that

$$\frac{\partial U}{\partial \mu_A(x_i)} = \left[-\ln \mu_A(x_i) + \mu_A(x_i) \frac{1}{\mu_A(x_i)} - \ln(1 - \mu_A(x_i)) + (1 - \mu_A(x_i)) \frac{1}{\mu_A(x_i)} (-1) \right] - \sum_{j=0}^m \lambda_j g_j(x_i) = 0,$$

$$[-\ln \mu_A(x_i) + 1 - \ln(1 - \mu_A(x_i)) - 1] - \sum_{j=0}^m \lambda_j g_j(x_i) = 0;$$

$$-\ln \frac{\mu_A(x_i)}{(1 - \mu_A(x_i))} = \sum_{j=0}^m \lambda_j g_j(x_i);$$

$$\frac{1 - \mu_A(x_i)}{\mu_A(x_i)} = e^{\sum_{j=0}^m \lambda_j g_j(x_i)}, \quad i = 0, 1, \dots, n$$

$$\frac{1}{\mu_A(x_i)} = 1 + e^{\sum_{j=0}^m \lambda_j g_j(x_i)},$$

$$\mu_A(x_i) = \frac{1}{1 + e^{\sum_{j=0}^m \lambda_j g_j(x_i)}}, \quad i = 0, 1, \dots, n. \quad (4)$$

Also, from (1) follows that

$$\frac{\partial U}{\partial \lambda_j} = -(\sum_{i=0}^n \mu_A(x_i) g_j(x) - \mu_j) = 0, \quad j = 0, 1, \dots, m.$$

If we take (4) into account in (2), then

$$\sum_{i=0}^n \frac{1}{1 + e^{\sum_{j=0}^m \lambda_j g_j(x_i)}} g_j(x_i) = \mu_j, \quad j = 0, 1, 2, \dots, m. \quad (5)$$

If denote the left-hand of (5) by $f_j(\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_m)$, then (5) can be written as

$$f_j(\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_m) = \sum_{i=0}^n \frac{1}{1 + e^{\sum_{j=0}^m \lambda_j g_j(x_i)}} g_j(x_i) = \mu_j, \quad j = 0, 1, \dots, m. \quad (6)$$

From (2₁) follows that

$$\sum_{i=0}^m g_j(x_i) \tilde{\mu}_A(x_i) = \tilde{\mu}_j - \sum_{i=m+1}^n g_j(x_i) \tilde{\mu}_A(x_i), \quad j = 0, 1, \dots, m. \quad (7)$$

(7) shows that there are linear correlations between $\tilde{\mu}_A(x_i), i = 0, 1, \dots, m$ and $\tilde{\mu}_A(x_i), i = m + 1, \dots, n$. Consequently, from the assumption 1), that moment functions $g_j(x), j = 0, 1, \dots, m$ are linearly independent, then the following condition is satisfied

$$\det \left(g_j(x_i) \right)_{\substack{j=0,1,\dots,m \\ i=0,1,\dots,m}} \neq 0. \quad (2_2)$$

In (7), $\tilde{\mu}_A(x_i), i = 0, 1, \dots, m$ by Cramer method of solving linear nonhomogenous algebraical equations can be expressed via $\tilde{\mu}_j, j = 0, 1, \dots, m$ and $\tilde{\mu}_A(x_i), i = m + 1, \dots, n$ in the form

$$\tilde{\mu}_A(x_i) = F(\tilde{\mu}_0, \tilde{\mu}_1, \dots, \tilde{\mu}_m, \tilde{\mu}_A(x_{m+1}), \dots, \tilde{\mu}_A(x_n)), \quad i = 0, 1, \dots, m. \quad (2_3)$$

From (4) follows that

$$\sum_{j=0}^m \lambda_j g_j(x_i) = \ln \left(\frac{1 - \mu_A(x_i)}{\mu_A(x_i)} \right), \quad i = 0, 1, \dots, m. \quad (8)$$

If substitute (2₃) in (8) and solve the getting equations with respect to $\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_m$, then it is possible to find $\tilde{\lambda}_0, \tilde{\lambda}_1, \dots, \tilde{\lambda}_m$ satisfying (6) and the equations

$$f_j(\tilde{\lambda}_0, \tilde{\lambda}_1, \dots, \tilde{\lambda}_m) = \tilde{\mu}_j, \quad j = 0, 1, \dots, m \quad (9)$$

are arised. Therefore, subject to assumption (2₂) by solving (7) with respect to $\tilde{\mu}_A(x_i), i = 0, 1, \dots, m$ and substituting (2₃) in (8) the relations (9) are appeared.

Note that relations (9) are one of the important conditions to solve equations (6) with respect to $\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_m$. The other condition to solve equations (6) with respect to $\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_m$ in the some neighbourhood of $(\tilde{\lambda}_0, \tilde{\lambda}_1, \dots, \tilde{\lambda}_m)$ satisfying (9) is the condition

$$J = \frac{D(f_0, f_1, \dots, f_m)}{D(\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_m)} \neq 0. \quad (10)$$

Now, we prove the fulfillment of (10). From (6), it follows that

$$\frac{\partial f_j}{\partial \lambda_k} = \sum_{i=0}^n \mu_A(x_i) (1 - \mu_A(x_i)) g_j(x_i) g_k(x_i), \quad j = 0, 1, \dots, m, k = 0, 1, \dots, m. \quad (11)$$

Let us $\sum_{i=0}^n \mu_A(x_i) (1 - \mu_A(x_i)) = \alpha$. Then,

$$\sum_{i=0}^n \frac{\mu_A(x_i) (1 - \mu_A(x_i))}{\alpha} = 1. \quad (12)$$

In (12), if the ratio $\frac{\mu_A(x_i) (1 - \mu_A(x_i))}{\alpha}$ is considered as probability measure, then

$$\frac{\mu_A(x_i) (1 - \mu_A(x_i))}{\alpha} = P_i, \quad i = 0, 1, \dots, n; \quad \sum_{i=0}^n P_i = 1$$

and from (11) it follows that

$$\frac{\partial f_j}{\partial \lambda_k} = \alpha \sum_{i=0}^n \frac{\mu_A(x_i) (1 - \mu_A(x_i))}{\alpha} g_j(x_i) g_k(x_i) = \alpha \sum_{i=0}^n P_i g_j(x_i) g_k(x_i) = \alpha E[g_j g_k]$$

and

$$R = \left(\frac{\partial f_j}{\partial \lambda_k} \right)_{j,k=0,1,\dots,m} = \alpha \begin{pmatrix} E[g_0g_0] & E[g_0g_1] & \dots & E[g_0g_m] \\ E[g_1g_0] & E[g_1g_1] & \dots & E[g_1g_m] \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ E[g_mg_0] & E[g_mg_1] & \dots & E[g_mg_m] \end{pmatrix}.$$

Since R is correlation matrix of random variables $g_0(x), \dots, g_m(x)$ each of which has $n + 1$ number of values, then

$$J = \frac{D(f_0, f_1, \dots, f_m)}{D(\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_m)} = \det(R) \neq 0.$$

Note that the satisfiability of last condition can be also proved as following:

$$\begin{aligned} 0 &\leq E\{|a_0g_0 + a_1g_1 + \dots + a_mg_m|^2\} = E\{\sum_{j=0}^m \sum_{k=0}^m a_j a_k g_j g_k\} = \\ &= \sum_{j=0}^m \sum_{k=0}^m a_j a_k E\{g_j g_k\} = a R a^T, \quad a \neq 0, \quad a = (a_0, \dots, a_m). \end{aligned} \quad (13)$$

It is seen that random variables $g_j(x), j = 0, 1, \dots, m$ are linearly independent according to assumption 1), the left-hand of (13) is equal to zero if and only if at $a = 0$, consequently R is positive defined matrix, therefore $\det R \neq 0$ and condition (10) is satisfied.

The satisfiability of (9) and (10) indicates that the implicit function theorem [16] can be applied to solvability of (6) with respect to $\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_m$.

The obtained results for solvability of (6) can be expressed in the following theorem.

Existence Theorem. Let us the conditions 1), 2) and 3) are satisfied.

Then, Maximum Fuzzy Entropy Problem (Max(F)EntP) which consists of maximizing Max(F)Ent measure (1) with respect to membership functions $\mu_A(x)$ with finite number of the fuzzy values $\mu_A(x_i), i = 0, 1, \dots, n$ subject to constraints (2) has a solution $(\mu_A(x_0), \mu_A(x_1), \dots, \mu_A(x_n))$.

5. EVALUATION OF LAGRANGE MULTIPLIERS FOR MAX(F)ENTP

From the proof of Existence theorem, it is indicated that evaluation of Lagrange multipliers occupies very important place. For this reason, it is required to consider this problem in more detail. One of basic stages of application of numerical methods is the choice of any initial point.

The mean problem consists of solving system of equations (6) with respect to $\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_m$ by starting any initial point $(\tilde{\lambda}_0, \tilde{\lambda}_1, \dots, \tilde{\lambda}_m)$. Mentioned point is obtained by following way. From (2₁) follows (7) and from (2₂) $\tilde{\mu}_A(x_i), i = 0, 1, \dots, m$ are obtained in the form of (2₃), later (2₃) is taken into account in (8). Solving (8) with respect to $\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_m$ and showing obtained values as $\tilde{\lambda}_0, \tilde{\lambda}_1, \dots, \tilde{\lambda}_m$ it is seen that these values satisfy (9). Consequently to solve system (6) by some numerical methods $(\tilde{\lambda}_0, \tilde{\lambda}_1, \dots, \tilde{\lambda}_m)$ can be taken as initial point.

6. MAXIMUM FUZZY ENTROPY VALUE

In Section 4, maximization of Max(F)Ent measure (1) is realized by Lagrange multipliers method and membership function $\mu_A(x)$ which gives maximum value to (1) is expressed by formula (4). By virtue of formula (4) from (1) follows that

$$\max H_A = - \sum_{i=0}^n \ln \frac{e^{\sum_{j=0}^m \lambda_j g_j(x_i)}}{1 + e^{\sum_{j=0}^m \lambda_j g_j(x_i)}} + \sum_{j=0}^m \lambda_j \mu_j. \quad (14)$$

The formula (14) represents maximum value of Max(F)Ent measure (1). It is seen that $\max H_A$ depends on Lagrange multipliers $\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_m$, moment functions $g_0(x), g_1(x), \dots, g_m(x)$ and moment fuzzy values $\mu_0, \mu_1, \dots, \mu_m$.

7. GENERALIZED MAXIMUM FUZZY ENTROPY PROBLEMS

Before it is showed that maximum value of Max(F)Ent measure H_A is represented by formula (14) in the dependency of moment functions $g_0(x), g_1(x), \dots, g_m(x)$, Lagrange multipliers $\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_m$, and moment fuzzy values $\mu_0, \mu_1, \dots, \mu_m$. Let us $g = (g_0, g_1, \dots, g_m)$ be vector moment functions with components g_0, g_1, \dots, g_m . If we take into account that according to condition (2) both Lagrange multipliers $\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_m$ and moment fuzzy values $\mu_0, \mu_1, \dots, \mu_m$ are generated by moment vector fuction g and given fuzzy values of $\mu_A(x_i)$, $i = 0, 1, \dots, n$, then the $\max H_A$ defined by formula (14) can be expressed as a functional $U(g)$ depended on moment vector fuction g . That is to say

$$U(g) = \max_g H_A = - \sum_{i=0}^n \ln \frac{e^{\sum_{j=0}^m \lambda_j g_j(x_i)}}{1 + e^{\sum_{j=0}^m \lambda_j g_j(x_i)}} + \sum_{j=0}^m \lambda_j \mu_j. \quad (15)$$

According to [13-15], let K be the compact set of moment vector functions $g(x)$. $U(g)$ reaches its least and greatest values in this compact set, because of its continuity property. For this reason,

$$\min_{g \in K} U(g) = U(g^{(1)}) \quad ; \quad \max_{g \in K} U(g) = U(g^{(2)}).$$

Consequently,

$$U(g^{(1)}) \leq U(g^{(2)}).$$

Distributions $\mu^{(1)} = (\mu^{(1)}(x_0), \mu^{(1)}(x_1), \dots, \mu^{(1)}(x_n))$ and $\mu^{(2)} = (\mu^{(2)}(x_0), \mu^{(2)}(x_1), \dots, \mu^{(2)}(x_n))$ corresponding to the moment functions $g^{(1)}(x)$ and $g^{(2)}(x)$ respectively, we call as MinMax(F)Ent and MaxMax(F)Ent distributions. Methods obtaining distributions MinMax(F)Ent and MaxMax(F)Ent we call as MinMax(F)EntM and MaxMax(F)EntM, respectively.

Now, MinMax(F)EntM and MaxMax(F)EntM for a finite set of characterizing moment functions can be defined in the following form.

Let $K_0 = \{g_1, \dots, g_r\}$ be the set of characterizing moment vector functions and all combinations of r elements of K_0 taken m elements at a time be $K_{0,m}$. We note that each element of $K_{0,m}$ is vector g with m components. Note that the number of vectors g is equal to $\binom{r}{m}$.

Solving the MinMax(F)Ent and MaxMax(F)Ent problems require to find vector functions $(g_0, g^{(1)}(x))$ and $(g_0, g^{(2)}(x))$, where $g_0(x) \equiv 1$, $g^{(1)} \in K_{0,m}$, $g^{(2)} \in K_{0,m}$ minimizing and maximizing functional $U(g)$ defined by (15). It should be noted that $U(g)$ reaches its minimum (maximum) value subject to constraints (2) generated by function $g_0(x)$ and all m -dimensional vector functions $g(x)$, $g \in K_{0,m}$. In other words, minimum (maximum) value of $U(g)$ is least (greatest) value of values $U(g)$ corresponding to $g(x)$, $g \in K_{0,m}$. In other words, MinMax(F)Ent (MaxMax(F)Ent) is distribution giving minimum (maximum) value to functional $U(g)$ along of all distributions generated by $\binom{r}{m}$ number of moment vector functions $g(x)$, $g \in K_{0,m}$. Mentioned distributions can be denoted by $(\text{MinMax(F)Ent})_m$ and $(\text{MaxMax(F)Ent})_m$.

If $(g_0, g^{(1)}(x))$ gives the minimum value to $U(g)$, then distribution $\mu^{(1)} = (\mu^{(1)}(x_0), \mu^{(1)}(x_1), \dots, \mu^{(1)}(x_n))$ is called $(\text{MinMax(F)Ent})_m$ distribution. In a similar way, if $(g_0, g^{(1)}(x))$ gives the maximum value to $U(g)$, then distribution of $\mu^{(2)} = (\mu^{(2)}(x_0), \mu^{(2)}(x_1), \dots, \mu^{(2)}(x_n))$ is called $(\text{MaxMax(F)Ent})_m$ distribution. MinMax(F)Ent and MaxMax(F)Ent methods represent maximum fuzzy entropy distributions in the form of $(\text{MinMax(F)Ent})_m$ and $(\text{MaxMax(F)Ent})_m$ distributions. It should be noted that both distributions can be applied in solving proper problems in fuzzy data analysis.

8. APPLICATION OF MINMAX(F)ENT AND MAXMAX(F)ENT METHODS

In this section, $(\text{MinMax(F)Ent})_m$ and $(\text{MaxMax(F)Ent})_m$ distributions are obtained for the following membership function values in fuzzy data given by Table 1. It should be noted that mentioned distributions are calculated by using MATLAB.

Table 1. Membership function values $\mu(x_i) = \mu_i, i = 1, 2, \dots, 18$

x_i	μ_i
0.1000	0.0004
0.6000	0.0011
1.1000	0.0030
1.6000	0.0082
2.1000	0.0219
2.6000	0.0573
3.1000	0.1419
3.6000	0.3100
4.1000	0.5498
4.6000	0.7685
5.1000	0.9002
5.6000	0.9608
6.1000	0.9852
6.6000	0.9945
7.1000	0.9980
7.6000	0.9993
8.1000	0.9997
8.6000	0.9999

In order to calculate $(\text{MinMax(F)Ent})_m$ and $(\text{MaxMax(F)Ent})_m$ distributions for fuzzy data given in Table 1, it is required to realize the following steps:

1. Determine Max(F)Ent characterizing moments $E\{g_0(x)\}, E\{g_1(x)\}, \dots, E\{g_m(x)\}$ according to fuzzy data.
2. Calculate Max(F)Ent distributions subject to each of Max(F)Ent characterizing moments $E\{g_0(x)\}, E\{g_1(x)\}, \dots, E\{g_m(x)\}$.
3. Determine $(\text{MinMax(F)Ent})_m$ and $(\text{MaxMax(F)Ent})_m$ distributions corresponding to selected Max(F)Ent characterizing moments $E\{g_0(x)\}, E\{g_1(x)\}, \dots, E\{g_m(x)\}$
4. Along obtained distributions choose the accepted Generalized Maximum Fuzzy Entropy distributions.

It is noted that selection of moment functions set is important in the application of Max(F)Ent method. In our investigation, Max(F)Ent characterizing moments $E\{\sqrt{x}\}, E\{\ln x\}, E\{\ln(1+x)\}, E\{\ln(1+x^2)\}$ are acquired by experimental way.

In order to obtain $(\text{MinMax(F)Ent})_m$ and $(\text{MaxMax(F)Ent})_m$ ($m = 1,2$) distributions, we should choose the moment vector functions giving the maximum and minimum values to the Max(F)Ent functional $U(g)$. Here, we used the moment functions

$$g_0(x) = 1, g_1(x) = \sqrt{x}, g_2(x) = \ln x, g_3(x) = \ln(1+x), g_4(x) = \ln(1+x^2).$$

According to suggested method, $K_0 = \{g_0, g_1, g_2, g_3, g_4\}$ and all combinations of r elements of K_0 taken m elements at a time are denoted by $K_{0,m}$. Max(F)Ent values subject to moment constraints generated by elements of $K_{0,m}$, $m=1,2$ is given in Tables 2,3.

Table 2. Entropy of calculated Max(F)Ent values subject to two moment functions

Moments Functions	Fuzzy Entropy
$(1, \sqrt{x})$	0.0375
$(1, \ln x)$	0.0896
$(1, \ln(1+x))$	0.0379
$(1, \ln(1+x^2))$	0.0464

Table 3. Entropy of calculated Max(F)Ent values subject to three moment functions

Moment Functions	Fuzzy Entropy
$(1, \sqrt{x}, \ln x)$	0.0351
$(1, \sqrt{x}, \ln(1+x))$	0.0182
$(1, \sqrt{x}, \ln(1+x^2))$	0.0277
$(1, \ln x, \ln(1+x))$	0.0268
$(1, \ln x, \ln(1+x^2))$	0.0281
$(1, \ln(1+x), \ln(1+x^2))$	0.0280

For $m = 1, K_{0,1} = \{(1, \sqrt{x}), (1, \ln x), (1, \ln(1+x)), (1, \ln(1+x^2))\}$.

From Table 2, it is shown that $(g_0, g^{(1)}) = (1, \sqrt{x})$, $g^{(1)} \in K_{0,1}$ gives to least value to $U(g)$, consequently corresponding distribution is $(\text{MinMax(F)Ent})_1$, and $(g_0, g^{(2)}) = (1, \ln x)$, $g^{(2)} \in K_{0,1}$ gives to greatest value to $U(g)$, consequently corresponding distribution is $(\text{MaxMax(F)Ent})_1$. In a similar way,

For $m = 2, K_{0,2} = \{(1, \sqrt{x}, \ln x), (1, \sqrt{x}, \ln(1+x)), (1, \sqrt{x}, \ln(1+x^2)), (1, \ln x, \ln(1+x)), (1, \ln x, \ln(1+x^2))\}$.

From Table 3, it is shown that $(g_0, g^{(1)}) = (1, \sqrt{x}, \ln(1+x))$, $g^{(1)} \in K_{0,2}$ gives to least value to $U(g)$, consequently corresponding distribution is $(\text{MinMax(F)Ent})_2$ and $(g_0, g^{(2)}) = (1, \sqrt{x}, \ln x)$, $g^{(2)} \in K_{0,2}$ gives to greatest value to $U(g)$, consequently corresponding distribution is $(\text{MaxMax(F)Ent})_2$.

Calculated $(\text{MinMax(F)Ent})_m$ and $(\text{MaxMax(F)Ent})_m$, $m = 1,2$ distributions are given in Table 4.

Table 4. Distributions of $(\text{MinMax}(\text{F})\text{Ent})_m$ and $(\text{MaxMax}(\text{F})\text{Ent})_m$, $m = 1,2$

$(\text{MinMax}(\text{F})\text{Ent})_1$	$(\text{MinMax}(\text{F})\text{Ent})_2$	$(\text{MaxMax}(\text{F})\text{Ent})_1$	$(\text{MaxMax}(\text{F})\text{Ent})_2$
0.9997	0.9998	0.9963	0.9982
0.9998	0.9999	0.9991	0.9996
0.9998	0.9999	0.9995	0.9998
0.9998	0.9999	0.9996	0.9999
0.9998	0.9999	0.9997	0.9999
0.9998	0.9999	0.9997	0.9999
0.9998	0.9999	0.9998	0.9999
0.9999	0.9999	0.9998	1.0000
0.9999	0.9999	0.9998	1.0000
0.9999	0.9999	0.9998	1.0000
0.9999	1.0000	0.9998	1.0000
0.9999	1.0000	0.9999	1.0000
0.9999	1.0000	0.9999	1.0000
0.9999	1.0000	0.9999	1.0000
0.9999	1.0000	0.9999	1.0000
0.9999	1.0000	0.9999	1.0000
0.9999	1.0000	0.9999	1.0000
0.9999	1.0000	0.9999	1.0000
0.9999	1.0000	0.9999	1.0000
0.9999	1.0000	0.9999	1.0000
0.9999	1.0000	0.9999	1.0000

In order to obtain the performance of $(\text{MinMax}(\text{F})\text{Ent})_m$ and $(\text{MaxMax}(\text{F})\text{Ent})_m$ distributions, we use various criterias as Root Mean Square Error (RMSE), Chi-Square (χ^2) and Max(F)Ent measure (H). The acquired results are demonstrated in Table 5-6.

Table 5. The obtained results for $(\text{MinMax}(\text{F})\text{Ent})_m$, $m = 1,2$ distributions

Distributions of $(\text{MinMax}(\text{F})\text{Ent})_m$	Moment Constraints	H	RMSE	χ^2
$(\text{MinMax}(\text{F})\text{Ent})_1$	$(1, \sqrt{x})$	0.0375	0.6367	0.5212
$(\text{MinMax}(\text{F})\text{Ent})_2$	$(1, \sqrt{x}, \ln(1+x))$	0.0182	0.6368	0.5213

Table 6. The obtained results for $(\text{MaxMax}(\text{F})\text{Ent})_m$, $m = 1,2$ distributions

Distributions of $(\text{MaxMax}(\text{F})\text{Ent})_m$	Moment Constraints	H	RMSE	χ^2
$(\text{MaxMax}(\text{F})\text{Ent})_1$	$(1, \ln x)$	0.0896	0.6363	0.5205
$(\text{MaxMax}(\text{F})\text{Ent})_2$	$(1, \sqrt{x}, \ln x)$	0.0351	0.6366	0.5211

Tables 5-6 show that in the sense of RMSE and χ^2 criteria each of $(\text{MaxMax}(\text{F})\text{Ent})_m$, ($m = 1,2$) distribution is better than each of $(\text{MinMax}(\text{F})\text{Ent})_m$, ($m = 1,2$) distribution. Moreover, $(\text{MaxMax}(\text{F})\text{Ent})_1$ distribution shows better performance along $(\text{MaxMax}(\text{F})\text{Ent})_m, m = 1,2$ distributions.

8. CONCLUSION

In the present study the following results are achieved.

- It is proved the convexity property of Max(F)Ent measure, then it is formulated a Maximum Fuzzy Entropy Problem and proposed sufficient conditions for existence of its solution.
- A special functional $U(g)$ depended on moment vector functions g is defined by applying Lagrange multipliers method.

- Maximum Fuzzy Entropy Distribution (Max(F)EntD) is distribution of fuzzy values $(\mu_A(x_0), \mu_A(x_1), \dots, \mu_A(x_n))$ maximizing Max(F)Ent measure subject to constraints generated by fixed moment vector function. Maximum Fuzzy Entropy Distribution $(\mu_A(x_0), \mu_A(x_1), \dots, \mu_A(x_n))$ can be considered geometrically as points $(x_i, \mu_A(x_i))$, $i = 0, 1, \dots, n$ of membership function $\mu_A(x)$. Consequently, interpreting these points as experimental data it is possible to select formula, in other words membership function, in accordance on mentioned data by known methods.
- Generalized Maximum Fuzzy Entropy Methods (GMax(F)EntM) in the form of MinMax(F)Ent and MaxMax(F)Ent methods are suggested on the basis of primary maximizing Max(F)Ent measure H_A for fixed moment vector function in order to obtain the special functional $U(g)$ with maximum entropy values of Max(F)Ent measure and secondary optimization for mentioned functional with respect to moment vector functions. Distributions obtained by these methods are defined as $(\text{MinMax(F)Ent})_m$ and $(\text{MaxMax(F)Ent})_m$ distributions.

According to obtained results, for this fuzzy data, $(\text{MinMax(F)Ent})_m$ and $(\text{MaxMax(F)Ent})_m$, $m = 1, 2$ distributions are compared by using different criterias in terms of modelling data. It is shown that the each of $(\text{MaxMax(F)Ent})_m$, $m = 1, 2$ distribution is more suitable in modelling fuzzy data than each of $(\text{MinMax(F)Ent})_m$, $m = 1, 2$ distributions in the sense of RMSE and χ^2 criterias. It is found that $(\text{MaxMax(F)Ent})_1$ distribution can provide better results for the fuzzy data in terms of RMSE and χ^2 criterias. Consequently, obtained results are shown that developed methods can be applied successfully in fuzzy data analysis.

REFERENCES

- [1] Kapur JN, Kesavan HK. Entropy Optimization Principles with Applications. Academic Press, New York, 1992.
- [2] Zadeh LA. Fuzzy sets. Information and Control 1965; 8: 338-353.
- [3] Buckley James J. Fuzzy Probabilty and Statistics. Springer, 2006.
- [4] Lee Kwang H. First Course on Fuzzy Theory and applications. Springer, 2002.
- [5] De Luca A, Termini S. A definition of non-probabilistic entropy in setting of fuzzy set theory. Information and Control 1971; 20: 301-312.
- [6] Shannon CE. A mathematical theory of communications. Bell System Technical Journal 1948; 27: 379-623.
- [7] Kapur JN. Measures of Fuzzy Information. Mathematical Sciences Trust Society. New Delhi, 1997.
- [8] Parkash O, Sharma PK. Measures of fuzzy entropy and their relations. International Journal of Management & Systems 2004; 20: 65-72.
- [9] Yager R. On measures of fuzziness and negation, Part-I: membership in the unit interval, International Journal of General Systems 1979; 5(4): 221-229.
- [10] Bhandari D, Pal NR. Some new information measures for fuzzy sets. Information Sciences 1993; 67: 209-228.

- [11] Parkash O, Sharma PK, Kumar J. Characterization of fuzzy measures via concavity and recursivity. *Oriental Journal of Mathematical Sciences* 2008; 1: 107-117.
- [12] Parkash O, Sharma PK, Mahajan R. New measures of weighted fuzzy entropy and their applications for the study of maximum weighted fuzzy entropy principle, *Information Sciences* 2008; 1979: 2389-2395.
- [13] Shamilov A. *Entropy, Information and Entropy Optimization*. Turkey, 2009.
- [14] Shamilov A. A development of entropy optimization methods. *WSEAS Trans. Math.* 2006; 5: 568–575.
- [15] Shamilov A. Generalized entropy optimization problems and the existence of their solutions. *Phys. A: Stat. Mech. Appl.* 2007; 382: 465–472.
- [16] Shamilov A. Generalized entropy optimization problems with finite moment function sets. *Journal of Statistics and Management Systems* 2010; 13: 595-603.
- [17] Vladimir A. Zorich *Mathematical Analysis I*. Moscow, Springer, 2002.
- [18] Shamilov A, Ozdemir S, Yilmaz N. Generalized Entropy Optimization Methods for Survival Data, ALT2014: 5th International Conference on Accelerated Life Testing and Degradation Models, 2014; Pau, France: pp.174-183.
- [19] Shamilov A, Senturk S, Yilmaz N." Generalized Fuzzy Entropy Optimization Methods with application on Wind Speed Data", COIA-2015: The 5th International Conference on Control and Optimization with Industrial Applications 2015; Baku, Azerbaijan: pp.217-221.
- [20] Shamilov A, Senturk S, Yilmaz N. Generalized Maximum Fuzzy Entropy Methods with Applications on Wind Speed Data. *Journal of Mathematics and System Science Journal of Mathematics and System Science* 2016; 6: 46-52.

ÇİZGE-YÖNLENDİRİLMİŞ FRAKTALLARIN ÇAPLARI ÜZERİNE

Ali DENİZ *

Matematik Bölümü, Fen Fakültesi, Anadolu Üniversitesi, Eskişehir, Türkiye

ÖZET

Bu çalışmada çizge-yönlendirilmiş yinelemeli fonksiyon sistemleri ele alınmış, verilen keyfi noktaları merkez kabul eden ve bu sistemlerin çekicilerini kapsayan disklerin bulunabilmesi için bir yeterli koşul verilmiştir. Ayrıca çizge-yönlendirilmiş yinelemeli fonksiyon sistemi çekicilerinin çapları için alt ve üst sınırlar verilmiştir.

Anahtar Kelimeler: Fraktallar, Yinelemeli fonksiyon sistemleri, Çizge-yönlendirilmiş fraktallar

ON THE DIAMETERS OF GRAPH-DIRECTED FRACTALS

ABSTRACT

In this work it is considered the graph-directed iterated function systems, and a sufficient condition to find disks which are centered at arbitrarily given points and containing the attractors of these systems is given. It is also given upper and lower bounds for the diameter of the attractors of a graph-directed system.

Keywords: Fractals, Iterated function systems, Graph-directed fractals

1. GİRİŞ

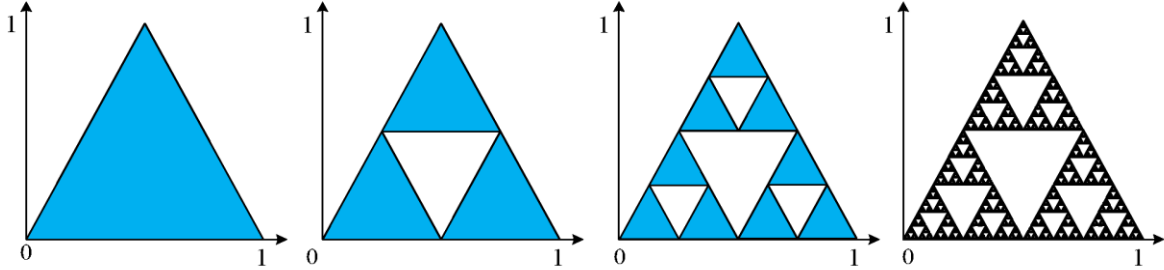
Kendine benzer yapıları veya kümeleri araştıran fraktal geometrinin ana dallarından biri yinelemeli fonksiyon sistemleridir. Yinelemeli fonksiyon sistemlerinin günlük hayatta fraktal görüntü sıkıştırma, fraktal antenler, fraktal interpolasyon fonksiyonları, sinyal modelleme gibi birçok farklı uygulaması vardır.

Bir yinelemeli fonksiyon sistemi (YFS) bir X tam metrik uzayı üzerinde tanımlı $\{\varphi_i\}_{i=1}^N$ fonksiyonlarından oluşur. Burada her bir $\varphi_i: X \rightarrow X$ fonksiyonu büzülme katsayısı $0 \leq \lambda_i < 1$ olacak şekilde bir büzülme fonksiyonudur. $H(X)$, X tam metrik uzayının boş olmayan kompakt altkümelerinin ailesi üzerinde Hausdorff metriği alınarak oluşturulan tam metrik uzay olmak üzere, Hutchinson teoremine göre,

$$\Phi : H(X) \rightarrow H(X)$$
$$\Phi(U) = \bigcup_{i=1}^N \varphi_i(U)$$

şeklinde tanımlı fonksiyon büzülme katsayısı $\lambda = \max_{i=1, \dots, N} \lambda_i$ olan bir büzülme dönüşümüdür ve dolayısıyla bir sabit noktası vardır. Bu sabit noktaya $\{\varphi_i\}_{i=1}^N$ yinelemeli fonksiyon sisteminin çekicisi (atraktörü) adı verilir. Ayrıca yine Hutchinson teoremine göre, Φ^n , Φ operatörünün kendisiyle n defa bileşkesini göstermek üzere, $H(X)$ içinden seçilen keyfi bir U kümesi için $\Phi^n(U)$ küme dizisi bu çekiciye yakınsar (bkz [1, 2]).

Örnek 1.1: $X = \mathbb{R}^2$ ve $\varphi_1(x, y) = \frac{1}{2}(x, y)$, $\varphi_2(x, y) = \frac{1}{2}(x + 1, y)$ ve $\varphi_3(x, y) = \frac{1}{2}(x + \frac{1}{2}, y + \frac{\sqrt{3}}{2})$ fonksiyonlarından oluşan yinelemeli fonksiyon sisteminin çekicisi Sierpinski üçgeni adıyla bilinen bir fraktaldır. Şekil 1’de bu yinelemeli fonksiyon sisteminin ilk birkaç iterasyonu ve çekicisi görülmektedir.



Şekil 1. Örnek 1.1 de verilen $\{\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3\}$ yinelemeli fonksiyon sistemi için oluşturulan Φ operatörünün en soldaki üçgene iki kez uygulanmasıyla ikinci ve üçüncü şekildeki kümeler elde edilir. Bu yineleme işleminin sonunda (limit durumunda) elde edilen küme en sağda temsili olarak gösterilen Sierpinski üçgenidir.

Bir YFS çekicisinin çapı için bir üst sınırın gerekli olduğu bazı algoritmalar vardır, bunlar arasında [3] ve [4] çalışmalarını sayabiliriz. Bu algoritmalar en azından çekicinin çapı için bir üst sınırın bilinmesine dayanır. YFS çekicilerinin çapları için bir üst sınır Dubuc ve Hamzaoui tarafından verilmiştir, (bkz. [5]). Bunun dışında bir YFS çekicisini kapsayan disklerin bulunmasıyla ilgili olarak pek çok çalışma bulunmaktadır (bkz. [6-9]). Bu çalışmada klasik yinelemeli fonksiyon sistemlerinin genellemesi olan çizge-yönlendirilmiş yinelemeli fonksiyon sistemlerinin çekicilerini kapsayan diskler için bir yeterli koşul verilecek ve çekicilerin çapları için bir sınır eşitsizliği ifade edilecektir.

Kendine-benzer bir fraktal kendisinin küçültülmüş kopyalarının birleşimi olarak ifade edilebilen bir metrik uzaydır. Bunun genellemesi olarak her biri birbirlerinin küçültülmüş kopyalarının birleşiminden oluşan sonlu sayıdaki metrik uzayların bir koleksiyonu oluşturulabilir. Bu tür metrik uzaylara da çizge-yönlendirilmiş fraktallar diyeceğiz. Şimdi çizge-yönlendirilmiş yinelemeli fonksiyon sistemlerini kısaca özetleyelim: $\{X_\alpha, d_\alpha \mid \alpha = 1, 2, \dots, N\}$ tam metrik uzayların bir sonlu ailesi olsun. Bir çizge-yönlendirilmiş yinelemeli fonksiyon sistemi (ÇYFS), bu metrik uzaylar arasında $\alpha, \beta = 1, 2, \dots, N$ ve $k = 1, 2, \dots, K^{\alpha, \beta}$ olmak üzere $\varphi_k^{\alpha, \beta}: X_\beta \rightarrow X_\alpha$ büzülme fonksiyonlarından oluşur. ($\varphi_k^{\alpha, \beta}$ fonksiyonunun büzülme katsayısını $\lambda_k^{\alpha, \beta} \in [0, 1)$ ile göstereceğiz.) Böylece oluşturulan

$$\{X_\alpha, \varphi_k^{\alpha, \beta} \mid \alpha, \beta = 1, 2, \dots, N \text{ ve } k = 1, 2, \dots, K^{\alpha, \beta}\}$$

koleksiyonuna bir çizge-yönlendirilmiş yinelemeli fonksiyon sistemi denir.

$H(X_1) \times \dots \times H(X_N)$ çarpımı, her bileşen üzerindeki Hausdorff uzaklıklarının maksimumu alınarak oluşturulan metrik ile bir tam metrik uzaydır. Yukarıdaki biçimde bir ÇYFS verildiğinde

$$\Phi: H(X_1) \times \dots \times H(X_N) \rightarrow H(X_1) \times \dots \times H(X_N)$$

operatörünü $\alpha = 1, 2, \dots, N$ için

$$\Phi_\alpha(U_1, U_2, \dots, U_N) = \bigcup_{\beta=1}^N \bigcup_{k=1}^{K^{\alpha, \beta}} \varphi_k^{\alpha, \beta}(U_\beta)$$

olmak üzere $\Phi = (\Phi_1, \Phi_2, \dots, \Phi_N)$ olarak tanımlayalım. Klasik yinelemeli fonksiyon sistemlerine

benzer olarak, buradaki Φ fonksiyonu da bir büzülme dönüşümüdür ve bir sabit noktası vardır. Bu sabit nokta $(\mathcal{A}^1, \mathcal{A}^2, \dots, \mathcal{A}^N)$ olmak üzere

$$\mathcal{A}^\alpha = \bigcup_{\beta=1}^N \bigcup_{k=1}^{K^{\alpha,\beta}} \varphi_k^{\alpha,\beta}(\mathcal{A}^\beta), \quad \alpha = 1, 2, \dots, N$$

eşitlikleri geçerlidir (bkz. [10-11]). Φ operatörünün sabit noktası olan $(\mathcal{A}^1, \mathcal{A}^2, \dots, \mathcal{A}^N)$ küme N -lisine sistemin çekici N -lisi ve bileşenlerinden her birine bir çizge-yönlendirilmiş fraktal veya sistemin bir çekicisi diyeceğiz. Burada uzaylar arasındaki fonksiyon ilişkileri bir çizge yardımıyla ifade edilebileceğinden bu tip yinelemeli fonksiyon sistemlerinde “çizge-yönlendirilmiş” tabiri kullanılmaktadır.

Bundan sonraki kısımda notasyon karmaşasından kurtulmak amacıyla $N = 2$ durumuyla ilgileneceğiz, genel durum benzer şekilde kolaylıkla elde edilebilir. Yukarıdakileri $N = 2$ durumunda ifade edecek olursak $\Phi: H(X_1) \times H(X_2) \rightarrow H(X_1) \times H(X_2)$ fonksiyonu

$$\Phi(U, V) = (\Phi_1(U, V), \Phi_2(U, V))$$

= $(\bigcup_{k=1}^{K^{1,1}} \varphi_k^{1,1}(U) \cup \bigcup_{k=1}^{K^{1,2}} \varphi_k^{1,2}(V), \bigcup_{k=1}^{K^{2,1}} \varphi_k^{2,1}(U) \cup \bigcup_{k=1}^{K^{2,2}} \varphi_k^{2,2}(V))$ olarak yazılır. Sistemin çekici ikilisi $(\mathcal{A}^1, \mathcal{A}^2)$ için

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^1 &= \bigcup_{\substack{k=1 \\ K^{1,1}}}^{K^{1,1}} \varphi_k^{1,1}(\mathcal{A}^1) \cup \bigcup_{\substack{k=1 \\ K^{1,2}}}^{K^{1,2}} \varphi_k^{1,2}(\mathcal{A}^2) \\ \mathcal{A}^2 &= \bigcup_{k=1} \varphi_k^{2,1}(\mathcal{A}^1) \cup \bigcup_{k=1} \varphi_k^{2,2}(\mathcal{A}^2) \end{aligned}$$

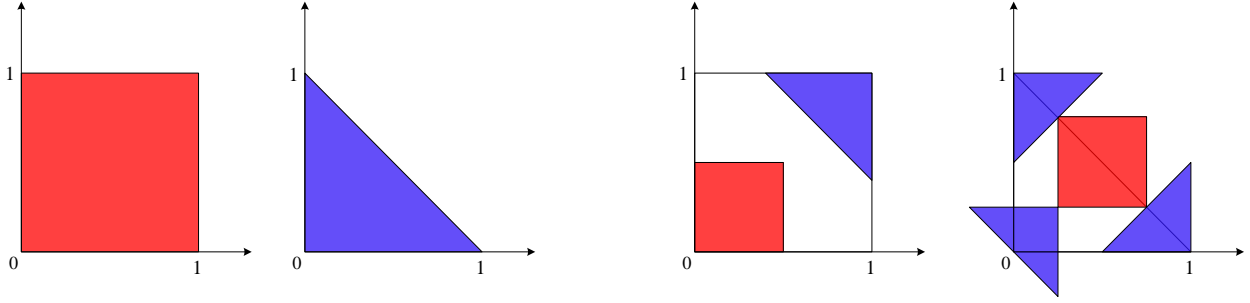
olur. Yine klasik yinelemeli fonksiyon sistemi durumundakine benzer olarak keyfi $U \in H(X_1)$ ve $V \in H(X_2)$ kümeleri için $\Phi^n(U, V)$ dizisi $n \rightarrow \infty$ için $(\mathcal{A}^1, \mathcal{A}^2)$ ikilisine yakınsar (bkz. [10, 11]).

Örnek 1.2. $X_1 = X_2 = \mathbb{R}^2$ ve $\varphi_k^{\alpha,\beta}: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ aşağıdaki tabloda verilen büzülme dönüşümleri olmak üzere $\{\varphi_k^{\alpha,\beta}\}$ çizge-yönlendirilmiş yinelemeli fonksiyon sistemini ele alalım. Burada $K^{1,1} = K^{1,2} = K^{2,1} = 1$ ve $K^{2,2} = 3$ tür.

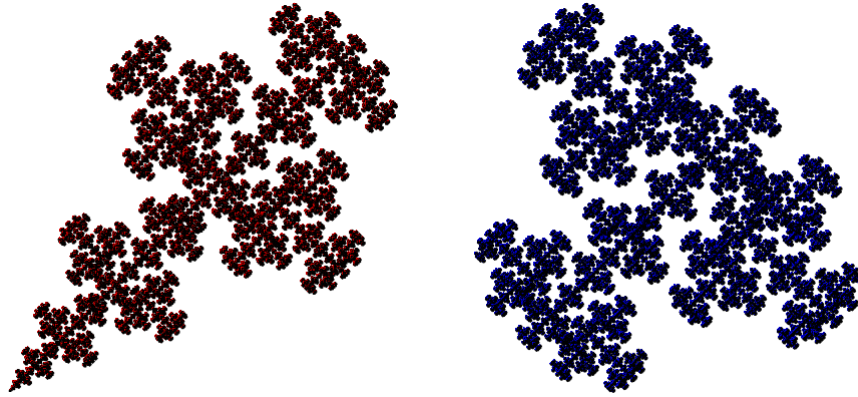
$\varphi_1^{1,1}(x, y) = \frac{1}{2}(x, y)$	$\varphi_1^{1,2}(x, y) = -\frac{3}{5}(x, y) + (1, 1)$
$\varphi_1^{2,1}(x, y) = \frac{1}{2}(x, y) + (\frac{1}{4}, \frac{1}{4})$	$\varphi_1^{2,2}(x, y) = \frac{1}{2}(x, -y) + (0, 1)$
	$\varphi_2^{2,2}(x, y) = \frac{1}{2}(-y, x) + (1, 0)$
	$\varphi_3^{2,2}(x, y) = -\frac{1}{2}(x, y) + (\frac{1}{4}, \frac{1}{4})$

$\varphi_k^{\alpha,\beta}$ dönüşümlerinin görüntülerinin birleşimi alınarak oluşturulan Φ_1 ve Φ_2 operatörlerinin geometrik tasvirleri Şekil 2’de yapılmıştır. Şekil 2’nin sol tarafındaki gibi alınan kare ve üçgenin görüntüleri sağda gösterilmiştir. $\{\varphi_k^{\alpha,\beta}\}$ çizge-yönlendirilmiş yinelemeli fonksiyon sisteminin çekici ikilisi $(\mathcal{A}^1, \mathcal{A}^2)$ ise

Şekil 3'te gösterilmiştir.



Şekil 2. Soldaki küme ikilisinin (kare ve üçgen) Φ_1 ve Φ_2 operatörleri altındaki görüntüleri sağda sırasıyla verilmiştir.



Şekil 3. Örnek 1.2'de verilen ÇYFS'nin çekicisi olan \mathcal{A}^1 ve \mathcal{A}^2 kümeleri

Bu çalışmada ilk önce merkezleri verilen keyfi noktalar olan ve çizge-yönlendirilmiş yinelemeli fonksiyon sisteminin çekicilerini kapsayan diskler için bir yeter koşul vereceğiz. Daha sonra ise çizge-yönlendirilmiş yinelemeli fonksiyon sistemi çekicilerinin çapları için Hausdorff uzaklığına bağlı olarak alt ve üst sınırlar vereceğiz.

2. ÇYFS ÇEKİCİLERİNİ KAPSAYAN DİSKLER İÇİN BİR YETER KOŞUL

Bu bölümde çizge-yönlendirilmiş yinelemeli fonksiyon sistemlerinin çekicilerini kapsayan diskler için bir yeterli koşul vereceğiz. Öncelikle aşağıdaki yardımcı teoremi ifade edelim:

Yardımcı Teorem 2.1 $\{X_\alpha, \varphi_k^{\alpha,\beta}\}$ ($\alpha, \beta = 1,2; k = 1,2, \dots, K^{\alpha,\beta}$) bir çizge-yönlendirilmiş yinelemeli fonksiyon sistemi ve \mathcal{A}^1 and \mathcal{A}^2 de bu sistemin çekicileri olsun. Eğer $\Phi_1(U,V) \subseteq U$ ve $\Phi_2(U,V) \subseteq V$ olacak şekilde $U \subseteq X_1$ ve $V \subseteq X_2$ kümeleri varsa $\mathcal{A}^1 \subseteq U$ ve $\mathcal{A}^2 \subseteq V$ olur.

İspat Hipotezden dolayı $\Phi(U,V) = (\Phi_1(U,V), \Phi_2(U,V)) \subseteq (U,V)$ dir. Φ fonksiyonu ardarda uygulanarak her $n \in \mathbb{N}$ için $\Phi^n(U,V) \subseteq (U,V)$ elde edilir. Böylece $\lim_{n \rightarrow \infty} \Phi^n(U,V) = (\mathcal{A}^1, \mathcal{A}^2)$ olduğundan $(\mathcal{A}^1, \mathcal{A}^2) \subseteq (U,V)$ ve dolayısıyla $\mathcal{A}^1 \subseteq U$ ve $\mathcal{A}^2 \subseteq V$ elde edilir.

Yardımcı Teorem 2.1, merkezleri keyfi $x \in X_1$ ve $y \in X_2$ noktaları olan, $\mathcal{A}^1 \subset B(x, r_x)$ ve $\mathcal{A}^2 \subset B(y, r_y)$ kapsamalarını sağlayan disklerin bulunması amacıyla kullanılabilir. Aşağıdaki teorem yarıçaplarla ilgili olarak bir yeter koşul vermektedir:

Teorem 2.2 $\{X_\alpha, \varphi_k^{\alpha,\beta}\}$ ($\alpha, \beta = 1,2; k = 1,2, \dots, K^{\alpha,\beta}$) bir çizge-yönlendirilmiş yinelemeli fonksiyon

sistemi, \mathcal{A}^1 ve \mathcal{A}^2 de bu sistemin çekicileri olsun. Keyfi bir $(x, y) \in X_1 \times X_2$ verilsin. Eğer r_x ve r_y yarıçapları

$$r_x \geq \frac{d_1(\varphi_k^{1,1}(x), x)}{1 - \lambda_k^{1,1}}, \quad k = 1, 2, \dots, K^{1,1} \quad (1)$$

$$r_x - \lambda_k^{1,2} r_y \geq d_1(\varphi_k^{1,2}(y), x), \quad k = 1, 2, \dots, K^{1,2} \quad (2)$$

$$-\lambda_k^{2,1} r_x + r_y \geq d_2(\varphi_k^{2,1}(x), y), \quad k = 1, 2, \dots, K^{2,1} \quad (3)$$

$$r_y \geq \frac{d_2(\varphi_k^{2,2}(y), y)}{1 - \lambda_k^{2,2}}, \quad k = 1, 2, \dots, K^{2,2}. \quad (4)$$

eşitsizliklerini sağlıyorsa $\mathcal{A}^1 \subseteq B(x, r_x)$ ve $\mathcal{A}^2 \subseteq B(y, r_y)$ olur.

İspat (1)-(4) eşitsizliklerinin sağlanması durumunda, eğer

$$\Phi_1(B(x, r_x), B(y, r_y)) \subseteq B(x, r_x) \quad (5)$$

$$\Phi_2(B(x, r_x), B(y, r_y)) \subseteq B(y, r_y) \quad (6)$$

ifadeleri kanıtlanırsa Yardımcı Teorem 2.1 ile ispat tamamlanır. (5) kapsamasını kanıtlamak için

$$\varphi_k^{1,1}(B(x, r_x)) \subseteq B(x, r_x), \quad k = 1, 2, \dots, K^{1,1} \quad (7)$$

$$\varphi_k^{1,2}(B(y, r_y)) \subseteq B(x, r_x), \quad k = 1, 2, \dots, K^{1,2} \quad (8)$$

kapsamalarını ve (6) kapsamasını kanıtlamak için ise

$$\varphi_k^{2,1}(B(x, r_x)) \subseteq B(y, r_y), \quad k = 1, 2, \dots, K^{2,1}$$

$$\varphi_k^{2,2}(B(y, r_y)) \subseteq B(y, r_y), \quad k = 1, 2, \dots, K^{2,2}$$

kapsamalarının kanıtlanması gerekir. Şimdi herhangi $x_0 \in B(x, r_x)$ ve $y_0 \in B(y, r_y)$ noktalarını alalım.

(1) eşitsizliği kullanılarak her bir $k = 1, 2, \dots, K^{1,1}$ için

$$\begin{aligned} d_1(\varphi_k^{1,1}(x_0), x) &\leq d_1(\varphi_k^{1,1}(x_0), \varphi_k^{1,1}(x)) + d_1(\varphi_k^{1,1}(x), x) \\ &\leq \lambda_k^{1,1} d_1(x_0, x) + d_1(\varphi_k^{1,1}(x), x) \\ &\leq \lambda_k^{1,1} r_x + d_1(\varphi_k^{1,1}(x), x) \\ &\leq r_x \end{aligned}$$

ve buradan da $\varphi_k^{1,1}(x_0) \in B(x, r_x)$ elde edilir. Böylece (7) kapsaması kanıtlanmış olur. Benzer şekilde (2) eşitsizliği kullanılarak her bir $k = 1, 2, \dots, K^{1,2}$ için

$$\begin{aligned} d_1(\varphi_k^{1,2}(y_0), x) &\leq d_1(\varphi_k^{1,2}(y_0), \varphi_k^{1,2}(y)) + d_1(\varphi_k^{1,2}(y), x) \\ &\leq \lambda_k^{1,2} d_2(y_0, y) + d_1(\varphi_k^{1,2}(y), x) \\ &\leq \lambda_k^{1,2} r_y + d_1(\varphi_k^{1,2}(y), x) \\ &\leq r_x \end{aligned}$$

ve dolayısıyla $\varphi_k^{1,2}(y_0) \in B(x, r_x)$ elde edilir. Yani (8) kapsaması sağlanır. Böylece

$$\Phi_1(B(x, r_x), B(y, r_y)) \subseteq B(x, r_x).$$

ifadesi ispatlanmış olur. (6) ifadesinin doğruluğu da benzer şekilde gösterilir.

Teorem 2.2'ye göre, herhangi $x \in X_1$ ve $y \in X_2$ noktaları verildiğinde (1)-(4) eşitsizliklerini sağlayan r_x ve r_y yarıçapları belirlenerek oluşturulan $B(x, r_x)$ ve $B(y, r_y)$ yuvarları sırasıyla sistemin çekicileri \mathcal{A}^1 ve \mathcal{A}^2 kümelerini kapsamaktadır. Bu durumda $2r_x$ ve $2r_y$ sayıları sırasıyla \mathcal{A}^1 ve \mathcal{A}^2 çekicilerinin çapları için birer üst sınır olurlar. Aşağıda çekicilerin çapları için Hausdorff uzaklığına bağlı olarak başka bir sınırlandırma yapılacaktır.

3. ÇİZGE-YÖNLENDİRİLMİŞ YİNELEMELİ FONKSİYON SİSTEMİ ÇEKİCİLERİNİN ÇAPLARI İÇİN BİR SINIR

Bu bölümde bir çizge-yönlendirilmiş yinelemeli fonksiyon sistemi çekicilerinin çapları için Hausdorff metriği ile ifade edilen bir sınır vereceğiz. Öncelikle bir (X, d) metrik uzayının altkümeleri üzerinde çap fonksiyonunu tanımlayalım. X 'in boş olmayan kompakt altkümelerinin kümesi $H(X)$ üzerinde çap fonksiyonu

$$\delta: H(X) \rightarrow \mathbb{R}$$

$$A \mapsto \delta(A) := \sup\{d(x, y) \mid x, y \in A\}$$

olarak tanımlanır. Çap fonksiyonu δ Lipschitz sabiti 2 olan bir Lipschitz fonksiyondur, yani $h, H(X)$ üzerindeki Hausdorff uzaklığını göstermek üzere, herhangi $A, B \in H(X)$ kümeleri için

$$|\delta(A) - \delta(B)| \leq 2 h(A, B) \quad (9)$$

eşitsizliği geçerlidir, (bkz. [12]).

Şimdi bir büzülme dönüşümü için ifade edilebilecek kontraksiyon prensibini hatırlayalım: (X, d) bir metrik uzay, $\varphi: X \rightarrow X$ büzülme katsayısı $0 \leq \lambda < 1$ ve sabit noktası $x_0 \in X$ olan bir büzülme dönüşümü olsun. Bu durumda her $n \in \mathbb{N}$ ve $x \in X$ için

$$d(x_0, \varphi^n(x)) \leq \frac{\lambda^n}{1-\lambda} d(x, \varphi(x))$$

eşitsizliği geçerli olur. Klasik YFS durumunda ifade edilen kontraksiyon prensibini $H(X_1) \times H(X_2)$ üzerinde büzülme dönüşümü olduğunu bildiğimiz çizge-yönlendirilmiş yinelemeli fonksiyon sisteminin belirlediği Φ operatörü için kullanacağız.

Teorem 3.1 (X_α, d_α) , $\alpha = 1, 2$ iki tam metrik uzay, $\{X_\alpha, \varphi_k^{\alpha, \beta}\}$ ($\alpha, \beta = 1, 2; k = 1, 2, \dots, K^{\alpha, \beta}$) bir çizge-yönlendirilmiş yinelemeli fonksiyon sistemi ve $\varphi_k^{\alpha, \beta}$ fonksiyonlarının büzülme katsayıları $0 \leq \lambda_k^{\alpha, \beta} < 1$ olsun. Sistemin çekicileri $\mathcal{A}^1, \mathcal{A}^2$ ve $\lambda = \max\{\lambda_k^{\alpha, \beta} \mid \alpha = 1, 2 \text{ ve } k = 1, 2, \dots, K^{\alpha, \beta}\}$ olmak üzere keyfi $E \in H(X_1)$ ve $F \in H(X_2)$ kümeleri için

$$|\delta(\mathcal{A}^i) - \delta((\Phi^n(E, F))_i)| \leq \frac{2\lambda^n}{1-\lambda} h_1 \times h_2((E, F), \Phi(E, F))$$

eşitsizliği her $n \in \mathbb{N}$ ve $i = 1, 2$ için geçerlidir.

Teorem 3.1'in ifadesindeki $(\Phi^n(E, F))_i$ terimi Φ operatörünün (E, F) küme ikilisine n defa uygulanmasıyla elde edilen $\Phi^n(E, F)$ küme ikilisinin i . bileşenini göstermektedir. $n = 1$ durumunda $(\Phi(E, F))_i = \Phi_i(E, F)$, $i = 1, 2$ olduğuna dikkat ediniz.

İspat h_1 ve h_2 sırasıyla $H(X_1)$ ve $H(X_2)$ üzerinde d_1 ve d_2 metrikleri tarafından üretilen Hausdorff metriklerini göstermek üzere $H(X_1) \times H(X_2)$ uzayı üzerinde $h_1 \times h_2$ çarpım metriği vardır ve bu metrik

herhangi $(A_1, B_1), (A_2, B_2) \in H(X_1) \times H(X_2)$ küme ikilileri için

$$h_1 \times h_2((A_1, B_1), (A_2, B_2)) = \max \{h_1(A_1, B_1), h_2(A_2, B_2)\}$$

olarak tanımlanır. $\{X_\alpha, \varphi_k^{\alpha, \beta}\}$ çizge-yönlendirilmiş yinelemeli fonksiyon sisteminin belirlediği operatör Φ olsun. Şimdi Φ operatörünün büzülme katsayısı $\lambda = \max \{\lambda_k^{\alpha, \beta} \mid \alpha = 1, 2 \text{ ve } k = 1, 2, \dots, K^{\alpha, \beta}\}$, sistemin çekici ikilisi $(\mathcal{A}^1, \mathcal{A}^2)$ ve $(E, F) \in H(X_1) \times H(X_2)$ keyfi bir küme ikilisi olmak üzere kontraksiyon prensibini her $n \in \mathbb{N}$ için

$$h_1 \times h_2((\mathcal{A}^1, \mathcal{A}^2), \Phi^n(E, F)) \leq \frac{\lambda^n}{1-\lambda} h_1 \times h_2((E, F), \Phi(E, F)) \quad (10)$$

olarak ifade edebiliriz.

Şimdi $(E, F) \in H(X_1) \times H(X_2)$ olsun. (9) eşitsizliği ile ifade edilen X_i üzerinde çap fonksiyonunun Lipschitz fonksiyonu olmasını \mathcal{A}^i ve $(\Phi^n(E, F))_i$ kümeleri için kullanırsak $i = 1, 2$ için

$$|\delta(\mathcal{A}^i) - \delta((\Phi^n(E, F))_i)| \leq 2 h_i(\mathcal{A}^i, (\Phi^n(E, F))_i)$$

elde ederiz.

$H(X_1) \times H(X_2)$ üzerindeki Hausdorff çarpım metriğinin tanımından dolayı

$$h_i(\mathcal{A}^i, (\Phi^n(E, F))_i) \leq h_1 \times h_2((\mathcal{A}^1, \mathcal{A}^2), \Phi^n(E, F))$$

yazabiliriz. Burada (10) eşitsizliğini kullanarak

$$|\delta(\mathcal{A}^i) - \delta((\Phi^n(E, F))_i)| \leq \frac{2\lambda^n}{1-\lambda} h_1 \times h_2((E, F), \Phi(E, F))$$

eşitsizliğini elde ederiz. Böylece ispat tamamlanmış olur.

Sonuç 3.2. Teorem 3.1’de ifade edilen eşitsizlikten ÇYFS çekicilerinin çapları için keyfi $E \in H(X_1)$ ve $F \in H(X_2)$ kümelerine karşılık her $n \in \mathbb{N}$ sayısı için

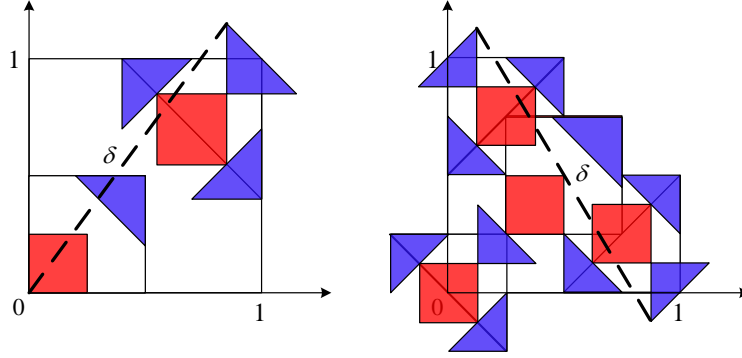
$$\begin{aligned} |\delta(\mathcal{A}^i)| &\leq \frac{2\lambda^n}{1-\lambda} h_1 \times h_2((E, F), \Phi(E, F)) + \delta((\Phi^n(E, F))_i) \\ -\frac{2\lambda^n}{1-\lambda} h_1 \times h_2((E, F), \Phi(E, F)) + \delta((\Phi^n(E, F))_i) &\leq |\delta(\mathcal{A}^i)| \end{aligned}$$

sınırları elde edilir.

Burada $\lambda < 1$ olduğundan $\lim_{n \rightarrow \infty} \lambda^n = 0$ olduğuna ve $\lim_{n \rightarrow \infty} \Phi^n(E, F) = (\mathcal{A}^1, \mathcal{A}^2)$ olmasından dolayı yeterince büyük n değerleri için $(\Phi^n(E, F))_i$ kümesinin çapının $\delta(\mathcal{A}^i)$ değerine yaklaşacağına dikkat edelim.

Örnek 3.3. Teorem 3.1’i kullanarak Örnek 1.2’de verdiğimiz çizge-yönlendirilmiş yinelemeli fonksiyon sisteminin çekicilerinin çapları için alt ve üst sınırlar belirleyelim. E ve F kümeleri olarak sırasıyla Şekil 2’deki kare ve üçgeni alalım ve iterasyonun ikinci adımı, yani $n = 2$ için hesap yapalım. $\lambda = \max \{\lambda_k^{\alpha, \beta} \mid \alpha = 1, 2 \text{ ve } k = 1, 2, \dots, K^{\alpha, \beta}\} = \frac{3}{5}$ olduğundan $\frac{2\lambda^2}{1-\lambda} = \frac{9}{5}$ olur. $h_1(E, \Phi_1(E, F)) = \frac{41}{100}$ ve

$h_2(F, \Phi_2(E, F)) = \frac{\sqrt{2}}{4}$ olduğundan $h_1 \times h_2((E, F), \Phi(E, F)) = \frac{41}{100}$ olur. Diğer taraftan büzülme katsayılarından faydalanılarak $\delta((\Phi^2(E, F))_1) = \frac{\sqrt{818}}{20}$ ve $\delta((\Phi^2(E, F))_2) = \frac{\sqrt{130}}{8}$ olduğu kolayca görülür (bkz. Şekil 4).



Şekil 4. $\{\varphi_k^{\alpha, \beta}\}$ çizge-yönlendirilmiş yinelemeli fonksiyon sisteminde kare ve üçgen iterasyonunun ikinci adımını. Burada $(\Phi^2(E, F))_i$, $i = 1, 2$ kümeleri için çapın alındığı uzaklıklar kesikli çizgiyle gösterilmiştir.

Bu durumda Teorem 3.1 ile

$$0.692 \approx -\frac{9}{5} \cdot \frac{41}{100} + \frac{\sqrt{818}}{20} \leq \delta(\mathcal{A}^1) \leq \frac{9}{10} \cdot \frac{41}{100} + \frac{\sqrt{818}}{20} \approx 2.168$$

$$0.687 \approx -\frac{9}{5} \cdot \frac{41}{100} + \frac{\sqrt{130}}{8} \leq \delta(\mathcal{A}^2) \leq \frac{9}{5} \cdot \frac{41}{100} + \frac{\sqrt{130}}{8} \approx 2.163$$

sınırları elde edilir.

Burada $\lim_{n \rightarrow \infty} \lambda^n = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{3}{5}\right)^n = 0$ olduğundan yeterince büyük n değerleri için

$$|\delta(\mathcal{A}^i) - \delta((\Phi^n(E, F))_i)| \leq \frac{2\lambda^n}{1-\lambda} h_1 \times h_2((E, F), \Phi(E, F))$$

eşitsizliğinin sağ tarafı sıfıra gidecektir. Böylece $(\Phi^n(E, F))_i$ kümesinin çapı $\delta(\mathcal{A}^i)$ değerine yaklaşacaktır. Dolayısıyla daha büyük n değerleri için $(\Phi^n(E, F))_i$ kümesinin çapı hesaplandığında \mathcal{A}^i kümesinin çapı için daha yakın sonuçlar elde edilecektir.

KAYNAKLAR

[1] Hutchinson, JE. Fractals and self similarity. Indiana Univ Math J 1981; 30: 713-747.

[2] Barnsley, M. Fractals Everywhere. Boston: Academic Press, 1993.

[3] Dubuc S, Elqortobi A. Approximations of fractal sets. J Comput Appl Math 1990; 29: 79-89.

[4] Hepting D, Prusinkiewicz P, Saupe D. Rendering methods for iterated function systems. In: Fractals in the Fundamental and Applied Sciences; 1991; H.-O. Peitgen, J. M. Henriques, L. Peneda (eds.), North-Holland, Amsterdam.

- [5] Dubuc S, Hamzaoui R. On the diameter of the attractor of an IFS. C R Math Rep Acad Sci. Canada, 1994.
- [6] Canright D. Estimating the spatial extent of attractors of iterated function systems. Computers and Graphics 1994; 18(2): 231-238.
- [7] Rice J. Spatial Bounding of Self-Affine Iterated Function System Attractor Sets. Proceedings of the Conference Graphics Interface 1996; 107-115.
- [8] Hart JC, DeFanti TA. Efficient antialiased rendering of 3-D linear fractals. Computer Graphics 1991; 25(4): 91-100.
- [9] Martyn T. The smallest enclosing disc of an affine IFS fractal. Fractals 2009; 17(3): 269-281.
- [10] Edgar G. Measure, Topology and Fractal Geometry. Springer, New York, 2008.
- [11] Mauldin RD, Williams SC. Hausdorff dimension in graph directed constructions. Trans Amer Math Soc 1988; 309(2):811–829.
- [12] Berger M, Cole M, Levy S. Geometry I. Springer, 2009.

ESKİŞEHİR İLİNDE HAVAYOLU YOLCU POTANSİYELİNİN BELİRLENMESİ ÜZERİNE BİR KARAR AĞACI UYGULAMASI

Ayşe KÜÇÜK YILMAZ¹, Mehmet Şahin DURAK^{1,*}, Emircan ÖZDEMİR¹,
Kasım KİRACI¹, Gökhan TANRIVERDİ¹

¹ Havacılık Yönetimi Bölümü, Havacılık ve Uzay Bilimleri Fakültesi, Anadolu Üniversitesi, Eskişehir

ÖZET

Havayolu şirketleri her hatta uçmayı tercih etmemektedir. Havayolu şirketlerinin bir hatta¹ uçuş gerçekleştirmesi, öncelikle o hattın karlılığının ortaya koyulması ile mümkündür. Bunun için ise o hatta ait potansiyel yolcu talebinin bilinmesi gerekmektedir. Ülkemizde konu ile ilgili ender araştırma geliştirme çalışmalarından biri olan bu araştırmanın amacı, Eskişehir’de havayolu yolcu taşımacılığına olan potansiyel yolcu talebinin ölçülmesi ve kentin sosyal ve ekonomik gelişimine katkı sağlayacak çapraz havayolu uçuşlarının gerçekleşmesi için gerekli verileri karar ağacı modeli ile ortaya koymaktır. Karar ağacı modelini oluşturmadaki amacımız havayolu ile seyahat etme potansiyelinin yüksek olduğu kesimin belirlenmesidir. Sonuç olarak potansiyel yolcuların seyahat amaçları ve ulaşım bütçelerine bakılarak uçak ile seyahat etme oranının en yüksek olduğu yolcu kesimi tespit edilmek istenmektedir.

Anahtar Kelimeler: Havayolu yolcu potansiyeli, Karar ağacı, Yönetim, Eskişehir

APPLICATION OF A DECISION TREE ON THE DETERMINATION OF POTENTIAL AIRLINE PASSENGER DEMAND IN ESKİŞEHİR

ABSTRACT

Airline companies do not operate flights all routes. Making decision about operating a route depends on profitability of the route which has to be revealed in advance. In order to reveal profitability, demand of the route must be known. This research, which is rare in its area of research-development, aims to measure potential airline demand in Eskişehir and reveal data for initiation of direct flights which contribute the city both economically and socially. Decision tree model is used in the research. This model allows segmentation of population in terms of airline demand potential. In conclusion, segment of high level airline demand is determined in line with variables of purpose of travel and transportation budget.

Keywords: Airline passenger potential, Decision tree, Management, Eskişehir

1. GİRİŞ

2003 sonrası sivil havacılık alanında yapılan yasal düzenlemeler sonucu havayolu taşımacılığı sektörün önemli gelişme gösterdiği görülmektedir. Türkiye’de 2003-2014 dönemi arasında havayolu taşımacılığında önemli gelişmeler meydana gelmiştir. Bu gelişmelere paralel olarak 2003 yılından 2014 yılına uçak sayısı %160, koltuk kapasitesi %176, kargo kapasitesi % 346 artmış, yurtiçi ve yurtdışı uçulan nokta sayısı ise 290’e ulaşmıştır [1]. Havayolu taşımacılığına yönelik yapılan tahminlere göre hem yolcu sayısının hem de taşımacılık faaliyetlerinin önemli ölçüde artacağını öngörmektedir. Buna göre özellikle yükselen ekonomilerde, iktisadi büyüme ve nüfus artış hızındaki gelişime bağlı olarak havayolu taşımacılığına olan talep artacak, taşımacılık faaliyetlerinde kayda değer gelişmeler meydana gelecek ve bu durum havayolu kullanım oranını da arttıracaktır [2].

*Sorumlu Yazar: msdurak@anadolu.edu.tr

¹ Hat: Uçağın coğrafi bir noktaya veya hava yoluna göre 2 boyutlu pozisyonunu belirtir. Havayollarının iki nokta arasında yapmış olduğu uçuştur.

Havayolu taşımacılığının uluslararası ve bölgesel olmak üzere, sosyal ve ekonomik pek çok faydası söz konusudur. Havayolu taşımacılığının en önemli faydası ise ekonomik büyümeye ve istihdama olan katkısıdır. Bunun yanı sıra havayolu taşımacılığının fırsat yaratmadaki başarısı da göz önüne alınırsa sosyal faydasının olduğu yadsınamaz gerçeklerdendir [3].

Hava taşımacılığının ekonomiye doğrudan etkisi, birinci kademe olarak da adlandırılan ve endüstrisiyle birebir ilişkili olan ekonomik etkidir. Özellikle havaalanlarının yerel ekonomilere, havaalanında verilen hizmetler, gerçekleştirilen faaliyetler ve istihdama yönelik katkısı dikkate alındığında son derece önemli bir etkiye sahip oldukları görülmektedir [4]. Dünya’da 3 milyardan fazla yolcuya hizmet veren hava taşımacılığı endüstrisi, Gayri Safi Yurtiçi Hasıla^{II} (GSYİH)’ya 606 milyar dolarlık katkının yanında 8.7 milyon kişiye doğrudan istihdam sağlamaktadır. Hava taşımacılığının dolaylı etkisi, istihdam ve tedarikçilere olan katkısı dikkate alınarak incelenmektedir. Örneğin, havayolu yakıt tedarikçilerine, havaalanı inşaat ve altyapı hizmeti sağlayan firmalara, uçaklarda kullanılan alt bileşenlerin tedarikçilerine ve havaalanında satışa sunulan malların üreticilerine sağladığı katkı bakımından son derece önem taşımaktadır [5].

Genel kabul görmüş varsayımlardan bir tanesi hava taşımacılığı ile ekonomi arasında destekleyici bir ilişki olduğu yönündedir. Hava taşımacılığının faydası ise diğer ulaşım modlarının sağladığı faydanın yanı sıra uzak mesafelere yapılan seyahatlerde yegane ulaşım modu olmasıdır. Hava taşımacılığının sosyal faydası, doğal afetlerin meydana gelmesi, tıbbi amaçla kullanımı ya da çevrenin korunması durumlarında ortaya çıkmaktadır. Hava taşımacılığının bir diğer sosyal faydası ise dünyanın global bir köy haline gelmesi ve farklı ülkelerde yaşayan toplumların bir araya gelmesine sağladığı katkıdır [3].

Çağımızın artan yaşama hızını yakalamamıza büyük katkı sağlayan havayolu taşımacılığı, bulunduğu yerin ekonomik ve sosyal yönden gelişimine yardımcı olmaktadır. Her fırsatta hem yaşayarak ve hem de araştırma sonuçlarıyla da görülmektedir ki; Eskişehir ve Anadolu Üniversitesi, havacılığı yaşayan, anlayan sosyal ve kültürel yapısı yanında sahip olduğu kabiliyetler, bilgi birikimi, kapasite ve donanım ile sürdürülebilir havacılık potansiyeline sahip bir şehirdir. Eskişehir bulunduğu coğrafi konumu, gelişmiş sanayisi, dikkate değer gelişim ivmesi gösteren iç turizm kapasitesi, dinamik nüfusu, gelişime ve öğrenmeye açık esnek sosyal ve kültürel yapısı ile öncü olma ve sürdürülebilirlik potansiyeli olan bir yapıya sahiptir.

2014 ve 2015 yıllarında gerçekleştirilmiş olan uçuşlar Eskişehir’in hat bakımından büyümesinin mümkün olduğunun göstermektedir. 2014 yılında THY Brüksel – Eskişehir – Brüksel hattında 129 sefer gerçekleştirmiştir. Toplam 29.267 yolcu taşımış ve doluluk oranı %66,33 doluluk oranına ulaşmıştır. Atlasjet havayolları da aynı hatta seferler düzenlemiştir. 17 sefer gerçekleştirmiş olup 4.788 yolcu taşımış ve %67,05 doluluk oranına ulaşmıştır. Onur Air Havayolları ise Eskişehir – Brüksel hattına 3 tek yön sefer düzenlemiştir. Bu seferlerde 656 yolcu taşımış olup %99,40 doluluk oranına ulaşmıştır. Tui Airlines Brüksel – Eskişehir – Brüksel hattında faaliyet gösteren havayollarından biri olmuştur. Toplam 8 sefer gerçekleştirmiş olan Tui Airlines 1.953 yolcu taşıyarak %86,11 doluluk oranına ulaşmıştır.

2015 yılında Hasan Polatkan Havalimanı’nda 9 havayolu tarafından farklı hatlara seferler düzenlenmiştir. THY Brüksel – Eskişehir – Brüksel hattında 125 sefer gerçekleştirmiştir. Toplam 22.846 yolcu taşımış ve doluluk oranı %63,58 doluluk oranına ulaşmıştır. Freebird havayolları da aynı hatta seferler düzenlemiştir. 9 sefer gerçekleştirmiş olup 2.409 yolcu taşımış ve %74,35 doluluk oranına ulaşmıştır. Onur Air Havayolları ise Eskişehir – Brüksel hattına 7 tek yön sefer düzenlemiştir. Bu seferlerde 1267 yolcu taşımış olup %82,27 doluluk oranına ulaşmıştır. 2014 yılında Brüksel – Eskişehir – Brüksel hattında seferlere başlayan Tui Airlines, 2015 yılında aynı hatta faaliyetlerine devam etmiştir. Bu hatta 40 sefer gerçekleştirmiş olup 10.998 yolcu taşımış ve %72,74 doluluk oranına ulaşmıştır. Atlasjet Havayolları Eskişehir – Kıbrıs – Eskişehir hattında 7 sefer düzenlemiş olup 1.014 yolcu taşımıştır. Auigle Azur Havayolları Lyon – Eskişehir – Lyon hattında toplam 4 sefer gerçekleştirmiş

^{II} GSYİH: bir ülke sınırları içerisinde belli bir zaman içinde, üretilen tüm nihai mal ve hizmetlerin para birimi cinsinden değeridir.

olup 718 yolcu taşımıştır. Tailwind havayolları Brüksel – Eskişehir – Brüksel hattında 14 sefer gerçekleştirmiş olup 2526 yolcu taşımış ve %53,70 doluluk oranına ulaşmıştır. Ayrıca 2015 yılı içerisinde Mekke ve Medine’ye umre seferleri başlamıştır. Toplam 11 sefer gerçekleştirilmiş olup 3 tanesi THY, 6 tanesi Atlasjet ve 2 tanesi Pegasus havayolları tarafından gerçekleştirilmiştir.

Bu çalışmada Eskişehir ve dolayısıyla Türkiye ekonomisine artı değer yaratmak üzere, Eskişehir’de yaşayan vatandaşlara direkt temas edilme yoluyla şehrin yolcu potansiyelini bilimsel olarak da sınıyarak, yolcu talebi potansiyelini ölçmek hedeflenmiştir. Yine bu çalışmada, sürdürülebilir havayolu taşımacılığı kapsamında en çok talep gören hatları belirlemek ve özellikle çapraz uçuşlar kapsamında ağ yapılarına dair altyapı çalışması yapmak üzere yola çıkmıştır.

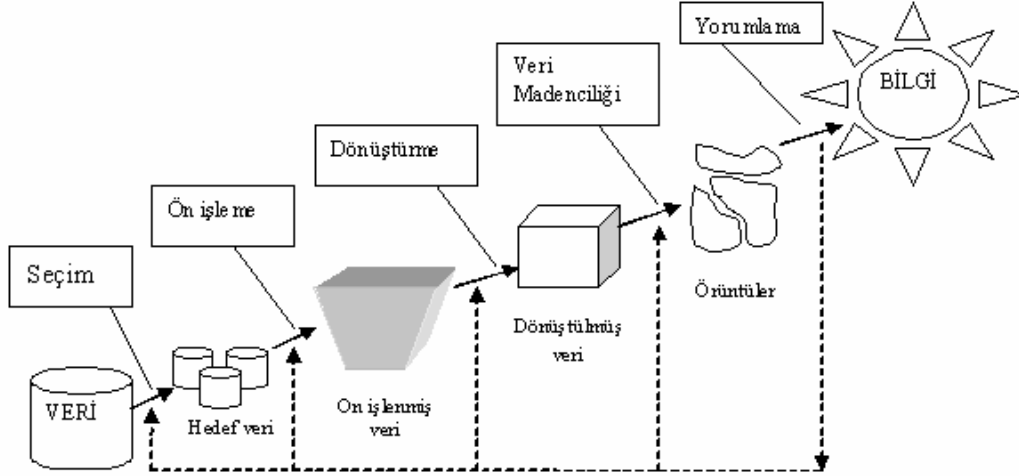
2. LİTERATÜR

Literatürde hava taşımacılığı talebinin konu alındığı birkaç çalışma göze çarpmaktadır. Bunlar arasında yer alan Graham’ın çalışmasında, İngiltere için tatil amaçlı hava taşımacılığının talebi ve büyüme potansiyeli olup olmadığını ölçmüştür [6]. Mason, hava taşımacılığında yaşanan olumsuz olayların (SARS, 11 Eylül, Körfez Savaşı vs.) talep üzerindeki etkisini tespit etmeye yönelik bir araştırma yapmıştır [7]. Brons vd. çalışmalarında talebin fiyat esnekliğini tespit etmeye yönelik çalışma yapmışlardır [8]. Njegovan ise hava taşımacılığında tatil amaçlı hava taşımacılığı (leisure air travel) talebinin fiyat esnekliğini ölçmeye yönelik bir çalışma yapmıştır [9]. Literatürde aynı zamanda hızlı trenin hava taşımacılığına olan talebe etkisini ölçmeye yönelik çalışmalar da yer almaktadır [10]. Literatürde Eskişehir’de havayolu yolcu talebini yaratacak faktörlerin analiz edildiği önemli çalışmalardan biri Oktal vd., tarafından yapılmıştır [11]. Söz konusu çalışma 2007 yılında yapılmış olup, havayoluna olan talep farklı açılardan incelenerek ve tüm boyutları dikkate alınarak değerlendirilmiştir. Bu çalışma, Oktal vd.’nin çalışmasından farklı olarak, sadece Eskişehir ili ve tüm ilçelerini kapsayacak şekilde hazırlanmış olup, güncel havayolu yolcu taşımacılığına olan talep durumsallık yaklaşımıyla mevcut tüm dinamikler dikkate alınarak değerlendirilmeye çalışılmıştır.

3: VERİ MADENCİLİĞİ

Günümüzde verilerin dijital ortamlarda saklanmasıdaki hızla artış, yeryüzündeki bilgi miktarını gitgide artırmakta ve veri tabanlarının sayısı da benzer şekilde artmaktadır. Yeni teknolojiyle birlikte veri saklama hem daha kolaylaşmış hem de verinin kendisi ucuzlamıştır. Veri tabanlarındaki saklanan veriler tek başlarına değersiz ve kullanıcı için çok fazla bir anlam ifade etmemektedir. Fakat bu veri tabanları sistematik olarak işlenir ve analiz edilirse, amaca yönelik sorulara cevap verebilecek çok değerli bilgilere ulaşılabilir [12].

Veri tabanlarından bilgi keşfi veri tabanlarından faydalı bilginin keşfedilmesi sürecinin tamamına atıfta bulunmaktadır. Fakat veri madenciliği bu sürecin bir adımına karşılık gelmektedir. Veri keşfi sürecinde veri madenciliği, veriden örüntülerin aktarımı için özel algoritmaların uygulanmasıdır. Veri tabanlarında bilgi keşfi sürecinde veri madenciliği 4. aşamada devreye girmektedir [13].



Şekil 1. Veri Tabanlarında Bilgi Keşki Süreci [13]

Veri madenciliği veri tabanlarındaki örüntü ve ilişkileri keşfetmek amacıyla birçok farklı analiz aracı kullanarak geçerli tahminler yürütmek için kullanılan bir süreçtir [14]. Veri madenciliği otomatikleşmiş modeller sayesinde veri ambarlarında tutulan verilerden anlamlı bilgileri, ilişkileri ve davranışları ortaya çıkarma süreci olarak tanımlanabilmektedir. Bu süreçte önceden veri içinde anlaşılmayan ve görünmeyen desenler öncelikle ortaya çıkarılmaya çalışılmaktadır. Bu genellikle bilgiler arasındaki ilişkilerin, sınıflandırmanın, veri birlikteliğinin ve tahminlemenin sonucunda elde edilmektedir [15].

Veri madenciliği ile veri yığınlarından oluşan veri tabanlarında gizli kalmış bilgilerin ortaya çıkarılması sağlanır. Gizli kalmış veriler istatistik, matematik disiplinleri, modelleme teknikleri, veri tabanı teknolojisi ve çeşitli bilgisayar programları kullanılarak ortaya çıkarılır. Veri madenciliği veri tabanları ile yakından ilişkilidir. Veri madenciliğinde gerekli veriye hızla ulaşılabilmesi ve amaca uygun şekilde verinin saklanması gerekir. Bu amaçla günümüzde yaygın olarak kullanılan veri ambarları, günlük kullanılan veri tabanlarını birleştirmiş ve işlemeye daha uygun bir özetini sağlamaktadır [16]. Veri ambarı farklı kaynaklardan ve genellikle farklı yapıdaki verinin depolandığı ve hepsinin de birleşik çatı altında kullanılmasının istenildiği yapılardır. Böylece veri ambarları farklı kaynaklardan elde edilen veriyi aynı çatı altında analiz etme imkanı sağlamaktadır [13].

Veri madenciliği bir süreç olarak işlemektedir. Sürecin ana unsuru, süreci gerçekleştiren uygulamacıdır. İstenilen sonuca ulaşmak için sürecin tüm adımları doğru olarak yerine getirilmelidir. Veri madenciliği bilgi keşfi sürecidir ve bu süreç aşağıdaki aşamalardan oluşur [17]:

- Veri Temizleme (tutarsız verileri çıkarmak)
- Veri Bütünleştirme (veri kaynağını birleştirebilmek)
- Veri Seçme (yapılacak olan analiz için verileri belirlemek)
- Veri Dönüşümü (veriyi veri madenciliği kullanımına uygun hale dönüştürmek)
- Veri Madenciliği (veri örüntülerini yakalayabilmek için akıllı metodlar uygulamak)
- Örüntü Değerlendirme (bazı ölçümlere göre elde edilmiş bilgiyi temsil eden ilginç örüntülerin tanımlanması)
- Bilgi sunumu (madenciliği yapılmış olan elde edilmiş bilginin kullanıcıya sunumunu gerçekleştirmek)

Veri madenciliğinin kullanım alanı çok geniştir. Verinin olduğu her alanda veri madenciliği kullanımı mümkündür. Havacılıkta ise, potansiyel yolcu talebinin belirlemede, müşteri ihtiyaçlarını anlamada, promosyonlarda, gecikme nedenlerinde, uçuş rotaların tespitinde, bakım planlamada, uçuş fiyatı belirlemede ve kaza analizlerinde sıklıkla kullanılmaktadır.

3.1. Veri Madenciliği Fonksiyonları ve Karar Ağaçları

Veri madenciliğinin sunduğu çözümler farklı fonksiyonlar altında ele alınmalıdır. Veri yığını içerisindeki ilişkilerin ortaya konması açısından doğru tekniğin seçimi ve analizin yapılması önem taşımaktadır. Veri madenciliği teknikleri aşağıdaki veri madenciliği fonksiyonlarından bir ya da bir kaçına sahiptir [18]:

- (1) Birliktelik
- (2) Sınıflandırma
- (3) Kümeleme
- (4) Tahminleme
- (5) Regresyon
- (6) Sekans (ardışık zamanlı örüntü) ortaya çıkarma
- (7) Görselleştirme

Karar ağacı teknikleri özellikle veri madenciliğinin sınıflandırma fonksiyonu altında ele alınmaktadır. Bunun dışında bazı veri madenciliği tekniklerinin çoğunlukla hangi fonksiyonlar altında yer aldığı Tablo 1’de yer almaktadır [19]:

Tablo 1. Bazı Veri Madenciliği Teknikleri ve İlgili Fonksiyonlar

Veri Madenciliği Fonksiyonu	Veri Madenciliği Tekniği
Birliktelik	Kümeleme teorisi Bayesian sınıflandırması
Tahminleme	Sinir ağları Zaman serileri Regresyon
Sınıflandırma	Karar ağaçları Bulanık mantık Sinir ağları Genetik algoritmalar
Kümeleme	İki adımlı kümeleme Kohonen ağları K ortalama kümeleme

Görüldüğü gibi veri madenciliği tekniklerini tek bir fonksiyon dahilinde değerlendirmek yerine kullanım alanına göre birden fazla fonksiyon altında yer alabilmeleri mümkündür. Bu nedenle fonksiyona odaklanmak yerine veri madenciliği teknikleri ile çözülecek olan probleme ya da araştırma sorusuna odaklanılmalıdır.

Araştırmamızda kullandığımız karar ağacı tekniği çoğunlukla sınıflandırma amaçlı olarak kullanılmaktadır. Ancak bunun yanı sıra kurulan karar ağacı modeli tahminlemelerin yapılmasına da olanak tanımaktadır [20]. Karar ağacı modellerinin sınıflandırma fonksiyonu altında tercih edilmesini sağlayan başlıca özellikleri düşük maliyetli olması, anlaşılması ve yorumlanmasının kolay olması, güvenilirliklerinin iyi olmasıdır [21].

Karar ağacı tekniğinin havayolu taşımacılığı alanında uygulamalarına bakıldığında birçok farklı konuda sınıflandırmaya dayalı karar problemlerinin çözümlenmesine olanak sağladığı görülmektedir. Havayolu yolcularının değerlendirilmesi ve pazar segmentasyonu [22], havayolu yolcularının gelecekteki değerlerinin tahminlemesi [23], yolcu güvenlik taraması sistemlerinde istenmeyen durumlara sebep olacak yolcuların önceden belirlenmesi [24], uçucu ekip planlarındaki rezerv personel sayısının operasyon aksaklık ve gecikmelerine cevap verebilecek şekilde belirlenmesi [25] konuları havayolu taşımacılığı alanında karar ağacı tekniğinin kullanıldığı konulardan bazılarıdır.

Karar ağacı algoritmalarının da kendi aralarında farklı çeşitleri bulunmakla birlikte, her birinin farklı üstünlerinin olduğu söylenebilir. Bazı karar ağacı algoritmaları sürekli değişkenlerin modellenmesinde başarılı iken, bazıları kategorik değişkenler üzerinde başarılıdırlar. Örneğin hedef değişkenin kategorik

olduğu durumlarda C5.0 algoritması daha etkin olabilmektedir. Diğer karar ağacı algoritmalarından biri olan CART algoritması ise her adımda iki dal oluşturarak karar ağacını geliştirir.

Çalışmamızda karar ağacını modellemek amacıyla SPSS Modeler 14.2 paket programında C5.0 algoritması kullanılmıştır. Veri setindeki alanların kategorik yapıda olması, algoritmanın boosting özeliği sayesinde doğruluğu arttırması ve elde edilen karar ağacının diğer algoritmalara göre daha düzgün yapıda olması nedeniyle bu algoritma seçilmiştir.

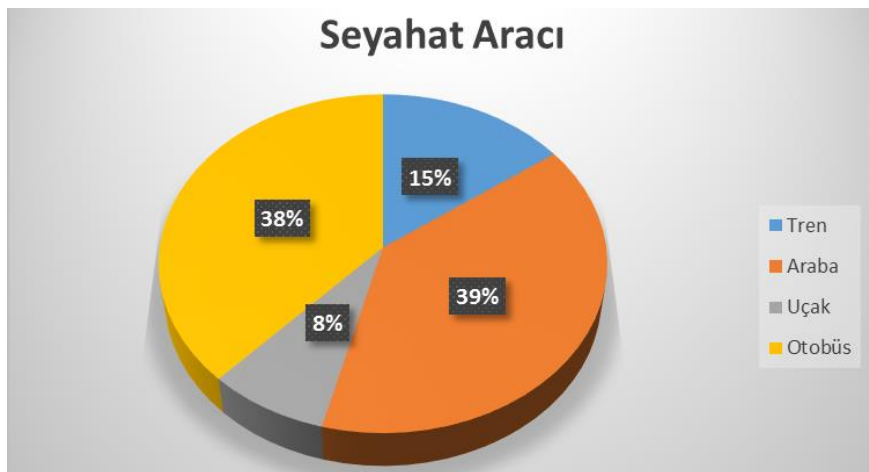
4. KARAR AĞACI UYGULAMASI

Eskişehir ilindeki havayolu yolcu potansiyelinin belirlenmesi amacıyla şehirde yaşayan insanlarla yüz yüze anket yapılmıştır. Karar ağacı modelini oluşturmadaki amacımız havayolu ile seyahat etme potansiyelinin yüksek olduğu kesimin belirlenmesidir. Potansiyel yolcuların seyahat amaçları ve ulaşım bütçelerine bakılarak uçak ile seyahat etme oranının en yüksek olduğu yolcu kesimi tespit edilmek istenmektedir. Bu amaçla bağımlı değişken seyahat aracı olup, amaç değişkenine yönelik örneklemin segmentasyonu belirli kural setleri çerçevesinde yapılmalıdır. İlgili kural setlerinin elde edilmesini sağlayan karar ağacı analizi, araştırma kapsamında havayolu ile seyahat etme potansiyeli yüksek olan yolcu kesiminin kural setleri çerçevesinde belirlenmesine yönelik uygunluğu açısından tercih edilmiştir. Toplamda 750 geçerli anket tamamlanmıştır. Ana kütlein büyüklüğü Eskişehir ilinin nüfusu olup TÜİK verilerine göre 2015 yılı projeksiyonu 824.124'tür. Örneklemin yeterliliği için kullanılan formül aşağıda verilmiştir ve ana kütleli %95 güven düzeyinde ve %5 hata payı ile temsil edecek olan örnek kütlein büyüklüğü 385 kişidir. Dolayısıyla örneklem yeterli büyüklüktedir.

$$n = \frac{p * q * z_{\alpha}^2}{d^2}$$

- n: Ana kütleli temsil edebilecek örnek kütle büyüklüğü
p: Ana kütledeki x olayının gözlem oranı
q: Ana kütledeki x olayının gözlemeleme oranı (1-p)
d: Hata marjı
z_α: α=0,05 için z değeri 1,96 olarak alınmıştır.

Ankette yer alan sorular arasında katılımcıların seyahatlerinde tercih ettikleri ulaşım aracı değişkeni bizim hedef değişkenimiz durumundadır. Katılımcıların seyahatlerinde tercih ettikleri ulaşım araçları Şekil 2'de yer almaktadır.



Şekil 2. Seyahat Aracına Göre Katılımcıların Dağılımı

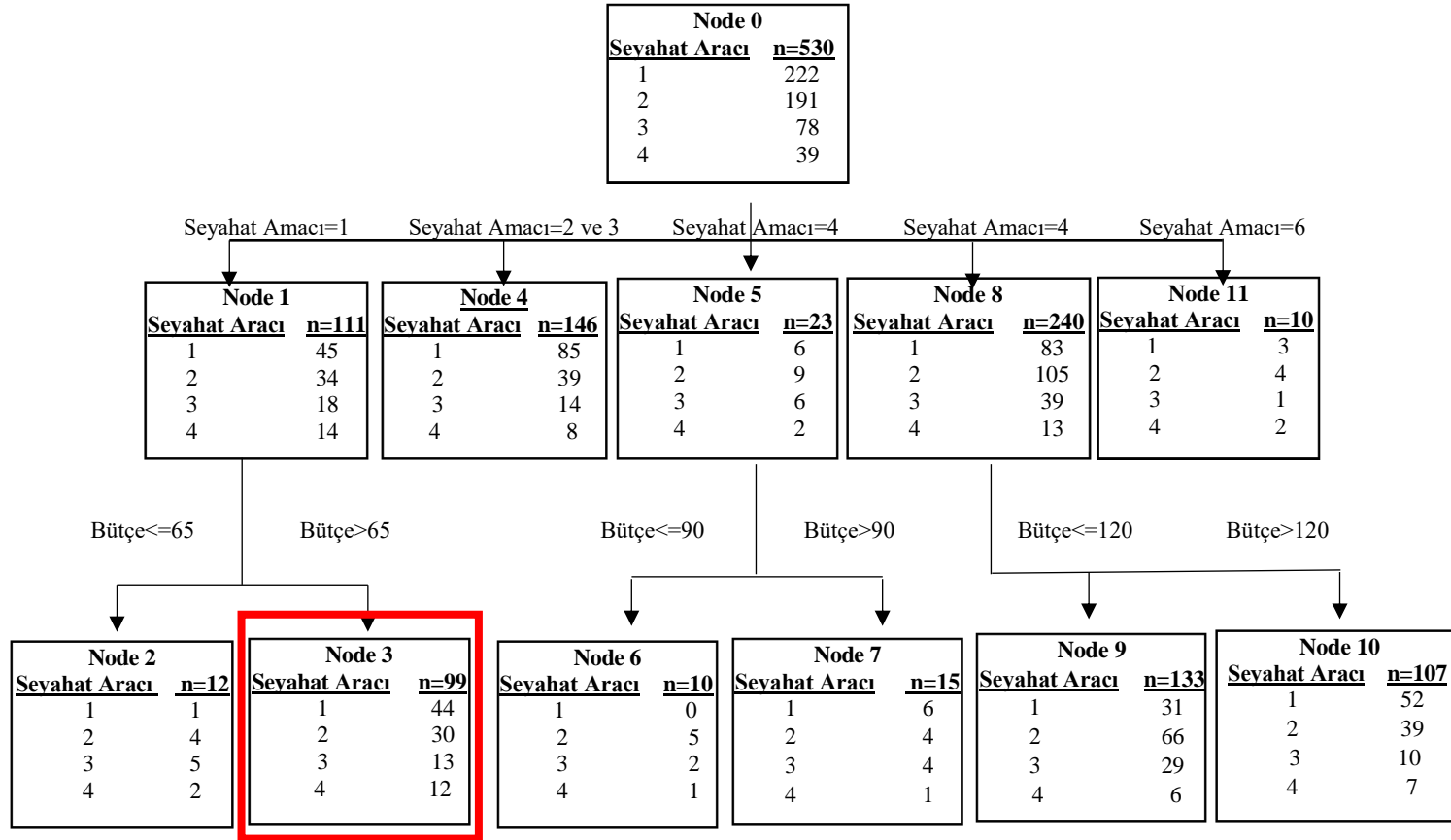
Katılımcıların kullandıkları seyahat aracı değişkeni ile diğer değişkenler arasındaki ilişki analiz edilmiştir. Sonuç olarak katılımcıların seyahat amacı ile ulaşım için ayırdıkları bütçe değişkenleri arasında anlamlı ilişkinin olduğu görülmüştür. Değişkenler arasındaki ilişkilerin incelenmesi amacıyla seyahat aracı –seyahat amacı, seyahat aracı – ulaşım bütçesi değişkenleri arasındaki korelasyona bakılmıştır. Yapılan korelasyon analizleri 0,05 düzeyinde anlamlıdır ($p<0,05$).

Karar ağacı modeline dahil edilen değişkenlerin ikisi kategorik olup her bir değişkene ait kategoriler Tablo 2’de verilmiştir. Üçüncü değişkenimiz olan ulaşım bütçesi ise katılımcılara doğrudan sorulmuştur. Yani üçüncü değişkenimiz için oranlı ölçek kullanılmıştır.

Tablo 2. Değişkenler ve Kategoriler

Değişken	Kategori	Etiket
Seyahat amacı	1	İş
	2	Tatil / Eğlence
	3	Sağlık
	4	Eğitim
	5	Akraba Ziyareti
	6	Diğer
Seyahat aracı (Bağımlı Değişken)	1	Araba / Özel araç
	2	Otobüs
	3	Tren
	4	Uçak
Ulaşım bütçesi	*Oranlı ölçek kullanılmıştır.	

Karar ağacı modeline dahil edilen toplamda 750 adet katılımcıya ait verinin %70’i modelin öğrenmesi, %30’u modelin test edilmesi amacıyla bölümlendirilmiştir. Oluşturulan C5.0 karar ağacı modelinde budama şiddeti %75 olarak belirlenmiştir ve minimum alt dal katsayısı 2’dir. Elde edilen modelin doğruluk oranı %86,2’dir. Karar ağacı modeline ait dal grafiği Şekil 3’te verilmiştir.



Şekil 3. Seyahat amacı değişkeni için oluşturulan karar ağacı dalları

Tablo 3. Karar ağacı son düzey kural seti

Grup*	Seyahat Amacı	Ulaşım Bütçesi
1	=1	<=65
2	=1	>65
3	=4	<=90
4	=4	>90
5	=5	<=120
6	=5	>120

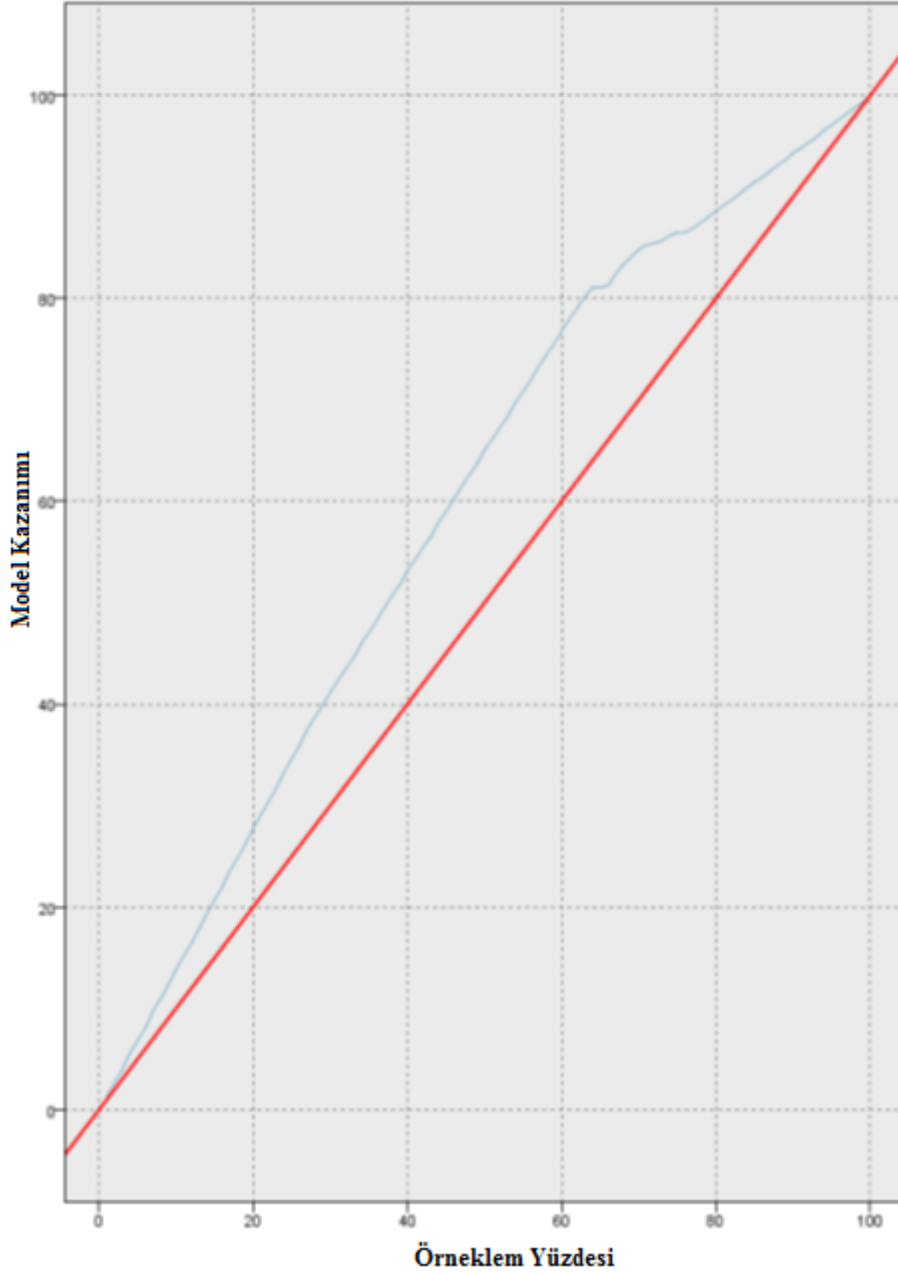
*Son düzeydeki her bir dal grup olarak adlandırılmıştır.

Karar ağacını oluşturmadaki amacımız uçak ile seyahat eden kesimin özellikleri üzerine yoğunlaştığından ötürü ilk düzeydeki dallar üzerine yoğunlaşmamıştır. Çünkü ilk düzeyde yer alan ikinci ve beşinci dallarda uçak ile seyahat edenlerin sayısı oldukça düşüktür. Bu yüzden ilgili dalların kural setlerine yer verilmemiştir. Ek olarak ulaşım bütçesi değişkeninin veri seti içerisindeki alt limiti 30 TL ve üst limiti 600 TL'dir. Yani kural seti içerisinde yer alan eşitsizlikleri veri seti minimum ve maksimum değerleri dahilinde değerlendirmek daha doğru olacaktır.

Elde ettiğimiz karar ağacındaki ikinci düzeydeki dallara bakıldığında uçak ile seyahat edenlerin büyük kısmı Şekil 3'te kutu içerisine alınarak belirtilen grup (node 3) içerisinde yer almaktadır. Uçak ile seyahat edenlerin %30,7'si tek bir grup altında toplanmıştır. İlgili grup incelendiğinde iş amaçlı olarak seyahat edenlerin uçağı tercih ettikleri görülmektedir. Ayrıca uçak ile seyahat için ayrılan bütçenin 65 TL'nin üzerinde olduğu görülmektedir. Belirtilen kesimin havayolu ile seyahat etme potansiyelinin yüksek olduğunu söyleyebiliriz.

Havayolu ile seyahat etme potansiyeli yüksek olan diğer %33'lük kesimin akraba ziyareti amaçlı seyahat ettikleri görülmektedir (node 8). Akraba ziyareti amaçlı seyahat edenlerin yer aldığı dal ise ulaşım bütçesi 120 TL veya daha az olanlar ile 120 TL'nin üzerinde olanlar olmak üzere iki alt dala ayrılmaktadır. İlgili gruplar 5 ve 6 numaraları ile belirtilmiştir ve iş amaçlı seyahat edenlerden sonra bizim için önem arz eden diğer gruplardır. Havayolu ile seyahat edenlere yönelik yapılacak çalışmalarda belirtilen kesimlere odaklanmak, yapılacak olan çalışmaların verimliliklerini arttıracaktır. İş amaçlı seyahat edenler ve akraba ziyareti amaçlı seyahat edenlerin yer aldığı gruplar toplam potansiyelin %63,7'sine sahiptir diyebiliriz. Belirtilen gruplar Eskişehir'deki havayolu talebinin büyük kısmını oluşturmakla birlikte, şehirdeki talebin geliştirilmesi konusunda da kilit rol üstlenmektedirler.

Uygulamamız sonucunda oluşturulan karar ağacı modelinin tahminleme amaçlı olarak kullanılması söz konusu olduğunda, modelin performansını incelemek yararlı olacaktır. Karar ağacı modelinin performans değerlendirme grafiğı Şekil 4'te verilmiştir.



Şekil 4. Karar ağacı modeli performans değerlendirme grafiği

Şekilde yer alan grafik incelendiğinde eğimin sabit olduğu durum var olan durumdur. Ancak model dahilinde tahminleme yapıldığında modelin performans grafiği var olan durum grafiğinin üstünde yer almaktadır ve daha iyi bir performansa sahiptir. Normalde 100 kişilik bir grup içerisinde 60 kişiye ulaşıldığında, havayolu ile seyahat edenlerin de %60'ına ulaşılması beklenmektedir. Eğimin sabit olduğu grafik bize bunu verir. Ancak oluşturulan karar ağacı modeli dahilinde 100 kişilik bir grup içerisindeki 60 kişilik spesifik bir gruba erişildiğinde havayolu ile seyahat edenlerin %76,85'ine ulaşılması beklenmektedir. Yani model dahilinde seçilecek bir kesimin içerisindeki havayolu ile seyahat edenlerin oranı %28,08 daha fazla olacaktır. Yapılan bu açıklamalar performans grafiğinin %60 noktası için geçerlidir. Belirlenecek olan hedef kitlenin büyüklüğüne göre modelin kazanımı değişecektir. Ancak her halükarda modelin sunacağı performans normal durumdaki kazanımlara göre pozitif olacaktır.

5. SONUÇ

Veri madenciliği tekniklerinin kullanımı sayesinde veri setinde yer alan değişkenler arasındaki gizli örüntülerin ortaya konması mümkün olmaktadır. İşletmelerin üretim, pazarlama, finans gibi birçok faaliyetinde bu tekniklerin kullanılması mümkündür. Mevcut faaliyetlerin verimliliklerinin artırılması bu sayede mümkün olmaktadır.

Yaptığımız çalışmada amacımız Eskişehir ilinde havayolu ile seyahat eden kesimin analiz edilmesi ve mevcut potansiyelin artmasında rol oynayan grupların belirlenmesi üzerine olmuştur. Seyahat amacı ve ulaşım bütçesi ile seyahat araçları arasında olan ilişkinin anlamlı olduğu görülmüştür. İlgili değişkenler ile kurulan model doğrultusunda mevcut potansiyelin büyük kısmına sahip olan ve ileride bu potansiyeli geliştirmede kilit rol oynayan gruplara ulaşılmıştır. Halihazırda mevcut olan havayolu talebinin artırılmasında iş amaçlı seyahat edenler ile akraba ziyareti amaçlı seyahat edenlerin önem arz ettiği görülmüştür. Mevcut talebin geliştirilmesine yönelik yapılacak olan pazarlama çalışmalarının belirli bir kesime odaklanılarak icra edilmesi, yapılacak olan faaliyetlerin daha etkin olmasını sağlayacaktır. Ayrıca seyahat amacının yanı sıra müşterilerin havayolu ile seyahat etmek için ayırdıkları bütçelere göre de hareket edilmesi gereklidir. Müşterilerin havayolu ile seyahat etmek için ayırmayı göze alabilecekleri bütçelere de çalışmamızda yer verilmiştir.

Eskişehir ilindeki havayolu yolcu potansiyelinin geliştirilmesi amacıyla oluşturulan model üzerinden öngörülen çalışmalar da yapılabilir. Veri setinde yer alan kayıtların üzerinde eklenecek olan yeni bireylerin nasıl bir davranış sergileyecekleri ve hangi ulaşım aracını tercih edecekleri tahmin edilebilir. Bu sayede potansiyelin düşük olduğu kesimlere yönelik olarak yapılacak harcamalar önlenerek, kaynakların potansiyeli arttırmada rol oynayan kesime yönlendirilmesi mümkün olacaktır.

TEŞEKKÜR

Bu çalışma Anadolu Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Komisyonu tarafından kabul edilen “1509F631” nolu proje kapsamında desteklenmiştir.

KAYNAKLAR

- [1] SHGM. 2014. Sivil Havacılık Genel Müdürlüğü Faaliyet Raporu. Ankara: Sivil Havacılık Genel Müdürlüğü, 2014. Faaliyet Raporu.
- [2] BOEING. 2015. Current Market Outlook 2014–2033. Basım yeri bilinmiyor: Boeing, 2015.
- [3] Caves Robert. The social and economic benefits of aviation. [kitap yaz.] Paul Upham, ve diğerleri. Towards Sustainable Aviation. London : Earthscan Publications Ltd, 2003.
- [4] Vasigh Bijan, Fleming, Ken ve Tacker, Thomas Introduction to Air Transport Economics from Theory to Applications. Surrey: Ashgate Publishing Limited, 2013.
- [5] ATAG. Aviation: Benefits Beyond Borders. Geneva : Air Transport Action Group, 2014.
- [6] Graham A. Demand for leisure air travel and limits to growth. Journal of Air Transport Management, 2000, 6.2 109-118.
- [7] Mason Keith J. Observations of fundamental changes in the demand for aviation services. Journal of Air Transport Management, 2005, 11.1: 19-25.
- [8] Brons M, Pels E, Nijkamp, P, Rietveld, P. Price elasticities of demand for passenger air travel: a meta-analysis. Journal of Air Transport Management, 2002, 8(3), 165-175.

- [9] Njegovan N, (2006). Elasticities of demand for leisure air travel: A system modelling approach. *Journal of Air Transport Management*, 12.1: 33-39.
- [10] Park Y, Hun-Koo H., Analysis of the impact of high-speed railroad service on air transport demand. *Transportation Research Part E: Logistics and Transportation Review*, 2006, 42.2: 95-104.
- [11] Park Y., Hun-Koo H. Analysis of the impact of high-speed railroad service on air transport demand. *Transportation Research Part E: Logistics and Transportation Review*, 2006, 42.2: 95-104.
- [12] Özekes S. Veri madenciliği modelleri ve uygulama alanları. *İstanbul Ticaret Üniversitesi Dergisi*, 2003. 65-82.
- [13] Koyuncugil AS and Özgülbaş N. Veri Madenciliği: Tıp ve Sağlık Hizmetlerinde Kullanımı ve uygulamaları. *Bilim Teknolojileri Dergisi* 2009, Cilt: 2 Sayı:2, 21-32.
- [14] Two Crows Corporation. (tarih yok). Introduction to Data Mining and Knowledge Discovery. <http://www.twocrows.com/intro-dm.pdf>.
- [15] Mitra S and Acharya T. Data Mining. New Jersey: WILEY, 2003.
- [16] Baykal A. (2006). Veri madenciliği uygulama alanları. D.Ü. Ziya Gökalp Eğitim Fakültesi Dergisi 7, 95-107.
- [17] Tekerek A. Veri madenciliği süreçleri ve açık kaynak kodlu veri madenciliği araçları. Gazi Üniversitesi, Elektronik-Bilgisayar Eğitimi Bölümü, (2011).
- [18] Nigai E, Xiu L and Chau D. Application of data mining techniques in customer relationship management: A literature review and classification. *Expert Systems with Applications*, 2009 36, 2592-2602.
- [19] Nigai E, Xiu L and Chau D. Application of data mining techniques in customer relationship management: A literature review and classification. *Expert Systems with Applications*, 2009, 36, 2592-2602.
- [20] Çalış A, Kayapınar, S and Çetinyokuş, T. Veri Madenciliğinde Karar Ağacı Algoritmaları ile Bilgisayar ve İnternet Güvenliği Üzerine Bir Uygulama. *Endüstri Mühendisliği Dergisi*, 2014, 25(3-4), 2-19.
- [21] Chien C-F and Chen, L-F. Data mining to improve personnel selection and enhance human capital: A case study in high-technology industry. *Expert Systems with Applications*, 2008, 34(1), 280-290.
- [22] Chiang WY. Applying a new model of customer value on international air passengers' market in Taiwan. *International Journal of Tourism Research*, 2012, 14(2), 116-123.
- [23] Tirenni G, Kaiser C ve Herrmann A00. Applying decision trees for value-based customer relations management: Predicting airline customers' future values. *Journal of Database Marketing and Customer Strategy Management*, 2007, 14(2), 130-142.
- [24] Majeske KD. ve Lauer TW. Optimizing airline passenger prescreening systems with Bayesian decision models. *Computers and Operations Research*, 2012, 39(8), 1827-1836.
- [25] Homaie-Shandizi, AH, Nia VP, Gamache M ve Agard B. Flight deck crew reserve: from data to forecasting. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 2016, 50, 106-114.

8-BOYUTTA HİPERBOLİK UZAYLARDA SEIBERG –WITTEN DENKLEMLERİ

Serhan EKER^{1, *}, Şenay BULUT¹, Nedim DEĞİRMENCİ¹

¹ Matematik Bölümü, Fen Fakültesi, Anadolu Üniversitesi, Eskişehir, Türkiye

ÖZET

4 – manifoldların yapısını incelemekte kullanılan Seiberg–Witten denklemleri, Dirac denklemi ve Eğrilik denklemi olmak üzere iki denklemden oluşmaktadır. Bu denklemlerin yüksek boyutlarda da self –dualite seçimine bağlı olarak genellemeleri yapılmıştır [1,2,6,9]. Bu çalışmada öncelikle 4-boyutlu Hiperbolik uzay üzerinde klasik Seiberg–Witten denklemleri yazılmış daha sonra [1,2,6,9] de verilen yöntem kullanılarak 8 – boyutlu Hiperbolik uzay üzerinde geliştirilmiş Seiberg-Witten denklemleri yazılmıştır.

Anahtar Kelimeler: Seiberg–Witten denklemleri, Hiperbolik Uzay, Eğrilik denklemi, Spinor, Self–Dualite

SEIBERG–WITTEN EQUATIONS ON 8 –DIMENSIONAL HYPERBOLIC SPACES

ABSTRACT

Seiberg–Witten equations, which are used to investigate the structure of 4 –dimensional manifolds, consist of two equations. The first item is Dirac equation and the latter is Curvature equation. According to choosing of the self–duality concept, the generalized of these equations were done in higher dimensions [1, 2,6,9]. In this paper, at first the classical Seiberg–Witten equations are written on 4 –dimensional Hiperbolic space. Then, the generalized Seiberg–Witten equations are written on 8 –dimensional Hiperbolic space by using the method given in [1].

Keywords: Seiberg–Witten equations, Hiperbolic space, Curvature equation, Spinor, Self–Duality

1. GİRİŞ

M, n –boyutlu yönlendirilebilir Riemann manifoldu olsun. Bu durumda $Spin^c$ –yapısı aşağıdaki gibi verilir:

M, n –boyutlu yönlendirilebilir Riemann manifoldunun yapı grubu $SO(n)$ dir. O halde M nin $\{U_\alpha\}_{\alpha \in \mathcal{A}}$ açık örtüsüne bağlı olarak TM tanjant demedinin $\{(\pi^{-1}(U_\alpha), \phi_\alpha)\}$ demet kartları vardır. Bu kartlara karşılık gelen geçiş fonksiyonları da $U_\alpha \cap U_\beta \neq \emptyset$ iken

$$g_{\alpha\beta}: U_\alpha \cap U_\beta \rightarrow SO(n)$$

şeklindeki düzgün fonksiyonlardır. Buna ilaveten $U_\alpha \cap U_\beta \neq \emptyset$ iken

$$\tilde{g}_{\alpha\beta}: U_\alpha \cap U_\beta \rightarrow Spin^c(n)$$

düzgün fonksiyonları aşağıdaki koşulları sağlayacak şekilde mevcut olsun.

$$1. \quad \begin{aligned} \lambda: Spin^c(n) &\rightarrow SO(n) \\ ([g, z]) &\mapsto \lambda([g, z]) := \lambda(g) \end{aligned}$$

Burada $\lambda: Spin(n) \rightarrow SO(n)$ 2:1 örtü dönüşümüdür.

Buna göre

$$\begin{array}{ccc} & & Spin^c(n) \\ & \nearrow \tilde{g}_{\alpha\beta} & \downarrow \lambda \\ U_\alpha \cap U_\beta & \xrightarrow{g_{\alpha\beta}} & SO(n) \end{array}$$

diyagramı değişmelidir, yani $\lambda \circ \tilde{g}_{\alpha\beta} = g_{\alpha\beta}$ dir.

2. $U_\alpha \cap U_\beta \cap U_\gamma \neq \emptyset$ iken $\forall x \in U_\alpha \cap U_\beta \cap U_\gamma \neq \emptyset$ için

$$\tilde{g}_{\alpha\beta}(x) \circ \tilde{g}_{\beta\gamma}(x) = \tilde{g}_{\alpha\gamma}(x)$$

dir.

Bu durumda M ye $Spin^c(n)$ manifoldu denir (Bazen M manifoldu $Spin^c(n)$ –yapısına sahiptir denir [3]). M $Spin^c$ manifoldu ise asli lif demeti kurma teoremini kullanarak M üzerinde aşağıdaki gibi üç tane asli lif demeti inşa edilebilir [5]:

1. Eğer $g_{\alpha\beta}$ geçiş fonksiyonları kullanılırsa $P_{SO(n)} = U_\alpha U_\alpha \times SO(n) / \sim$ bölüm uzayı aşağıdaki denklik bağıntısı ile tanımlanır:

$$(\alpha, x, g) \sim (\beta, y, h) \Leftrightarrow \alpha = \beta, y = x, h = g_{\alpha\beta}(x)g.$$

Bu durumda geçiş fonksiyonları $g_{\alpha\beta}$ lar olan bir $P_{SO(n)}$ asli $SO(n)$ lif demeti vardır ve denklik bakımından tektir.

2. Eğer $\tilde{g}_{\alpha\beta}$ geçiş fonksiyonları kullanılırsa $P_{Spin^c(n)} = U_\alpha U_\alpha \times Spin^c(n) / \sim$ bölüm uzayı aşağıdaki denklik bağıntısı ile tanımlanır:

$$(\alpha, x, g) \sim (\beta, y, h) \Leftrightarrow \alpha = \beta, y = x, h = \tilde{g}_{\alpha\beta}(x)g.$$

Bu durumda geçiş fonksiyonları $\tilde{g}_{\alpha\beta}$ lar olan bir $P_{Spin^c(n)}$ asli $Spin^c(n)$ lif demeti vardır ve denklik bakımından tektir.

3.

$$\begin{aligned} l: Spin^c(n) &\rightarrow S^1 \\ [g, z] &\mapsto l([g, z]) := z^2 \end{aligned}$$

olmak üzere

$$l_{\alpha\beta} = l \circ \tilde{g}_{\alpha\beta}: U_\alpha \cap U_\beta \xrightarrow{\tilde{g}_{\alpha\beta}} Spin^c(n) \xrightarrow{l} S^1$$

geçiş fonksiyonları kullanılırsa $P_{S^1} = U_\alpha U_\alpha \times S^1 / \sim$ bölüm uzayı aşağıdaki denklik bağıntısı ile tanımlanır:

$$(\alpha, x, g) \sim (\beta, y, h) \Leftrightarrow \alpha = \beta, y = x, h = l_{\alpha\beta}(x)g.$$

Bu durumda geçiş fonksiyonları $l_{\alpha\beta}$ lar olan bir P_{S^1} asli S^1 lif demeti vardır ve denklik bakımından tektir.

M manifoldu üzerinde spinor demedi

$$\kappa_n: Spin^c(n) \rightarrow Aut(\Delta_n)$$

spinor temsili yardımıyla $S = P_{Spin^c(n)} \times \Delta_n / \sim$ bölüm uzayı aşağıdaki denklik bağıntısı ile tanımlanır:

$$(p, v) \sim (p', v') \Leftrightarrow p' = p \cdot g, v' = (\kappa_n(g))^{-1}(v).$$

Bu durumda $S = P_{Spin^c(n)} \times \Delta_n / \sim$ bölüm uzayı, asosye vektör demedi olarak tanımlanır ve

$$S = P_{Spin^c(n)} \times_{\kappa_n} \Delta_n$$

ile gösterilir. S ye Spinor demedi ve S nin kesitlerine de M üzerinde spinor alanları denir.

M çift boyutlu iken S spinor demedi, $S = S^+ \oplus S^-$ şeklinde ayrışır [10]. κ_n spinor temsili yardımıyla elde edilen $S = P_{Spin^c(n)} \times_{\kappa_n} \Delta_n$ kompleks spinor demedir. $\kappa_n^+: Spin^c(n) \rightarrow Aut(\Delta_n^+)$, $\kappa_n^-: Spin^c(n) \rightarrow Aut(\Delta_n^-)$ temsilleri ile $S^+ = P_{Spin^c(n)} \times_{\kappa_n^+} \Delta_n^+$ ve $S^- = P_{Spin^c(n)} \times_{\kappa_n^-} \Delta_n^-$ şeklinde ifade edilir. Ayrıca n çift iken $k = \frac{n}{2}$ ve n tek iken $k = \frac{n-1}{2}$ olmak üzere S kompleks spinor demetinin kesitleri üzerinde aşağıdaki gibi $\Delta_n = \mathbb{C}^{2^k}$ boyutlu hermityen iç çarpım tanımlanabilir [10].

$$\begin{aligned} \langle, \rangle: \Gamma(S) \times \Gamma(S) &\rightarrow \mathbb{C} \\ ([p, \Psi], [p, \Phi]) &\mapsto \langle \Psi, \Phi \rangle \end{aligned}$$

$\forall [p \cdot g, \kappa(g^{-1})\Psi], [p \cdot g, \kappa(g^{-1})\Phi] \in \Gamma(S)$ için

$$\begin{aligned} \langle [p \cdot g, \kappa(g^{-1})\Psi], [p \cdot g, \kappa(g^{-1})\Phi] \rangle &= \langle \kappa(g^{-1})\Psi, g, \kappa(g^{-1})\Phi \rangle \\ &= \langle \Psi, \Phi \rangle \end{aligned}$$

temsilciden bağımsız olduğundan S spinor demedi üzerinde tanımlanan iç çarpım iyi tanımlıdır.

2. BİR VEKTÖR ALANI İLE SPİNOR ALANININ ÇARPIMI

$$\begin{aligned} \kappa: \mathbb{R}^n &\rightarrow End(\Delta_n) \\ v &\mapsto \kappa(v): \Delta_n \rightarrow \Delta_n \\ &\quad \Psi \mapsto \kappa(v)\Psi := v \cdot \Psi \end{aligned}$$

κ temsili için $\kappa(v): \Delta_n \rightarrow \Delta_n$ \mathbb{R} –lineer olduğu kolaylıkla görülür. Ayrıca κ dönüşümü $\forall v \in \mathbb{R}^n$ için aşağıdaki özellikleri sağlar.

1. $\kappa(v)^* + \kappa(v) = 0$
2. $\kappa(v)^* \kappa(v) = |v|^2$

κ dönüşümü demed üzerindeki $\kappa: TM \rightarrow End(S)$ dönüşümüne genişletmek için

$$\begin{array}{ccccc} & & Spin^c(n) & & \\ & \nearrow \tilde{g}_{\alpha\beta} & \downarrow \lambda & \searrow \rho_{st} \circ \lambda = \rho & \\ U_\alpha \cap U_\beta & \xrightarrow{g_{\alpha\beta}} & SO(n) & \xrightarrow{\rho_{st}} & Aut(\mathbb{R}^n) \end{array}$$

Diyagramında

$$\rho_{st}: SO(n) \rightarrow Aut(\mathbb{R}^n)$$

ve

$$\rho: Spin^c(n) \xrightarrow{\lambda} SO(n) \xrightarrow{\rho_{st}} Aut(\mathbb{R}^n)$$

temsiller olmak üzere, $TM = P_{Spin^c(n)} \times_{\rho} \mathbb{R}^n$ olduğundan tanjant vektörleri denklik sınıfları şeklinde de düşünülebilir.

$$\begin{aligned} \kappa: TM &\rightarrow End(S) \\ ([p, v]) &\mapsto \kappa([p, v]): S \rightarrow S \\ &([p, \Psi]) \mapsto \kappa([p, v]) ([p, \Psi]) = [p, v. \Psi] \end{aligned}$$

dönüşümü iyi tanımlıdır [10].

Bazı kaynaklarda bu koşulları sağlayan

$$\kappa: TM \rightarrow End(S)$$

dönüşümü M manifoldu üzerinde $Spin^c$ –yapısı olarak adlandırılır [3]. $\kappa: TM \rightarrow End(S)$ dönüşümü yardımıyla

$$\rho: \Lambda^2(T^*M) \rightarrow End(S)$$

dönüşümü çatılar üzerinde aşağıdaki gibi tanımlanır:

$U \subset M$ açık alt kümesi üzerinde $\{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ ortonormal çatı olmak üzere

$$\eta = \sum_{i < j} \eta_{ij} e^i \wedge e^j \rightarrow \rho(\eta) = \sum_{i < j} \eta_{ij} \kappa(e_i) \kappa(e_j)$$

dir. Bu dönüşüm aynı şekilde kompleks değerli 2 –formlara genişletilebilir [3]. Buna göre

$$\rho: \Lambda^2(T^*M) \otimes \mathbb{C} \rightarrow End(S)$$

her bir $\eta \in \Lambda^2(T^*M)$ için S^+ ve S^- alt demedleri $\rho(\eta)$ altında invaryanttır. Yani,

$$\begin{aligned} \forall \Psi \in S^+ \text{ için } \rho(\eta)(\Psi) &\in S^+, \\ \forall \Psi \in S^- \text{ için } \rho(\eta)(\Psi) &\in S^- \end{aligned}$$

Bu nedenle $\rho^+(\eta) = \rho(\eta)|_{S^+}$, $\rho^-(\eta) = \rho(\eta)|_{S^-}$ dönüşümleri indirgenir. Buna göre

$$\rho^+: \Lambda^2(T^*M) \otimes \mathbb{C} \rightarrow End(S^+)$$

Dönüşümü

$$\rho^+(\eta) = \rho^+ \left(\sum_{i < j} \eta_{ij} e^i \wedge e^j \right) = \sum_{i < j} \eta_{ij} \kappa(e_i) \kappa(e_j)$$

şeklinde ifade edilir.

3. S SPİNOR DEMEDİ ÜZERİNDE KOVARYANT TÜREV

(M, g) Riemann manifoldundaki ∇ Levi–Civita yardımıyla $P_{SO(n)}$ asli lif demedinin üzerinde ω konneksiyon 1 –formunu belirlendikten sonra, P_{S^1} üzerindeki sabit $A \in \Omega^1(M, i\mathbb{R})$ konneksiyon

1 –formu yardımıyla $P_{Spin^c(n)}$ üzerinde, aşağıdaki diyagramı değişmeli yapacak şekilde Z^A konneksiyon 1 –formu aşağıdaki gibi tanımlanabilir [6]:

$$\begin{array}{ccc} T_p P_{Spin^c(n)} & \xrightarrow{Z^A} & \mathfrak{spin}(n) \oplus i\mathbb{R} \\ \downarrow d\pi & & \downarrow \lambda_* \times l_* \\ T_{\pi(p)}(P_{SO(n)} \times P_{S^1}) & \xrightarrow{\omega \times A} & \mathfrak{so}(n) \oplus i\mathbb{R} \end{array}$$

$p \in P_{Spin^c(n)}$ ve $v \in T_p P_{Spin^c(n)}$ için

$$Z^A(v) = (\lambda_* \times l_*)^{-1} \circ (\omega \times A) \circ d\pi(v).$$

Z^A konneksiyon 1-formu yardımıyla $S = P_{Spin^c(n)} \times_{\kappa_n} \Delta_n$ spinor demedi üzerindeki ∇^A kovaryant türev operatörü $\forall \Psi \in \Gamma(S)$, $X \in \chi(M)$ için aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$\nabla_X^A \Psi = d\Psi(X) + \frac{1}{2} \sum_{i < j} \omega_{ij}(X) e_i \cdot e_j \cdot \Psi + \frac{1}{2} A(X) \Psi.$$

Bazı kaynaklarda $\frac{1}{2}A$ yerine A olarak formül ifade edilir [1].

4. DİRAC OPERATÖRÜ D_A

$\kappa: \mathbb{R}^n \rightarrow End(\Delta_n)$ lineer dönüşümü $\mu_0: \mathbb{R}^n \times \Delta_n \rightarrow \Delta_n$ bilineer dönüşümü belirler. μ_0 dönüşümü bilineer olduğundan bu dönüşüm tensor çarpımının evrensellik özelliğinden $\mu_0: \mathbb{R}^n \otimes \Delta_n \rightarrow \Delta_n$ şeklinde lineer dönüşüme genişler. Bu dönüşüm de

$$\begin{aligned} \mu: TM \otimes S &\rightarrow S \\ ([p, v], [p, \Psi]) &\mapsto [p, \mu_0(v \otimes \Psi)] \end{aligned}$$

Şeklinde demed dönüşümü belirler.

(M, g) Riemann manifold üzerindeki Dirac operatörü aşağıdaki gibi

$$D_A = \mu \circ \nabla^A: \Gamma(S) \xrightarrow{\nabla^A} \Gamma(T^*M \otimes S) \cong \Gamma(TM \otimes S) \xrightarrow{\mu} \Gamma(S)$$

bileşke işlemi ile tanımlanır. Burada T^*M ve TM arasındaki geçiş g metriği ile yapılır.

M manifoldu üzerinde $U \subset M$ açık alt kümesi olmak üzere, $\{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ yerel ortonormal çatı verildiğinde Dirac operatörünün lokal ifadesi aşağıdaki gibidir:

$$D_A \Psi = \sum_{i=1}^n e_i \cdot \nabla_{e_i}^A \Psi.$$

Dirac operatörü, M manifoldunun boyutunun çift olması durumunda

$$D_A = D_A^+ \oplus D_A^-$$

şeklinde dekompoze olur.

Özel olarak, $M = \mathbb{H}^n = \{(x_1, \dots, x_n) | x_n > 0\} \subset \mathbb{R}^n$ manifoldu üzerinde tanımlanan

$$ds^2 = \frac{1}{(x_n)^2} ((dx^1)^2 + (dx^2)^2 + \dots + (dx^n)^2)$$

(\mathbb{H}^n, ds^2) Hiperbolik uzayı tek kart ile verilebildiği için tanjant demedi aşıkardır. Dolayısıyla Hiperbolik uzayın yapı grubu $SO(n)$ ' in $G = \{Id\}$ aşık alt grubudur. Bu yüzden \mathbb{H}^n Hiperbolik uzayı $Spin^c$ – yapısına sahiptir. $Spin^c$ – yapısına sahip Hiperbolik uzayı üzerinde de yukarıda tanımlan tüm yapılar inşa edilebilir. Biz bu çalışmada öncelikle 4-boyutlu Hiperbolik uzay üzerinde klasik Seiberg–Witten denklemleri yazacağız. Daha sonra [1,2,6,9] de verilen yöntem kullanılarak 8 – boyutlu Hiperbolik uzay üzerinde genelleştirilmiş Seiberg–Witten denklemlerini ifade edeceğiz.

5. \mathbb{H}^4 ÜZERİNDE SEIBERG-WITTEN DENKLEMLERİ

Hatırlanacağı üzere, n – boyutlu yönlendirilmiş bir M Rieamann manifoldu üzerinde dV , g metriği ile indirgenmiş hacim formu olmak üzere Hodge $*$ operatörü

$$\begin{aligned} *: \Omega^k(M) &\rightarrow \Omega^{n-k}(M) \\ F &\mapsto *(F) \end{aligned}$$

$F \wedge *(F) = \langle F, F \rangle_g dV$ şeklinde verilen eşitlikle tanımlanmaktadır.
 $n = 4$ ve $k = 2$ olması durumunda

$$\begin{aligned} *: \Omega^2(M) &\rightarrow \Omega^2(M) \\ F &\mapsto *(F) \end{aligned}$$

şeklinde ve $*^2 = Id$ olup özdeğerleri ± 1 olur. Bunun sonucu olarak 2 – formların uzayı

$$\Omega^2(M) = \Omega^{2,+}(M) \oplus \Omega^{2,-}(M)$$

şeklinde dekompoze olur, burada $\Omega^{2,+}(M) = \{F \in \Omega^2(M) | *F = F\}$ ve $\Omega^{2,-}(M) = \{F \in \Omega^2(M) | *F = -F\}$ dir. $\Omega^{2,+}(M)$ ya self-dual 2 – formların uzayı, $\Omega^{2,-}(M)$ ya da anti self-dual 2 – formların uzayı denir. Buna göre herhangi bir $F \in \Omega^2(M) = \Omega^{2,+}(M) \oplus \Omega^{2,-}(M)$ 2-formunu

$$F = F^+ + F^-$$

şeklinde ayrıştırabiliriz. F^+ ya F nin self-dual kısmı F^- yede F nin anti–self dual kısmı denir. $U \subseteq M$ açığı üzerinde $\{e_1, \dots, e_4\}$ lokal orthonormal çatısı verildiğinde

$$\begin{aligned} f_1 &= e^1 \wedge e^2 + e^3 \wedge e^4 \\ f_2 &= e^1 \wedge e^3 - e^2 \wedge e^4 \\ f_3 &= e^1 \wedge e^4 + e^2 \wedge e^3 \end{aligned}$$

2 – formları $\Omega^{2,+}(M)$ nin bir çatısı olur.

Bu dekompozisyon $i\mathbb{R}$ – değerli 2 – formlar içinde

$$\Omega^2(M, i\mathbb{R}) = \Omega^{2,+}(M, i\mathbb{R}) \oplus \Omega^{2,-}(M, i\mathbb{R})$$

şeklinde olur. Benzer şekilde

$$F_A \in \Omega^2(M, i\mathbb{R}) = \Omega^{2,+}(M, i\mathbb{R}) \oplus \Omega^{2,-}(M, i\mathbb{R})$$

ayrışımında F_A nın $\Omega^{2,+}(M, i\mathbb{R})$ ye giren kısmı, F_A nın self-dual kısmı olarak adlandırılır ve F_A^+ ile gösterilir.

Seiberg-Witten denklemlerinin ikincisi olan eğrilik denklemi M manifoldu üzerindeki P_{S^1} demedi üzerindeki bir $i\mathbb{R}$ değerli A konneksiyon 1–formuna karşılık gelen F_A eğrilik 2-formunun self-dual kısmı ile bir spinor alanını eşler. Her bir $\Psi \in \Gamma(S)$ için $\Gamma(S)$ üzerindeki hermityen iç çarpımı yardımıyla

$$\begin{aligned} \Psi\Psi^*: \Gamma(S) &\rightarrow \Gamma(S) \\ \tau &\mapsto \Psi\Psi^*(\tau) = \langle \Psi, \tau \rangle \Psi \end{aligned}$$

endomorfizmi tanımlanır. Bu dönüşümün ortonormal bir çatıya göre ifadesi de aşağıdaki gibidir:

Bir Ψ spinoru $\psi_1, \psi_2 \in \mathbb{C}$ için $\Psi = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix}_{2 \times 1}$ şeklinde yazılabiliriz. Buna göre $\Psi^* = [\overline{\psi_1} \ \overline{\psi_2}]_{1 \times 2}$ olur.

O halde

$$\Psi\Psi^* = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix} [\overline{\psi_1} \ \overline{\psi_2}] = \begin{bmatrix} |\psi_1|^2 & \psi_1\overline{\psi_2} \\ \psi_2\overline{\psi_1} & |\psi_2|^2 \end{bmatrix}$$

dir. $\Psi\Psi^*$ dönüşümünün izsiz kısmı $(\Psi\Psi^*)_0$ şeklinde gösterilir ve

$$\begin{aligned} (\Psi\Psi^*)_0 &= \Psi\Psi^* - \frac{1}{2} \text{trace}(\Psi\Psi^*) \mathbb{I}_{2 \times 2} \\ &= \begin{bmatrix} \frac{|\psi_1|^2 - |\psi_2|^2}{2} & \psi_1\overline{\psi_2} \\ \psi_2\overline{\psi_1} & \frac{|\psi_1|^2 - |\psi_2|^2}{2} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

dir.

Yukarıda elde edilenlerle birlikte 4 –boyutlu M manifoldları üzerinde Seiberg–Witten denklemleri $\Psi \in \Gamma(S)$ ve P_{S^1} demedi üzerindeki $i\mathbb{R}$ değerli A konneksiyon 1–formu için

1. $D_A^+ \Psi = 0$
2. $\rho^+(F_A^+) = (\Psi\Psi^*)_0$

şeklinde ifade edilir [2,3,5,7]. Bu denklemlerin ilkinde Dirac denklemi, ikincisine ise eğrilik denklemi denir. Literatürde çok iyi bilinen klasik Seiberg–Witten denklemleri [3,4,7,10] çalışılmıştır. Ayrıca \mathbb{R}^4 üzerinde standart metrik alınarak bu denklemlerin açık ifadeleri üzerinde de çalışılmıştır [salamon ve naberin 2.kitabı interaction].

6. 4 –BOYUTLU HİPERBOLİK UZAY ÜZERİNDE SEIBERG-WITTEN DENKLEMLERİ

Bu bölümde $M = \mathbb{H}^4 = \{(x_1, \dots, x_4) | x_4 > 0\} \subset \mathbb{R}^4$ manifoldu üzerinde tanımlanan

$$ds^2 = \frac{1}{(x_4)^2} ((dx^1)^2 + (dx^2)^2 + (dx^3)^2 + (dx^4)^2)$$

Metriği göz önüne alınacaktır. (\mathbb{H}^4, ds^2) çiftine Hiperbolik uzay denir. Amacımız \mathbb{H}^4 üzerinde ki ds^2 Hiperbolik metriğini kullanarak Seiberg–Witten denklemlerini elde etmektir.

4 –boyutlu Riemannian manifoldları için kompleks 4 –spinorların vektör uzayı da 4 –boyutludur ve $\Delta_4 = \mathbb{C}^4$ ile gösterilir. $Cl_4 \cong End(\Delta_4)$ olduğundan Cl_4 kompleks Clifford cebirinin spin temsili κ aşağıdaki şekilde verilir.

$\kappa: Cl_4 \rightarrow End(\Delta_4)$,

$$\begin{aligned} \kappa(e_1) &= \begin{bmatrix} 0 & \mathbb{I} \\ \mathbb{I} & 0 \end{bmatrix}, & \kappa(e_2) &= \begin{bmatrix} 0 & \gamma_1 \\ -(\gamma_1)^* & 0 \end{bmatrix} \\ \kappa(e_3) &= \begin{bmatrix} 0 & \gamma_2 \\ -(\gamma_2)^* & 0 \end{bmatrix}, & \kappa(e_4) &= \begin{bmatrix} 0 & \gamma_3 \\ -(\gamma_3)^* & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Burada \mathbb{I} , 2×2 lik birim matris ve $i = 1,2,3$ için γ_i matrisleri aşağıdaki gibidir.

$$\gamma_1 = \begin{bmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{bmatrix}, \gamma_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}, \gamma_3 = \begin{bmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{bmatrix},$$

$\kappa_4: Cl_4 \rightarrow End(\Delta_4)$ spinor temsili yardımıyla

$$\Delta_4^+ = \{(\Psi = (\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4) \in \mathbb{C}^4 | \psi_3 = \psi_4 = 0)\} \cong \mathbb{C}^2$$

$$\Delta_4^- = \{(\Psi = (\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4) \in \mathbb{C}^4 | \psi_1 = \psi_2 = 0)\} \cong \mathbb{C}^2$$

olmak üzere

$$\Delta_4 = \Delta_4^+ \oplus \Delta_4^-$$

dekompozisyonu elde edilir.

Böylece $\Psi \in \Gamma(\Delta_4^+)$ ve $A \in \Omega^1(M, i\mathbb{R})$ konneksiyon 1 –formu için D_A^+ Dirac operatörü

$$\begin{aligned} D_A^+: \Gamma(\Delta_4^+) &\rightarrow \Gamma(\Delta_4^-) \\ \Psi &\mapsto D_A^+(\Psi) = \sum_{i=1}^4 e_i \cdot \nabla_{e_i}^A \Psi \end{aligned}$$

olur. Lokal koordinatlarda A konneksiyon 1 –formu $A_i: \mathbb{H}^4 \rightarrow i\mathbb{R}$ fonksiyonları düzgün olmak üzere

$$A = \sum_{i=1}^4 A_i dx^i \in \Omega^1(\mathbb{H}^4, i\mathbb{R})$$

şeklinde ifade edilir.

O halde A nın eğriliği F_A , $F_{ij} = \left(\frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j} \right)$, $1 \leq i < j \leq 4$ için aşağıdaki gibi

$$F_A = dA = \sum_{i < j} F_{ij} dx^i \wedge dx^j \in \Omega^2(\mathbb{H}^4, i\mathbb{R})$$

ifade edilir.

Hiperbolik uzay üzerindeki spinorların kovaryant türevini hesaplamakta kullanılan ∇^A spinor konneksiyonunu, \mathbb{R}^4 Öklidyen durumundakinden oldukça farklıdır. Çünkü Öklid metriğine karşılık gelen Levi-Civita konneksiyonun $\omega = (\omega_{ij})$ konneksiyon 1 –formun tüm girdileri sıfır olmasına karşın Hiperbolik metriğe karşılık gelen Levi-Civita konneksiyonun $\omega = (\omega_{ij})$ konneksiyon 1 –formu sıfır değildir. Hiperbolik uzay üzerindeki $\Psi \in \Gamma(\Delta_4^+)$ spinorunun $\nabla^A \Psi$ kovaryant türevi

$$\nabla^A \Psi = d\Psi + \frac{1}{2} \sum_{i < j} \omega_{ij} e_i \cdot e_j \cdot \Psi + \frac{1}{2} A \Psi$$

Şeklindedir, buradaki ω_{ij} 1–formları $g = ds^2$ Hiperbolik metriğine göre hesaplanır. Aşağıda n –boyutlu \mathbb{H}^n uzayı üzerinde ds^2 ye karşılık gelen Levi-Civita konneksiyonunun ω konneksiyon 1 –formunun ω_{ij} girdileri hesaplanmıştır. Bu hesaplamalarda [8] da verilen yöntem esas alınmıştır. Hesaplamaları genel çerçevede tutma bakımından öncelikle n –boyutlu M Riemannian manifoldunu ele alalım. $\{E_1, \dots, E_n\}$ ve $\{\Theta^1, \dots, \Theta^n\}$ sırasıyla TM ve TM^* in lokal orthonormal çatıları olsun. O halde ∇ , M^n manifoldunu üzerindeki *Levi – Civita* konneksiyonu olmak üzere ω_{ij} konneksiyon 1 –formu aşağıdaki gibi elde edilir : $\forall X \in X(M)$ için

$$\omega_{ij}(X) = \Theta^i(\nabla_X E_j)$$

Dahası

$$\nabla_X E_j = \sum_{m=1}^n \omega_{mj}(X) E_m$$

dir. Yukarıdaki eşitlik

$$d\Theta^i = -\sum_{m=1}^n \omega_{im} \wedge \Theta^m$$

şeklinde de ifade edilebilir. Eğer $\omega = [\omega_{ij}]$ konneksiyon 1 –formu matris olarak düşünülürse

$$d\Theta = -\omega \wedge \Theta$$

dir [6].

Dikkat edilirse \mathbb{R}^4 üzerindeki standart metriğe bağlı olarak ω_{ij} konneksiyon 1 –formu sıfır olduğundan spinor kovaryant türevi

$$\nabla^A \Psi = d\Psi + \frac{1}{2} A \Psi$$

şeklinde olur.

$$\mathbb{H}^4 = \{(x_1, \dots, x_4) | x_4 > 0\},$$

$$ds^2 = \frac{1}{(x_4)^2} ((dx^1)^2 + (dx^2)^2 + (dx^3)^2 + (dx^4)^2)$$

olmak üzere (\mathbb{H}^4, ds^2) bir Riemannian manifoldudur. Bu şekilde tanımlanan Riemannian manifolduna Hiperbolik uzay denir. \mathbb{H}^4 uzayı tek bir kart ile verilebildiği için tanjant demedi aşıkardır. Dolayısıyla Hiperbolik uzayın yapı grubu $SO(4)$ ' ün $G = \{Id\}$ aşık alt grubudur. Dolayısıyla \mathbb{H}^4 Hiperbolik uzayı $Spin^c$ –yapısına sahiptir. Riemannian metriğine karşılık gelen

$$\kappa(e_1) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \kappa(e_2) = \begin{bmatrix} i & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix}, \kappa(e_3) = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}, \kappa(e_4) = \begin{bmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{bmatrix}$$

matrisler yardımıyla \mathbb{H}^4 üzerinde Spinor demedi inşa edilebilir ve inşa edilen bu Spinor demedi üzerinde *Seiberg – Witten* denklemleri yazılabilir.

\mathbb{H}^4 üzerinde Seiberg–Witten denklemlerini yazmak için konneksiyon 1 –formunun hesaplanması gerekir.

$\mathbb{H}^4 = \{(x_1, \dots, x_4) | x_4 > 0\} \subset \mathbb{R}^4$ için

$$ds^2 = \frac{1}{(x_4)^2} ((dx^1)^2 + (dx^2)^2 + (dx^3)^2 + (dx^4)^2)$$

olmak üzere hiperbolik metriğe karşılık gelen matrisler $g = [g_{ij}] = [g(\partial_i, \partial_j)]$ ve $g^{-1} = [g^{ij}] = [(g_{ij})^{-1}]$ sırasıyla aşağıdaki gibidir:

$$g = \begin{bmatrix} \frac{1}{x_4^2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{x_4^2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{x_4^2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{x_4^2} \end{bmatrix} \quad g^{-1} = \begin{bmatrix} x_4^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & x_4^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & x_4^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & x_4^2 \end{bmatrix}$$

g_{ij} ve g^{ij} matrisler, $g_{ij} = \frac{1}{x_4^2} \delta_{ij}$ ve $g^{ij} = x_4^2 \delta_{ij}$ şeklinde ifade edilebilir. γ_{ij} ve γ^{ij} sırasıyla g_{ij} ve g^{ij} nin karekökü olmak üzere, $\gamma_{ij} = \frac{1}{x_4} \delta_{ij}$ ve $\gamma^{ij} = x_4 \delta_{ij}$ olur. O halde $\Theta^i = \sum_{i=1}^4 \gamma_{ij} dx^i$ ler Gram-Schmid ortonormalleştirme yöntemi ile elde edilen koframeler olur (detaylar için bakınız [6]).

Konneksiyon 1-formunun tanımından

$$d\Theta = \frac{1}{(x_4)^2} (dx^1 \wedge dx^4 + dx^2 \wedge dx^4 + dx^3 \wedge dx^4)$$

ve

$$\omega = \frac{1}{x_4} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -dx^1 \\ 0 & 0 & 0 & -dx^2 \\ 0 & 0 & 0 & -dx^3 \\ dx^1 & dx^2 & dx^3 & 0 \end{bmatrix}$$

olur.

$D_A^+ \Psi = 0$ Dirac denkleminin açık ifadesi \mathbb{H}^4 üzerinde Hiperbolik metriğe bağlı olarak aşağıdaki gibidir:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi_1}{\partial x_1} x_4 + A_1 \psi_1 x_4 &= i \left(\frac{\partial \psi_1}{\partial x_2} + A_2 \psi_1 \right) x_4 + \frac{\partial \psi_2}{\partial x_3} x_4 + A_3 \psi_2 x_4 \\ &\quad + i \left(\frac{\partial \psi_2}{\partial x_4} + A_4 \psi_2 \right) x_4 + 3i \psi_2 \\ \frac{\partial \psi_2}{\partial x_1} x_4 + A_1 \psi_2 x_4 &= -i \left(\frac{\partial \psi_2}{\partial x_2} + A_2 \psi_2 \right) x_4 - \frac{\partial \psi_1}{\partial x_3} x_4 - A_3 \psi_1 x_4 \\ &\quad + i \left(\frac{\partial \psi_1}{\partial x_4} + A_4 \psi_1 \right) x_4 - 3i \psi_1 \end{aligned}$$

Seiberg–Witten denklemlerinin ikinci denklemi olan eğrilik denklemi $\rho^+(F_A^+) = (\Psi \Psi^*)_0$

$$F_{12} + F_{34} = -\frac{i}{2x_4^2} (|\psi_1|^2 - |\psi_2|^2),$$

$$F_{13} - F_{24} = \frac{1}{2x_4^2} (\psi_1 \bar{\psi}_2 - \psi_2 \bar{\psi}_1),$$

$$F_{14} + F_{23} = -\frac{i}{2x_4^2} (\psi_1 \bar{\psi}_2 + \psi_2 \bar{\psi}_1).$$

şeklinde elde edilir.

7. \mathbb{H}^8 ÜZERİNDE SEIBERG-WITTEN DENKLEMLERİ

Seiberg–Witten denklemlerinin ilki olan $D_A \Psi = 0$ Dirac denkleminin herhangi boyuttaki herhangi bir $Spin^c$ yapısı için anlamlı olmasına karşın, bu denklemlerden ikincisini ifade etmekte kullanılan Hodge anlamında kendine duallığın yüksek boyutta doğal bir genellemesi yoktur. Biz bu çalışmada $Spin(7)$ yapısına sahip M manifoldu üzerinde ϕ temel 4 –formu yardımı ile 2–formların uzayının $\Omega^2(M) = \Omega_7^2(M) \oplus \Omega_{21}^2(M)$ ‘nin

$$\Omega_7^2(M) = \{\omega \in \Omega^2(M) \mid *(\Phi \wedge \omega) = 3\omega\}$$

$$\Omega_{21}^2(M) = \{\omega \in \Omega^2(M) \mid *(\Phi \wedge \omega) = -\omega\}$$

şeklindeki ayrışımından $\Omega_7^2(M)$ yi 2–formların self–dual uzayı olarak göz önüne alacağız (Bkz. [1,]). $U \subseteq M$ açığı üzerinde $\{e_1, \dots, e_8\}$ lokal orthonormal çatası verildiğinde

$$\begin{aligned} f_1 &= e^1 \wedge e^5 + e^2 \wedge e^6 + e^3 \wedge e^7 + e^4 \wedge e^8 \\ f_2 &= e^1 \wedge e^2 + e^3 \wedge e^4 - e^5 \wedge e^6 - e^7 \wedge e^8 \\ f_3 &= e^1 \wedge e^6 - e^2 \wedge e^5 - e^3 \wedge e^8 + e^4 \wedge e^7 \\ f_4 &= e^1 \wedge e^3 - e^2 \wedge e^4 - e^5 \wedge e^7 + e^6 \wedge e^8 \\ f_5 &= e^1 \wedge e^7 + e^2 \wedge e^8 - e^3 \wedge e^5 - e^4 \wedge e^6 \\ f_6 &= e^1 \wedge e^4 + e^2 \wedge e^3 - e^5 \wedge e^8 - e^6 \wedge e^7 \\ f_7 &= e^1 \wedge e^8 - e^2 \wedge e^7 - e^3 \wedge e^6 - e^4 \wedge e^5 \end{aligned}$$

2 –formları $\Omega^{2,+}(M)$ nin bir çatası olur.

Dahası bu şekilde verilen dekompozisyon aşağıdaki gibi $i\mathbb{R}$ değerli 2 –formların dekompozisyonu şeklinde de ifade edilebilir:

$$\Omega_7^2(M, i\mathbb{R}) = \{\omega \in \Omega^2(M, i\mathbb{R}) \mid *(\Phi \wedge \omega) = 3\omega\}$$

$$\Omega_{21}^2(M, i\mathbb{R}) = \{\omega \in \Omega^2(M, i\mathbb{R}) \mid *(\Phi \wedge \omega) = -\omega\}$$

F_A nın $\Omega_7^2(M, i\mathbb{R})$ ye düşen parçasına F_A nın self–dual kısmı denir ve F_A^+ ile gösterilir. Burada

$$F_A^+ = Proj_{\Omega_7^2(M, i\mathbb{R})} F_A$$

dır. Şimdi daha önce tanımlanan

$$\rho^+: \Lambda^2(T^*M) \otimes \mathbb{C} \rightarrow End(S^+)$$

dönüşümü yardımı ile $\rho^+(\Omega_7^2(M, i\mathbb{R})) = W'$ alt demedini alalım. Ayrıca $\Psi\Psi^*$ in W' üstüne dik izdüşümü $(\Psi\Psi^*)^+ = Proj_{W'} \Psi\Psi^*$ olsun. Buna göre 8 –boyutlu (M, g, ϕ) $Spin(7)$ –yapısına sahip M manifoldu üzerindeki Seiberg–Witten denklemleri

1. $D_A^+ \Psi = 0$
2. $\rho^+(F_A^+) = (\Psi\Psi^*)^+$

şeklinde ifade edilmiştir [1]. [1] de ele alınan çalışmada özel olarak $M = \mathbb{R}^8$ durumunda standart metric alınarak Seiberg–Witten denklemlerinin açık ifadeleri verilmiştir. Bu çalışmada [1] de verilen yöntemle $M = \mathbb{H}^8 = \{(x_1, \dots, x_8) | x_8 > 0\} \subset \mathbb{R}^8$ uzayı üzerinde tanımlanan

$$ds^2 = \frac{1}{(x_8)^2} ((dx^1)^2 + (dx^2)^2 + (dx^3)^2 + \dots + (dx^8)^2)$$

Hiperbolik metrik için Seiberg–Witten denklemleri elde edilecektir.

\mathbb{H}^8 uzayı tek bir kartla ifade edilebildiği için yapı grubu $G = \{Id\} \subseteq Spin(7) \subseteq SO(8)$ olduğundan $Spin(7)$ yapısına sahiptir. Bu sebeble \mathbb{H}^8 manifoldu hem $Spin^c$ – yapısına sahiptir, hemde 2 –formların uzayı $\Omega^2(\mathbb{H}^8) = \Omega_7^2(\mathbb{H}^8) \oplus \Omega_{21}^2(\mathbb{H}^8)$ şeklinde dekompoze olur. Bu durum \mathbb{H}^8 üzerinde Dirac ve eğrilik denklemlerini yazmamızı mümkün kılar.

8 –boyutlu uzaylarda kompleks spinorların vektör uzayı 16 –boyutludur ve $\Delta_8 = \mathbb{C}^{16}$ ile gösterilir. Hesaplamalarımızda $\mathbb{C}l_8$ kompleks Clifford cebirinin [6] da verilen aşağıdaki spinor temsiliğini kullanacağız:

$$\begin{aligned} \kappa: \mathbb{C}l_8 &\rightarrow End(\Delta_8) \\ \kappa(e_1) &= \begin{bmatrix} 0 & \mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & 0 \end{bmatrix}, & \kappa(e_2) &= \begin{bmatrix} 0 & \gamma_1 \\ -\gamma_1 & 0 \end{bmatrix}, & \kappa(e_3) &= \begin{bmatrix} 0 & \gamma_2 \\ -\gamma_2 & 0 \end{bmatrix} \\ \kappa(e_4) &= \begin{bmatrix} 0 & \gamma_3 \\ -\gamma_3 & 0 \end{bmatrix}, & \kappa(e_5) &= \begin{bmatrix} 0 & \gamma_4 \\ -\gamma_4 & 0 \end{bmatrix}, & \kappa(e_6) &= \begin{bmatrix} 0 & \gamma_5 \\ -\gamma_5 & 0 \end{bmatrix} \\ \kappa(e_7) &= \begin{bmatrix} 0 & \gamma_6 \\ -\gamma_6 & 0 \end{bmatrix}, & \kappa(e_8) &= \begin{bmatrix} 0 & \gamma_7 \\ -\gamma_7 & 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Burada $\mathbb{I}, 8 \times 8$ lik birim matristir ve $i = 1, \dots, 7$ için γ_i matrisleri aşağıdaki gibidir:

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \gamma_2 &= \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ \gamma_3 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \gamma_4 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ \gamma_5 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \gamma_6 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ \gamma_7 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

γ_i matrisleri, $\mathcal{Cl}_7 \cong \text{End}(\Delta_8) \oplus \text{End}(\Delta_8)$ izomorfizmi altında \mathcal{Cl}_7 cebirinin üreteçlerinin görüntülerinin birinci izdüşüm altındaki görüntüleridir.

\mathbb{R}^8 üzerinde standart metriğe bağlı olarak $\omega_{ij} = g(\nabla e_i, e_j)$ konneksiyon 1 –formu sıfır olduğundan $\nabla^A \Psi = d\Psi + \frac{1}{2} A\Psi$ olur. Fakat \mathbb{H}^8 üzerinde durum böyle değildir. \mathbb{H}^8 üzerinde konneksiyon 1 –formu sıfırdan farklıdır.

$\mathbb{H}^8 = \{(x_1, \dots, x_8) | x_8 > 0\} \subset \mathbb{R}^8$ Hiperboklik uzayı üzerinde verilen

$$ds^2 = \frac{1}{(x_8)^2} ((dx^1)^2 + (dx^2)^2 + (dx^3)^2 + \dots + (dx^8)^2)$$

Hiperbolik metrik ile ω_{ij} konneksiyon 1 –formu 4 –boyutta kullanılan metodla aşağıdaki gibi elde edilir [6]:

$$\omega = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{dx^1}{x_8} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{dx^2}{x_8} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{dx^3}{x_8} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{dx^4}{x_8} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{dx^5}{x_8} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{dx^6}{x_8} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{dx^7}{x_8} \\ \frac{dx^1}{x_8} & \frac{dx^2}{x_8} & \frac{dx^3}{x_8} & \frac{dx^4}{x_8} & \frac{dx^5}{x_8} & \frac{dx^6}{x_8} & \frac{dx^7}{x_8} & 0 \end{bmatrix}$$

Tüm bu elde edilenlerle birlikte [6] da ele alınan $Spin^c$ –yapısı aşağıdaki Dirac denkleminde yerine yazılırsa

$$D_A^+ \Psi = \sum_{i=1}^8 e_i \cdot \nabla_{e_i}^A \Psi = d\Psi(e_i) + \frac{1}{2} \sum_{i < j} \omega_{ij}(e_i) e_i \cdot e_j \cdot \Psi + A(e_i) \Psi$$

elde edilir. \mathbb{H}^8 üzerinde Hiperbolik metriğe bağlı olarak elde edilen Dirac denkleminin açık ifadesi aşağıdaki gibi bulunur:

$$\left(-\frac{\partial \psi_1}{\partial x_1} + \frac{\partial \psi_2}{\partial x_3} + \frac{\partial \psi_3}{\partial x_5} + \frac{\partial \psi_4}{\partial x_7} + \frac{\partial \psi_5}{\partial x_2} + \frac{\partial \psi_6}{\partial x_4} + \frac{\partial \psi_7}{\partial x_6} + \frac{\partial \psi_8}{\partial x_8} \right) x_8 + (-A_1 \psi_1 + A_2 \psi_5 + A_3 \psi_2 + A_4 \psi_6 + A_5 \psi_3 + A_6 \psi_7 + A_7 \psi_4 + A_8 \psi_8) x_8 + 5\psi_8 = 0$$

$$\left(-\frac{\partial \psi_1}{\partial x_3} - \frac{\partial \psi_2}{\partial x_1} + \frac{\partial \psi_3}{\partial x_7} - \frac{\partial \psi_4}{\partial x_5} - \frac{\partial \psi_5}{\partial x_4} + \frac{\partial \psi_6}{\partial x_2} + \frac{\partial \psi_8}{\partial x_6} - \frac{\partial \psi_7}{\partial x_8} \right) x_8 + (-A_1 \psi_2 + A_2 \psi_6 - A_3 \psi_1 - A_4 \psi_5 - A_5 \psi_4 + A_6 \psi_8 + A_7 \psi_3 - A_8 \psi_7) x_8 - 5\psi_7 = 0$$

$$\left(-\frac{\partial \psi_1}{\partial x_5} - \frac{\partial \psi_2}{\partial x_7} - \frac{\partial \psi_3}{\partial x_1} + \frac{\partial \psi_4}{\partial x_3} - \frac{\partial \psi_5}{\partial x_6} + \frac{\partial \psi_7}{\partial x_2} - \frac{\partial \psi_8}{\partial x_4} + \frac{\partial \psi_6}{\partial x_8} \right) x_8 + (-A_1 \psi_3 + A_2 \psi_7 + A_3 \psi_4 - A_4 \psi_8 - A_5 \psi_1 - A_6 \psi_5 - A_7 \psi_2 + A_8 \psi_6) x_8 + 5\psi_6 = 0$$

$$\left(-\frac{\partial\psi_1}{\partial x_7} + \frac{\partial\psi_2}{\partial x_5} - \frac{\partial\psi_3}{\partial x_3} - \frac{\partial\psi_4}{\partial x_1} - \frac{\partial\psi_6}{\partial x_6} + \frac{\partial\psi_7}{\partial x_4} + \frac{\partial\psi_8}{\partial x_2} - \frac{\partial\psi_5}{\partial x_8}\right)x_8 + (-A_1\psi_4 + A_2\psi_8 - A_3\psi_3 + A_4\psi_7 + A_5\psi_2 - A_6\psi_6 - A_7\psi_1 - A_8\psi_5)x_8 - 5\psi_5 = 0$$

$$\left(-\frac{\partial\psi_1}{\partial x_2} + \frac{\partial\psi_2}{\partial x_4} + \frac{\partial\psi_3}{\partial x_6} - \frac{\partial\psi_5}{\partial x_1} - \frac{\partial\psi_6}{\partial x_3} - \frac{\partial\psi_7}{\partial x_5} - \frac{\partial\psi_8}{\partial x_7} + \frac{\partial\psi_4}{\partial x_8}\right)x_8 + (-A_1\psi_5 - A_2\psi_1 - A_3\psi_6 + A_4\psi_2 - A_5\psi_7 + A_6\psi_3 - A_7\psi_8 + A_8\psi_4)x_8 + 5\psi_4 = 0$$

$$\left(-\frac{\partial\psi_1}{\partial x_4} - \frac{\partial\psi_2}{\partial x_2} + \frac{\partial\psi_4}{\partial x_6} + \frac{\partial\psi_5}{\partial x_3} - \frac{\partial\psi_6}{\partial x_1} - \frac{\partial\psi_7}{\partial x_7} + \frac{\partial\psi_8}{\partial x_5} - \frac{\partial\psi_3}{\partial x_8}\right)x_8 + (-A_1\psi_6 - A_2\psi_2 + A_3\psi_5 - A_4\psi_1 + A_5\psi_8 + A_6\psi_4 - A_7\psi_7 - A_8\psi_3)x_8 - 5\psi_3 = 0$$

$$\left(-\frac{\partial\psi_1}{\partial x_6} - \frac{\partial\psi_3}{\partial x_2} - \frac{\partial\psi_4}{\partial x_4} + \frac{\partial\psi_5}{\partial x_5} + \frac{\partial\psi_6}{\partial x_7} - \frac{\partial\psi_7}{\partial x_1} - \frac{\partial\psi_8}{\partial x_3} + \frac{\partial\psi_2}{\partial x_8}\right)x_8 + (-A_1\psi_7 - A_2\psi_3 - A_3\psi_8 - A_4\psi_4 + A_5\psi_5 - A_6\psi_1 + A_7\psi_6 + A_8\psi_2)x_8 + 5\psi_2 = 0$$

$$\left(-\frac{\partial\psi_2}{\partial x_6} + \frac{\partial\psi_3}{\partial x_4} - \frac{\partial\psi_4}{\partial x_2} + \frac{\partial\psi_5}{\partial x_7} - \frac{\partial\psi_6}{\partial x_5} + \frac{\partial\psi_7}{\partial x_3} - \frac{\partial\psi_8}{\partial x_1} - \frac{\partial\psi_1}{\partial x_8}\right)x_8 + (-A_1\psi_8 - A_2\psi_4 + A_3\psi_7 + A_4\psi_3 - A_5\psi_6 - A_6\psi_2 + A_7\psi_5 - A_8\psi_1)x_8 - 5\psi_1 = 0$$

Eğrilik denklemi ise $F_A^+ = Proj_{\Omega^2(\mathbb{H}^8, i\mathbb{R})} F_A = \sum_{i=1}^7 \frac{\langle f_i, F_A \rangle}{\langle f_i, f_i \rangle} f_i$ olmak üzere

$$\begin{aligned} F_{15} + F_{26} + F_{37} + F_{48} &= \frac{1}{4x^8} (\psi_1\bar{\psi}_3 - \psi_3\bar{\psi}_1 - \psi_2\bar{\psi}_4 + \psi_4\bar{\psi}_2 - \psi_5\bar{\psi}_7 + \psi_7\bar{\psi}_5 - \psi_6\bar{\psi}_8 + \psi_8\bar{\psi}_6) \\ F_{12} + F_{34} - F_{56} - F_{78} &= \frac{1}{4x^8} (\psi_1\bar{\psi}_5 - \psi_5\bar{\psi}_1 - \psi_2\bar{\psi}_6 + \psi_6\bar{\psi}_2 + \psi_3\bar{\psi}_7 - \psi_7\bar{\psi}_3 + \psi_4\bar{\psi}_8 - \psi_8\bar{\psi}_4) \\ F_{16} - F_{25} - F_{38} + F_{47} &= \frac{1}{4x^8} (\psi_1\bar{\psi}_7 - \psi_7\bar{\psi}_1 + \psi_2\bar{\psi}_8 - \psi_8\bar{\psi}_2 - \psi_3\bar{\psi}_5 + \psi_5\bar{\psi}_3 + \psi_4\bar{\psi}_6 - \psi_6\bar{\psi}_4) \\ F_{13} - F_{24} - F_{57} + F_{68} &= \frac{1}{4x^8} (\psi_1\bar{\psi}_2 - \psi_2\bar{\psi}_1 + \psi_3\bar{\psi}_4 - \psi_4\bar{\psi}_3 + \psi_5\bar{\psi}_6 - \psi_6\bar{\psi}_5 - \psi_7\bar{\psi}_8 + \psi_8\bar{\psi}_7) \\ F_{17} + F_{28} - F_{35} - F_{46} &= \frac{1}{4x^8} (\psi_1\bar{\psi}_4 - \psi_4\bar{\psi}_1 + \psi_2\bar{\psi}_3 - \psi_3\bar{\psi}_2 - \psi_5\bar{\psi}_8 + \psi_8\bar{\psi}_5 + \psi_6\bar{\psi}_7 - \psi_7\bar{\psi}_6) \\ F_{14} + F_{23} - F_{58} - F_{67} &= \frac{1}{4x^8} (\psi_6\bar{\psi}_1 - \psi_1\bar{\psi}_6 - \psi_2\bar{\psi}_5 + \psi_5\bar{\psi}_2 - \psi_3\bar{\psi}_8 + \psi_8\bar{\psi}_3 + \psi_4\bar{\psi}_7 - \psi_7\bar{\psi}_4) \\ F_{18} - F_{27} - F_{36} - F_{45} &= \frac{1}{4x^8} (\psi_1\bar{\psi}_8 - \psi_8\bar{\psi}_1 - \psi_2\bar{\psi}_7 + \psi_7\bar{\psi}_2 - \psi_3\bar{\psi}_6 + \psi_6\bar{\psi}_3 - \psi_4\bar{\psi}_5 - \psi_5\bar{\psi}_4) \end{aligned}$$

şeklindedir.

KAYNAKLAR

- [1] Bilge AH, Dereli T, Koçak Ş. Monopole equations on 8-manifolds with $Spin(7)$ holonomy, Commun Math Phys 1999; 203(1): 21–30.
- [2] Tian G. Gauge theory and calibrated geometry I, Annals of Math 2000; 151(1):193-268.
- [3] Salamon D. Spin geometry and Seiberg–Witten invariants, Preprint.
- [4] Witten E. Monopoles and four manifolds, Math Res Lett 1994; 1:769-796.
- [5] Naber GL. Topology, Geometry, and Gauge Fields, Foundations, Springer–Verlag, New York, Berlin, 1997.

- [6] Değirmenci N, Özdemir N. Seiberg–Witten like equations on 8-manifolds with structure group $Spin(7)$, Journal of Dynamical System and Geometric Theories 2009; 7(1): 21-39.
- [7] Donaldson,SK, Kronheimer PB. The geometry of four-manifolds, Oxford Mathematical Monographs, Oxford University Press, 1990.
- [8] Sternberg S. Curvature in Mathematics and Physics, Dover Publications, New York, 2012.
- [9] Karapazar Ş. Seiberg–Witten equations on 8-dimensional $SU(4)$ –structure, International Journal of Geometric Methods in Modern Physics 2013; 10(3): 1220032.
- [10] Friedrich T. Dirac operators in Riemannian geometry, Graduate Studies in Mathematics, American Mathematical Society, Providence, Rhode Island, 25, 2000.

A NOTE ON CONNECTION FORMS ON THE QUATERNIONIC HOPF BUNDLE

Nülifer ÖZDEMİR *

Department of Mathematics, Faculty of Science, Anadolu University, 26470, Eskişehir, Turkey

ABSTRACT

It is known that there exists a family of connection 1-forms depending on two parameters on the standard quaternionic Hopf bundle. This family is constructed by using the canonical connection 1-form. In this work, the self duality and the anti-self duality of these connection 1-forms are investigated. Parameters for which the family of connection 1-forms are self dual and anti-self dual are determined.

Keywords: Principal fibre bundle, Connection 1-form, Self (anti-self) dual form, Instanton

KUATERNİYONİK HOPF DEMETİ ÜZERİNDE BAĞLANTI FORMLARI ÜZERİNE BİR NOT

ÖZET

Standart kuaterniyonik Hopf demeti üzerinde iki parametreye bağlı bağlantı formlarının bir ailesinin varlığı bilinmektedir. Bu bağlantı formların ailesi kanonik konneksiyon 1-formu kullanılarak inşa edilmiştir. Bu çalışmada, bu bağlantı 1-formlarının self dual ve anti-self dualiteği araştırılmıştır. Bu bağlantı 1-formların hangi parametreler için self dual ya da anti-self dual olduğu belirlenmiştir.

Anahtar Kelimeler: Asli lif demeti, Bağlantı 1-formu, Self (anti-self) dual form, İstanton

1. INTRODUCTION

It is known that instantons are important for the topological invariants of 4-manifolds [1,2]. Geometrically, instantons are connection 1-forms (gauge potentials) on principle fiber bundles over 4-dimensional manifolds whose curvature 2-forms (gauge fields associated with gauge potentials) are self-dual (or anti-self dual, when orientation is reversed). The natural examples of instantons are given on the standard quaternionic Hopf bundle [1,3,4]. Actually, self-dual (or anti self-dual) connection 1-forms satisfy the Yang-Mills equations. Earlier, special solutions to the Yang-Mills equations were given in [3]. These solutions (the BPST instantons) are called pseudoparticles. After this work, Trautman showed that [5] the solutions of the Yang-Mills equations (the BPST instantons) correspond to the canonical connections on the complex and quaternionic Hopf bundles $S^1 \rightarrow S^3 \rightarrow S^2$ and $S^3 \rightarrow S^7 \rightarrow S^4$. In his work, nontrivial solutions of Maxwell and Yang-Mills equations are constructed and the curvature 2-form (electromagnetic field) \mathcal{F} is self dual ($*\mathcal{F} = \mathcal{F}$) on the two dimensional complex projective space with the Fubini-Study metric. On the other hand, Minami [6] produced two specific connections on S^7 by using Gauge transformations and showed that the gauge potentials which are the pullbacks of these two connections are identical with solutions of $SU(2)$ Yang-Mills equations. There also exist similar results for some higher dimensions. Corrigan, Devchand and Fairlie studied the gauge field equation in dimensions greater than four [7]. In [8], the Hopf bundle $S^7 \rightarrow S^{15} \rightarrow S^8$ is considered and a solution of eight dimensional Euclidean Yang-Mills field equation is obtained.

*Corresponding Author: nozdemir@anadolu.edu.tr

A family of connection 1-forms depending on n parameters is given in [9] on complex and quaternionic Hopf bundles $S^1 \rightarrow S^{2n-1} \rightarrow \mathbb{C}P_n$ and $S^3 \rightarrow S^{4n-1} \rightarrow \mathbb{H}P_n$, respectively. These connections are expressed in the following theorem:

Theorem 1 The $i\text{Im}\mathbb{C}$ -valued 1-form

$$\omega_{(r_1, r_2, \dots, r_n)} = i \text{Im} \left(\frac{\|z_1\|^{r_1} \bar{z}_1 dz_1 + \|z_2\|^{r_2} \bar{z}_2 dz_2 + \dots + \|z_n\|^{r_n} \bar{z}_n dz_n}{\|z_1\|^{r_1+2} + \|z_2\|^{r_2+2} + \dots + \|z_n\|^{r_n+2}} \right)$$

on S^{2n-1} is a connection 1-form on the complex Hopf bundle $S^1 \rightarrow S^{2n-1} \rightarrow \mathbb{C}P_n$, where r_1, r_2, \dots, r_n are positive real numbers.

The $\text{Im}(\mathbb{H})$ -valued 1-form

$$\omega_{(s_1, s_2, \dots, s_n)} = \text{Im} \left(\frac{\|q_1\|^{s_1} \bar{q}_1 dq_1 + \|q_2\|^{s_2} \bar{q}_2 dq_2 + \dots + \|q_n\|^{s_n} \bar{q}_n dq_n}{\|q_1\|^{s_1+2} + \|q_2\|^{s_2+2} + \dots + \|q_n\|^{s_n+2}} \right)$$

on S^{4n-1} is a connection 1-form on the complex Hopf bundle $S^3 \rightarrow S^{4n-1} \rightarrow \mathbb{H}P_n$, where s_1, s_2, \dots, s_n are positive real numbers.

In this work, we investigate the duality properties of the two parametric family of connection 1-forms

$$\omega_{(r,s)} = \text{Im} \left(\frac{\|q_1\|^r \bar{q}_1 dq_1 + \|q_2\|^s \bar{q}_2 dq_2}{\|q_1\|^{r+2} + \|q_2\|^{s+2}} \right) \quad (1.1)$$

to obtain new Yang-Mills solutions on the quaternionic Hopf bundle $S^3 \rightarrow S^7 \rightarrow S^4$. For $r = s = 0$, $\omega_{(0;0)}$ coincides with the canonical connection on the quaternionic Hopf bundle.

2. PRELIMINARIES

Now, let us explain the materials which will be used in this work. One of these, is the principal fibre bundle which is one of the most fundamental concepts of differential geometry and topology. A principal fiber bundle consists of three manifolds G, P, M which are base space, total space and fiber (a Lie group), respectively; π is a differentiable map of P onto M and $\sigma : P \times G \rightarrow P$, $\sigma(p, g) = p \cdot g$ is a right action of G on P such that following conditions are satisfied:

1. $\pi(p \cdot g) = \pi(p)$, for all $p \in P$ and $g \in G$.
2. (Local Triviality): For each $m \in M$, there exists an open neighborhood U and a diffeomorphism $\Psi : \pi^{-1}(U) \rightarrow U \times G$ such that $\Psi(p) = (\pi(p), \psi(p))$, where $\psi : \pi^{-1}(U) \rightarrow G$ satisfies

$$\psi(p \cdot g) = \psi(p) \cdot g,$$

for all $p \in \pi^{-1}(U)$ and $g \in G$.

Another basic concept is connection 1-form, which is a Lie algebra valued 1-form, on a principal fibre bundle and has an important role in geometry, topology and mathematical physics (see [4]). Hopf bundles are specific examples of principal fibre bundles. There are canonical connection 1-forms on Hopf bundles $S^3 \rightarrow S^7 \rightarrow S^4$ and $S^1 \rightarrow S^3 \rightarrow S^2$. These connection 1-forms are explicitly expressed in [4] and are generalized to higher dimensions in [9].

Consider the quaternionic Hopf bundle $S^3 \rightarrow S^7 \rightarrow \mathbb{H}P_1 \cong S^4$,

where

$$S^7 = \{(q_1, q_2) \in \mathbb{H}^2 : \|q_1\|^2 + \|q_2\|^2 = 1\}.$$

There is a right action of S^3 on S^7 given by

$$(q_1, q_2) \cdot g = (q_1 g, q_2 g),$$

where $(q_1, q_2) \in S^7$ and $g \in S^3$. The Lie algebra of S^3 can be identified with $Im\mathbb{H}$. The projection map of this bundle is $\pi(q_1, q_2) = [q_1, q_2] \in \mathbb{H}P_1 \cong S^4$. Standard trivializations (U_1, Ψ_1) and (U_2, Ψ_2) are as follows:

$$U_1 = \{[q_1, q_2] \in \mathbb{H}P_1 : q_1 \neq 0\}, \quad U_2 = \{[q_1, q_2] \in \mathbb{H}P_1 : q_2 \neq 0\},$$

$$\Psi_1: \pi^{-1}(U_1) \rightarrow U_1 \times S^3, \quad \Psi_1(q_1, q_2) = \left([q_1, q_2], \frac{q_1}{\|q_1\|}\right),$$

$$\Psi_2: \pi^{-1}(U_2) \rightarrow U_2 \times S^3, \quad \Psi_2(q_1, q_2) = \left([q_1, q_2], \frac{q_2}{\|q_2\|}\right)$$

and inverses of Ψ_1 and Ψ_2 are

$$\Phi_1 = (\Psi_1)^{-1}: U_1 \times S^3 \rightarrow \pi^{-1}(U_1), \quad \Phi_1([q_1, q_2], g) = (\|q_1\|g, q_2(q_1)^{-1}\|q_1\|g),$$

$$\Phi_2 = (\Psi_2)^{-1}: U_2 \times S^3 \rightarrow \pi^{-1}(U_2), \quad \Phi_2([q_1, q_2], g) = (q_1(q_2)^{-1}\|q_2\|g, \|q_2\|g),$$

where $g \in S^3$. Canonical local cross-sections induced by local trivializations (U_1, Ψ_1) and (U_2, Ψ_2) are

$$s_1: U_1 \rightarrow \pi^{-1}(U_1) \subset S^7, \quad s_1([q_1, q_2]) = \left(\|q_1\|, \frac{q_2\|q_1\|}{q_1}\right),$$

$$s_2: U_2 \rightarrow \pi^{-1}(U_2) \subset S^7, \quad s_2([q_1, q_2]) = \left(\frac{q_1\|q_2\|}{q_2}, \|q_2\|\right).$$

The diffeomorphisms corresponding to standard coordinate neighborhoods U_1 and U_2 on $\mathbb{H}P_1$ are

$$\phi_1: U_1 \rightarrow \mathbb{H} \cong \mathbb{R}^4, \quad \phi_1([q_1, q_2]) = q_2 q_1^{-1}$$

and

$$\phi_2: U_2 \rightarrow \mathbb{H} \cong \mathbb{R}^4, \quad \phi_2([q_1, q_2]) = q_1 q_2^{-1}.$$

Thus, for all $q \in \mathbb{H} - \{0\}$, one has

$$(s_1 \circ \phi_1^{-1})(q) = \frac{1}{\sqrt{1+\|q\|^2}}(1, q),$$

$$(s_2 \circ \phi_2^{-1})(q) = \frac{1}{\sqrt{1+\|q\|^2}}(q, 1).$$

Details can be found in [1, 4]. It is known that the canonical connection 1-form on the quaternionic Hopf bundle $S^3 \rightarrow S^7 \rightarrow S^4$

$$\omega = \text{Im}(\bar{q}_1 dq_1 + \bar{q}_2 dq_2)$$

is anti-self dual (or self dual) [1, 3, 4]. In [9], duality or anti-self duality of families of connection 1-forms $\omega_{(r,s)}$ are not investigated. In this work, similar calculations are done for the two-parameters family of $\text{Im}(\mathbb{H})$ -valued connection 1-forms

$$\omega_{(r,s)} = \text{Im} \left(\frac{\|q_1\|^r \bar{q}_1 dq_1 + \|q_2\|^s \bar{q}_2 dq_2}{\|q_1\|^{r+2} + \|q_2\|^{s+2}} \right),$$

on the quaternionic Hopf bundle $S^3 \rightarrow S^7 \rightarrow S^4$ to investigate the duality properties, where r and s are positive real numbers. Note that, if r and s are negative, then $\omega_{(r,s)}$ are not defined for $\|q_1\| = 0$, $\|q_2\| = 0$.

Let M be a 4-dimensional Riemannian manifold. It is known that in 4-dimension the Hodge star operator is an involution on 2-forms, that is

$$*:\Lambda^2(M) \rightarrow \Lambda^2(M) \text{ and } *^2 = \text{id}.$$

The 2-forms associated to the eigenvalue +1 are called self dual and the 2-forms associated to the eigenvalue -1 are called anti-self dual forms. Then, the space of 2-forms decomposes into self dual and anti-self dual parts. Let $\{e_0, e_1, e_2, e_3\}$ be a local orthonormal frame on an open set $U \subset M$ and e^i the 1-form dual to e_i , for $0 \leq i \leq 3$. In local coordinates

$$e^0 \wedge e^1 - e^2 \wedge e^3, \quad e^0 \wedge e^2 + e^1 \wedge e^3, \quad e^0 \wedge e^3 - e^1 \wedge e^2$$

is a basis for self dual forms and

$$e^0 \wedge e^1 + e^2 \wedge e^3, \quad e^0 \wedge e^2 - e^1 \wedge e^3, \quad e^0 \wedge e^3 + e^1 \wedge e^2$$

is a basis for anti-self dual forms.

3. THE DUALITY OF CONNECTIONS

It is proved in [1, 3, 4] that pullbacks of the canonical connection 1-form ω to $\mathbb{R}^4 \cong \mathbb{H}$ by $s_1 \circ \phi_1^{-1}$ and $s_2 \circ \phi_2^{-1}$ are anti-self-dual. In this section, we compute pullbacks of connection 1-forms $\omega_{(r,s)}$ to \mathbb{H} by the canonical local cross section s_1 and the standard chart (U_1, Ψ_1) on $\mathbb{H}P_1$ by similar arguments to [4]. Let $k := s_1 \circ \phi_1^{-1}: \mathbb{H} \rightarrow \pi^{-1}(U_1)$. Then, one can evaluate

$$(k^* \omega_{(r,s)})_q(v_q) = \frac{\|q\|^s}{(1 + \|q\|^2)^{\frac{s-r}{2}} + \|q\|^{s+2}} \text{Im}(\bar{q}v),$$

where $q \in \mathbb{H}$ and $v_q \in T_q \mathbb{H}$. Hence, we have

$$\mathcal{A}_{(r,s)} := k^* \omega_{(r,s)} = i \text{Im}(g(q) dq),$$

where

$$g(q) = f(q)\bar{q}, \quad f(q) = \frac{\|q\|^s}{(1 + \|q\|^2)^{\frac{s-r}{2}} + \|q\|^{s+2}}.$$

Thus, if $q \neq 0$, then $\mathcal{A}_{(r,s)}$ is defined for all real numbers r, s . If $\eta = \text{Im}(g(q)dq)$ is an $\text{Im}\mathbb{H}$ -valued 1-form on \mathbb{R}^4 , one can easily check that [4]

$$d\eta + \eta \wedge \eta = \text{Im} \{ dg \wedge dq + g(q)dq \wedge g(q)dq \}.$$

After tedious calculations, curvature 2-form $\mathcal{F}_{(r;s)}$ of $\mathcal{A}_{(r;s)}$ is

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{(r,s)} = & A(dq_0 \wedge dq_1 - dq_2 \wedge dq_3)\mathbf{i} + A(dq_0 \wedge dq_2 + dq_1 \wedge dq_3)\mathbf{j} \\ & A(dq_0 \wedge dq_3 - dq_1 \wedge dq_2)\mathbf{k} + B(dq_0 \wedge dq_1 + dq_2 \wedge dq_3)\bar{q}\mathbf{i}q \\ & B(dq_0 \wedge dq_2 - dq_1 \wedge dq_3)\bar{q}\mathbf{j}q + B(dq_0 \wedge dq_3 + dq_1 \wedge dq_2)\bar{q}\mathbf{k}q \end{aligned}$$

where

$$\begin{aligned} A = & 2 \left(f(q) + \frac{K}{2} \|q\|^2 \right) - \|q\|^2 \left(f(q)^2 + \frac{K}{2} \right) \\ = & \frac{((4+s) + (4+r)\|q\|^2)\|q\|^s(1 + \|q\|^2)^{\frac{s-r}{2}-1}}{2 \left((1 + \|q\|^2)^{\frac{s-r}{2}} + \|q\|^{s+2} \right)^2} \end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned} B = & f(q)^2 + \frac{K}{2} \\ = & \frac{(s+r\|q\|^2)\|q\|^{s-2}(1 + \|q\|^2)^{\frac{s-r}{2}-1}}{2 \left((1 + \|q\|^2)^{\frac{s-r}{2}} + \|q\|^{s+2} \right)^2}. \end{aligned}$$

If similar calculations are done for $s_2 \circ \phi_2^{-1}$, we get curvature 2-form on $\mathbb{H} \cong \mathbb{R}^4$ as

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{F}}_{(r;s)} = & \tilde{A}(dq_0 \wedge dq_1 - dq_2 \wedge dq_3)\mathbf{i} + \tilde{A}(dq_0 \wedge dq_2 + dq_1 \wedge dq_3)\mathbf{j} \\ & \tilde{A}(dq_0 \wedge dq_3 - dq_1 \wedge dq_2)\mathbf{k} + \tilde{B}(dq_0 \wedge dq_1 + dq_2 \wedge dq_3)\bar{q}\mathbf{i}q \\ & \tilde{B}(dq_0 \wedge dq_2 - dq_1 \wedge dq_3)\bar{q}\mathbf{j}q + \tilde{B}(dq_0 \wedge dq_3 + dq_1 \wedge dq_2)\bar{q}\mathbf{k}q \end{aligned}$$

where

$$\tilde{A} = \frac{((4+r) + (4+s)\|q\|^2)\|q\|^r(1 + \|q\|^2)^{\frac{r-s}{2}-1}}{2 \left((1 + \|q\|^2)^{\frac{r-s}{2}} + \|q\|^{r+2} \right)^2}$$

and

$$\tilde{B} = \frac{(r+s\|q\|^2)\|q\|^{r-2}(1 + \|q\|^2)^{\frac{r-s}{2}-1}}{2 \left((1 + \|q\|^2)^{\frac{r-s}{2}} + \|q\|^{r+2} \right)^2}.$$

Note that, if r (or s) is a negative real number,

$$\omega_{(r,s)} = \text{Im} \left(\frac{\|q_1\|^r \bar{q}_1 dq_1 + \|q_2\|^s \bar{q}_2 dq_2}{\|q_1\|^{r+2} + \|q_2\|^{s+2}} \right)$$

can not be a global connection 1-form on S^7 . But locally, the pullback of the connection 1-form $\omega_{(r,s)}$ with respect to $s_1 \circ \phi_1^{-1}$ (or $s_2 \circ \phi_2^{-1}$), $\mathcal{A}_{(r;s)}$ ($\tilde{\mathcal{A}}_{(r;s)}$) is a connection 1-form on $\mathbb{H} - \{0\}$.

As a result, the 2-form $\mathcal{F}_{(r;s)}$ is self-dual if and only if

$$A = \frac{((4 + s) + (4 + r)\|q\|^2)\|q\|^s(1 + \|q\|^2)^{\frac{s-r}{2}-1}}{2\left((1 + \|q\|^2)^{\frac{s-r}{2}} + \|q\|^{s+2}\right)^2} = 0$$

and anti-self dual if and only if

$$B = \frac{(s + r\|q\|^2)\|q\|^s(1 + \|q\|^2)^{\frac{s-r}{2}-1}}{2\left((1 + \|q\|^2)^{\frac{s-r}{2}} + \|q\|^{s+2}\right)^2} = 0.$$

Therefore, we state the theorem below:

Theorem 2 Followings hold for the curvature 2-form $\mathcal{F}_{(r,s)}$:

1. $\mathcal{F}_{(r,s)}$ is anti-self dual if and only if $r = s = 0$.
2. $\mathcal{F}_{(r,s)}$ is self dual if and only if $r = s = -4$.

4. DISCUSSION AND CONCLUSION

Potentials of most interest in physics are those whose field strengths satisfy the Bianchi identity, that is

$$D_{\mathcal{A}} \mathcal{F} = d\mathcal{A} + [\mathcal{A}, \mathcal{F}] = 0,$$

for a potential \mathcal{A} with associated gauge field \mathcal{F} . After tedious calculations, one can show that field strengths $\mathcal{F}_{(r,s)}$ of potentials $\mathcal{A}_{(r,s)}$ satisfy the Bianchi identity. Now, for $q \neq 0$ ($q \in \mathbb{H}$), we calculate the squared norm $\|\mathcal{F}_{(r,s)}(q)\|^2$ of $\mathcal{F}_{(r,s)}(q)$ as

$$\|\mathcal{F}_{(r,s)}(q)\|^2 = 3 \frac{\|q\|^{2s}(1+\|q\|^2)^{s-r-2}}{\left((1+\|q\|^2)^{\frac{s-r}{2}} + \|q\|^{s+2}\right)^4} \left[((4 + s) + (4 + r)\|q\|^2)^2 + (s + r\|q\|^2)^2 \right].$$

If we integrate $\|\mathcal{F}_{(r,s)}(q)\|^2$ over $\mathbb{H} - \{0\}$, we obtain a global measure of the total field strength. To integrate, one can choose the standard spherical coordinates on \mathbb{R}^4 as

$$\begin{aligned} q_0 &= \rho \sin \varphi \sin \nu \cos \theta, \\ q_1 &= \rho \sin \varphi \sin \nu \sin \theta, \\ q_2 &= \rho \sin \varphi \cos \nu, \\ q_3 &= \rho \cos \varphi, \end{aligned}$$

where $\rho = \|q\| > 0$, $0 \leq \varphi, \nu, \theta \leq \pi$, then

$$\begin{aligned} S_{YM}[\mathcal{A}_{(r,s)}] &= \int_{\mathbb{R}^4 - \{0\}} \|\mathcal{F}_{(r,s)}(q)\|^2 \\ &= 6\pi^2 \int_0^\infty \frac{\rho^{2s+3}(1+\rho^2)^{s-r-2}}{\left((1+\rho^2)^{\frac{s-r}{2}} + \rho^{s+2}\right)^4} \left[((4 + s) + (4 + r)\rho^2)^2 + (s + r\rho^2)^2 \right] d\rho. \end{aligned} \tag{4.1}$$

Using the result outlined in Theorem 1, one can easily perform integration (4.1) when $r = s$. In that case, the squared norm reduces to the simple expression

$$\|\mathcal{F}_{(s,s)}(q)\|^2 = 3((4 + s)^2 + s^2) \frac{\|q\|^{2s+3}}{(1 + \|q\|^{s+2})^4}$$

whose Yang-Mills functional can be exactly integrated as

$$S_{YM}[\mathcal{A}_{(s,s)}] = \int_{\mathbb{R}^4 - \{0\}} \|\mathcal{F}_{(s,s)}(q)\|^2 = \begin{cases} 2\pi^2 \left(\frac{s^2 + 4s + 8}{s + 2} \right), & \text{if } s > -2 \\ -2\pi^2 \left(\frac{s^2 + 4s + 8}{s + 2} \right), & \text{if } s < -2 \end{cases}$$

By taking derivative of the Yang-Mills action $S_{YM}[\mathcal{A}_{(r,s)}]$, we observe that $s = 0$ and $s = -4$ are minimum values of the Yang-Mills action. As a result, potentials $\mathcal{A}_{(s,s)}$ minimize the Yang-Mills functional. At these extremum values of s , gauge fields $\mathcal{F}_{(s,s)}$ also satisfies

$$D_{\mathcal{A}} * \mathcal{F}_{(s,s)} = 0.$$

REFERENCES

- [1] Atiyah MF. Geometry of Yang-Mills Fields, Lezioni Fermiane, Accademia Nazionale dei Lincei Scuola Normale Superiore, 1979.
- [2] Freed DS, Uhlenbeck, K. K., Instantons and Four-Manifolds, MSRI Publications, Springer-Verlag, New York, 1984.
- [3] Belavin Polyakov, A, Schwatz A, Tyupkin Y. Pseudoparticle Solutions of the Yang-Mills Equations, Phys. Lett., 59B, 85-87, 1975.
- [4] Naber GL. Topology, Geometry, and Gauge Fields: Foundations, 2nd ed.; Springer: New York, NY, USA, 2011.
- [5] Trautman A. Solutions of the Maxwell and Yang-Mills Equations Associated with Hopf Fibrings, International Journal of Theoretical Physics, Vol. 16, No. 8, 561-565, 1977.
- [6] Minami M. Quaternionic Gauge Fields on S^7 and Yang's $SU(2)$ Monopole, Progress of Theoretical Physics, Vol. 63, No. 1, 1980.
- [7] Corrigan E, Devchand C, Fairlie DB. First-Order Equations for Gauge Fields in Spaces of Dimension Greater Than Four, Nuclear Physics, B214, 1983.
- [8] Grossman B, Kephart TW, Stasheff JD. Solutions to Yang-Mills Equations in Eight Dimensions and the Last Hopf Map, Commun. Math. Phys., Vol. 96, 1984.
- [9] Degirmenci N, Ergen E. A New Family of Connection Forms on the Hopf Bundles, Anadolu University Journal of Science and Tecnology- B,1(2), 2011.

INVESTIGATION OF ELECTRONIC AND MOLECULAR PROPERTIES OF 5-(3-METHYL-3-PHENYLCYCLOBUTYL)-N-PHENYL-3,6-DIHYDRO-2H-1,3,4-THIADIAZIN-2-IMINE BY EXPERIMENTAL AND THEORETICAL METHODS

Buse FERAH ^{1,*}, İbrahim YILMAZ ², Muharrem DİNÇER ¹, Alaaddin ÇUKUROVALI ³

¹ Department of Physics, Faculty of Arts and Sciences, Ondokuz Mayıs University, 55139- Kurupelit, Samsun, Turkey

² Department of Chemistry, Faculty of Science, University of Karamanoglu Mehmet Bey, 70200 Karaman, Turkey,

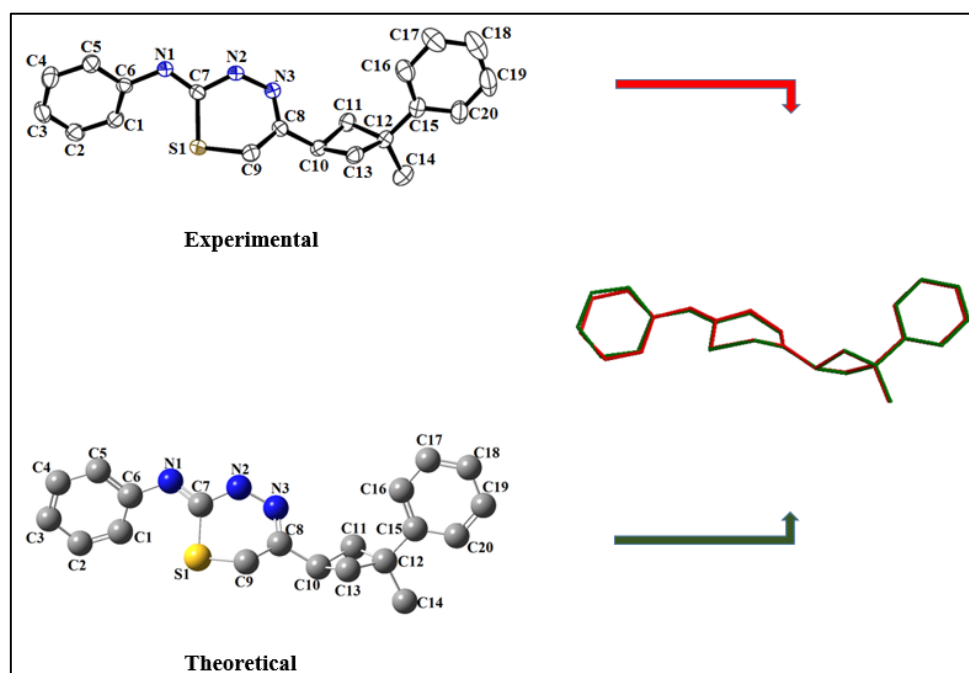
³ Department of Chemistry, Faculty of Sciences, Firat University, 23200 Elazığ, Turkey.

ABSTRACT

In this work, 5-(3-methyl-3-phenylcyclobutyl)-N-phenyl-3,6-dihydro-2H-1,3,4-thiadiazin-2-imine (C₂₀H₂₁N₃S), MPDT, was prepared and characterized by X – ray single crystal diffraction and IR and ¹³C-NMR spectroscopic techniques. The molecular geometry, vibrational frequencies, gauge including atomic orbital (GIAO) ¹³C chemical shift values of MPDT in the ground state have been calculated by using the Hartree-Fock (HF) and Density Functional Theory (B3LYP) with 6-31G(d) basis set. The scaled B3LYP/6-31G(d) results shows the best agreement with the experimental values over the other method. B3LYP is applied to explore the Mulliken atomic charges of the title molecule. In addition to frontier molecular orbital (FMO) and molecular electrostatic potential (MEP) of the title molecule have been calculated by using the HF and B3LYP with 6-31G(d) basis set.

Keywords: Cyclobutane, X-ray structure determination, IR and (¹³C) NMR spectroscopy, Hartree-Fock (HF) Density Functional Theory (DFT).

GRAPHICAL ABSTRACT



5-(3-METHYL-3-PHENYLCYCLOBUTYL)-N-PHENYL-3,6-DİHYDRO-2H-1,3,4-THİADİAZİN-2-İMİNENİN DENEYSEL VE TEORİK METOTLARLA MOLEKÜLER VE ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

ÖZET

Bu çalışmada, 5-(3-methyl-3-phenylcyclobutyl)-N-phenyl-3,6-dihydro-2H-1,3,4-thiadiazin-2-imine ($C_{20}H_{21}N_3S$), MPDT, IR ve ^{13}C -NMR spektroskopik teknikleriyle ve X-ışını tek kristal kırınımı ile karakterize edilip hazırlandı. Temel halde molekülün, moleküler geometri, titreşim frekansları, GIAO ^{13}C kimyasal değişim değerleri 6-31G(d) baz seti ile HF ve B3LYP metotları kullanılarak hesaplandı. B3LYP/6-31G(d) de elde edilen sonuçları diğer metoda kıyasla deneysel veriler ile daha uyumlu sonuçlar gösterdi. Bu sebeple molekülün Mulliken yük dağılımları B3LYP ile hesaplandı. Ek olarak molekülün moleküler orbital ve moleküler elektrostatik potansiyeli de HF/6-31G(d) ve B3LYP/6-31G(d) kullanılarak hesaplandı.

Anahtar Kelimeler: Siklobütan, X-ışını ile yapı belirleme, IR ve (^{13}C) NMR spektroskopisi, Hartree-Fock (HF), Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT)

1. INTRODUCTION

5-(3-methyl-3-phenylcyclobutyl)-N-phenyl-3,6-dihydro-2H-1,3,4-thiadiazin-2-imine is a novel compound firstly prepared in our laboratories by us so there is no information about it in the literature.

In order to support the experimental data, various computational techniques have been developed all over the world. Nowadays structural and electronic properties of atoms, molecules and solids can be calculated with great accuracy with the Density Functional Theory. The electronic structure and spectroscopic assignments of a molecule with given molecular geometry, have been calculated with following methods. DFT provides a variety of methods such as LSDA, BPV86, and B3LYP. B3LYP stands for Becke 3-Parameter (Exchange), Lee, Yang and Parr (Correlation; density functional theory) [1, 2].

In this paper, MPDT was described and characterized by ^{13}C -NMR, IR and single-crystal X-ray diffraction methods as well as theoretical studies in the ground state which have been calculated using the HF and B3LYP with 6-31G(d) basis set.

2. MATERIALS AND METHODS

2.1. Synthesis

To a stirred solution of 4-phenyl thiosemicarbazide (1.6723 g, 10 mmol) in 20 mL absolute ethanol, a solution of 2-chloro-1-(3-methyl-3-phenylcyclobutyl)ethanone (2.2271 g, 10 mmol) in 10 mL absolute ethanol was added at 0 °C and stirred for additional fifteen minutes (TLC). Light yellow precipitate separated by suction, washed with copious water and crystallized from acetone. Yield: 95%, melting point: 438 K. (see Figure 1).

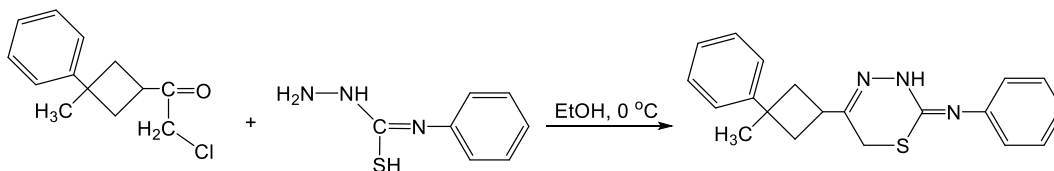


Figure 1. Synthetic pathway for the synthesis of the target compound

2.2. General Remarks

All chemicals were of reagent grade and used as in commercially available forms without further purification. Melting point was determined by Gallenkamp melting point apparatus. The IR spectra of

the compound were recorded in the range of 4000–400 cm^{-1} using a Mattson 1000 FT-IR spectrometer with KBr pellets. The ^{13}C -NMR spectra were recorded on a Varian-Mercury-Plus 400 MHz spectrometer using TMS as internal standard and CDCl_3 (chloroform) as solvent.

2.3. Crystallography

All diffraction measurements were performed at room temperature (293 K) using graphite monochromatic $\text{MoK}\alpha$ radiation ($k = 0.71073 \text{ \AA}$) radiation and STOE IPDS (II) diffractometer. A suitable sample with the size of $0.62 \times 0.42 \times 0.13 \text{ mm}$ was selected for the crystallographic study. Reflection data was recorded in the rotation mode using the ω scan technique by using X-AREA software [3]. Intensity parameters were collected in the θ range $2.7^\circ \leq \theta \leq 27.1^\circ$. The structure was solved by direct methods using SHELXS-97 [4] implemented in the WinGX [5] program suite. The refinement was carried out by full-matrix least-squares method on the positional and anisotropic temperature parameters of the non-hydrogen atoms, or equivalently corresponding to 222 crystallographic parameters, using SHELXL-97 [6]. Computing data collection: X-AREA, cell refinement: X-AREA, computing data reduction: X-RED. The general-purpose crystallographic tool PLATON [7] was used for the structure analysis and presentation of the results. The structure was refined to $R_{\text{int}} = 0.085$ with 1689 observed reflections using $I > 2\sigma(I)$ threshold. The molecular graphic were displayed using ORTEP-3 for Windows [8]. Details of the data collection conditions and the parameters of the refinement process are given in Table 1.

Table 1. Crystal data and structure refinement parameters for the title compound

CCDC deposition no.	1061682
Chemical formula	$\text{C}_{20}\text{H}_{21}\text{N}_3\text{S}$
Formula weight	335.46
Temperature (K)	293(2)
Wavelength (Å)	0.71073 Mo $\text{K}\alpha$
Crystal system	Orthorhombic
Shape	Plate
Space group	$P b c a$
Unit cell parameters	
a,b,c (Å)	8.8028(5), 12.8690(7), 31.1611(16)
α,β,γ ($^\circ$)	90.00
Volume Å^3	3530.0(3)
Z	8
Calculated density (Mg/m^3)	1.262
μ (mm^{-1})	0.189
F_{000}	1424
Crystal size (mm)	$0.62 \times 0.42 \times 0.13$
$h_{\text{min}}, h_{\text{max}}$	-11, 10
$k_{\text{min}}, k_{\text{max}}$	-16, 16
$l_{\text{min}}, l_{\text{max}}$	-39, 30
Theta range for data collection ($^\circ$)	$2.7 \leq \theta \leq 27.1$
Measured reflections	15198
Independent reflections	3867
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
wR(F^2)	0.066
$R[F^2 > 2\sigma(F^2)]$	0.039
R_{int}	0.085
$\Delta\rho_{\text{max}}, \Delta\rho_{\text{min}}$ ($\text{e}/\text{Å}^3$)	0.15, -0.16

2.4. Quantum Chemical Calculations

All the calculations were performed without specifying any symmetry for the title molecule by using Gauss View molecular visualization program [8] and Gaussian 03 program package [9]. For modeling, the initial guess of the compound was first obtained from the X-ray coordinates and the structure was optimized by Hartree–Fock (HF) and Density Functional Theory (DFT)/B3LYP methods [10, 1] with

the 6-31G(d) basis set. ^{13}C -NMR chemical shift are calculated within GIAO approach [11, 12] applying HF and B3LYP method with 6-31G(d) basis set. In addition to frontier molecular orbitals and molecular electrostatic potential map analysis were investigated by theoretical calculations

3. RESULTS AND DISCUSSION

3.1. Geometrical Structure

An ORTEP view of the title compound and the B3LYP optimized structure of the title compound are shown in Figure 2, where the compound crystallizes in the orthorhombic space group *Pbca* with eight molecules in the unit cell ($Z = 8$). The unit cell dimensions are $a = 8.8028(5) \text{ \AA}$, $b = 12.8690(7) \text{ \AA}$, $c = 31.1611(16) \text{ \AA}$ and $V = 3530.0(3) \text{ \AA}^3$. The title molecule is composed of a cyclobutane ring and two benzene rings.

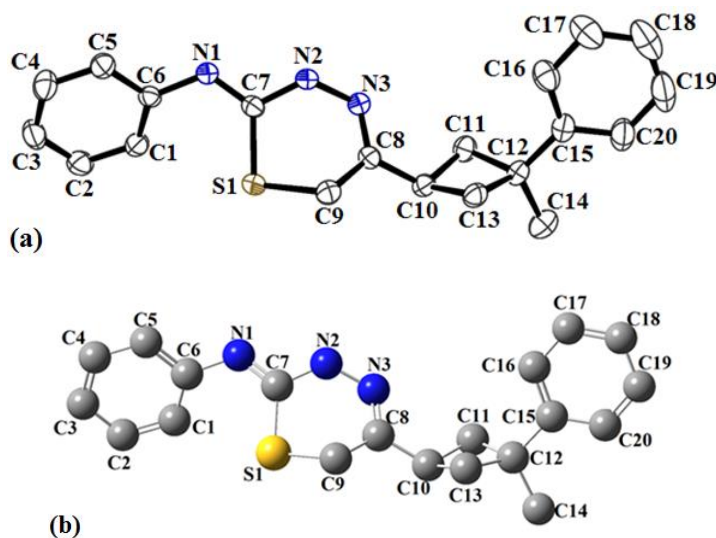


Figure 2. (a) A view of the title compound showing the atom-numbering scheme. Displacement ellipsoids are drawn at the 30% probability level and H atoms have been omitted for clarity. (b) The theoretical geometric structure of the title compound (B3LYP/6-31 G(d) level)

The crystal structure could be described as being built from essentially planar fragments, the aromatic ring **A** (C1—C6), N1 atom is linking **B** (C7—S1), the cyclobutane plane **C** (C10—C13) and the other aromatic ring **D** (C15—C20). The dihedral angles between **A**, **B**, **C** and **D** are $50.16(0.08)^\circ$ (**A/B**), $48.88(0.08)^\circ$ (**B/C**), $87.82(0.08)^\circ$ (**C/D**).

It is well known that 3-substituted cyclobutane carboxylic acid derivatives exhibit anti-inflammatory and antidepressant activities [13] as well as liquid crystal properties [14]. The popular anticancer drug, carboplatin, also contains a cyclobutane ring [15]. Cyclobutane ring has adopted a puckered conformation and although the value for the puckering of the cyclobutane ring found in the literature is $19.8(3)^\circ$ [16], there is a negligible puckering in the cyclobutane ring (torsion angles; C12—C11—C10—C13 and C10—C13—C12—C11; $15.07(15)^\circ$ and $14.90(16)^\circ$, respectively). When the bond lengths and angles of the cyclobutane ring in the title molecule are compared with the previously reported cyclobutane derivatives [17-20], it is seen that there are no significant differences.

Perspective view of the crystal packing in the unit cell is shown in Figure 3. In the crystal packing, there is a C—H...S hydrogen bonding, and the details of which are given in Table 2. The crystal structure of MPDT shows an intramolecular bond-interaction. In this hydrogen bonding, atom S1 acts as a donor to related C1 at $(2-x, -y, -z)$.

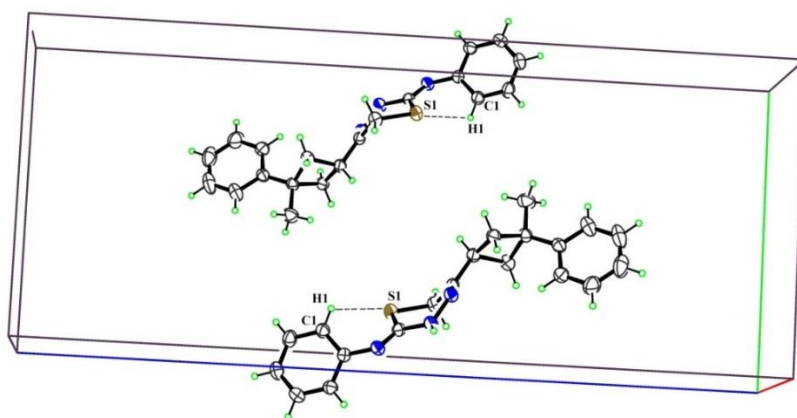


Figure 3. Part of the crystal structure of the title compound, showing the C1–H1···S1 interactions

Table 2. Hydrogen bond geometries in crystal structure (Å, °)

D–H···A	D–H	H···A	D···A	D–H···A
C1–H1···S1	0.93	2.60	3.045 (2)	110

Symmetry codes: 2-x,-y,-z.

3.2. Optimized Structures

The optimized parameters (bond lengths, bond angles and torsion angles) of the title compound have been obtained using HF and B3LYP methods with the 6-31G(d) basis set. Some selected geometrical parameters which have been experimentally gathered and theoretically calculated are listed in Table 3. From Table 3, it can be seen that there are some deviations in the computed geometrical parameters from those data, and these differences are probably due to the intramolecular interaction.

Table 3. Some selected experimental and optimized geometrical parameters of the title compound

Geometric parameters	Experimental (X-ray)	Calculated [6-31G(d)]	
		HF	B3LYP
<i>Bond lengths (Å)</i>			
C1–C6	1.386(3)	1.3897	1.4062
C6–N1	1.408(3)	1.4078	1.4006
S1–C7	1.759(2)	1.7757	1.7933
N2–N3	1.396(2)	1.3854	1.3859
C8–C10	1.489(3)	1.5007	1.5002
C10–C11	1.534(3)	1.5396	1.5469
C11–C12	1.543(3)	1.5592	1.5708
C12–C14	1.530(3)	1.5307	1.5332
C15–C16	1.379(3)	1.3972	1.4066
R ²		0.9953	0.9889
<i>Bond angles (°)</i>			
C2–C3–C4	119.5(2)	119.3454	119.3759
C5–C6–N1	117.96(18)	119.3491	117.949
N1–C7–S1	126.66(17)	125.8496	127.0803
C7–N2–N3	125.02(18)	122.8985	126.0701
N2–N3–C8	116.56(18)	117.4256	117.2056
C8–C10–C13	116.50(17)	116.9861	117.2379
C10–C11–C12	90.13(16)	89.7584	90.072
C14–C12–C15	113.63(19)	113.4319	113.677
R ²		0.9908	0.9989
<i>Torsion angles (°)</i>			
C1–C2–C3–C4	0.8(4)	0.3333	0.7463
C5–C6–N1–C7	143.0(2)	108.6945	133.419
N1–C6–C5–C4	176.7(2)	177.63	178.62
C10–C11–C12–C14	95.96(19)	95.5586	96.0979
R ²		0.9499	0.9954

We have displayed the correlation graph in Figure 4 based on the correlation calculations. The correlation values (R^2) have been found as 0.9953 and 0.9889 for bond lengths, 0.9908 and 0.9989 for bond angles, 0.9499 and 0.9954 for torsion angles at HF/6-31G(d) and B3LYP/6-31G(d) levels, respectively. According to correlations values, the B3LYP/6-31G(d) method gave accurate results for the bond angles, when torsion angles compared with the HF/6-31G(d) method.

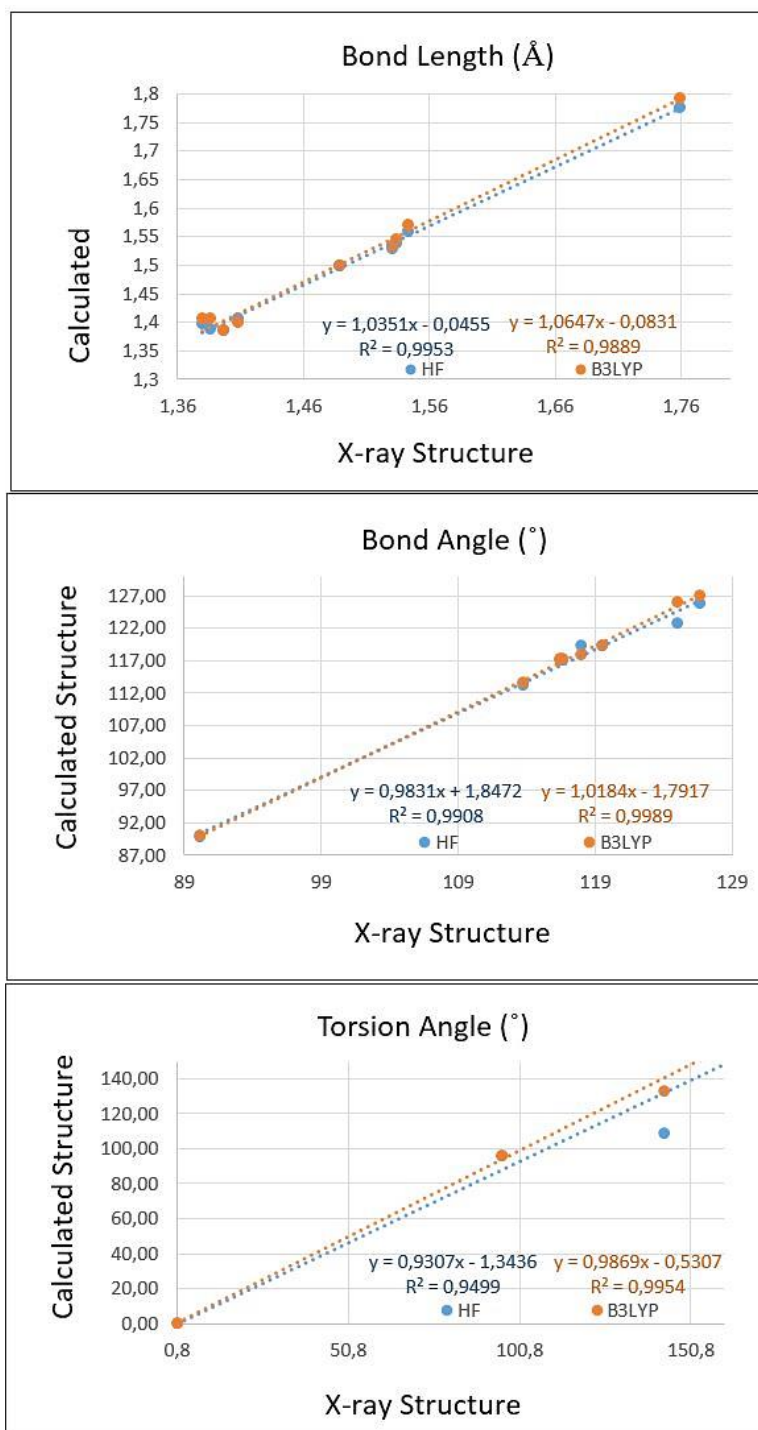


Figure 4. Correlation graphics between the experimental and theoretical geometric parameters of the title compound

A global comparison was performed by superimposing the molecular skeletons obtained from the X-ray diffraction and the theoretical calculations atom by atom (Figure 5), obtaining RMSE values of 0.232 and 0.107 Å for HF/6-31G(d) and B3LYP/6-31G(d), respectively. According to these results, the smallest RMSE value is acquired for B3LYP/6-31G(d) and the geometry obtained from this method coincides better with the crystalline structure than HF/6-31G(d) method. For that reason, we used the geometry from B3LYP/6-31G(d) method, to calculate molecular electrostatic potential (MEP) and frontier molecular orbitals (FMOs).

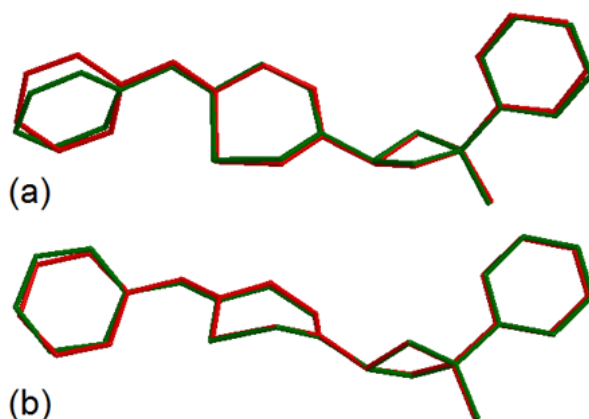


Figure 5. Atom-by atom superimposition of the calculated structures calculated (green) (a = HF/6-31 G(d), b = B3LYP/6-31 G(d)) on the X-ray structure (red) of the title compound

3.3. IR Spectroscopy

The experimental IR spectra of the title compound are shown in Figure 6. The vibrational bands have been assigned using GaussView molecular visualization program and calculated bands with both HF and B3LYP approach along with selected experimental counterparts which are indicated in Table 4.

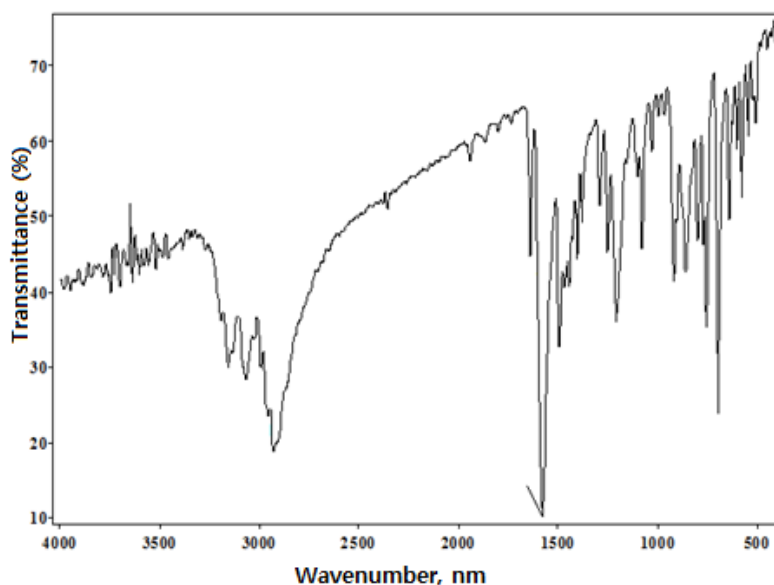


Figure 6. Experimental IR spectra of the title compound

Table 4. Comparisons of the observed and calculated vibrational spectra of the title compound

Assignment	Experimental	Calculated [6-31 G(d)]	
	FT-IR (cm ⁻¹)	HF	B3LYP
v _s N—H	3259	3584	3477
v _{as} C—H _{aromatic}	3067	3026	2868
v _{as} C—H _{2cyclobutane}	2961	3036	3015
vC—H _{cyclobutane}	2855	2861	2834
Θ _{cyclobutane}	1036	946	918
R ²		0.9835	0.9784

Vibrational modes v, stretching; s, symmetric; as, asymmetric; Θ, ring breathing.

Aromatic C—H vibrations

The C—H asymmetric stretching vibrations are observed at 3105 cm⁻¹ in FT-IR spectrum [21]. In the title compound, the C—H asymmetric stretching vibration is observed at 3067 cm⁻¹, which has been calculated at 3026 cm⁻¹ for HF level, 2868 cm⁻¹ for B3LYP level. There are no peaks observed in FT-IR spectrum for C—H symmetric stretching vibrations.

N—H vibrations

The N—H aromatic stretching vibrations were occurred at 3300-3500 cm⁻¹ [22]. In previous study, N—H stretching vibration was founded at 3330-3481 cm⁻¹ [23]. In here, the N—H stretching vibration is observed at 3259 cm⁻¹ as a very strong band in FT-IR spectrum and its corresponding calculated frequencies are 3584 and 3477 cm⁻¹ using HF/6-31G(d) and B3LYP/6-31G(d), respectively.

Cyclobutane vibrations

In the title molecule, there are many cyclobutane ring vibrations. The asymmetric stretching of C—H₂ was observed at 2939 and 2855 cm⁻¹ [24]. The symmetric and asymmetric stretching are observed at 2855 and 2961 cm⁻¹ in FT-IR spectrum. These modes have been calculated at 2861, 2834 cm⁻¹ with HF/6-31G(d) and 3036, 3015 cm⁻¹ with B3LYP/6-31G(d), respectively.

The correlation values (R²) have been found as 0.9835 and 0.9784 for HF/6-31G(d) and B3LYP/6-31G(d), respectively. According to the correlations values, the B3LYP/6-31G(d) method gave accurate results for the vibration modes compared with the HF/6-31G(d) method.

3.4. NMR Spectra

The isotropic chemical shifts are frequently used as an aid in identification of organic compounds and accurate predictions of molecular geometries that are essential for reliable studies of magnetic properties [25]. The experimental ¹³C-NMR spectra of the title compound recorded using TMS as an internal standard and chloroform (CDCl₃) as solvent are shown in Figure 7. The theoretical ¹³C chemical shifts are calculated for the optimized geometry obtained from HF/6-31G(d) and B3LYP/6-31G(d) by using Gaussian program with the standard GIAO approach.

¹³C-NMR

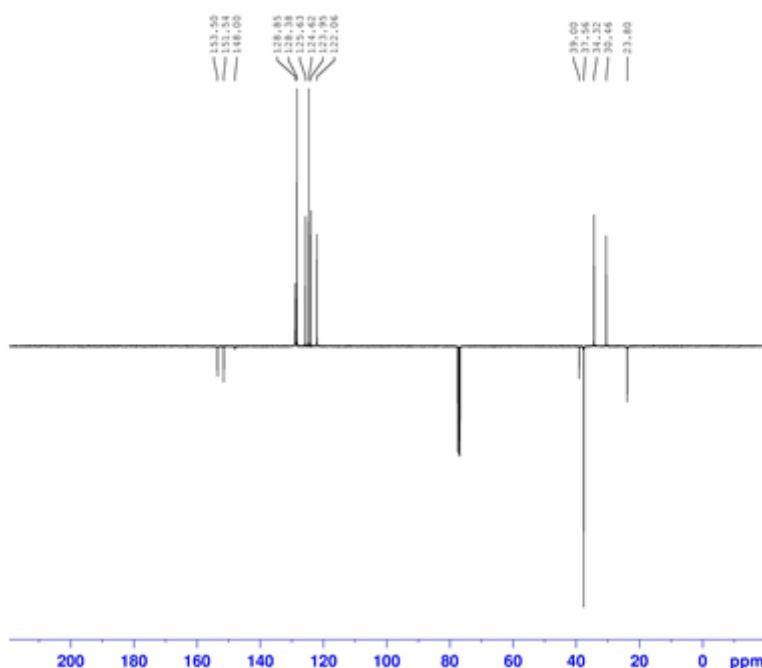


Figure 7. Experimental ¹³C chemical shift spectra of the title compound

In the experimental ¹³C-NMR spectrum of MPDT, the signals at 153.6 and 23.79 ppm are assigned to the atoms C8 and C9, respectively. In the cyclobutane ring the ¹³C-NMR signals of C12 and C13 carbons are at 44.21 ppm [26]. In the present work, the experimental results are attained at 37.52 ppm. The other calculated chemical shifts values can be seen in Table 5.

Table 5. The experimental and calculated ¹³C isotropic chemical shifts (with respect to TMS, all values in ppm) for title compound

Atom	Experimental (ppm) CDCl ₃	Calculated/6-31G(d) (ppm)	
		HF	B3LYP
C1	122.02	113.42	118.03
C2	128.88	119.97	122.92
C3	125.64	113.26	117.59
C4	128.88	121.72	124.29
C5	122.02	118.16	121.72
C6	151.54	145.51	151.13
C8	153.6	162.99	159.93
C9	23.79	12.77	25.99
C10	34.31	17.68	32.29
C11	37.52	20.79	33.15
C12	38.99	22.74	40.97
C13	37.52	23.74	37.93
C14	30.46	3.42	12.55
C15	148	144.14	149.95
C16	124	120.42	123.64
C17	128.38	120.36	123.66
C18	124.61	116.15	119.86
C19	128.38	119.27	122.61
C20	124	116.52	120.28
		0.9922	0.9892

The large difference between the experimental and calculated values of the cyclobutane ring may be due to the fact that theoretical calculations of the title molecule have been done in gaseous phase.

In order to compare the chemical shifts, correlation graph between the observed and calculated ^{13}C -NMR chemical shifts is shown in Figure 8. Therefore, the experimentally obtained values are in good agreement with the theoretically computed values by HF/6-31G(d) method when compared to B3LYP/6-31(G) method.

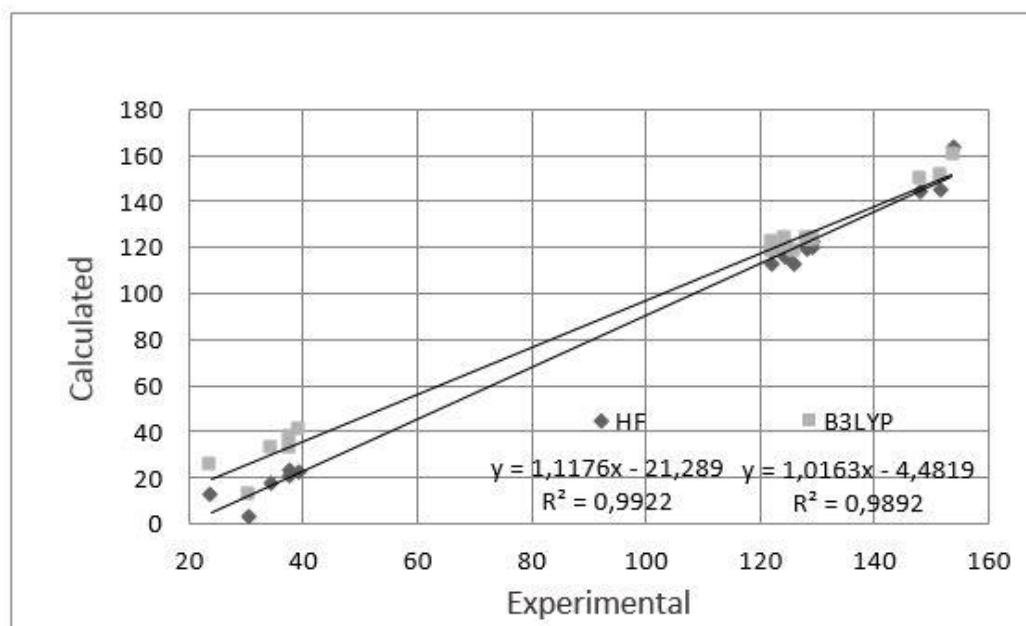


Figure 8. Correlation graphics between the experimental and theoretical NMR chemical shift values of the title compound

Quantum-Chemical Studies

3.5. Molecular Electrostatic Potential (MEP)

The molecular electrostatic potential (MEP) is related to the electronic density and is a very useful descriptor in understanding sites of electrophilic attack and nucleophilic reactions as well as hydrogen bonding interactions [27, 28]. It is very useful to study the relationship between molecular structures with its physiochemical property.

Different values of electrostatic potential at the surface are represented by different colors. The color scheme for the MEP surface is red-electron rich, partially negative charge (electrophilic reactive centre); blue-electron deficient, partially positive charge; light blue-slightly electron deficient region (nucleophilic reactive centre); yellow-slightly electron rich region; green-neutral, respectively [29]. In the present study, MEP maps of MPDT has been found by HF/6-31G(d) and B3LYP/6-31G(d) methods and shown in Figure 9. The color code of these maps is in the range between -4.834 a.u. to 4.834 a.u. for HF/6-31G(d) and -4.043 a.u. to 4.043 a.u. for B3LYP/6-31G(d).

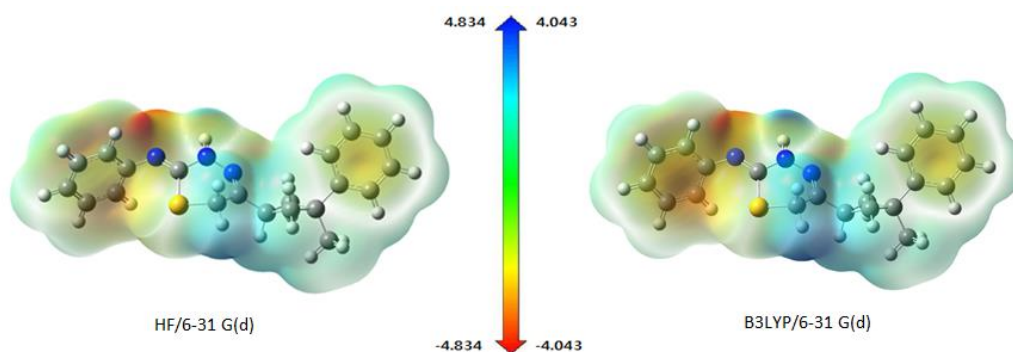


Figure 9. Molecular electrostatic potential map (MEP) (in a.u.) calculated at B3LYP/6-31 G(d) level

Areas of low potential (red) are characterized by an abundance of electrons. Areas of high potential (blue) are characterized by a relative absence of electrons. The region around the nitrogen atom (N1) linked with carbon (C7) through double bond represents the most negative potential region in MPDT. Nitrogen has a higher electronegativity value which would consequently have a higher electron density around them. Thus the spherical region that corresponds to nitrogen atom would have a red portion on it. The MPDT of the compound clearly indicates the electron rich centers of nitrogen atom.

3.6. Frontier Molecular Orbital Analysis (FMO)

The most important frontier molecular orbital (FMO) such as highest occupied molecular orbital (HOMO) and lowest unoccupied molecular orbital (LUMO) plays a crucial part in the chemical stability of the molecule [30]. The HOMO represents the ability to donate an electron and LUMO represents the ability of accept an electron [31]. The energy gap between HOMO and LUMO also determines the chemical reactivity, optical polarizability and chemical hardness-softness of a molecule [30]. A molecule with a small frontier orbital gap is more polarizable and is generally associated with a high chemical reactivity, low kinetic stability and is also termed as soft molecule [32]. By examining the frontier orbitals of a molecule the optical properties and the steps to react with other molecules can be determined. The calculations indicate that the title compound has 89 occupied molecular orbitals. The plots of highest occupied molecular orbitals (HOMOs) and lowest unoccupied molecular orbitals (LUMOs) are shown in Figure 10.

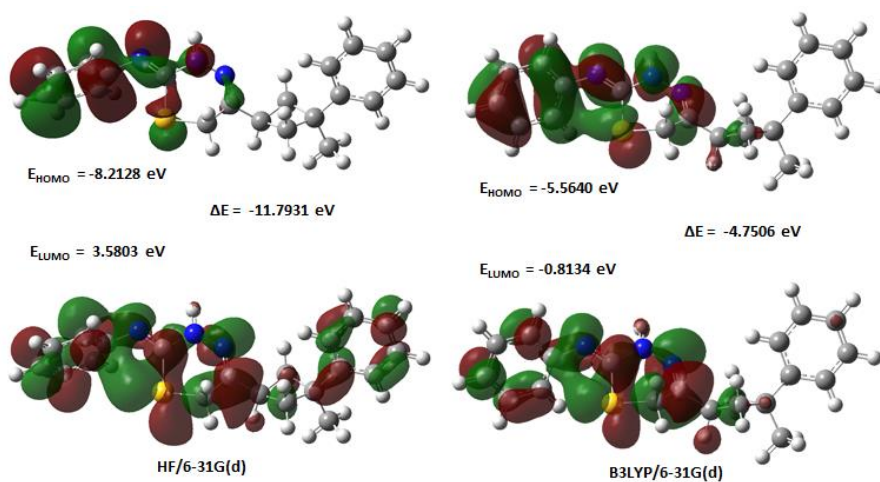


Figure 10. Molecular orbital surfaces and energy levels given for the HOMO and LUMO of the title compound

By using HOMO and LUMO energy values for a molecule, the global chemical reactivity descriptors of molecules such as hardness (η), chemical potential (μ), softness (S), electronegativity (χ) and electrophilicity index (ω) have been defined [33, 34]. On the basis of E_{HOMO} and E_{LUMO} , these are calculated using the below equations. Using Koopman's theorem [35] for closed-shell molecules,

The hardness of the molecule is $\eta = (I - A) / 2$,

The chemical potential of the molecule is $\mu = - (I + A) / 2$,

The electronegativity of the molecule is $\chi = (I + A) / 2$,

The electrophilicity index of the molecule is $\omega = \mu^2 / 2\eta$.

Where A is the ionization potential and I is the electron affinity of the molecule. I and A can be expressed through HOMO and LUMO orbital energies as $I = - E_{\text{HOMO}}$ and $A = - E_{\text{LUMO}}$. The calculated values of the hardness, chemical potential, electronegativity and electrophilicity index of our molecule in gas phase are given in Table 6.

Table 6. The calculated values of the title molecule using both HF/ 6-31G(d) and B3LYP/ 6-31G(d) levels

	HF/ 6-31G(d)	B3LYP/ 6-31G(d)
E_{HOMO} (eV)	-8.2128	-5.5640
E_{LUMO} (eV)	3.5803	-0.8134
I (eV)	8.2128	5.5640
A (eV)	-3.5803	0.8134
η (eV)	5.8965	2.3753
μ (eV)	-2.3163	-3.1887
χ (eV)	2.3163	3.1887
ω (eV)	0.4549	2.1403

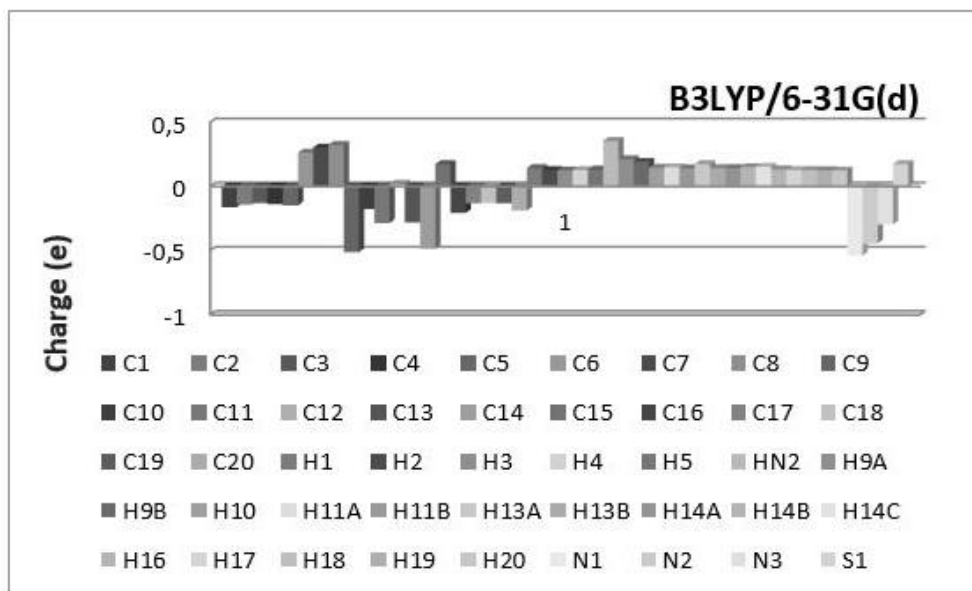


Figure 11. The charge distribution calculated by the Mulliken method for the title molecule

4. CONCLUSIONS

Crystal structure of MPDT was determined and its geometry was optimized by HF and B3LYP method with 6-31G(d) basis set. Theoretical IR and NMR spectroscopies for optimized molecular structure were calculated. Compared to the theoretical and experimental results, compatible results have been observed. Investigations by B3LYP/6-31G(d) level for both the bond angles and torsion angles are performed

better. Mulliken atomic charge values are also calculated using same method with basis set. Besides of these properties of the molecule, we have calculated MEP, HOMO-LUMO, hardness, chemical potential, electronegativity and electrophilicity index of the molecule with HF and B3LYP.

ACKNOWLEDGMENTS

We wish to thank Prof. Dr. Orhan Büyükgüngör for his help with the data collection and acknowledge the Faculty of Arts and Sciences, Ondokuz Mayıs University, Turkey, for the use of the STOE IPDS II diffractometer.

SUPPLEMENTARY DATA

CCDC-1061682 contains the supplementary crystallographic data for the compound reported in this article. These data can be obtained free of charge at www.ccdc.cam.ac.uk/conts/retrieving.html [or from the Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC), 12 Union Road, Cambridge CB2 1EZ, UK; fax: +44(0)1223-336033; e-mail: deposit@ccdc.cam.ac.uk].

REFERENCES

- [1] Becke AD. Density functional thermochemistry. III. The role of exact exchange. *J Chem Phys* 1993; 98: 5648.
- [2] Lee C, Yang W, Parr RG. Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density. *Phys Rev* 1988; B37: 785-789.
- [3] Stoe & Cie. X-Area Version 1.18 and X-RED32 Version 1.04 2002; Darmstadt, Germany.
- [4] Sheldrick GM. SHELXS-97; Program for the Solution of Crystal Structures, University of Gottingen, 1997.
- [5] Farrugia LJ. WinGX suite for smallmolecule single-crystal crystallography. *J Appl Crystallogr* 1999; 32: 837–838.
- [6] Sheldrick GM. SHELXL-97; Program for Crystal Structures Refinement, University of Gottingen, 1997.
- [7] Spek AL. Structure validation in chemical crystallography. *Acta Crystallogr* 2009; D65: 148–155.
- [8] Dennington II R, Keith T, Millam J, Gauss View, Version 4.1.2, Semichem Inc, Shawnee Mission, KS, 2007.
- [9] Frisch MJ, Trucks GW, Schlegel HB, Scuseria GE, Robb MA, Cheeseman JR, Montgomery Jr JA, Vreven T, Kudin K.N, Burant J.C, Millam J.M, Iyengar SS, Tomasi J, Barone V, Mennucci B, Cossi M, Scalmani G, Rega N, Petersson GA, Nakatsuji H, Hada M, Ehara M, Toyota K, Fukuda R, Hasegawa J, Ishida M, Nakajima T, Honda Y, Kitao O, Nakai H, Klene M, Li X, Knox JE, Hratchian HP, Cross JB, Bakken V, Adamo C, Jaramillo J, Gomperts R, Stratmann RE, Yazyev O, Austin AJ, Cammi R, Pomelli C, Ochterski JW, Ayala PY, Morokuma K, Voth GA, P Salvador, Dannenberg JJ, Zakrzewski VG, Dapprich S, Daniels AD, Strain MC, Farkas O, Malick DK, Rabuck AD, Raghavachari K, Foresman JB, Ortiz JV, Cui Q, Baboul AG, Clifford S, Cioslowski J, Stefanov BB, Liu G, Liashenko A, Piskorz P, Komaromi I, Martin RL, Fox DJ, Keith T, Al-Laham MA, Peng CY, Nanayakkara A, Challacombe

M, Gill PMW, Johnson B, Chen W, Wong MW, Gonzalez C, Pople JA, Gaussian 03, Revision E.01, Gaussian, Inc: Wallingford CT, 2004.

[10] Lee C, Yang W, Parr RG. Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density. Phys Rev 1988; B37: 785.

[11] Ditchfield R. Molecular Orbital Theory of Magnetic Shielding and Magnetic Susceptibility. J Chem Phys 1972; 56: 5688.

[12] Wolinski K, Hinton JF, Pulay P. Efficient implementation of the gauge-independent atomic orbital method for NMR chemical shift calculations. J Am Chem Soc 1990; 112: 8251-8260.

[13] Dehmlow EV, Schmidt S. Synthesis of Stereoisomeric 3-Substituted cyclobutanecarboxylic acid-derivatives. Liebigs Ann Chem 1990; 5: 411–414.

[14] Coghi L, Lanfredi AMM, Tiripicchio A. Crystal and molecular structure of thiosemicarbazide hydrochloride. J Chem Soc Perkin Trans 1976; 2: 1808-1810.

[15] Wheate NJ, Walker S, Craig GE and Oun R. The status of platinum anticancer drugs in the clinic and in clinical trials. Dalton Transactions 2010; 39: 8113-8127.

[16] Dincer M, Ozdemir N, Cukurovali A, Yilmaz I, Buyukgungor O. "1-(3-Mesityl-3-methylcyclobutyl)-2-(pyrrolidin-1-yl) ethan-1-one. Acta Cryst 2004; E60: o1523-o1524.

[17] Sen F, Dincer M, Cukurovali A, Yilmaz I. (Z)-1-(3-Mesityl-3-methylcyclobu-tyl)-2-(morpholin-4-yl) ethanone oxime. Acta Cryst 2011; E67: o958-o959.

[18] Sen F, Dincer M, Cukurovali A, Yilmaz I. 1,1'-Bis(3-methyl-3-phenylcyclobutyl)-2,2'-(azanedi-yl)diethanol. Acta Cryst 2012; E68: o1052.

[19] Dincer M, Ozdemir N, Yilmaz I, Cukurovali A, Buyukgungor O. 1-Methyl-1-phenyl-3-[1-hydroxyimino-2-(succinimido)ethyl]cyclobutane. Acta Cryst 2012; C60: o674-o676.

[20] Ozdemir N, Dincer M, Yilmaz I, Cukurovali A. 1-Methyl-1-phenyl-3-(phthalimidoacetyl) cyclobutane. Acta Cryst 2004; E60: o14-o16.

[21] Sen F, Dincer M, Cukurovali A, Yilmaz I. N-[4-(3-methyl-3-mesityl-cyclobutyl)-thiazol-2-yl]-succinamic acid: X-ray structure, spectroscopic characterization and quantum chemical computational studies. J Mol Struc 2013; 1046: 1–8.

[22] Bellamy LJ. The Infrared Spectra of Complex Molecules, vol. 2, Chapman and Hall; London, 1980.

CALCULATION OF CUTOFF FREQUENCY FOR POLYNOMIAL FAMILIES

Taner BÜYÜKKÖROĞLU ^{1,*}, Gökhan ÇELEBİ ²

¹ Department of Mathematics, Faculty of Science, Anadolu University, Eskişehir, Turkey

² Department of Mathematics, Faculty of Arts and Sciences, Bozok University, Yozgat, Turkey

ABSTRACT

In many stability problems, the investigation of pure imaginary roots for a polynomial family is very important. Given a pure imaginary complex number, the set of all images of uncertainty vectors is called the value set corresponding to this pure imaginary complex number. The question whether these sets contain the origin is very important from robust stability point of view of a polynomial family. Cutoff frequency guarantees the noninclusion of the origin to the value set for large frequencies. In this paper, we give a procedure for more strict estimation of cutoff frequency and applications of the obtained result to the constant inertia problem of a polynomial family.

Keywords: Cutoff frequency, Constant regular inertia, Multilinear polynomial families, Hurwitz stability

POLİNOM AİLELERİ İÇİN KESME FREKANSI HESABI

ÖZET

Kararlılık problemlerinde, polinom ailesinin pür imajiner köklerinin araştırılması oldukça önemlidir. Pür imajiner bir kompleks sayı verildiğinde, belirsizlik vektörlerinin görüntülerinin kümesi bu kompleks sayıya karşılık gelen değer kümesi olarak adlandırılır. Değer kümelerinin orijini kapsayıp kapsamadığı sorusu, polinom ailesinin gürbüz kararlılığı açısından çok önemlidir. Kesme frekansı, daha büyük frekanslar için değer kümesinin orijini içermemesini garanti eder. Bu çalışmada, kesme frekansını daha iyi belirlemek için bir prosedür verilmiştir ve elde edilen sonuçlar polinom ailesinin sabit inersiyon problemine uygulanmıştır.

Anahtar Kelimeler: Kesme frekansı, Sabit regüler inersiyon, Multilineer polinom aileleri, Hurwitz kararlılık

1. INTRODUCTION

The robust stability and root clustering of polynomials have attracted much attention in control theory (see [1-3] and reference therein). We consider a more general case where the coefficients of a polynomial depend on uncertainty parameters. A powerful tool for analyzing stability of a polynomial family in the frequency domain is the value set approach. The value set depends on the chosen frequency which varies in the positive real axis. In this paper our aim is determine an upper bound for the active frequencies.

Let

$$p(s) = a_n s^n + a_{n-1} s^{n-1} + \dots + a_1 s + a_0 \quad (1)$$

be a fixed polynomial. $p(s)$ is said to be Hurwitz stable if all its roots lie in the open left half plane.

Let polynomial family be defined by

$$p(s, q) = a_n(q) s^n + a_{n-1}(q) s^{n-1} + \dots + a_1(q) s + a_0(q) \quad (2)$$

*Corresponding Author: tbuyukkoroglu@anadolu.edu.tr

where the uncertainty vector q belongs to a box Q , where

$$Q = \{(q_1, q_2, \dots, q_l) \in \mathbb{R}: q_i^- \leq q_i \leq q_i^+, i = 1, 2, \dots, l\} \quad (3)$$

and the functions $a_i: Q \rightarrow \mathbb{R}$ ($i = 1, 2, \dots, l$) are continuous.

Denote the set of all polynomials $p(s, q)$ by \mathcal{P} , that is

$$\mathcal{P} = \{p(s, q): q \in Q\}. \quad (4)$$

\mathcal{P} is said to be multilinear family if each coefficient function $a_i(q)$ is an affine linear with respect to each component of $q \in Q$. The family \mathcal{P} is said to be robust Hurwitz stable if for each $q \in Q$ the polynomial $p(s, q)$ is Hurwitz stable.

Theorem 1 (Zero Exclusion Condition, [1, p. 113]) Suppose that the polynomial family \mathcal{P} given by (4) has invariant degree and at least has one stable member $p(s, q^0)$. Then \mathcal{P} is robustly stable if and only if $z = 0$ is excluded from the value set $A(\omega) = \{p(j\omega, q): q \in Q\}$ at all nonnegative frequencies, i.e., $0 \notin p(j\omega, Q)$

for all frequencies $\omega \geq 0$.

Theorem 1 gives a graphical test for robust stability of the family \mathcal{P} . By watching the value set $p(j\omega, Q)$ as ω varies from 0 to $+\infty$, we can check, by inspection, the condition $0 \notin p(j\omega, Q)$. This raises the following question: Can we find possible small cutoff frequency $\omega_c > 0$ such that $0 \notin p(j\omega, Q)$ for all $\omega \geq \omega_c$?

One estimation for ω_c comes from classical bounds on the roots of a polynomial. It is well-known that the roots of a fixed positive coefficient polynomial $p(s) = a_n s^n + a_{n-1} s^{n-1} + \dots + a_1 s + a_0$ lie in the disc of radius

$$R = 1 + \frac{\max\{a_0, a_1, \dots, a_{n-1}\}}{a_n}$$

with center at the origin (see [4, p. 123], Theorem (27.2)). Hence for any $\omega > R$, $s = j\omega$ can not be a root of the polynomial $p(s)$. From this it follows that for the polynomial family $p(s, q)$ with $a_n(q) > 0$ for all $q \in Q$, an appropriate cutoff frequency may be given as

$$\omega_c = 1 + \frac{\max\left\{\max_q a_0(q), \max_q a_1(q), \dots, \max_q a_{n-1}(q)\right\}}{\min_q a_n(q)}. \quad (5)$$

Calculation of the cutoff frequency by (5) gives large value as usually. Therefore, the minimization of ω_c becomes an important problem the consideration of which is the subject of the next section.

2. MINIMIZATION OF ω_c

Consider family (2), where $a_i(q)$ ($i = 0, 1, \dots, n$) are continuous in q . Consider pure imaginary root $s = j\omega$. We show that the nonexistence of such a root is equivalent to the nonexistence of a common solution of two polynomial equations defined on a box. Similar system of two equations for discrete polynomial families has been obtained in [5].

Suppose that the number $s = j\omega$ is a root of \mathcal{P} and $\omega \neq 0$. Then $s = -j\omega$ is also a root, and there exist $\alpha_0(q), \alpha_1(q), \dots, \alpha_{n-2}(q)$ such that

$$\begin{aligned}
 a_0(q) + a_1(q)s + \dots + a_n(q)s^n &= (s - j\omega)(s + j\omega)(\alpha_0(q) + \alpha_1(q)s + \dots + \alpha_{n-2}(q)s^{n-2}) \\
 &= (s^2 + \omega^2)(\alpha_0(q) + \alpha_1(q)s + \dots + \alpha_{n-2}(q)s^{n-2})
 \end{aligned} \tag{6}$$

is valid. Taking $t = \omega^2$ in (6), it follows that the equalities

$$\begin{aligned}
 t\alpha_0(q) &= a_0(q) \\
 t\alpha_1(q) &= a_1(q) \\
 \alpha_0(q) + t\alpha_2(q) &= a_2(q) \\
 \alpha_1(q) + t\alpha_3(q) &= a_3(q) \\
 \vdots &\quad \quad \quad \vdots \\
 \alpha_{k-2}(q) + t\alpha_k(q) &= a_k(q) \\
 \vdots &\quad \quad \quad \vdots \\
 \alpha_{n-4}(q) + t\alpha_{n-2}(q) &= a_{n-2}(q) \\
 \alpha_{n-3}(q) &= a_{n-1}(q) \\
 \alpha_{n-2}(q) &= a_n(q)
 \end{aligned} \tag{7}$$

are satisfied.

Elimination of $\alpha_0(q), \alpha_1(q), \dots, \alpha_{n-2}(q)$ from (7) reduces the system of equations (7) into the system

$$\begin{aligned}
 f_1(t, q) &= 0, \\
 f_2(t, q) &= 0.
 \end{aligned} \tag{8}$$

If n is odd, this system has the form

$$\begin{aligned}
 f_1(t, q) &:= a_0(q) - ta_2(q) + t^2a_4(q) + \dots + t^{\frac{n-1}{2}}a_{n-1}(q) = 0 \\
 f_2(t, q) &:= a_1(q) - ta_3(q) + t^2a_5(q) + \dots + t^{\frac{n-1}{2}}a_n(q) = 0
 \end{aligned}$$

If n is even, then

$$\begin{aligned}
 f_1(t, q) &:= a_0(q) - ta_2(q) + t^2a_4(q) + \dots + t^{\frac{n}{2}}a_n(q) = 0 \\
 f_2(t, q) &:= a_1(q) - ta_3(q) + t^2a_5(q) + \dots + t^{\frac{n-2}{2}}a_{n-1}(q) = 0
 \end{aligned}$$

For example, assume that $n = 5$. Then the system (8) becomes

$$\begin{aligned}
 a_0(q) - ta_2(q) + t^2a_4(q) &= 0, \\
 a_1(q) - ta_3(q) + t^2a_5(q) &= 0.
 \end{aligned} \tag{9}$$

Thus we obtain the following result:

Theorem 2 $(t_*, q_*) \in (0, \infty) \times Q$ is a solution of the system (8) if and only if $p(j\omega_*, q_*) = 0$, where $t_* = \omega_*^2$. Equivalently, $p(j\omega, q) \neq 0$ for all $(t, q) \in [\omega_1, \omega_2] \times Q$ if and only if equation (8) has no solution on $[t_1, t_2] \times Q$ where $t_1 = \omega_1^2, t_2 = \omega_2^2$.

Proof: Assume that $(t_*, q_*) \in (0, \infty) \times Q$ is a solution of (8):

$$\begin{aligned}
 f_1(t, q) &= 0, \\
 f_2(t, q) &= 0.
 \end{aligned}$$

Then by (6), (7) the polynomial $a_0(q_*) + a_1(q_*)s + \dots + a_n(q_*)s^n$ has roots $s = \pm j\omega_*$, where $t_* = \omega_*^2$, that is $p(j\omega_*, q_*) = p(-j\omega_*, q_*) = 0$.

Conversely, if $p(j\omega_*, q_*) = 0$ then from (6), (7) it follows that $f_1(t_*, q_*) = f_2(t_*, q_*) = 0$, where $t_* = \omega_*^2$. Consequently, (t_*, q_*) is a solution of (8).

From now on we consider multilinear polynomial family (see Section 1). The following extremal property of a scalar multilinear function defined on a box is well-known.

Theorem 3 (Extremal property, [1, p. 245]) Suppose Q is a box in \mathbb{R}^l with the set of extreme points $\{q^i\}$ and $f: Q \rightarrow \mathbb{R}$ is multilinear. Then both the maximum and minimum of $f(q)$ are attained at extreme points. That is

$$\begin{aligned} \max_{q \in Q} f(q) &= \max_i f(q^i), \\ \min_{q \in Q} f(q) &= \min_i f(q^i). \end{aligned}$$

Let the family (2) be given, where the functions $a_i(q)$ are multilinear ($i = 0, 1, \dots, n$). In system (8) both f_1 and f_2 are multilinear on q and polynomially dependent on t .

The system (8) is almost multilinear and the variables (t, q) vary on the box $[\omega_1^2, \omega_2^2] \times Q$. This system can be multilinearized by introducing new variables (see [5]). Indeed, if system (8) contains t^k as the greatest power of t , we can replace t^k by the product $t_1 t_2 \dots t_k$ where t_1, t_2, \dots, t_k , are new variables and add new equations $t_2 - t_1 = 0, t_3 - t_1 = 0, \dots, t_k - t_1 = 0$ to the system (8) (we set $t_1 = t$). This new extended system will then be multilinear and Theorem 3 will be applicable. For example, assume that $n = 5$. Then the system (9) is transformed into

$$\begin{aligned} a_0(q) - t_1 a_2(q) + t_1 t_2 a_4(q) &= 0 \\ a_1(q) - t_1 a_3(q) + t_1 t_2 a_5(q) &= 0 \\ t_2 - t_1 &= 0 \end{aligned}$$

where $(t_1, t_2, q) \in [\omega_1^2, \omega_2^2] \times [\omega_1^2, \omega_2^2] \times Q$.

Given a multilinear family $p(s, q)$, our aim is to find possible small ω_c . To this end we suggest the following algorithm.

Algorithm 1

- i) Given family (2). Write the corresponding system (8) and multilinearize it.
- ii) Find ω_c from (5).
- iii) Construct the intervals $[\frac{\omega_c^2}{2}, \omega_c^2], [\frac{\omega_c^2}{4}, \frac{\omega_c^2}{2}], [\frac{\omega_c^2}{8}, \frac{\omega_c^2}{4}], \dots$.
- iv) Take the first interval $[\frac{\omega_c^2}{2}, \omega_c^2]$ and check for nonexistence of a root of the obtained multilinear system on the extended box $[\frac{\omega_c^2}{2}, \omega_c^2] \times \dots \times [\frac{\omega_c^2}{2}, \omega_c^2] \times Q$ by using Theorem 2. If the nonexistence of a root is satisfied then replace $[\frac{\omega_c^2}{2}, \omega_c^2]$ by $[\frac{\omega_c^2}{4}, \frac{\omega_c^2}{2}]$ and continue.
- v) If nonexistence of a root on some box $[\frac{\omega_c^2}{2^{k+1}}, \frac{\omega_c^2}{2^k}] \times \dots \times [\frac{\omega_c^2}{2^{k+1}}, \frac{\omega_c^2}{2^k}] \times Q$ can not be verified then stop.

The number $\tilde{\omega}_c = \sqrt{\frac{\omega_c^2}{2^k}} = \omega_c \cdot 2^{-\frac{k}{2}}$ is a new cutoff frequency.

Example 1 [1, p. 183] Consider the model of an experimental oblique wing aircraft. The aircraft transfer function is

$$P(s) = \frac{64s + 128}{s^4 + 3.7s^3 + 65.6s^2 + 32s}.$$

We replace $P(s)$ by the following interval plant family \mathcal{P} described by

$$P(s, q, r) = \frac{q_1 s + q_0}{s^4 + r_3 s^3 + r_2 s^2 + r_1 s + r_0} \tag{10}$$

with uncertainty bounds $90 \leq q_0 \leq 166, 54 \leq q_1 \leq 74, -0.1 \leq r_0 \leq 0.1, 30.1 \leq r_1 \leq 33.9, 50.4 \leq r_2 \leq 80.8, 2.8 \leq r_3 \leq 4.6$.

For this interval plant family \mathcal{P} , consider the problem of existence of a robustly stabilizing PI controller

$$C(s) = K_1 + \frac{K_2}{s}.$$

Assume that $0.8 \leq K_1 \leq 1.24$, $0.01 \leq K_2 \leq 0.84$. The closed loop characteristic polynomial is

$$p(s, q, r, K_1, K_2) = s^5 + r_3s^4 + r_2s^3 + (r_1 + q_1K_1)s^2 + (r_0 + q_0K_1 + q_1K_2)s + q_0K_2. \quad (11)$$

This polynomial family is multilinear. Calculation ω_c by (5) gives $\omega_c = 269.1$. Now apply Algorithm 1 to reduce ω_c . After 4 steps we arrive at the value $\omega_c = 16.81875$. The above intervals for the parameters K_1 and K_2 are taken from [1] (see [1], p. 186, Fig. 11.5.2) where by using Routh tables the set of robust stabilizing parameters are obtained graphically. In the next section, we will prove that the set of all (K_1, K_2) satisfying $0.8 \leq K_1 \leq 1.24$, $0.01 \leq K_2 \leq 0.84$ are stabilizing by using Sixteen Plant Theorem and the value $\omega_c = 16.81875$.

3. CONSTANT REGULAR INERTIA PROBLEM FOR A MULTILINEAR FAMILY

Let polynomial (1) with $a_n \neq 0$ be given. Define the ordered triple (n_1, n_2, n_3) where $n_1 + n_2 + n_3 = n$ and n_1 is the number of roots in the open left half plane, n_2 is the number of roots on the imaginary axis and n_3 is the number of roots in the open right-half plane. The ordered triple (n_1, n_2, n_3) is called the inertia of polynomial (1). If polynomial (1) is Hurwitz stable then its inertia is $(n, 0, 0)$. In the case of $n_2 = 0$ the inertia is called regular.

Theorem 4 Let multilinear family (2) be given, assume that the point $s = 0$ is not a root of \mathcal{P} and \mathcal{P} has at least one polynomial with regular inertia $(\alpha, 0, \beta)$. Then \mathcal{P} has constant regular inertia $(\alpha, 0, \beta)$ if and only if the system (8) has no solution on $[0, \omega_c^2] \times Q \subset \mathbb{R}^{l+1}$.

After finding a suitable ω_c by using the results from the previous section, we get the following algorithm for checking the inertia of a multilinear family.

Algorithm 2

- i) Let multilinear family (2) be given and the least one polynomial has regular inertia $(\alpha, 0, \beta)$. Using Theorem 3, check the nonexistence of the root $s = 0$. Otherwise \mathcal{P} has no constant regular inertia $(\alpha, 0, \beta)$.
- ii) Obtain the equations $f_1(t, q) = 0, f_2(t, q) = 0$.
- iii) Multilinearize this system by replacing $t = t_1$ and introducing new variables t_1, t_2, \dots, t_k and new equation

$$\begin{aligned} f_1(t_1, t_2, \dots, t_k, q) &= 0, \\ f_1(t_1, t_2, \dots, t_k, q) &= 0, \\ t_2 - t_1 &= 0, \\ t_3 - t_1 &= 0, \\ &\vdots \\ t_k - t_1 &= 0 \end{aligned} \quad (12)$$

where $(t_1, t_2, \dots, t_k, q) \in [0, \omega_c^2] \times \dots \times [0, \omega_c^2] \times Q \subset \mathbb{R}^{k+l}$.

- iv) Using Theorem 3, calculate the ranges of all functions (12). If at least one range does not contain zero, then stop. The family \mathcal{P} has regular inertia $(\alpha, 0, \beta)$. Otherwise apply the next step.

Example 2 Consider again the characteristic polynomial (11). According to the Sixteen Plant Theorem, the family (11) is robust stable if and only if all 16 Kharitonov polynomials are stable [1, p. 182]. All Kharitonov polynomials are affine with respect to (K_1, K_2) and have members with inertia $(5, 0, 0)$. We have applied Algorithm 2 to all Kharitonov polynomials. As a result, all 16 families have regular inertia $(5, 0, 0)$ and each (K_1, K_2) from the rectangle $0.8 \leq K_1 \leq 1.24$, $0.01 \leq K_2 \leq 0.84$ is stabilizing for the

plant (10) (see Figure 1 and Table 1). Numbers of required steps for each Kharitonov polynomial are given in Table 1.

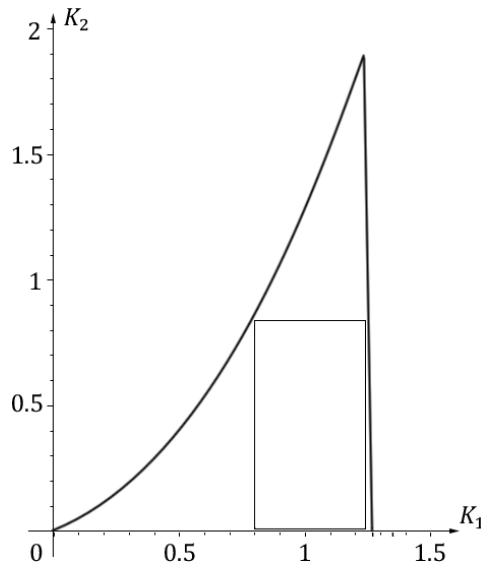


Figure 1: The set of robust stabilizing parameters and the rectangle $0.8 \leq K_1 \leq 1.24, 0.01 \leq K_2 \leq 0.84$

Table 1. For Example 2, the numbers of steps are given in the second column

Kharitonov polinomial families correspond to the polynomial family (11)	steps
$p_{1,1}(s, K_1, K_2) = s^5 + 4.6s^4 + 80.8s^3 + (54K_1 + 30.1)s^2 + (90K_1 + 54K_2 - 0.1)s + 90K_2$	62
$p_{1,2}(s, K_1, K_2) = s^5 + 2.8s^4 + 50.4s^3 + (54K_1 + 33.9)s^2 + (90K_1 + 54K_2 + 0.1)s + 90K_2$	48
$p_{1,3}(s, K_1, K_2) = s^5 + 4.6s^4 + 50.4s^3 + (54K_1 + 30.1)s^2 + (90K_1 + 54K_2 + 0.1)s + 90K_2$	44
$p_{1,4}(s, K_1, K_2) = s^5 + 2.8s^4 + 80.8s^3 + (54K_1 + 33.9)s^2 + (90K_1 + 54K_2 - 0.1)s + 90K_2$	42
$p_{2,1}(s, K_1, K_2) = s^5 + 4.6s^4 + 80.8s^3 + (74K_1 + 30.1)s^2 + (166K_1 + 74K_2 - 0.1)s + 166K_2$	44
$p_{2,2}(s, K_1, K_2) = s^5 + 2.8s^4 + 50.4s^3 + (74K_1 + 33.9)s^2 + (166K_1 + 74K_2 + 0.1)s + 166K_2$	116
$p_{2,3}(s, K_1, K_2) = s^5 + 4.6s^4 + 50.4s^3 + (74K_1 + 30.1)s^2 + (166K_1 + 74K_2 + 0.1)s + 166K_2$	38
$p_{2,4}(s, K_1, K_2) = s^5 + 2.8s^4 + 80.8s^3 + (74K_1 + 33.9)s^2 + (166K_1 + 74K_2 - 0.1)s + 166K_2$	38
$p_{3,1}(s, K_1, K_2) = s^5 + 4.6s^4 + 80.8s^3 + (54K_1 + 30.1)s^2 + (166K_1 + 54K_2 - 0.1)s + 166K_2$	110
$p_{3,2}(s, K_1, K_2) = s^5 + 2.8s^4 + 50.4s^3 + (54K_1 + 33.9)s^2 + (166K_1 + 54K_2 + 0.1)s + 166K_2$	50
$p_{3,3}(s, K_1, K_2) = s^5 + 4.6s^4 + 50.4s^3 + (54K_1 + 30.1)s^2 + (166K_1 + 54K_2 + 0.1)s + 166K_2$	40
$p_{3,4}(s, K_1, K_2) = s^5 + 2.8s^4 + 80.8s^3 + (54K_1 + 33.9)s^2 + (166K_1 + 54K_2 - 0.1)s + 166K_2$	52
$p_{4,1}(s, K_1, K_2) = s^5 + 4.6s^4 + 80.8s^3 + (74K_1 + 30.1)s^2 + (90K_1 + 74K_2 - 0.1)s + 90K_2$	42
$p_{4,2}(s, K_1, K_2) = s^5 + 2.8s^4 + 50.4s^3 + (74K_1 + 33.9)s^2 + (90K_1 + 74K_2 + 0.1)s + 90K_2$	60
$p_{4,3}(s, K_1, K_2) = s^5 + 4.6s^4 + 50.4s^3 + (74K_1 + 30.1)s^2 + (90K_1 + 74K_2 + 0.1)s + 90K_2$	36
$p_{4,4}(s, K_1, K_2) = s^5 + 2.8s^4 + 80.8s^3 + (74K_1 + 33.9)s^2 + (90K_1 + 74K_2 - 0.1)s + 90K_2$	42

4. CONCLUSIONS

In this work, two procedures are given for strict estimation of cutoff frequency and the constant inertia problem of a polynomial family. The cutoff frequency for a multilinear polynomial family obtained by the classical calculations can be minimized by Algorithm 1. After finding a suitable ω_c , the inertia of this family can be checked by Algorithm 2. An application of these algorithms to an interval plant family is also provided.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors would like to thank the Editor and referees for the valuable comments.

REFERENCES

- [1] Barmish BR. New Tools for Robustness of Linear Systems. Macmillan, New York, 1994.
- [2] Bhattacharyya SP, Chapellat H and Keel LH. Robust Control: The Parametric Approach. Prentice Hall PTR, 1995.
- [3] Petersen IR, Tempo R. Robust Control of Uncertain Systems: Classical Results and Recent Developments. Automatica, 50, pp 1315-1335, 2014.
- [4] Marden M. Geometry of Polynomials. American Mathematical Society, Providence, R.I., 1966.
- [5] Akyar H, Büyükköroğlu T and Dzhafarov V. On stability of parametrized families of polynomials and matrices, Abstract and Applied Analysis, vol. 2010, Article ID 687951, 16 pages, 2010.

SURFACE DISPLACEMENT FIELD OF A COATED ELASTIC HALF-SPACE UNDER THE INFLUENCE OF A MOVING DISTRIBUTIONAL LOAD

Onur ŞAHİN^{1*}, Nihal EGE²

¹Department of Mathematics, Hecemî "qî"Uelgpeg"çpf "Ctv"Giresun University, Giresun, Turkey

²Department of Mathematics, Hecemî "qî"Uelgpeg."Anadolu University, Eskişehir, Turkey

ABSTRACT

An analysis of the distributed moving load along the surface of a coated half space is presented. The formulation of the problem depends on the hyperbolic-elliptic asymptotic model developed earlier by the authors. The integral solution of the longitudinal and transverse displacements along the surface for the sub and super-Rayleigh cases are obtained by using the uniform stationary phase method. Numerical comparisons of the exact and asymptotic solutions of the longitudinal displacement are illustrated for the certain cross-sections of the profile.

Keywords: 3D elasticity, Asymptotic model, Moving load, Surface wave, Thin layer

HAREKETLİ DAĞILIMLI YÜK ETKİSİ ALTINDA KAPLAMALI BİR ELASTİK YARI UZAYIN YÜZEY YER DEĞİŞTİRME ALANI

ÖZET

Kaplamalı elastik bir yarı uzayın yüzeyi boyunca dağılımlı hareketli yükün bir analizi sunulmuştur. Problemin formülasyonu yazarlar tarafından önceden geliştirilmiş hiperbolik-eliptik modele dayanmaktadır. Sub ve süper Rayleigh durumları için yüzey boyunca boyuna ve enine yer değiştirmelerin integral çözümleri düzgün durağan faz metodu kullanılarak elde edilmiştir. Boyuna yer değiştirmenin tam ve asimptotik çözümlerinin nümerik karşılaştırmaları profilin belirli kesitleri için grafikler ile gösterilmiştir.

Anahtar Kelimeler: 3-Boyutlu elastisite, Asimptotik model, Hareketli yük, Yüzey dalgası, İnce kaplama

1. INTRODUCTION

The propagation of surface waves in elastic structures under the action of moving loads is an active area of research. It has received significant attention due to its applicability in modern engineering application ranging from dynamic response of bridges, [1,2], to the effect of high-speed vehicles to the surrounding environments (see e.g., [3,4]). Most of these problems are modelled through a two-dimensional (2D) setting, however real life problems require modelling and analysis of problems in a three-dimensional (3D) framework. Most of the works dealing with 3D problems either employ a numerical approach or leave the obtained solutions in integral forms both of which do not immediately yield to further physical analysis (a very good account of such solutions may be found in the leading texts by Achenbach [5] and Miklowitz [6]). These considerations necessitate different approaches one of which, the asymptotic approximation, is the essential theme of the current paper. The method used in this article, first introduced by Kaplunov et al. [7], relies on the relation of the longitudinal and transverse wave potentials (see eqn. (5), also Chadwick [8]) reducing the 3D problem to a pair of 2D plain problems. The model is also aimed at deriving the contribution arising from the Rayleigh surface wave. This allows one to analyse the physical parameters of the problem in a more straightforward manner.

*Corresponding Author: onur.sahin@giresun.edu.tr

In this paper the dynamic response of the surface of a coated elastic half-space to a distributional load moving with a velocity c is considered. In Section 2, the mathematical model is presented through the governing equations and boundary conditions. The problem is then scaled with respect to the thickness of the coating as well as the load speed, being closer to the surface wave speed. In Sections 3 and 4, the surface dynamics is investigated for super and sub-Rayleigh load speeds respectively. In both sections, the displacements fields are presented for the different problem parameters. The conclusions and the discussions of the obtained results are given in Section 5.

2. STATEMENT OF THE PROBLEM

We consider a 3D elastic half-space coated by a thin layer of thickness h , see Figure 1.

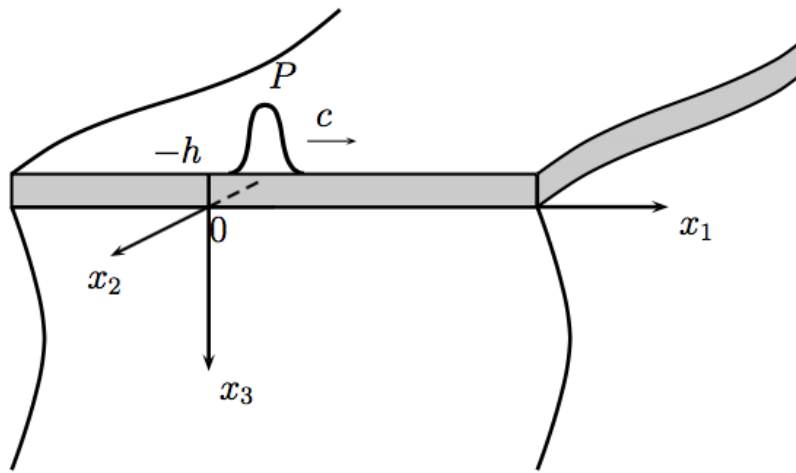


Figure 1. Coated half-space under the action of a moving distributional load

The equations of motion in 3D elasticity are adopted in their classical form [5]

$$(\lambda + \mu) \text{grad div} \mathbf{u} + \mu \Delta \mathbf{u} = \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2}, \quad (1)$$

where $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ is the displacement vector, λ and μ are Lamé constants, ρ is the volume density and Δ is 3D Laplace operator. Here, the 3D coated elastic half-space is loaded with a distributional force of amplitude P , moving along the Ox_1 axis on the surface at a constant speed c . The boundary conditions on the surface may hence be written as

$$\begin{aligned} \sigma_{i3} &= \frac{\partial u_i}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_i} = 0, & x_3 &= -h, \\ \sigma_{33} &= \lambda \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \right) + (\lambda + 2\mu) \frac{\partial u_3}{\partial x_3} = -P \frac{a}{\pi[(x_1 - ct)^2 + a^2]} \delta(x_2), & x_3 &= -h \end{aligned}$$

where σ_{i3} and σ_{33} are components of the Cauchy stress tensor, $i = 1, 2$, $\delta(\cdot)$ is Dirac delta function and a is a parameter describing the Gaussian profile of the load. Employing Helmholtz decomposition of a vector field (see, [9])

$$\mathbf{u} = \text{grad} \varphi + \text{curl} \boldsymbol{\psi}, \quad (2)$$

and approximate hyperbolic-elliptic formulation presented in [7] and [10], we obtain pseudo-elliptic equations from equation (1) in the interior $-h < x_3$ of the half-space

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x_3^2} + k_1^2 \Delta_2 \phi = 0, \quad \frac{\partial^2 \psi_i}{\partial x_3^2} + k_2^2 \Delta_2 \phi = 0, \quad i = 1, 2, \quad (3)$$

with boundary equation at $x_3 = 0$

$$\Delta_2 \phi - \frac{1}{c_R^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - \frac{bh}{k_1} \frac{\partial}{\partial x_3} (\Delta_2 \phi) = AP \frac{a}{\pi[(x_1 - ct)^2 + a^2]} \delta(x_2), \quad (4)$$

and relations between the potentials

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_i} = \frac{2}{1 + k_2^2} \frac{\partial \psi_i}{\partial x_3}, \quad i = 1, 2. \quad (5)$$

In the above formulae, the vector potential $\boldsymbol{\psi}$ is defined as $\boldsymbol{\psi} = (-\psi_2, \psi_1, 0)$, $k_i = 1 - c_R^2/c_i^2$ are the wave numbers, $\Delta_2 = \partial_{x_1}^2 + \partial_{x_2}^2$ is the 2D Laplacian, A and b are constants first defined in [10], and c_R , c_1 and c_2 are the Rayleigh, longitudinal and transverse wave speeds respectively. Solution of equation (3) may be written in symbolic form as

$$\phi(x_1, x_2, x_3, t) = \exp(-k_1 \sqrt{-\Delta_2} x_3) \phi(x_1, x_2, 0, t), \quad (6)$$

where $\sqrt{-\Delta_2}$ is a pseudo differential operator (for further details see [10]). Straightforward differentiation of (6) gives

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_3} \Big|_{x_3=0} = -k_1 \sqrt{-\Delta_2} \phi(x_1, x_2, 0, t),$$

and equation (4) can be written as

$$\Delta_2 \phi - \frac{1}{c_R^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - bh \sqrt{-\Delta_2} \Delta_2 \phi = AP \frac{a}{\pi[(x_1 - ct)^2 + a^2]} \delta(x_2). \quad (7)$$

It is a common practice that since the determination of the displacement field over the entire half-space is very difficult, if not impossible, throughout the paper we will focus on the surface displacements, i.e., displacements over $x_3 = 0$, which can be expressed through equations (2) and (5) in terms of one single potential as

$$u_i = \frac{c_R^2}{2c_2^2} \frac{\partial \phi}{\partial x_i}, \quad i = 1, 2. \quad (8)$$

We now restrict ourselves to steady-state regime with introducing moving coordinate $\chi = x_1 - ct$. Rewriting equation (7) in terms of the new coordinate we get for the super-Rayleigh ($c > c_R$) and the sub-Rayleigh ($c < c_R$) regimes

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x_2^2} - \varepsilon^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \chi^2} - bh \sqrt{-\left(\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial \chi^2}\right)} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial \chi^2}\right) = AP \frac{a}{\pi[\chi^2 + a^2]} \delta(x_2), \quad (9)$$

and

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x_2^2} + \varepsilon^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \chi^2} - bh \sqrt{-\left(\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial \chi^2}\right)} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial \chi^2}\right) = AP \frac{a}{\pi[\chi^2 + a^2]} \delta(x_2), \quad (10)$$

respectively, where

$$\varepsilon = \sqrt{1 - \frac{c^2}{c_R^2}}.$$

The small parameter ε signifies the fact that the speed of the applied load is close to the Rayleigh wave speed for which the approximate model is based on, so that $\varepsilon \ll 1$. Furthermore, thickness of the coating is taken smaller than a typical wave length (see, [11,12]). Here, it is also appropriate to expect that the distributions occur along the x_1 axis due to the direction of the movement of the load. Making use of the arguments mentioned above, it is reasonable to introduce the scaled variables

$$\chi = \frac{\xi bh}{\varepsilon^2}, \quad x_2 = \frac{\eta bh}{\varepsilon^3}. \quad (11)$$

On employing the scaling (11), equations (9) and (10) become, respectively,

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} - \sqrt{-\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2}} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} = \frac{AP}{\varepsilon} \frac{a_s}{\pi[\xi^2 + a_s^2]} \delta(\eta), \quad (12)$$

and

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} - \sqrt{-\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2}} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} = \frac{AP}{\varepsilon} \frac{a_s}{\pi[\xi^2 + a_s^2]} \delta(\eta), \quad (13)$$

where $a_s = a \varepsilon^2 / (b h)$. It is the object of next two sections to obtain the solutions of equations (12) and (13).

3. THE SUPER-RAYLEIGH REGIME

Consider first the super-Rayleigh regime. On applying the Fourier transform to equation (12) in the variable ξ , we obtain

$$\frac{d^2 \phi^F}{d\eta^2} + k^2(1 + |k|)\phi^F = \frac{AP}{\varepsilon} e^{-a_s|k|} \delta(\eta), \quad (14)$$

where

$$\phi^F(k, \eta, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(\xi, \eta, 0) e^{-ik\xi} d\xi.$$

Similarly, employing the two-sided Laplace transform, defined as

$$\phi^{FL}(k, s, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k, \eta, 0) e^{-s\eta} d\eta,$$

to equation (14) we get

$$s^2 \phi^{FL} + k^2(1 + |k|)\phi^{FL} = \frac{AP}{\varepsilon} e^{-a_s |k|},$$

which results in

$$\phi^{FL} = \frac{AP}{\varepsilon} \frac{1}{s^2 + k^2(1 + |k|)} e^{-a_s |k|}.$$

The symmetry of the transformed potential with respect to s enables the immediate use of Laplace transform tables (see, [13]) leading to

$$\phi^F = \frac{AP}{\varepsilon} \frac{\sin(|k|\sqrt{1 + |k|}|\eta|)}{|k|\sqrt{1 + |k|}} e^{-a_s |k|}.$$

The related inverse Fourier transform is then given by

$$\begin{aligned} \phi(\xi, \eta, 0) &= \frac{AP}{2\pi\varepsilon} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(|k|\sqrt{1 + |k|}|\eta|)}{|k|\sqrt{1 + |k|}} e^{-a_s |k|} e^{ik\xi} dk \\ &= \frac{AP}{\pi\varepsilon} \int_0^{\infty} \frac{\sin(k\sqrt{1 + k}|\eta|) \cos(k\xi)}{k\sqrt{1 + k}} e^{-a_s k} dk. \end{aligned} \tag{15}$$

The longitudinal and the transverse displacements, u_1 and u_2 , may be expressed, through the new variables, on the surface $x_3 = 0$ as (cf. eqn (8))

$$u_1 = \frac{\varepsilon^2 c_R^2}{2bhc_2^2} \frac{\partial \phi}{\partial \xi}, \quad u_2 = \frac{\varepsilon^3 c_R^2}{2bhc_2^2} \frac{\partial \phi}{\partial \eta}. \tag{16}$$

Let us first evaluate the longitudinal displacement u_1 , which may be written through straightforward differentiation of (15) as

$$\begin{aligned} u_1 &= -\frac{AP\varepsilon c_R^2 \operatorname{sgn}(\xi)}{2\pi bhc_2^2} \int_0^{\infty} \frac{\sin(k\sqrt{1 + k}|\eta|) \sin(k|\xi|)}{\sqrt{1 + k}} e^{-a_s k} dk \\ &= \frac{AP\varepsilon c_R^2 \operatorname{sgn}(\xi)}{4\pi bhc_2^2} \int_0^{\infty} \frac{\cos(k\sqrt{1 + k}|\eta| + k|\xi|) - \cos(k\sqrt{1 + k}|\eta| - k|\xi|)}{\sqrt{1 + k}} e^{-a_s k} dk \\ &= \frac{AP\varepsilon c_R^2 \operatorname{sgn}(\xi)}{4\pi bhc_2^2} \operatorname{Re} \left\{ \int_0^{\infty} \frac{e^{i|\xi|(k\sqrt{1+k}\mu_* + k)}}{\sqrt{1 + k}} e^{-a_s k} dk - \int_0^{\infty} \frac{e^{i|\xi|(k\sqrt{1+k}\mu_* - k)}}{\sqrt{1 + k}} e^{-a_s k} dk \right\}, \end{aligned} \tag{17}$$

where $\mu_* = |\eta/\xi|$.

Integrals appearing in eqn. (17) are frequently encountered in the dynamic surface wave propagation problems and in most cases, they are notoriously difficult to calculate if not impossible. We will therefore investigate the far-field asymptotic behaviour of the integrals as $|\xi| \gg 1$ and $\mu_* \sim 1$. It may be shown that while the first integral in (17) does not have any stationary points in the integration interval, i.e., any points for which the derivative vanishes, the second integral has one, which is obtained by taking the derivative of the exponent with respect to k , given by

$$k_* = \frac{2(1 - 3\mu_*^2 + \sqrt{1 + 3\mu_*^2})}{9\mu_*^2}.$$

Consequently, the asymptotic contribution of the first integral in (17) is negligible in comparison to the second integral. It should also be noted that the stationary point k_* coincides with the lower limit of the integral on the line of Mach cone $\mu_* = 1$ (see, [11]). Therefore, we must use the uniform stationary phase method to obtain a uniform asymptotic expansion of the considered integral, (see [14,15]). Applying the uniform stationary phase method, we get at the leading order

$$\int_0^\infty \frac{e^{i|\xi|(k\sqrt{1+k}\mu_* - k)}}{\sqrt{1+k}} e^{-a_s k} dk \sim f(k_*) \sqrt{\frac{2}{|\xi|h_1''(k_*)}} \left\{ \cos(|\xi|h_1(k_*)) \left[\sqrt{\frac{\pi}{8}} - C \left(-k_* \sqrt{\frac{|\xi|h_1''(k_*)}{2}} \right) \right] - \sin(|\xi|h_1(k_*)) \left[\sqrt{\frac{\pi}{8}} - S \left(-k_* \sqrt{\frac{|\xi|h_1''(k_*)}{2}} \right) \right] \right\}$$

where

$$h_1(k) = k\sqrt{1+k}\mu_* - k, \quad f(k) = \frac{e^{-a_s k}}{\sqrt{1+k}},$$

and $C(x)$ and $S(x)$ are the Fresnel functions, defined by

$$C(x) = \int_0^x \cos(t^2) dt, \quad S(x) = \int_0^x \sin(t^2) dt,$$

(see, [16]). Thus, the displacement u_1 is given by

$$u_1 \sim -\frac{AP\varepsilon c_R^2 \operatorname{sgn}(\xi)}{4\pi b h c_2^2} f(k_*) \sqrt{\frac{2}{|\xi|h_1''(k_*)}} \left\{ \cos(|\xi|h_1(k_*)) \left[\sqrt{\frac{\pi}{8}} - C \left(-k_* \sqrt{\frac{|\xi|h_1''(k_*)}{2}} \right) \right] - \sin(|\xi|h_1(k_*)) \left[\sqrt{\frac{\pi}{8}} - S \left(-k_* \sqrt{\frac{|\xi|h_1''(k_*)}{2}} \right) \right] \right\} \quad (18)$$

Following a similar approach for u_2 as in the preceding process, the far-field asymptotic expansion for the transverse displacement may be written as

$$u_2 \sim -\frac{AP\varepsilon^2 c_R^2 \text{sgn}(\eta)}{4\pi b h c_2^2} g(k_*) \sqrt{\frac{2}{|\xi| h_1''(k_*)}} \left\{ \cos(|\xi| h_1(k_*)) \left[\sqrt{\frac{\pi}{8}} - C \left(-k_* \sqrt{\frac{|\xi| h_1''(k_*)}{2}} \right) \right. \right. \\ \left. \left. - \sin(|\xi| h_1(k_*)) \left[\sqrt{\frac{\pi}{8}} - S \left(-k_* \sqrt{\frac{|\xi| h_1''(k_*)}{2}} \right) \right] \right] \right.$$

where

$$g(k) = e^{-a_s k}.$$

In order to illustrate the accuracy of the approximate displacements we present below graphs of the comparisons of u_1 given by (18), and the exact solution (17), both of which are scaled as

$$U_1 = \frac{4\pi b h c_2^2}{AP c_R^2 \varepsilon} u_1.$$

In Figure 2, the longitudinal cross-sectional profile of the exact and asymptotic solutions of U_1 for different values of a_s are presented. In this figure, solid lines correspond to exact solutions whereas the dashed lines correspond to asymptotic solutions. It is clearly seen in these graphs that the greater values of the parameter a_s reduces the magnitude of the displacement resulting in a more uniform distributed profile, which is an expected result (cf. [17,18]). It should be noted that the values of the parameter a_s either corresponds to the amplitude of the profile of the load for fixed values of the material parameter b and the coating thickness h ; or, to the coating thickness h for fixed values of a , and b . This allows us to arbitrarily change either the profile of the load or the coating thickness according to the desired displacement outcome.

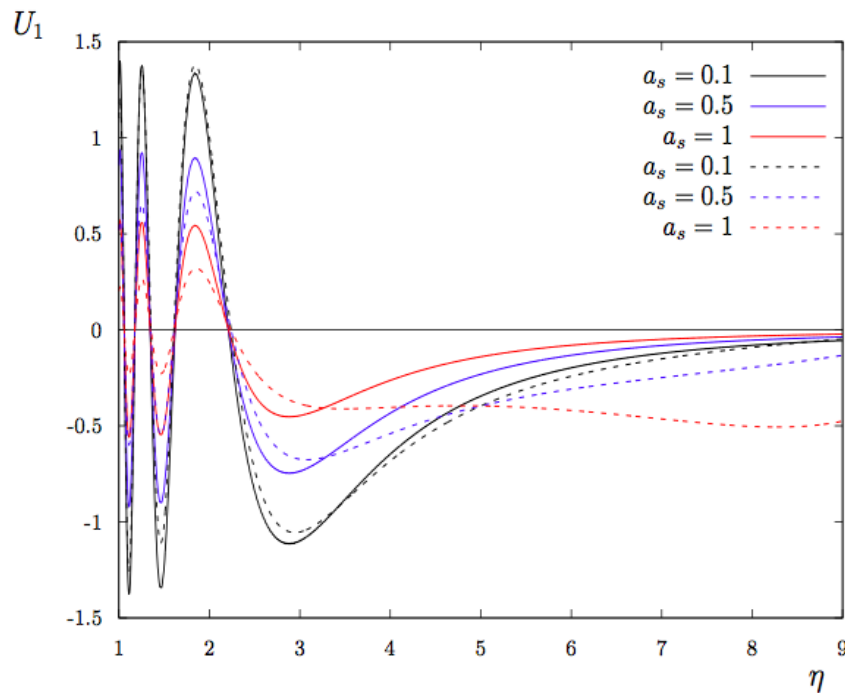


Figure 2. Super-Rayleigh displacement U_1 versus η at $\xi = 5$.

Figure 3 compares the transverse cross-sectional profile of U_1 for exact and approximate solutions for different values of a_s . Once again the displacement amplitude reduces for larger values of a_s demonstrating a smoothed displacement profile. We also would like to draw attention to the peculiar fact that, in both Figures 2 and 3 for increasing values of a_s , particularly for values greater than unity, the agreement between the exact and approximate solutions start to fail. This is not an inconsistency since the asymptotic solution is valid in the Mach cone $\mu_* = 1$ ($|\xi| = |\eta|$) (for further details see, [11,12]), and the argument of the exponential factor appearing in eqn. (18) becomes positive for certain particular values, making the displacement unbounded. However, these particular values are out of the Mach cone and therefore do not violate the validity of the obtained approximate displacement.

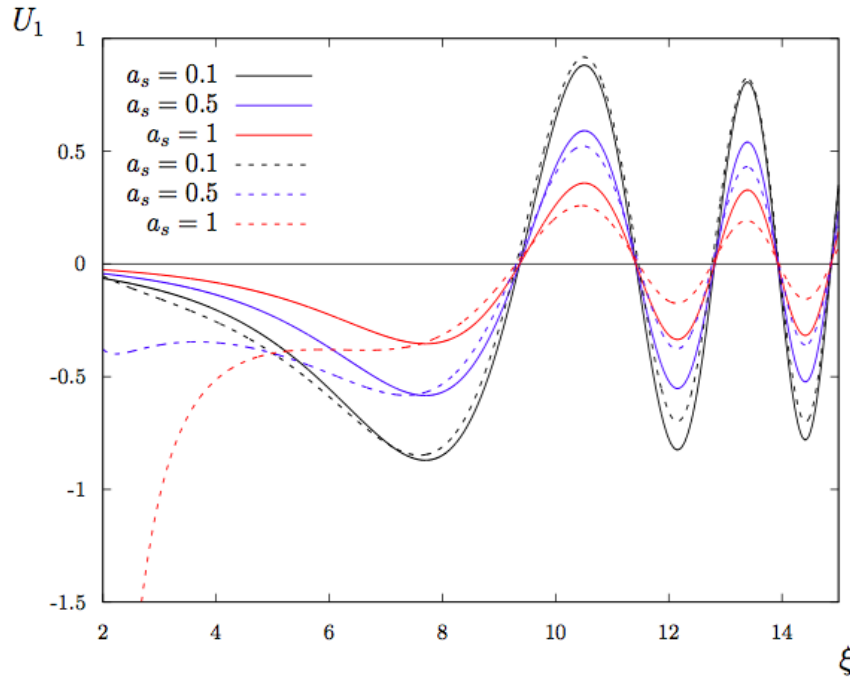


Figure 3. Super-Rayleigh displacement U_1 versus ξ at $\eta = 5$.

3. THE SUB-RAYLEIGH REGIME

We now proceed to the sub-Rayleigh regime. Taking the Fourier and Laplace transforms of equation (13) we obtain

$$\phi^{FL} = \frac{AP}{\varepsilon} \frac{1}{s^2 - k^2(1 - |k|)} e^{-a_s|k|}.$$

As before, the Laplace transform may easily be written using the symmetry of the potential in s , giving

$$\phi^F(k, \eta, 0) = \begin{cases} -\frac{AP}{\varepsilon} \frac{e^{-|k|(\sqrt{1-|k|}|\eta|+a_s)}}{2|k|\sqrt{1-|k|}}, & |k| < 1; \\ \frac{AP}{\varepsilon} \frac{e^{-a_s|k|} \sin(|k|\sqrt{|k|-1}|\eta|)}{|k|\sqrt{|k|-1}}, & |k| > 1. \end{cases}$$

Employing the inverse Fourier transform we arrive at

$$\phi(k, \eta, 0) = \frac{AP}{\pi \varepsilon} \left\{ \int_1^{\infty} \frac{e^{-a_s k} \sin(k\sqrt{k-1}|\eta|)}{k\sqrt{k-1}} \cos(k|\xi|) dk - \int_0^1 \frac{e^{-k(\sqrt{1-k}|\eta|+a_s)}}{2k\sqrt{1-k}} \cos(k\xi) dk \right\}.$$

The longitudinal surface displacement u_1 can be written from equation (16) in the following form

$$u_1(\xi, \eta, 0) = \frac{AP\varepsilon c_R^2 \text{sgn}(\xi)}{2\pi c_2^2 bh} \left[\int_0^1 \frac{e^{-k(\sqrt{1-k}|\eta|+a_s)}}{2\sqrt{1-k}} \sin(k|\xi|) dk - \int_1^{\infty} \frac{e^{-a_s k} \sin(k\sqrt{k-1}|\xi|\mu_*)}{\sqrt{k-1}} \sin(k|\xi|) dk \right]. \tag{19}$$

Considering the far-field approximation as $|\xi| \gg 1$, it may be shown that the leading order asymptotic behaviour of u_1 arises from the stationary point of the second integral in equation (19), which can be written as

$$\int_1^{\infty} \frac{\sin(k|\xi|)\sin(k\sqrt{k-1}|\xi|\mu_*)}{\sqrt{k-1}} e^{-a_s k} dk = \frac{1}{2} \text{Re} \left\{ \int_1^{\infty} \frac{e^{i|\xi|(k\sqrt{k-1}\mu_*-k)}}{\sqrt{k-1}} e^{-a_s k} dk - \int_1^{\infty} \frac{e^{i|\xi|(k\sqrt{k-1}\mu_*+k)}}{\sqrt{k-1}} e^{-a_s k} dk \right\}.$$

A change of variable $t = \sqrt{k-1}$ transforms the integrals above to

$$\int_1^{\infty} \frac{\sin(k|\xi|)\sin(k\sqrt{k-1}|\xi|\mu_*)}{\sqrt{k-1}} e^{-a_s k} dk = e^{-a_s} \text{Re} \left\{ \int_0^{\infty} e^{i|\xi|(\mu_*t^3-t^2+t\mu_*-1)} e^{-a_s t^2} dt - \int_0^{\infty} e^{i|\xi|(\mu_*t^3+t^2+t\mu_*+1)} e^{-a_s t^2} dt \right\}. \tag{20}$$

If we analyse the stationary points of the integrals in eqn. (20), we immediately observe that only the first integral in (19) has stationary points which are given by

$$t_1 = \frac{1 + \sqrt{1 - 3\mu_*^2}}{3\mu_*} \quad \text{and} \quad t_2 = \frac{1 - \sqrt{1 - 3\mu_*^2}}{3\mu_*}, \quad 0 < \mu_* \leq 1/\sqrt{3}.$$

It should be emphasized that the two stationary points converge to each other along the line $\mu_* = 1/\sqrt{3}$ which imposes the use of the stationary phase method. Thus, we are concerned with the approximate value of an integral of the form

$$\int_0^{\infty} e^{i|\xi|h_2(t,\mu_*)} g(t) dt, \tag{21}$$

where, in our specific problem,

$$h_2(t, \mu_*) = \mu_* t^3 - t^2 + \mu_* t - 1 \quad \text{and} \quad g(t) = e^{-a_s t^2}.$$

A change of variable of the form

$$h_2(t, \mu_*) = \frac{u^3}{3} - \alpha u + \beta, \tag{22}$$

introduced by Chester et al. [19], provides a means of obtaining a uniform asymptotic expansion when two stationary points coincide. Here α and β are determined as

$$\alpha = \frac{1 - 3\mu_*^2}{(3\mu_*)^{4/3}}, \quad \beta = -\frac{2}{27} \left(9 + \frac{1}{\mu_*^2} \right).$$

Substituting (22) into the integral in equation (21), we get

$$e^{i|\xi|\beta} e^{-a_s} \int_0^{\infty} e^{i|\xi|(u^3/3 - \alpha u)} p(u) du, \tag{23}$$

where

$$p(u) = e^{-a_s t^2} \frac{dt}{du},$$

and $t = t(u)$ is a single valued analytic function and derivation of $t(u)$ is given by

$$\frac{dt}{du} = \frac{u^2 - \alpha}{h_2'(t, \mu_*)_t},$$

for more details see [15]. Following Bleistein [20], $p(u)$ can be written as

$$p(u) = a_0 + b_0 u + (u^2 - \zeta)r(u),$$

where

$$a_0 = \frac{\alpha^{1/4}}{\sqrt{2}} \left[\frac{e^{-a_s t_2^2}}{\sqrt{h_2''(t_2)}} + \frac{e^{-a_s t_1^2}}{\sqrt{h_2''(t_1)}} \right],$$

and

$$b_0 = -\frac{\alpha^{-1/4}}{\sqrt{2}} \left[\frac{e^{-a_s t_2^2}}{\sqrt{h_2''(t_2)}} - \frac{e^{-a_s t_1^2}}{\sqrt{h_2''(t_1)}} \right].$$

Thus, (23) is written as

$$e^{i|\xi|\beta} e^{-a_s} \left\{ a_0 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i|\xi|(u^3/3 - \alpha u)} p(u) du + b_0 \int_{-\infty}^{\infty} u e^{i|\xi|(u^3/3 - \alpha u)} du + I(|\xi|, \alpha) \right\}, \quad (24)$$

where

$$I(|\xi|, \alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} (u^2 - \zeta) e^{i|\xi|(u^3/3 - \alpha u)} r(u) du.$$

After applying the same process for $I(|\xi|, \alpha)$ it may be seen that the asymptotic contribution of $I(|\xi|, \alpha)$ is negligible in comparison to the integrals in (24). Therefore, the asymptotic expansion of the integral given in (20) takes the form

$$\int_1^{\infty} \frac{\sin(k|\xi|) \sin(k\sqrt{k-1}|\xi|\mu_*)}{\sqrt{k-1}} e^{-a_s k} dk \sim e^{-a_s} \text{Re} \left\{ e^{i|\xi|\beta} \left(2\pi a_0 |\xi|^{-1/3} \text{Ai}(-|\xi|^{2/3} \alpha) - i 2\pi b_0 |\xi|^{-2/3} \text{Ai}'(-|\xi|^{2/3} \alpha) \right) \right\}.$$

where $\text{Ai}(x)$ is the Airy function, for more details see [16].

The resulting longitudinal displacement u_1 is then given by

$$u_1 \sim -\frac{AP\varepsilon c_R^2 \text{sgn}(\xi) e^{-a_s}}{bhc_2^2} \text{Re} \left\{ e^{i|\xi|\beta} \left(a_0 |\xi|^{-1/3} \text{Ai}(-|\xi|^{2/3} \alpha) - i b_0 |\xi|^{-2/3} \text{Ai}'(-|\xi|^{2/3} \alpha) \right) \right\}.$$

Obtaining the asymptotic expansion for the transverse displacement follows the same lines presented in detail for the longitudinal displacement, and therefore it is found as

$$u_2 \sim -\frac{AP\varepsilon^2 c_R^2 \text{sgn}(\eta) e^{-a_s}}{bhc_2^2} \text{Re} \left\{ e^{i|\xi|\beta} \left(a_1 |\xi|^{-1/3} \text{Ai}(-|\xi|^{2/3} \alpha) - i b_1 |\xi|^{-2/3} \text{Ai}'(-|\xi|^{2/3} \alpha) \right) \right\},$$

where

$$a_1 = \frac{\alpha^{1/4}}{\sqrt{2}} \left[\frac{t_2 e^{-a_s t_2^2}}{\sqrt{h_2''(t_2)}} + \frac{t_1 e^{-a_s t_1^2}}{\sqrt{h_2''(t_1)}} \right],$$

and

$$b_1 = -\frac{\alpha^{-1/4}}{\sqrt{2}} \left[\frac{t_2 e^{-a_s t_2^2}}{\sqrt{h_2''(t_2)}} - \frac{t_1 e^{-a_s t_1^2}}{\sqrt{h_2''(t_1)}} \right].$$

The longitudinal displacement U_1 is scaled, similar as in Section 2, and written as

$$U_1 = \frac{bhc_2^2}{APc_R^2\varepsilon}.$$

Figures 4 and 5 illustrate the comparisons of the exact and asymptotic displacements U_1 for the longitudinal and transverse cross sectional profiles, respectively. As before, the solid lines correspond to exact solutions and the dashed lines are the corresponding approximate solutions. Similar observations considered in the case of super Rayleigh regime apply here too, in that the smoothed displacement profiles require the values of the parameter a_s to be large. However, care must be taken in the choice of the mentioned parameter taking into account the validity region (Mach cones) of the obtained asymptotic solutions. Therefore, in the graphs, although we see a diminished displacement profile in U_1 for the particular value $a_s = 1$, the exponential factor in the asymptotic solution as well as the domain of validity of the approximation causes a discrepancy for smaller values of the variable η .

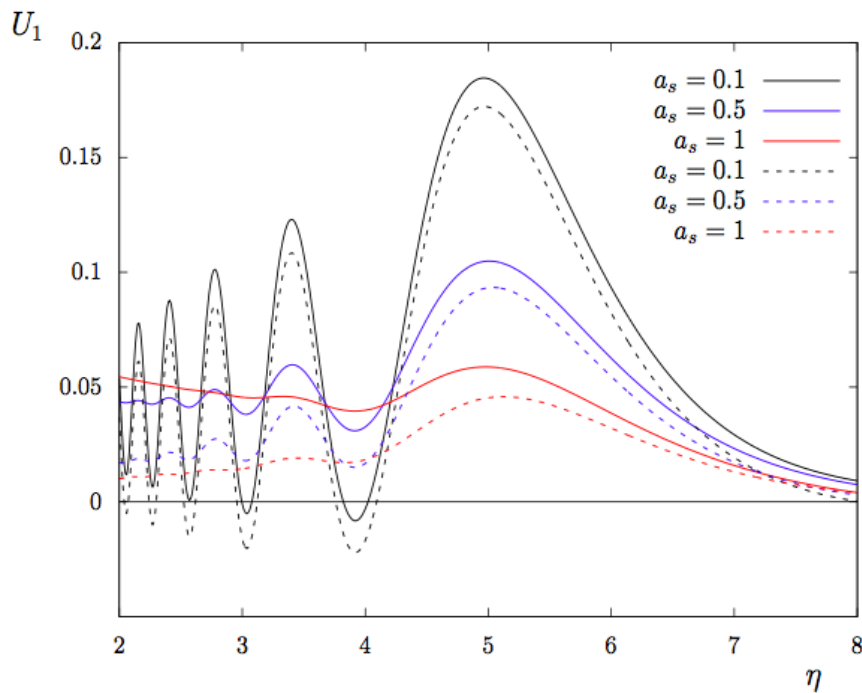


Figure 4. Sub-Rayleigh displacement U_1 versus η at $\xi = 10$.

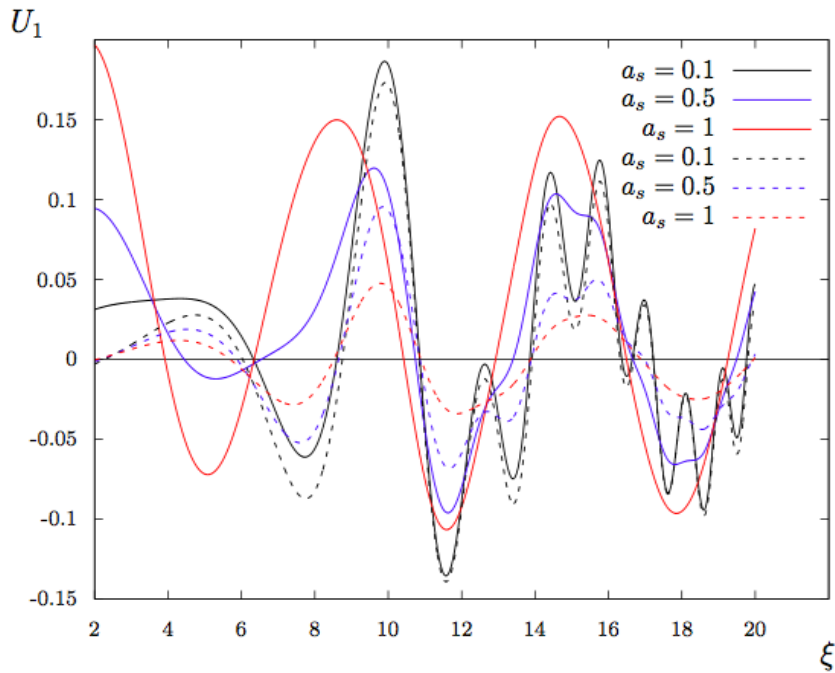


Figure 5. Sub-Rayleigh displacement U_1 versus ξ at $\eta = 5$.

4. CONCLUSION

In the present paper, the response of a 3D coated elastic half-space under the action of a distributed moving load is investigated. The displacement field is obtained through the application of an asymptotic model developed earlier by the authors. This approach reduces the 3D problem to a pair of 2D plain problems in the wave potentials, and therefore enables a convenient physical analysis of the original problem. The obtained approximate solutions for the displacement fields are expressed in terms of elementary functions differing from the known numerical solutions or solutions in terms of implicit integrals. This fact makes it possible to further examine the required elastic fields of the considered problem. The accuracy of the approximate solutions is presented by means of graphs giving comparisons of the asymptotic and exact solutions. It is clearly seen in the Figures that the effect of the coating and/or the width of the distributed load play a similar role reducing the singularity under the load encountered generally in point load problems. The parameter a_s has a two-fold role: depending on the desired smoothness of the displacement field, either the thickness of the coating or the width of the distributed load may be altered, i.e. for a very thin layer, a larger width of the load might be chosen; if the layer thickness is large, even a point load may give smoothed results. Obviously, such choices are dictated by real-life applications and adjustments might be made according to the needs of the industry.

REFERENCES

- [1] Zhu XQ and Law SS. Dynamic load on continuous multi-lane bridge deck from moving vehicles. *Journal of Sound and Vibration* 2002; 251: 697-716.
- [2] Cao Y, Xia H and Li ZA. Semi-analytical/FEM model for predicting ground vibrations induced by high-speed train through continuous girder bridge. *Journal of Mechanical Science and Technology* 2012; 26: 2485-2496.
- [3] Agostinacchio M, Ciampa D, Diomedì M, and Olita S. Parametrical analysis of the railways dynamic response at high speed moving loads. *J. Mod. Transp* 2013; 21: 169-181.

- [4] El Kacimi A, Woodward PK, Laghrouche O, and Medero G. Time domain 3D finite element modelling of train-induced vibration at high speed. *Comput. Struct.* 2013; 118: 66-73.
- [5] Achenbach JD. *Wave propagation in elastic solids*, North-Holland, Amsterdam, 1973.
- [6] Miklowitz J. *The theory of elastic waves and waveguides*, Elsevier, 2012.
- [7] Kaplunov J, Zakharov A and Prikazchikov DA. Explicit models for elastic and piezoelectric surface waves. *IMA J. Appl. Math.* 2006; 71: 768-782.
- [8] Chadwick P. Surface and interfacial waves of arbitrary form in isotropic elastic media, *J. of Elasticity* 1976; 6: 73-80.
- [9] Courant R and Hilbert D. *Methods of Mathematical Physics*, John Wiley & Sons, 1989.
- [10] Dai HH, Kaplunov J and Prikazchikov DA. A long-wave model for the surface elastic wave in a coated half-space. *Proc. R. Soc. A.* 2010; 466: 3097–3116.
- [11] Kaplunov JD, Prikazchikov DA, Erbaş B, and Şahin O. On a 3D moving load problem for an elastic half space. *Wave Motion* 2013; 50: 1229–1238.
- [12] Erbaş B, Kaplunov J, Prikazchikov DA and Şahin O. The near-resonant regimes of a moving load in a 3D problem for a coated elastic half space. *Math. Mech. Solids* 2014; doi: 10.1177/1081286514555451.
- [13] Debnath L, and Dambaru B. *Integral transforms and their applications*, CRC press, 2014.
- [14] Borovikov VA. *Uniform stationary phase method*, Institution of Electrical Engineers, London, 1994.
- [15] Wong R. *Asymptotic Approximations of Integrals*, Academic Press, 2014.
- [16] Abramowitz M and Stegun IA. *Handbook of mathematical functions*, Dover Publications, New York, 2012.
- [17] Erbaş B, Şahin O. On the causality of the Rayleigh wave. *Journal of mechanics of materials and structures* 2016, 11: 449-461.
- [18] Erbaş B, Şahin O, Ege N. Response of a 3D elastic half-space to a distributed moving load. *Hacettepe Journal of Mathematics and Statistics*, in press.
- [19] Chester C, Friedman B, and Ursell F. *An extension of the method of steepest descents*, Cambridge University Press, 1957.
- [20] Bleistein N. Uniform asymptotic expansions of integrals with many nearby stationary points and algebraic singularities. *Journal of Mathematics and Mechanics* 1967; 17: 533-559.

A MECHANISTIC STUDY ON THE REACTIONS OF VINYL CARBENE WITH HYDROGEN, CARBON MONOXIDE AND CARBON DIOXIDE: SHED LIGHT ON FURTHER MANIPULATIONS

Cem Burak YILDIZ*

Department of Medicinal and Aromatic Plants, University of Aksaray, 68100, Aksaray, Turkey

ABSTRACT

Density Functional calculations have been used to explore the potential energy profiles of H₂, CO, and CO₂ activation reactions by vinyl carbene structure **1**. The reactions of vinyl carbene **1** with CO₂ was proposed to yield a variety of possible products (**3–5**) depending on its selectivity. The density functional calculations established that the proposed reactions of **1** with CO₂ proceed in a *concerted* or *stepwise* manners to form **3** and **5**. However, that of CO reaction occur in only concerted fashion for the proposed products **15** and **16**. Furthermore, the compound **1** is found to be most reactive than **5** and **16** towards H₂ with the required lower energy barrier. Finally, the more dominant routes are determined to be formation processes of **3**, **4**, and **10**.

Keywords: Vinyl carbene, Small molecule activation, DFT, CO, CO₂

VİNİL KARBEN YAPISININ HİDROJEN, KARBON MONOKSİT VE KARBON DİOKSİT İLE TEPKİMELERİ ÜZERİNE MEKANİSTİK BİR ÇALIŞMA: İLERİ ÇALIŞMALARA BİR İŞİK

ÖZET

Yoğunluk fonksiyoneli teorisi H₂, CO ve CO₂ moleküllerinin vinil karben **1** bileşiği ile aktivasyonu sonucu oluşan enerji yüzeylerini incelemek için kullanılmıştır. Seçiciliğe bağlı olarak vinil karben **1** bileşiğinin CO₂ molekülü ile tepkimesi çeşitli muhtemel ürünlerin (**3–5**) oluşabileceğini önermektedir. Yoğunluk fonksiyoneli teorisi hesaplamaları **3** ve **5** numaralı ürünlerin oluşum tepkimelerinin *tek basamak* veya *basamak basamak* mekanizmalar üzerinden yürüyebileceğini göstermektedir. Buna karşın, **1** numaralı yapının CO ile tepkimesi sonucunda olası ürünler **15** ve **16** yalnızca tek basamak içermektedir. Dahası, H₂ aktivasyon tepkimeleri değerlendirildiğinde **1** numaralı yapının **5** ve **16** numaralı yapılara nazaran daha reaktif olduğu elde edilen enerji bariyerleri ile tespit edilmiştir. Sonuç olarak, en uygun mekanizmalar **3**, **4** ve **10** numaralı yapıların oluşumları için tespit edilmiştir.

Anahtar Kelimeler: Vinil karben, Küçük molekül aktivasyonu, DFT, CO, CO₂

1. INTRODUCTION

Alkylidene carbenes, alkenylidenes, have been known as highly reactive intermediates in organic chemistry [1–5]. Several methods have been improved to generate these highly reactive intermediates [6–13]. In the past few decades, the alkenylidenes have attracted considerable attention due to their role in many organic reactions. They play obvious roles in many organic synthesis with high levels of selectivity [14–25]. Furthermore, the cycloaddition of unsaturated carbenes can provide the synthesis of small ring, highly strained compounds by conventional ways. The 3–dimensional selectivity of substitute groups from the addition reactions of alkylidene carbene to olefins was exemplified in a collaboration of Apeloig and Fox [26,27]. As it can be seen from the literature, there are many reports and discussions on theoretical studies of alkylidene carbenes [28–32]. However, no scientific study has been reported on the activation of small molecules by alkylidene carbenes so far.

*Corresponding Author: cemburakyildiz@aksaray.edu.tr

In the present computational study, we would like to distil a general message for the behavior of heavier vinyl carbenes towards hydrogen (H_2), carbon monoxide (CO), and carbon dioxide (CO_2). With this incentive, we started by calculations of the energy profiles for the oxidative addition reactions of the considered small molecules with vinyl carbene **1** on the basis of proposed mechanisms: The reactions may proceed in either *concerted* or *stepwise* fashion to yield variety of different possible products. As we show here, the ketene + CO complex **4** and a kind of cyclic carbene **5** can be generated from the proposed reaction of **1** with CO_2 . Although formation process of **4** is determined to be exergonic, that of constitutional isomer **5** has an endergonic nature with nonspontaneous character. On the other hand, the proposed reaction of **1** with CO depict that the formation of proposed products **17** and **18** are strongly endergonic at the level of theories used herein. Furthermore, the H_2 activation by **1** is found to be more favored than **5** and **18** with the lower energy barriers.

2. COMPUTATIONAL DETAILS

Initially, all manipulations were performed using the Gaussian 09 suite of programs [33]. In order to optimize the structures on their potential energy surface in gas phase, Becke's three-hybrid method and the exchange functional of Lee, Yang, and Parr (B3LYP) theory was employed with the 6-311++G(d,p) basis set [34,35]. Further, the calculations were repeated with full geometry optimizations at newer theory level of WB97XD/6-311++G(d,p) [36]. The stationary points were characterized as minima or transition structures by vibrational frequency calculations, and all relative energies reported here are Gibbs free energies in $kcal\ mol^{-1}$. The intrinsic reaction coordinates (IRC) were also followed to verify the energy profiles connecting each transition state to the correct local minima, by using the second-order Gonzalez-Schlegel method [37,38]. The computed structures were visualized by using the GaussView 5.0 program [39].

3. RESULTS and DISCUSSION

From the theoretical calculations, vinylidene carbene **1** is known to be singlet ground state ($\Delta_{S-T} = 48\ kcal\ mol^{-1}$) [40]. Due to the high singlet-triplet energy separations, we consider only singlet state of **1** for oxidative addition of H_2 , CO, and CO_2 . Several conceptually different pathways have been proposed to explain the ability of vinylidene **1** to activate the related small molecules.

The reaction mechanisms of **1** with carbon dioxide (CO_2) was investigated in this part. The reaction can take place via **TS1**, **TS6**, and **TS7** which lead to diverse products such as **3**, **5**, and **4**, respectively. The [1+2] addition of **1** to CO_2 is found to be slightly exergonic to form proposed product **3** via **TS1** in a *concerted* manner by $\Delta G = -2.4\ kcal\ mol^{-1}$ and $-5.6\ kcal\ mol^{-1}$ at the B3LYP/6-311++G(d,p) and WB97XD/6-311++G(d,p) level of theories, respectively (Table 1 and Figure 1, black arrows). Then, the intramolecular rearrangement of **3** can be considered to form another possible products of **4** (ketene + CO) by the required energy barrier of $\Delta G^\ddagger = +5.9\ kcal\ mol^{-1}$, so that the overall pathway for **4** starting from **1** is decidedly exergonic by $\Delta G = -36.1\ kcal\ mol^{-1}$ at the B3LYP/6-311++G(d,p) level of theory (Table 1 and Figure 1, red arrows). Moreover, the calculation at the WB97XD/6-311++G(d,p) level is very similar by $\Delta G = -35.4\ kcal\ mol^{-1}$. Based on the theoretical results, the formation of **4** can also be evaluated with direct attack of **1** to oxygen atom of CO_2 via **TS7** by the required very high energy barrier of $\Delta G^\ddagger = +47.5\ kcal\ mol^{-1}$, the overall pathway of *concerted* mechanism is determined to be also strongly exergonic by $\Delta G = -36.1\ kcal\ mol^{-1}$ (Table 1 and Figure 1, blue arrows). Next, we considered how to incorporate the product **5** from the reaction of **1** with CO_2 and intermolecular rearrangement of **4**. The [2+2] cycloaddition of **1** to CO_2 can also yield the product **5** by considerably high energy barrier of $\Delta G^\ddagger = +47.4\ kcal\ mol^{-1}$ (Table 1 and Figure 1, green arrows). In this case, the nature of the proposed reaction for **5** via **TS6** is found to be endergonic by $\Delta G = +18.2\ kcal\ mol^{-1}$. The related energy barrier and overall pathway at the WB97XD/6-311++G(d,p) level are determined to be relatively lower by $\Delta G^\ddagger = +43.6\ kcal\ mol^{-1}$ and $\Delta G = +11.7\ kcal\ mol^{-1}$, respectively. Similarly, the formation of **5** is also to be existed endergonic from intermolecular rearrangement of **4** (Table 1 and Figure 1, pink arrows).

Collectively, the dominant reaction route for the reaction **1** with CO₂ is determined to be formation process of **4** via **TS1** and **TS2** with the observed lower energy barriers. Another interesting point is that inclusion of dispersion by WB97XD, which uses a version of Grimme's D2, leads to negligible differences in terms of the energetics and nature of the proposed pathways. For this reason, the following discussions will be based on the results at the B3LYP/6-311++G(d,p) level of theory.

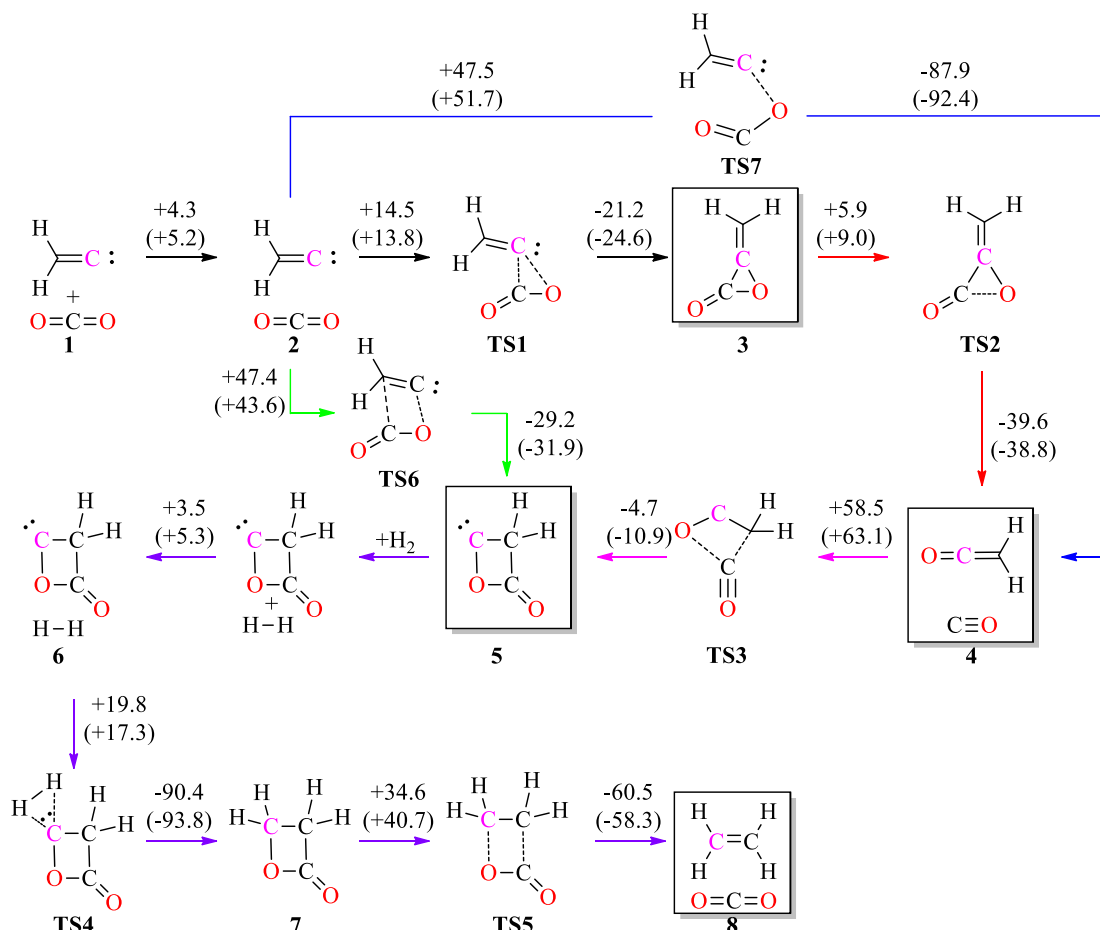


Figure 1. The proposed reaction mechanisms and energy channel for the reaction of vinyl carbene **1** with CO₂ and further H₂ activation at the B3LYP/6-311++G(d,p) and WB97XD/6-311++G(d,p) (in parentheses) level of theories (ΔG energies given in kcal mol⁻¹)

We believe that it is possible to generate **5** from **1** + CO₂ at sufficiently high temperature. In this case, it can be designed the formation of ethylene from the hydrogenation of **5**. The addition of H₂ to the resulting product **5** begins with the formation of van der Waals complex **6** which is determined to be of higher in energy than the **5** + H₂ by $\Delta G = 3.5$ kcal mol⁻¹. Then, the required energy barrier to form **8** is to be existed $\Delta G^\ddagger = +19.8$ kcal mol⁻¹ with strongly exergonic nature. The DFT calculations indicate that the liberation of CO₂ from the optimized structure **7** leads to the formation of **8** (ethylene + CO₂) by the considerably high energy barrier of $\Delta G^\ddagger = +34.6$ kcal mol⁻¹, so that the overall pathway for **8** starting from **6** is decidedly exergonic by $\Delta G = -96.5$ kcal mol⁻¹ (Figure 1, purple arrows).

Table 1. Calculated energy channel for the activation of CO₂ and H₂ by **1** and **5** at the B3LYP/6-311++G(d,p) and WB97XD/6-311++G(d,p) (in parentheses) level of theories (ΔG energies given in kcal mol⁻¹)

CO ₂ activation by 1	Energy Channel	H ₂ Activation by 5	Energy Channel
1 → 2	+4.3 (+5.2)	5 → 6	+3.5 (+5.3)
2 → TS1	+14.5 (+13.8)	6 → TS4	+19.8 (+17.3)
TS1 → 3	-21.2 (-24.6)	TS4 → 7	-90.4 (-93.8)
3 → TS2	+5.9 (+9.0)	7 → TS5	+34.6 (+40.7)
TS2 → 4	-39.6 (-38.8)	TS5 → 8	-60.5 (-58.3)
4 → TS3	+58.5 (63.1)		
TS3 → 5	-4.7 (-10.9)		
2 → TS6	+47.4 (+43.6)		
TS6 → 5	-29.2 (-31.9)		
2 → TS7	+47.5 (+51.7)		
TS7 → 4	-87.9 (-92.4)		

Additionally, the activation of H₂ by **1** is also considered in the presented theoretical study. The modelled mechanism for the direct addition of H₂ to **1** occurs in a *concerted* manner to yield ethylene **10** by the relatively lower energy barrier of $\Delta G^\ddagger = +12.6$ kcal mol⁻¹ as compared to that of **5** (Table 2 and Figure 2, black arrows). Overall, the reaction is determined to be strongly exergonic by $\Delta G = -79.0$ kcal mol⁻¹. The activation of H₂ by **1** to generate an ethylene molecule is found to be slightly favorable than that of **5** with the lower energy barrier although the exergonic character of the pathway for **5** + H₂ is stronger. Furthermore, the mechanistic scenario for the activations of CO and CO₂ by ethylene molecule **10** were examined. As it can be seen from Figure 2, all the proposed mechanisms were determined to be strongly endergonic, showing that the reactions are nonspontaneous and not favorable (Table 2 and Figure 2, red, blue, and green arrows).

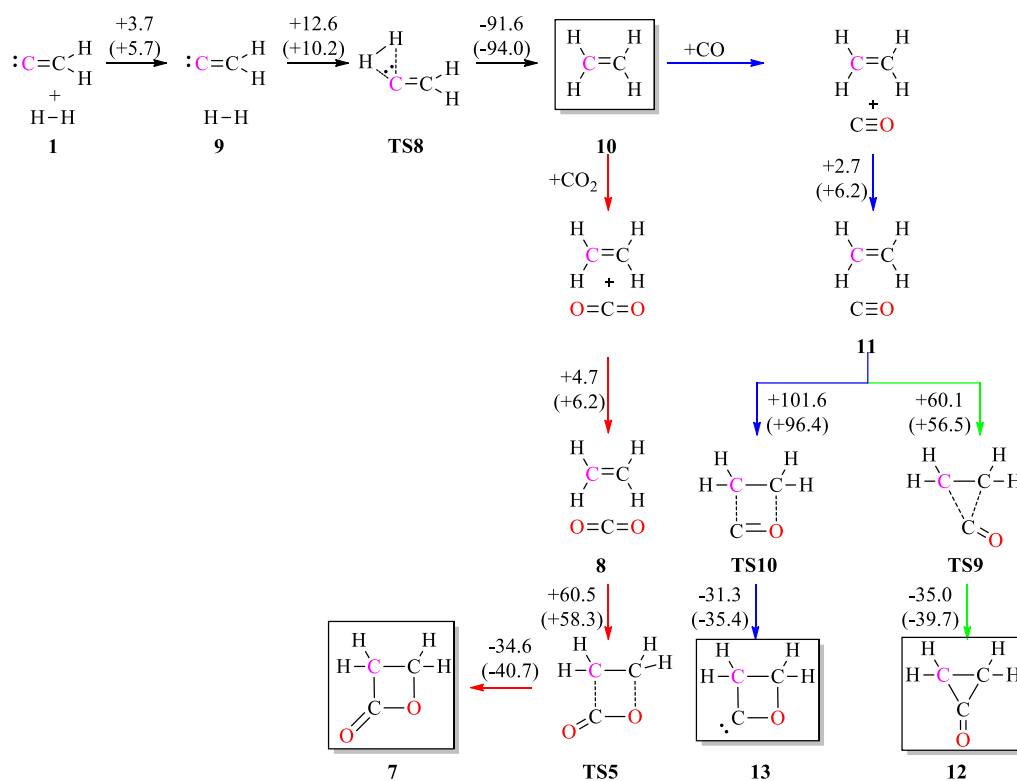
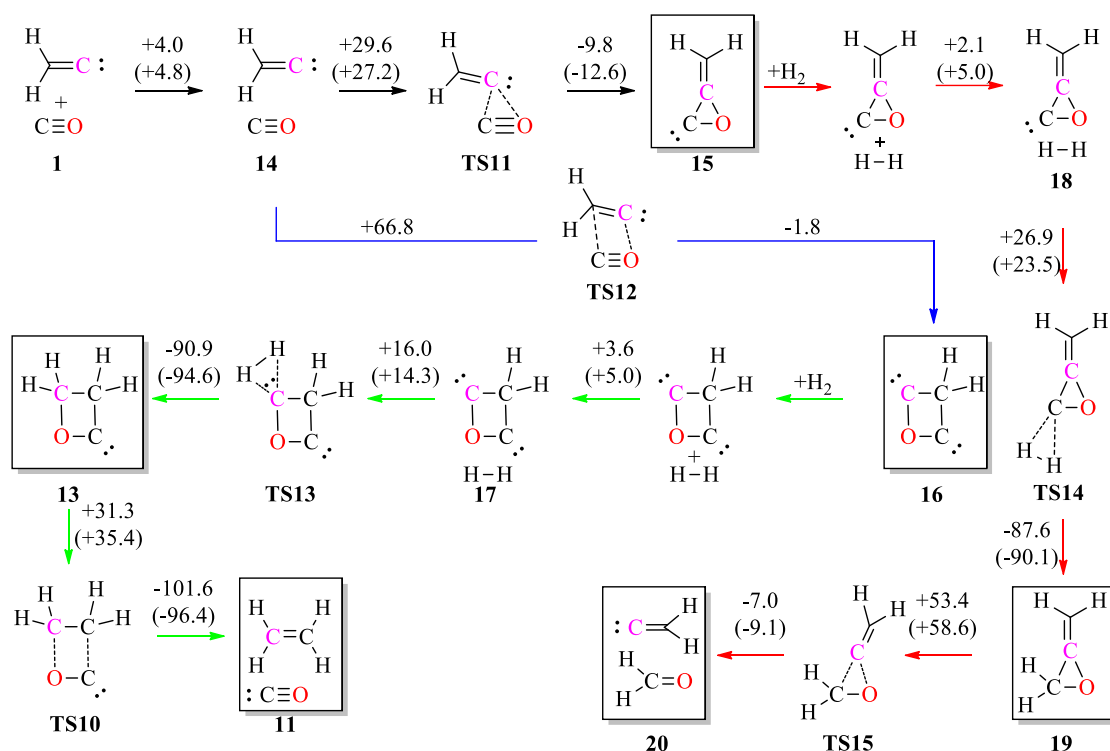
**Figure 2.** The proposed reaction mechanism for the reaction of vinyl carbene **1** with H₂ and further CO and CO₂ activations at the B3LYP/6-311++G(d,p) and WB97XD/6-311++G(d,p) (in parentheses) level of theories (ΔG energies given in kcal mol⁻¹)

Table 2. Calculated energy channel for the activation of H₂, CO, and CO₂ by **1** and **10** at the B3LYP/6–311++G(d,p) and WB97XD/6–311++G(d,p) (in parentheses) level of theories (ΔG energies given in kcal mol⁻¹)

H ₂ activation by 1	Energy Channel	CO and CO ₂ Activation by 10	Energy Channel
1 → 9	+3.7 (+5.7)	10 → 8	+4.7 (+6.2)
9 → TS8	+12.6 (+10.2)	8 → TS5	+60.5 (+58.3)
TS8 → 10	-91.6 (-94.0)	TS5 → 7	-34.6 (-40.7)
		10 → 11	+2.7 (+6.2)
		11 → TS9	+60.1 (+56.5)
		TS9 → 12	-35.0 (-39.7)
		11 → TS10	+101.6 (+96.4)
		TS10 → 13	-31.3 (-35.4)

In order to test the possibility of the CO activation by vinyl carbene **1**, the DFT calculations were carried out for the modelled system. Two competitive *concerted* pathways can be considered from intermolecular rearrangement of **1** and CO to form the possible products of **15** and **16**. In accordance with the activation mechanism of CO₂, the CO included trends follow almost same order to form related proposed products with [1+2] and [2+2] cycloaddition steps via **TS11** and **TS12**, respectively. Although the possible [1+2] addition step of **1** to CO₂ for **3** needs lower energy barrier with exergonic nature, the overall pathway for **15** is determined to be strongly endergonic by $\Delta G = 17.1$ kcal mol⁻¹ in the case of CO, indicating that the reaction cannot occur spontaneously (Table 3 and Figure 3, black arrows). Based on the theoretical results, the formation of **16** is also plausible from the reaction of **1** with CO. For this reason, the formation mechanism of **16** was also designed. By this way, we can reach a dicarbene compound **16**. However, the calculations show that the formation of **16** is strongly endergonic and the required energy barrier is too high for a reaction at room temperature (Table 3 and Figure 3, blue arrows).

**Figure 3.** The proposed reaction mechanisms for the reaction of vinyl carbene **1** with CO and further H₂ activation at the B3LYP/6–311++G(d,p) and WB97XD/6–311++G(d,p) (in parentheses) level of theories (ΔG energies given in kcal mol⁻¹).

In case of any possible synthesis of **15** and **16** at sufficiently high temperature, we also designed their H₂ activation mechanisms to generate **11** (ethylene + CO) and **20** (Vinylidene carbene + formaldehyde). The direct addition of H₂ to the proposed product **15** can form the related van der Waals complex of **18** which is more stable than **15** + H₂ by $\Delta G = -2.1$ kcal mol⁻¹ (Table 3 and Figure 3, red arrows). Clearly, the hydrogenation of the **15** can proceed by direct addition of H₂ to the carbenic center of **15** via **TS14**. This process requires 26.9 kcal mol⁻¹ energy barrier to overcome for the formation of **19**. Then, the decomposition of **19** to form **20** can be activated with the cleavage of C–C and C–O bonds in a *concerted* manner by the very high energy barrier of $\Delta G^\ddagger = +53.4$ kcal mol⁻¹ (Table 3 and Figure 3, red arrows). Separately, the calculations indicate that the addition of H₂ can be feasibly binded to the one of the carbenic centers in **16**, forming possible compound **13** by the required relatively lower energy barrier of $\Delta G^\ddagger = +16.0$ kcal mol⁻¹ (Table 3 and Figure 3, green arrows). We found that the formation processes of **13** from the van der Waals complex of **17** is strongly exergonic by $\Delta G = -74.9$ kcal mol⁻¹. Additionally, the subsequent CO elimination from the structure **13** was also investigated. In the following rearrangement, it is possible to yield the ethylene + CO mixture **11** via the transition state of **TS10** and the process is exergonic by $\Delta G = -70.5$ kcal mol⁻¹. (Figure 3). Overall, the reaction starting from **17** is determined to be strongly exergonic by $\Delta G = -145.4$ kcal mol⁻¹.

Table 3. Calculated energy channel for the activation of CO and H₂ by **1**, **15** and **16** at the B3LYP/6–311++G(d,p) and WB97XD/6–311++G(d,p) (in parentheses) level of theories (ΔG energies given in kcal mol⁻¹).

CO activation by 1	Energy Channel	H ₂ Activation by 15 and 16	Energy Channel
1 → 14	+4.0 (+4.8)	15 → 18	+2.1 (+5.0)
14 → TS11	+29.6 (27.2)	18 → TS14	+26.9 (+23.5)
TS11 → 15	-9.8 (-12.6)	TS14 → 19	-87.6 (-90.1)
14 → TS12	+66.8 (+62.4)	19 → TS15	+53.4 (+58.6)
TS12 → 16	-1.8 (-2.7)	TS15 → 20	-7.0 (-9.1)
		16 → 17	+3.6 (+5.0)
		17 → TS13	+16.0 (+14.3)
		TS13 → 13	-90.9 (-94.6)
		13 → TS110	+31.3 (+35.4)
		TS110 → 11	-101.6 (-96.4)

4. CONCLUSION

Using B3LYP theory with 6–311++G(d,p) basis set, the activation reaction mechanism of H₂, CO, and CO₂ by **1**, **5**, **10**, **15**, and **16** were studied. The calculations depict that the reactions may proceed in either *concerted* or *stepwise* fashion to yield a variety of different possible products. The proposed reactions can occur in *concerted* and *stepwise* manners to generate **3**, **4**, or **5** from **1** + CO₂. The nature of the formation process of **4** is strongly exergonic, whereas that of constitutional isomer **5** is determined to be endergonic with the proposed mechanisms. Additionally, the activation of H₂ by **5** was also considered in the presented theoretical study. The computed relative ΔG energies indicated that the formation of **8** (ethylene + CO₂) is exergonic with energy of -96.5 kcal mol⁻¹ at the B3LYP/6–311++G(d,p) level of theory. In the case of CO activation by **1**, the proposed reactions is strongly endergonic for both products **15** and **16**. In spite of this, however, the required energy for the activation of H₂ by **16** is relatively lower with $\Delta G^\ddagger = +16.0$ kcal mol⁻¹. Overall, the formation process of **11** starting from **17** is determined to be strongly exergonic by $\Delta G = -145.4$ kcal mol⁻¹. Collectively, the formation processes of **3**, **4**, and **10** are found to be favorable with the obtained facile energy values.

REFERENCES

- [1] Kirmse W. Carbene Chemistry, 2nd ed. New York, NY, USA: Academic Press, 1971.
- [2] Gilchrist T. L. Carbenes and Nitrenes, in Organic Reaction Mechanisms. Chichester, UK: Wiley, 1972.
- [3] Wentrup C. Reactive Molecules. New York, NY, USA: Wiley, 1984.
- [4] Doyle MP, Forbes DC. Recent advances in asymmetric catalytic metal carbene transformations. *Chem Rev.* 1998; 98: 911–935.
- [5] Richard SG, Kevin RM. Recent advances in alkylidene carbene chemistry. *Tetrahedron* 2015; 71: 7795–7835.
- [6] Ohira S, Sawamoto T, Yamato M. Synthesis of (–)-neplanocin A via C–H insertion of alkylidenecarbene. *Tetrahedron Lett.* 1995; 36: 1537–1538.
- [7] Eisler S, Tykwinski RR. Migrating alkynes in vinylidene carbenoids: An unprecedented route to polyynes. *J Am Chem Soc.* 2000; 122: 10736–10737.
- [8] Van Nhien AN, León R, Postel D, Carreiras MC, García AG, Marco-Contelles J. 1,6-C-H and 1,5-O-Si insertion reactions of alkylidenecarbene derivatives of monosaccharides. *J Carbohyd Chem.* 2005; 24: 369–377.
- [9] Tsai CC, Chien CT, Chang YC, Lin HC, Yan TH. Intramolecular C–H insertion by an alkylidene carbene: Diastereoselective Synthesis of a Taxol A Ring Synthon. *J Org Chem.* 2005; 70: 5745–5747.
- [10] Satoh T. Recent advances in the chemistry of magnesium carbenoids. *Chem Soc Rev.* 2007; 36: 1561–1572.
- [11] Satoh T. Recent Advances in the chemistry and synthetic uses of magnesium carbenoids. *Heterocycles* 2012; 85: 1–33.
- [12] Quinodoz P, Wright K, Drouillat B, David O, Marrot J, Couty F. Synthesis of homopropargylamines from 2-cyanoazetidines. *Chem Commun.* 2016; 52: 10072–10075.
- [13] Frihed TG, Bols M, Pedersen CM. C–H Functionalization on carbohydrates. *European J Org Chem.* 2016; 16: 2740–2756.
- [14] Stang PJ. Unsaturated carbenes. *Chem Rev* 1978; 78: 383–405.
- [15] Stang PJ, Fisk TE. Extended unsaturated carbenes. Generation and nature of alkadienylidenecarbenes. *J Chem Soc* 1980; 102: 6813–6816.
- [16] Stang, PJ. Vinyl carbamates via interaction of alkylidenecarbenes with isocyanates. *J Organomet Chem.* 1981; 46: 4585–4586.
- [17] Stang PJ, Bjork JA. Reaction of isopropylidenecarbene with isonitriles. Evidence for the formation of alkadienylideneamine. *Chem Commun* 1978; 23: 1057–1058.

- [18] Brown RFC, Eastwood FW, Harrington KJ, McMullen GL. Methyleneketenes and methylenecarbenes. *Aust J Chem.* 1974; 27: 2393–2402.
- [19] Feldman KS, Perkins AL. 1,6-C–H insertion of alkylidenecarbenes in 1-naphthol and 1-anthrol derivatives. *Tetrahedron Lett.* 2001; 42: 6031–6033.
- [20] Bonomo L, Stern C, Solari E, Scopelliti R, Floriani C. Acetylenes rearranging on Ruthenium–Porphyrinogen and leading to vinylidene and carbene functionalities. *Angew Chem Int Ed* 2001; 40: 1449–1452.
- [21] Ciardi, C.; Reginato, G.; Gonsalvi L, de los Rios I, Romerosa A, Peruzzini M. Ruthenium(II) π -alkyne and vinylidene complexes derived from glycoynitols: New precursors for water-soluble unsaturated carbenes. *Organometallics.* 2004; 23: 2020–2026.
- [22] Cheng CJ, Tong HC, Fong YH, Wang PY, Kuo YL, Lo YH, Lin CH. Reactions of $\text{Tp}(\text{NH}=\text{CPh}_2)(\text{PPh}_3)\text{Ru}-\text{Cl}$ with $\text{HC}\equiv\text{CPh}$ in the presence of H_2O : insertion/hydration products *Dalton Trans.* 2009; 4435–4438.
- [23] Ma ESF, Patrick BO, James BR. Reactions of phenylacetylene and p-tolylacetylene with a five-coordinate RuII complex. *Inorg Chim Acta.* 2013; 408: 126–130.
- [24] Bucher J, Stoßer T, Rudolph M, Rominger F, Hashmi ASK. CO Extrusion in homogeneous gold catalysis: Reactivity of gold acyl species generated through water addition to gold vinylidenes. *Angew Chem Int Ed* 2015; 54: 1666–1670.
- [25] Raubenheimer HG. Gold acyl complex formation and decarbonylation during indene synthesis from catalytically active vinylidene complexes. *ChemCatChem.* 2015; 7: 1261–1262.
- [26] Apeloig Y, Karni M, Stang PJ, Fox DP. Transition-state geometries and stereoselectivity of alkylidenecarbene addition to olefins. An experimental and theoretical investigation. *J Am Chem Soc* 1983; 105: 4781–4792.
- [27] Fox DP, Stang PJ, Apeloig Y, Karni M. Stereoselectivity of alkylidenecarbene addition to olefins. 2. Effect of orbital polarization in the alkenes. *J Am Chem Soc* 1986; 108: 750–756.
- [28] Lu XH, Wang YX. Theoretical studies on mechanisms of cycloaddition reaction between dichlorovinylidene and formaldehyde: *Concerted* and *Stepwise*? *J Phys Chem A* 2003; 107: 7885–7890.
- [29] Lu XH, Wu WR, Yu HB, Yang XL, Xu YH. A theoretical study on the mechanism of cycloaddition reaction between vinylidene and acetone. *J Mol Struct (Theochem)* 2005; 755: 39–44.
- [30] Lu XH, Yu HB, Wu WR, Xu YH. Theoretical studies of mechanisms of cycloaddition reaction between difluoromethylene carbene and acetone. *Int J Quantum Chem* 2007; 107: 451–457.
- [31] Lu XH, Xiang PP, Wu WR, Che X. Theoretical study on mechanism of cycloaddition reaction between dimethyl methylene carbene and ethylene. *J Mol Struct (Theochem)* 2008; 853: 82–88.
- [32] Lu X, Lian Z, Li Y. An ab initio study of the mechanism of the cycloaddition reaction forming bicyclic compounds between vinylidene ($\text{H}_2\text{C}=\text{C}$) and ethylene. *J Serb Chem Soc* 2011; 76: 743–749.
- [33] Frisch MJ, Trucks GW, Schlegel HB, Scuseria GE, Robb MA, Cheeseman JR, Montgomery Jr JA, Vreven T, Kudin K.N, Burant J.C, Millam J.M, Iyengar SS, Tomasi J, Barone V, Mennucci B, Cossi M,

Scalmani G, Rega N, Petersson GA, Nakatsuji H, Hada M, Ehara M, Toyota K, Fukuda R, Hasegawa J, Ishida M, Nakajima T, Honda Y, Kitao O, Nakai H, Klene M, Li X, Knox JE, Hratchian HP, Cross JB, Bakken V, Adamo C, Jaramillo J, Gomperts R, Stratmann RE, Yazyev O, Austin AJ, Cammi R, Pomelli C, Ochterski JW, Ayala PY, Morokuma K, Voth GA, P Salvador, Dannenberg JJ, Zakrzewski VG, Dapprich S, Daniels AD, Strain MC, Farkas O, Malick DK, Rabuck AD, Raghavachari K, Foresman JB, Ortiz JV, Cui Q, Baboul AG, Clifford S, Cioslowski J, Stefanov BB, Liu G, Liashenko A, Piskorz P, Komaromi I, Martin RL, Fox DJ, Keith T, Al-Laham MA, Peng CY, Nanayakkara A, Challacombe M, Gill PMW, Johnson B, Chen W, Wong MW, Gonzalez C, Pople JA, Gaussian 03, Revision E.01, Gaussian 09, Inc: Wallingford CT, 2009.

[34] Becke AD. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange. *J Chem Phys* 1993; 98: 5648–5652.

[35] Lee C, Yang W, Parr RG. Development of the Colle–Salvetti correlation–energy formula into a functional of the electron density. *Phys Rev B* 1998; 37: 785–789.

[36] Chai JD, Head–Gordon M Long–range corrected hybrid density functionals with damped atom–atom dispersion corrections. *Phys Chem Chem Phys* 2008; 10: 6615–6620.

[37] Gonzalez C, Schlegel HB. Improved algorithms for reaction path following: higher-order implicit algorithms. *J Chem Phys* 1991; 95: 5853–5860.

[38] Wiberg KB. Application of the pople–santry–segal CNDO method to the cyclopropylcarbinyl and cyclobutyl cation and to bicyclobutane. *Tetrahedron* 1968; 24: 1083–1096.

[39] Dennington RII, Keith T, Millam J, Eppinnett K, Hovell WL, Gilliland R (2009) GaussView v.5.0.9 Visualizer and Builder. Gaussian 09. Wallingford, CT

[40] Wu CJ, Carter EA. Ab initio thermochemistry for unsaturated C2 hydrocarbons. *J Phys Chem* 1991; 95: 8352–8363.

A MECHANISTIC STUDY ON THE REACTIONS OF VINYL CARBENE WITH HYDROGEN, CARBON MONOXIDE AND CARBON DIOXIDE: SHED LIGHT ON FURTHER MANIPULATIONS

Cem Burak YILDIZ*

Department of Medicinal and Aromatic Plants, University of Aksaray, 68100, Aksaray, Turkey

ABSTRACT

Density Functional calculations have been used to explore the potential energy profiles of H₂, CO, and CO₂ activation reactions by vinyl carbene structure **1**. The reactions of vinyl carbene **1** with CO₂ was proposed to yield a variety of possible products (**3–5**) depending on its selectivity. The density functional calculations established that the proposed reactions of **1** with CO₂ proceed in a *concerted* or *stepwise* manners to form **3** and **5**. However, that of CO reaction occur in only concerted fashion for the proposed products **15** and **16**. Furthermore, the compound **1** is found to be most reactive than **5** and **16** towards H₂ with the required lower energy barrier. Finally, the more dominant routes are determined to be formation processes of **3**, **4**, and **10**.

Keywords: Vinyl carbene, Small molecule activation, DFT, CO, CO₂

VİNİL KARBEN YAPISININ HİDROJEN, KARBON MONOKSİT VE KARBON DİOKSİT İLE TEPKİMELERİ ÜZERİNE MEKANİSTİK BİR ÇALIŞMA: İLERİ ÇALIŞMALARA BİR İŞİK

ÖZET

Yoğunluk fonksiyoneli teorisi H₂, CO ve CO₂ moleküllerinin vinil karben **1** bileşiği ile aktivasyonu sonucu oluşan enerji yüzeylerini incelemek için kullanılmıştır. Seçiciliğe bağlı olarak vinil karben **1** bileşiğinin CO₂ molekülü ile tepkimesi çeşitli muhtemel ürünlerin (**3–5**) oluşabileceğini önermektedir. Yoğunluk fonksiyoneli teorisi hesaplamaları **3** ve **5** numaralı ürünlerin oluşum tepkimelerinin *tek basamak* veya *basamak basamak* mekanizmalar üzerinden yürüyebileceğini göstermektedir. Buna karşın, **1** numaralı yapının CO ile tepkimesi sonucunda olası ürünler **15** ve **16** yalnızca tek basamak içermektedir. Dahası, H₂ aktivasyon tepkimeleri değerlendirildiğinde **1** numaralı yapının **5** ve **16** numaralı yapılara nazaran daha reaktif olduğu elde edilen enerji bariyerleri ile tespit edilmiştir. Sonuç olarak, en uygun mekanizmalar **3**, **4** ve **10** numaralı yapıların oluşumları için tespit edilmiştir.

Anahtar Kelimeler: Vinil karben, Küçük molekül aktivasyonu, DFT, CO, CO₂

1. INTRODUCTION

Alkylidene carbenes, alkenylidenes, have been known as highly reactive intermediates in organic chemistry [1–5]. Several methods have been improved to generate these highly reactive intermediates [6–13]. In the past few decades, the alkenylidenes have attracted considerable attention due to their role in many organic reactions. They play obvious roles in many organic synthesis with high levels of selectivity [14–25]. Furthermore, the cycloaddition of unsaturated carbenes can provide the synthesis of small ring, highly strained compounds by conventional ways. The 3–dimensional selectivity of substitute groups from the addition reactions of alkylidene carbene to olefins was exemplified in a collaboration of Apeloig and Fox [26,27]. As it can be seen from the literature, there are many reports and discussions on theoretical studies of alkylidene carbenes [28–32]. However, no scientific study has been reported on the activation of small molecules by alkylidene carbenes so far.

*Corresponding Author: cemburakyildiz@aksaray.edu.tr

In the present computational study, we would like to distil a general message for the behavior of heavier vinyl carbenes towards hydrogen (H_2), carbon monoxide (CO), and carbon dioxide (CO_2). With this incentive, we started by calculations of the energy profiles for the oxidative addition reactions of the considered small molecules with vinyl carbene **1** on the basis of proposed mechanisms: The reactions may proceed in either *concerted* or *stepwise* fashion to yield variety of different possible products. As we show here, the ketene + CO complex **4** and a kind of cyclic carbene **5** can be generated from the proposed reaction of **1** with CO_2 . Although formation process of **4** is determined to be exergonic, that of constitutional isomer **5** has an endergonic nature with nonspontaneous character. On the other hand, the proposed reaction of **1** with CO depict that the formation of proposed products **17** and **18** are strongly endergonic at the level of theories used herein. Furthermore, the H_2 activation by **1** is found to be more favored than **5** and **18** with the lower energy barriers.

2. COMPUTATIONAL DETAILS

Initially, all manipulations were performed using the Gaussian 09 suite of programs [33]. In order to optimize the structures on their potential energy surface in gas phase, Becke's three-hybrid method and the exchange functional of Lee, Yang, and Parr (B3LYP) theory was employed with the 6-311++G(d,p) basis set [34,35]. Further, the calculations were repeated with full geometry optimizations at newer theory level of WB97XD/6-311++G(d,p) [36]. The stationary points were characterized as minima or transition structures by vibrational frequency calculations, and all relative energies reported here are Gibbs free energies in $kcal\ mol^{-1}$. The intrinsic reaction coordinates (IRC) were also followed to verify the energy profiles connecting each transition state to the correct local minima, by using the second-order Gonzalez-Schlegel method [37,38]. The computed structures were visualized by using the GaussView 5.0 program [39].

3. RESULTS and DISCUSSION

From the theoretical calculations, vinylidene carbene **1** is known to be singlet ground state ($\Delta_{S-T} = 48\ kcal\ mol^{-1}$) [40]. Due to the high singlet-triplet energy separations, we consider only singlet state of **1** for oxidative addition of H_2 , CO, and CO_2 . Several conceptually different pathways have been proposed to explain the ability of vinylidene **1** to activate the related small molecules.

The reaction mechanisms of **1** with carbon dioxide (CO_2) was investigated in this part. The reaction can take place via **TS1**, **TS6**, and **TS7** which lead to diverse products such as **3**, **5**, and **4**, respectively. The [1+2] addition of **1** to CO_2 is found to be slightly exergonic to form proposed product **3** via **TS1** in a *concerted* manner by $\Delta G = -2.4\ kcal\ mol^{-1}$ and $-5.6\ kcal\ mol^{-1}$ at the B3LYP/6-311++G(d,p) and WB97XD/6-311++G(d,p) level of theories, respectively (Table 1 and Figure 1, black arrows). Then, the intramolecular rearrangement of **3** can be considered to form another possible products of **4** (ketene + CO) by the required energy barrier of $\Delta G^\ddagger = +5.9\ kcal\ mol^{-1}$, so that the overall pathway for **4** starting from **1** is decidedly exergonic by $\Delta G = -36.1\ kcal\ mol^{-1}$ at the B3LYP/6-311++G(d,p) level of theory (Table 1 and Figure 1, red arrows). Moreover, the calculation at the WB97XD/6-311++G(d,p) level is very similar by $\Delta G = -35.4\ kcal\ mol^{-1}$. Based on the theoretical results, the formation of **4** can also be evaluated with direct attack of **1** to oxygen atom of CO_2 via **TS7** by the required very high energy barrier of $\Delta G^\ddagger = +47.5\ kcal\ mol^{-1}$, the overall pathway of *concerted* mechanism is determined to be also strongly exergonic by $\Delta G = -36.1\ kcal\ mol^{-1}$ (Table 1 and Figure 1, blue arrows). Next, we considered how to incorporate the product **5** from the reaction of **1** with CO_2 and intermolecular rearrangement of **4**. The [2+2] cycloaddition of **1** to CO_2 can also yield the product **5** by considerably high energy barrier of $\Delta G^\ddagger = +47.4\ kcal\ mol^{-1}$ (Table 1 and Figure 1, green arrows). In this case, the nature of the proposed reaction for **5** via **TS6** is found to be endergonic by $\Delta G = +18.2\ kcal\ mol^{-1}$. The related energy barrier and overall pathway at the WB97XD/6-311++G(d,p) level are determined to be relatively lower by $\Delta G^\ddagger = +43.6\ kcal\ mol^{-1}$ and $\Delta G = +11.7\ kcal\ mol^{-1}$, respectively. Similarly, the formation of **5** is also to be existed endergonic from intermolecular rearrangement of **4** (Table 1 and Figure 1, pink arrows).

Collectively, the dominant reaction route for the reaction **1** with CO₂ is determined to be formation process of **4** via **TS1** and **TS2** with the observed lower energy barriers. Another interesting point is that inclusion of dispersion by WB97XD, which uses a version of Grimme's D2, leads to negligible differences in terms of the energetics and nature of the proposed pathways. For this reason, the following discussions will be based on the results at the B3LYP/6-311++G(d,p) level of theory.

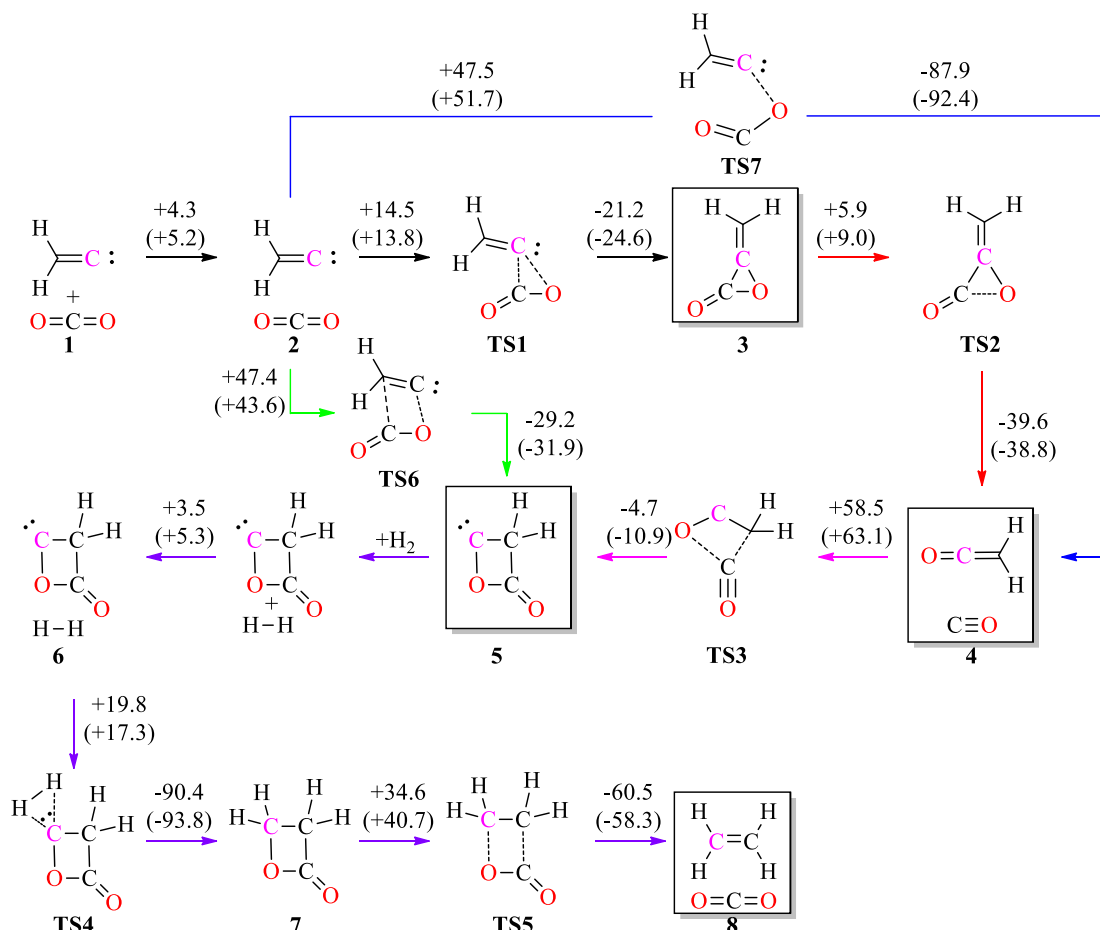


Figure 1. The proposed reaction mechanisms and energy channel for the reaction of vinyl carbene **1** with CO₂ and further H₂ activation at the B3LYP/6-311++G(d,p) and WB97XD/6-311++G(d,p) (in parentheses) level of theories (ΔG energies given in kcal mol⁻¹)

We believe that it is possible to generate **5** from **1** + CO₂ at sufficiently high temperature. In this case, it can be designed the formation of ethylene from the hydrogenation of **5**. The addition of H₂ to the resulting product **5** begins with the formation of van der Waals complex **6** which is determined to be of higher in energy than the **5** + H₂ by ΔG = 3.5 kcal mol⁻¹. Then, the required energy barrier to form **8** is to be existed ΔG[‡] = +19.8 kcal mol⁻¹ with strongly exergonic nature. The DFT calculations indicate that the liberation of CO₂ from the optimized structure **7** leads to the formation of **8** (ethylene + CO₂) by the considerably high energy barrier of ΔG[‡] = +34.6 kcal mol⁻¹, so that the overall pathway for **8** starting from **6** is decidedly exergonic by ΔG = -96.5 kcal mol⁻¹ (Figure 1, purple arrows).

Table 1. Calculated energy channel for the activation of CO₂ and H₂ by **1** and **5** at the B3LYP/6-311++G(d,p) and WB97XD/6-311++G(d,p) (in parentheses) level of theories (ΔG energies given in kcal mol⁻¹)

CO ₂ activation by 1	Energy Channel	H ₂ Activation by 5	Energy Channel
1 → 2	+4.3 (+5.2)	5 → 6	+3.5 (+5.3)
2 → TS1	+14.5 (+13.8)	6 → TS4	+19.8 (+17.3)
TS1 → 3	-21.2 (-24.6)	TS4 → 7	-90.4 (-93.8)
3 → TS2	+5.9 (+9.0)	7 → TS5	+34.6 (+40.7)
TS2 → 4	-39.6 (-38.8)	TS5 → 8	-60.5 (-58.3)
4 → TS3	+58.5 (63.1)		
TS3 → 5	-4.7 (-10.9)		
2 → TS6	+47.4 (+43.6)		
TS6 → 5	-29.2 (-31.9)		
2 → TS7	+47.5 (+51.7)		
TS7 → 4	-87.9 (-92.4)		

Additionally, the activation of H₂ by **1** is also considered in the presented theoretical study. The modelled mechanism for the direct addition of H₂ to **1** occurs in a *concerted* manner to yield ethylene **10** by the relatively lower energy barrier of $\Delta G^\ddagger = +12.6$ kcal mol⁻¹ as compared to that of **5** (Table 2 and Figure 2, black arrows). Overall, the reaction is determined to be strongly exergonic by $\Delta G = -79.0$ kcal mol⁻¹. The activation of H₂ by **1** to generate an ethylene molecule is found to be slightly favorable than that of **5** with the lower energy barrier although the exergonic character of the pathway for **5** + H₂ is stronger. Furthermore, the mechanistic scenario for the activations of CO and CO₂ by ethylene molecule **10** were examined. As it can be seen from Figure 2, all the proposed mechanisms were determined to be strongly endergonic, showing that the reactions are nonspontaneous and not favorable (Table 2 and Figure 2, red, blue, and green arrows).

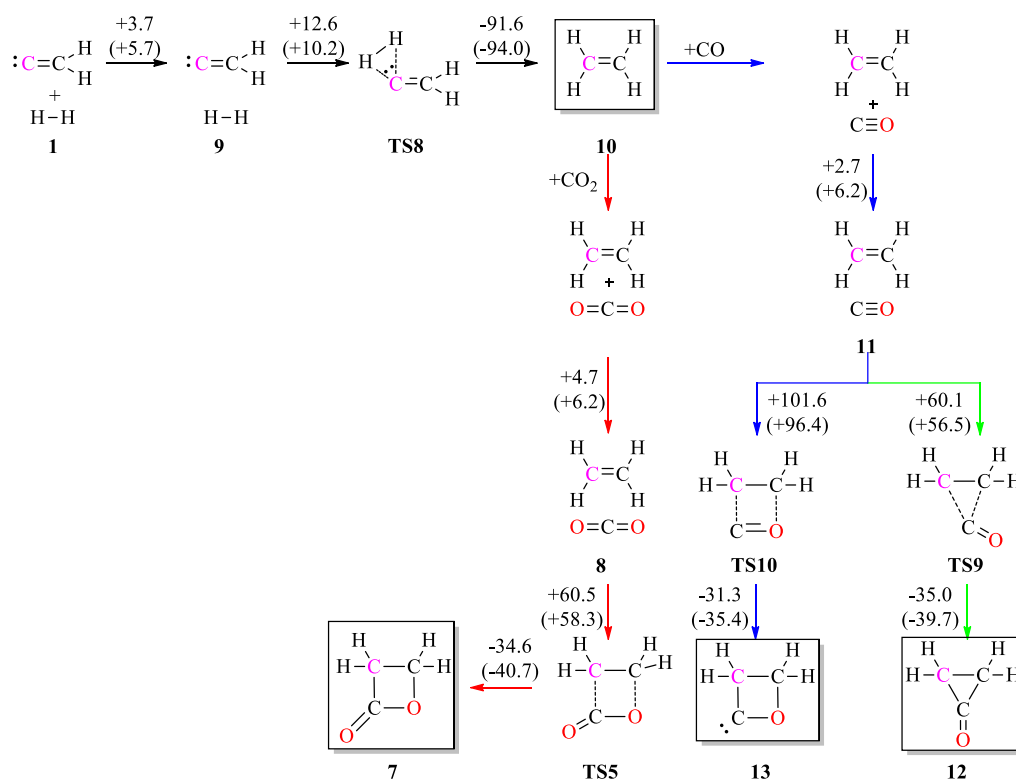
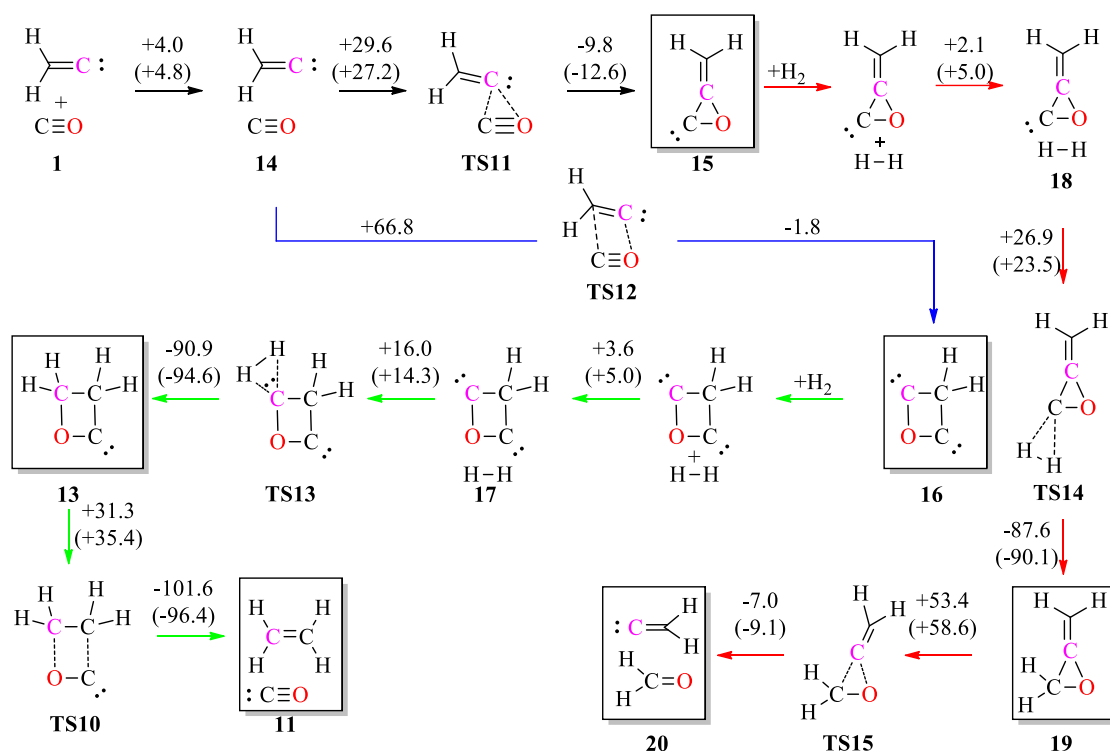
**Figure 2.** The proposed reaction mechanism for the reaction of vinyl carbene **1** with H₂ and further CO and CO₂ activations at the B3LYP/6-311++G(d,p) and WB97XD/6-311++G(d,p) (in parentheses) level of theories (ΔG energies given in kcal mol⁻¹)

Table 2. Calculated energy channel for the activation of H₂, CO, and CO₂ by **1** and **10** at the B3LYP/6–311++G(d,p) and WB97XD/6–311++G(d,p) (in parentheses) level of theories (ΔG energies given in kcal mol⁻¹)

H ₂ activation by 1	Energy Channel	CO and CO ₂ Activation by 10	Energy Channel
1 → 9	+3.7 (+5.7)	10 → 8	+4.7 (+6.2)
9 → TS8	+12.6 (+10.2)	8 → TS5	+60.5 (+58.3)
TS8 → 10	-91.6 (-94.0)	TS5 → 7	-34.6 (-40.7)
		10 → 11	+2.7 (+6.2)
		11 → TS9	+60.1 (+56.5)
		TS9 → 12	-35.0 (-39.7)
		11 → TS10	+101.6 (+96.4)
		TS10 → 13	-31.3 (-35.4)

In order to test the possibility of the CO activation by vinyl carbene **1**, the DFT calculations were carried out for the modelled system. Two competitive *concerted* pathways can be considered from intermolecular rearrangement of **1** and CO to form the possible products of **15** and **16**. In accordance with the activation mechanism of CO₂, the CO included trends follow almost same order to form related proposed products with [1+2] and [2+2] cycloaddition steps via **TS11** and **TS12**, respectively. Although the possible [1+2] addition step of **1** to CO₂ for **3** needs lower energy barrier with exergonic nature, the overall pathway for **15** is determined to be strongly endergonic by $\Delta G = 17.1$ kcal mol⁻¹ in the case of CO, indicating that the reaction cannot occur spontaneously (Table 3 and Figure 3, black arrows). Based on the theoretical results, the formation of **16** is also plausible from the reaction of **1** with CO. For this reason, the formation mechanism of **16** was also designed. By this way, we can reach a dicarbene compound **16**. However, the calculations show that the formation of **16** is strongly endergonic and the required energy barrier is too high for a reaction at room temperature (Table 3 and Figure 3, blue arrows).

**Figure 3.** The proposed reaction mechanisms for the reaction of vinyl carbene **1** with CO and further H₂ activation at the B3LYP/6–311++G(d,p) and WB97XD/6–311++G(d,p) (in parentheses) level of theories (ΔG energies given in kcal mol⁻¹).

In case of any possible synthesis of **15** and **16** at sufficiently high temperature, we also designed their H₂ activation mechanisms to generate **11** (ethylene + CO) and **20** (Vinylidene carbene + formaldehyde). The direct addition of H₂ to the proposed product **15** can form the related van der Waals complex of **18** which is more stable than **15** + H₂ by $\Delta G = -2.1$ kcal mol⁻¹ (Table 3 and Figure 3, red arrows). Clearly, the hydrogenation of the **15** can proceed by direct addition of H₂ to the carbenic center of **15** via **TS14**. This process requires 26.9 kcal mol⁻¹ energy barrier to overcome for the formation of **19**. Then, the decomposition of **19** to form **20** can be activated with the cleavage of C–C and C–O bonds in a *concerted* manner by the very high energy barrier of $\Delta G^\ddagger = +53.4$ kcal mol⁻¹ (Table 3 and Figure 3, red arrows). Separately, the calculations indicate that the addition of H₂ can be feasibly binded to the one of the carbenic centers in **16**, forming possible compound **13** by the required relatively lower energy barrier of $\Delta G^\ddagger = +16.0$ kcal mol⁻¹ (Table 3 and Figure 3, green arrows). We found that the formation processes of **13** from the van der Waals complex of **17** is strongly exergonic by $\Delta G = -74.9$ kcal mol⁻¹. Additionally, the subsequent CO elimination from the structure **13** was also investigated. In the following rearrangement, it is possible to yield the ethylene + CO mixture **11** via the transition state of **TS10** and the process is exergonic by $\Delta G = -70.5$ kcal mol⁻¹. (Figure 3). Overall, the reaction starting from **17** is determined to be strongly exergonic by $\Delta G = -145.4$ kcal mol⁻¹.

Table 3. Calculated energy channel for the activation of CO and H₂ by **1**, **15** and **16** at the B3LYP/6–311++G(d,p) and WB97XD/6–311++G(d,p) (in parentheses) level of theories (ΔG energies given in kcal mol⁻¹).

CO activation by 1	Energy Channel	H ₂ Activation by 15 and 16	Energy Channel
1 → 14	+4.0 (+4.8)	15 → 18	+2.1 (+5.0)
14 → TS11	+29.6 (27.2)	18 → TS14	+26.9 (+23.5)
TS11 → 15	-9.8 (-12.6)	TS14 → 19	-87.6 (-90.1)
14 → TS12	+66.8 (+62.4)	19 → TS15	+53.4 (+58.6)
TS12 → 16	-1.8 (-2.7)	TS15 → 20	-7.0 (-9.1)
		16 → 17	+3.6 (+5.0)
		17 → TS13	+16.0 (+14.3)
		TS13 → 13	-90.9 (-94.6)
		13 → TS110	+31.3 (+35.4)
		TS110 → 11	-101.6 (-96.4)

4. CONCLUSION

Using B3LYP theory with 6–311++G(d,p) basis set, the activation reaction mechanism of H₂, CO, and CO₂ by **1**, **5**, **10**, **15**, and **16** were studied. The calculations depict that the reactions may proceed in either *concerted* or *stepwise* fashion to yield a variety of different possible products. The proposed reactions can occur in *concerted* and *stepwise* manners to generate **3**, **4**, or **5** from **1** + CO₂. The nature of the formation process of **4** is strongly exergonic, whereas that of constitutional isomer **5** is determined to be endergonic with the proposed mechanisms. Additionally, the activation of H₂ by **5** was also considered in the presented theoretical study. The computed relative ΔG energies indicated that the formation of **8** (ethylene + CO₂) is exergonic with energy of -96.5 kcal mol⁻¹ at the B3LYP/6–311++G(d,p) level of theory. In the case of CO activation by **1**, the proposed reactions is strongly endergonic for both products **15** and **16**. In spite of this, however, the required energy for the activation of H₂ by **16** is relatively lower with $\Delta G^\ddagger = +16.0$ kcal mol⁻¹. Overall, the formation process of **11** starting from **17** is determined to be strongly exergonic by $\Delta G = -145.4$ kcal mol⁻¹. Collectively, the formation processes of **3**, **4**, and **10** are found to be favorable with the obtained facile energy values.

REFERENCES

- [1] Kirmse W. Carbene Chemistry, 2nd ed. New York, NY, USA: Academic Press, 1971.
- [2] Gilchrist T. L. Carbenes and Nitrenes, in Organic Reaction Mechanisms. Chichester, UK: Wiley, 1972.
- [3] Wentrup C. Reactive Molecules. New York, NY, USA: Wiley, 1984.
- [4] Doyle MP, Forbes DC. Recent advances in asymmetric catalytic metal carbene transformations. *Chem Rev.* 1998; 98: 911–935.
- [5] Richard SG, Kevin RM. Recent advances in alkylidene carbene chemistry. *Tetrahedron* 2015; 71: 7795–7835.
- [6] Ohira S, Sawamoto T, Yamato M. Synthesis of (–)-neplanocin A via C–H insertion of alkylidenecarbene. *Tetrahedron Lett.* 1995; 36: 1537–1538.
- [7] Eisler S, Tykwinski RR. Migrating alkynes in vinylidene carbenoids: An unprecedented route to polyynes. *J Am Chem Soc.* 2000; 122: 10736–10737.
- [8] Van Nhien AN, León R, Postel D, Carreiras MC, García AG, Marco-Contelles J. 1,6-C-H and 1,5-O-Si insertion reactions of alkylidenecarbene derivatives of monosaccharides. *J Carbohyd Chem.* 2005; 24: 369–377.
- [9] Tsai CC, Chien CT, Chang YC, Lin HC, Yan TH. Intramolecular C–H insertion by an alkylidene carbene: Diastereoselective Synthesis of a Taxol A Ring Synthon. *J Org Chem.* 2005; 70: 5745–5747.
- [10] Satoh T. Recent advances in the chemistry of magnesium carbenoids. *Chem Soc Rev.* 2007; 36: 1561–1572.
- [11] Satoh T. Recent Advances in the chemistry and synthetic uses of magnesium carbenoids. *Heterocycles* 2012; 85: 1–33.
- [12] Quinodoz P, Wright K, Drouillat B, David O, Marrot J, Couty F. Synthesis of homopropargylamines from 2-cyanoazetidines. *Chem Commun.* 2016; 52: 10072–10075.
- [13] Frihed TG, Bols M, Pedersen CM. C–H Functionalization on carbohydrates. *European J Org Chem.* 2016; 16: 2740–2756.
- [14] Stang PJ. Unsaturated carbenes. *Chem Rev* 1978; 78: 383–405.
- [15] Stang PJ, Fisk TE. Extended unsaturated carbenes. Generation and nature of alkadienylidenecarbenes. *J Chem Soc* 1980; 102: 6813–6816.
- [16] Stang, PJ. Vinyl carbamates via interaction of alkylidenecarbenes with isocyanates. *J Organomet Chem.* 1981; 46: 4585–4586.
- [17] Stang PJ, Bjork JA. Reaction of isopropylidenecarbene with isonitriles. Evidence for the formation of alkadienylideneamine. *Chem Commun* 1978; 23: 1057–1058.

- [18] Brown RFC, Eastwood FW, Harrington KJ, McMullen GL. Methyleneketenes and methylenecarbenes. Aust J Chem. 1974; 27: 2393–2402.
- [19] Feldman KS, Perkins AL. 1,6-C–H insertion of alkylidenecarbenes in 1-naphthol and 1-anthrol derivatives. Tetrahedron Lett. 2001; 42: 6031–6033.
- [20] Bonomo L, Stern C, Solari E, Scopelliti R, Floriani C. Acetylenes rearranging on Ruthenium–Porphyrinogen and leading to vinylidene and carbene functionalities. Angew Chem Int Ed 2001; 40: 1449–1452.
- [21] Ciardi, C.; Reginato, G.; Gonsalvi L, de los Rios I, Romerosa A, Peruzzini M. Ruthenium(II) π -alkyne and vinylidene complexes derived from glycoynitols: New precursors for water-soluble unsaturated carbenes. Organometallics. 2004; 23: 2020–2026.
- [22] Cheng CJ, Tong HC, Fong YH, Wang PY, Kuo YL, Lo YH, Lin CH. Reactions of $\text{Tp}(\text{NH}=\text{CPh}_2)(\text{PPh}_3)\text{Ru}-\text{Cl}$ with $\text{HC}=\text{CPh}$ in the presence of H_2O : insertion/hydration products Dalton Trans. 2009; 4435–4438.
- [23] Ma ESF, Patrick BO, James BR. Reactions of phenylacetylene and p-tolylacetylene with a five-coordinate RuII complex. Inorg Chim Acta. 2013; 408: 126–130.
- [24] Bucher J, Stoßer T, Rudolph M, Rominger F, Hashmi ASK. CO Extrusion in homogeneous gold catalysis: Reactivity of gold acyl species generated through water addition to gold vinylidenes. Angew Chem Int Ed 2015; 54: 1666–1670.
- [25] Raubenheimer HG. Gold acyl complex formation and decarbonylation during indene synthesis from catalytically active vinylidene complexes. ChemCatChem. 2015; 7: 1261–1262.
- [26] Apeloig Y, Karni M, Stang PJ, Fox DP. Transition-state geometries and stereoselectivity of alkylidenecarbene addition to olefins. An experimental and theoretical investigation. J Am Chem Soc 1983; 105: 4781–4792.
- [27] Fox DP, Stang PJ, Apeloig Y, Karni M. Stereoselectivity of alkylidenecarbene addition to olefins. 2. Effect of orbital polarization in the alkenes. J Am Chem Soc 1986; 108: 750–756.
- [28] Lu XH, Wang YX. Theoretical studies on mechanisms of cycloaddition reaction between dichlorovinylidene and formaldehyde: *Concerted* and *Stepwise*? J Phys Chem A 2003; 107: 7885–7890.
- [29] Lu XH, Wu WR, Yu HB, Yang XL, Xu YH. A theoretical study on the mechanism of cycloaddition reaction between vinylidene and acetone. J Mol Struct (Theochem) 2005; 755: 39–44.
- [30] Lu XH, Yu HB, Wu WR, Xu YH. Theoretical studies of mechanisms of cycloaddition reaction between difluoromethylene carbene and acetone. Int J Quantum Chem 2007; 107: 451–457.
- [31] Lu XH, Xiang PP, Wu WR, Che X. Theoretical study on mechanism of cycloaddition reaction between dimethyl methylene carbene and ethylene. J Mol Struct (Theochem) 2008; 853: 82–88.
- [32] Lu X, Lian Z, Li Y. An ab initio study of the mechanism of the cycloaddition reaction forming bicyclic compounds between vinylidene ($\text{H}_2\text{C}=\text{C}$) and ethylene. J Serb Chem Soc 2011; 76: 743–749.
- [33] Frisch MJ, Trucks GW, Schlegel HB, Scuseria GE, Robb MA, Cheeseman JR, Montgomery Jr JA, Vreven T, Kudin K.N, Burant J.C, Millam J.M, Iyengar SS, Tomasi J, Barone V, Mennucci B, Cossi M,

Scalmani G, Rega N, Petersson GA, Nakatsuji H, Hada M, Ehara M, Toyota K, Fukuda R, Hasegawa J, Ishida M, Nakajima T, Honda Y, Kitao O, Nakai H, Klene M, Li X, Knox JE, Hratchian HP, Cross JB, Bakken V, Adamo C, Jaramillo J, Gomperts R, Stratmann RE, Yazyev O, Austin AJ, Cammi R, Pomelli C, Ochterski JW, Ayala PY, Morokuma K, Voth GA, P Salvador, Dannenberg JJ, Zakrzewski VG, Dapprich S, Daniels AD, Strain MC, Farkas O, Malick DK, Rabuck AD, Raghavachari K, Foresman JB, Ortiz JV, Cui Q, Baboul AG, Clifford S, Cioslowski J, Stefanov BB, Liu G, Liashenko A, Piskorz P, Komaromi I, Martin RL, Fox DJ, Keith T, Al-Laham MA, Peng CY, Nanayakkara A, Challacombe M, Gill PMW, Johnson B, Chen W, Wong MW, Gonzalez C, Pople JA, Gaussian 03, Revision E.01, Gaussian 09, Inc: Wallingford CT, 2009.

[34] Becke AD. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange. *J Chem Phys* 1993; 98: 5648–5652.

[35] Lee C, Yang W, Parr RG. Development of the Colle–Salvetti correlation–energy formula into a functional of the electron density. *Phys Rev B* 1998; 37: 785–789.

[36] Chai JD, Head–Gordon M Long–range corrected hybrid density functionals with damped atom–atom dispersion corrections. *Phys Chem Chem Phys* 2008; 10: 6615–6620.

[37] Gonzalez C, Schlegel HB. Improved algorithms for reaction path following: higher-order implicit algorithms. *J Chem Phys* 1991; 95: 5853–5860.

[38] Wiberg KB. Application of the pople–santry–segal CNDO method to the cyclopropylcarbiny and cyclobutyl cation and to bicyclobutane. *Tetrahedron* 1968; 24: 1083–1096.

[39] Dennington RII, Keith T, Millam J, Eppinnett K, Hovell WL, Gilliland R (2009) GaussView v.5.0.9 Visualizer and Builder. Gaussian 09. Wallingford, CT

[40] Wu CJ, Carter EA. Ab initio thermochemistry for unsaturated C2 hydrocarbons. *J Phys Chem* 1991; 95: 8352–8363.

ÇİFT TARAFLI TİP II SANSÜRLENMİŞ ÖRNEKLEMLER İÇİN JONES VE FADDY' NİN ÇARPIK t DAĞILIMININ KONUM VE ÖLÇEK PARAMETRELERİNİN TAHMİNİ

M. S. Talha ARSLAN ^{1,*} Birdal ŞENOĞLU ²

¹ İstatistik Bölümü, Fen Edebiyat Fakültesi, Eskişehir Osmangazi Üniversitesi, 26480 Odunpazarı, Eskişehir, Türkiye

² İstatistik Bölümü, Fen Fakültesi, Ankara Üniversitesi, 06100 Tandoğan, Ankara, Türkiye

ÖZET

Bu çalışmada, çift taraflı Tip II sansürlenmiş (doubly Type II censored) örneklem için Jones ve Faddy' nin çarpık t (Jones and Faddy' s Skew t - JFST) dağılımının konum ve ölçek parametrelerinin en çok olabilirlik (maximum likelihood - ML) ve uyarlanmış en çok olabilirlik (modified maximum likelihood - MML) tahmin edicileri elde edilmiştir. Monte Carlo (MC) simülasyon çalışması kullanılarak ML ve MML tahmin edicilerinin etkinlikleri karşılaştırılmıştır. MC simülasyon çalışması, MML tahmin edicilerinin ML tahmin edicileri ile hemen hemen aynı etkinliğe sahip olduğunu göstermiştir. Çalışma sonucunda, odaklanılan nokta tahmin edicilerin etkinlikleri ise ML tahmin edicilerinin, etkinlikle beraber hesaplama zorlukları ele alındığında ise MML tahmin edicilerinin tercih edilmesi gerektiği belirlenmiştir.

Anahtar Kelimeler: JFST dağılımı, Tip II sansürleme, Uyarlanmış olabilirlik, Etkinlik, Monte Carlo simülasyonu

ESTIMATION FOR THE LOCATION AND THE SCALE PARAMETERS OF THE JONES AND FADDY'S SKEW t DISTRIBUTION UNDER THE DOUBLY TYPE II CENSORED SAMPLES

ABSTRACT

In this study, we obtain the maximum likelihood (ML) and the modified maximum likelihood (MML) estimators for the location and the scale parameters of the Jones and Faddy's Skew t (JFST) distribution based on the doubly Type II censored samples. Then, we use the Monte Carlo (MC) simulation study to compare the efficiencies of the ML and the MML estimators. The MC simulation study shows that, MML estimators have more or less same efficiency with the corresponding ML estimators. At the end of the study, it can be concluded that if we focus on the efficiencies of the estimators, we prefer to use ML estimators. However, if we focus on the computational difficulties together with the efficiencies of the estimators, we prefer to use MML estimators.

Keywords: JFST distribution, Type II censoring, Modified likelihood, Efficiency, Monte Carlo simulation

1. GİRİŞ

İstatistiksel çıkarımlar genellikle tam örneklem (complete samples) kullanılarak yapılmaktadır. Fakat örneklemin elde edilmiş şekline bağlı olarak bazı durumlarda sansürlenmiş örneklem (censored samples) kullanılması söz konusu olmaktadır. Sansürlenmiş örneklem genel olarak Tip I (Type I) ve Tip II (Type II) sansürlenmiş örneklem olarak isimlendirilir. Literatürde sansürlenmiş örneklemin kullanıldığı birçok çalışma mevcuttur. Bu çalışmaların çoğunluğu birimlerin yaşam sürelerinin incelendiği uygulamalı çalışmalardan oluşmaktadır.

Üstel, Normal, Lojistik, Log-normal dağılımları için farklı sansürleme türleri altında dağılım parametrelerinin tahmin edicileri Tiku [1-6] tarafından elde edilmiştir. Ayrıca, Tiku [7,8] deney

tasarımında Tip I ve Tip II sansürlenmiş örneklemelerin Normal dağılımdan geldiği varsayımı altında deneme etkilerinin tahmin edicileri ve bu tahmin edicilere dayalı test istatistiklerinin güçleri üzerinde çalışmıştır. Balakrishnan ve Mi [9] genelleştirilmiş ilerleyen tür Tip II (progressively Type II) sansürlenmiş örneklemeler için Normal dağılıma ilişkin konum ve ölçek parametrelerinin en çok olabilirlik (ML) tahmin edicilerinin var ve tek olduklarını göstermiştir. Senoglu ve Tiku [10] Normal dağılımdan gelmeyen sansürlenmiş örneklemeler için deney tasarımı model parametrelerinin tahmin edicileri ve bu tahmin edicilere dayalı test istatistiği üzerinde çalışmıştır. Wu, Lee ve Shen [11] çoklu Tip II (Multiply Type II) sansürlenmiş örneklemeler için Pareto dağılımının ölçek parametresinin tahmin edicisi olarak ağırlıklandırılmış moment (Weighted moment-WM) tahmin edicisini kullanmıştır.

Cristan [12] Tip I sansürlenmiş örneklemelerin karma dağılımdan geldiği varsayımı altında dağılım parametrelerinin ML tahmin edicilerini EM (Expectation Maximization) algoritmasını kullanarak elde etmiştir. Vaughan ve Tiku [13] Üstel dağılıma sahip sansürlenmiş iki örneklemin konum parametrelerinin eşitliğinin testi için istatistiksel bir test önermiştir. Balakrishnan ve Kateri [14] tam ve sansürlenmiş örneklemeler için Weibull dağılımının parametrelerinin ML tahmin edicilerinin var ve tek olduklarını göstermiştir. Sun, Zhou ve Wang [15] çift taraflı Tip II (doubly Type II) sansürlenmiş örneklemeler için iki parametrelili Üstel dağılımın ölçek parametresinin aralık tahminini elde etmiştir. Balakrishnan ve Dembinska [16] kesikli dağılıma sahip sağdan sansürlenmiş ilerleyen tür Tip II örneklemeler için istatistiksel çıkarımlar yapmıştır. Deng ve Pandey [17] sansürlenmiş örneklemeler için negatif değerler almayan dağılımların kantil fonksiyonunun tahmininde parametrik olmayan yeni bir yöntem kullanmıştır.

Saffari, Adnan ve Greene [18] sansürlenmiş örneklemeler için Hurdle Poisson regresyon model parametrelerinin ML tahmin edicilerini elde etmiştir. He ve Nagaraja [19], Tip II sansürlenmiş örneklemeler için Downton' ın iki değişkenli üstel dağılımının parametrelerinin Fisher bilgi matrisini elde etmiştir. Ortega, Cordeiro ve Lemonte [20] sansürlenmiş örneklemeler için hata terimlerinin Beta Birnbaum-Saunders dağılımına sahip olduğu regresyon model parametrelerinin ML tahmin edicilerini elde etmiştir. Lopez ve Saint-Pierre [21] iki değişkenli rasgele sansürlenmiş örneklemeler için regresyon model parametrelerinin M tahmin edicilerini elde etmiştir. Basak ve Balakrishnan [22] ilerleyen tür Tip II sansürlenmiş örneklemeler için üç parametrelili Gamma dağılımının parametrelerini ML yöntemini kullanarak tahmin etmiştir. Saffari, Adnan ve Greene [23] sağdan sansürlenmiş örneklemeler için Hurdle Genelleştirilmiş Poisson Regresyon model parametrelerinin ML tahmin edicilerini elde etmiştir. Balakrishnan ve Davies [24] Üstel dağılıma sahip Tip I sansürlenmiş örneklemelere dayalı Pitman yakınlık sonuçlarını karşılaştırmıştır. Rastogi ve Tripathi [25] hibrit (hybrid) sansürlenmiş örneklemeler için dağılım parametrelerinin ML tahmin edicilerini elde etmiştir. Pradhan ve Kundu [26] ilerleyen tür Tip II sansürlenmiş örneklemeler için Brinbaum-Saunders dağılımının parametrelerini ML yöntemi kullanarak tahmin etmiştir. Cramer ve Balakrishnan [27] ilerleyen tür hibrit Tip I (Type I progressively hybrid) sansürlenmiş örneklemeler için iki parametrelili Üstel dağılımın parametrelerini ML yöntemini kullanarak tahmin etmiştir. Matos, Lachos, Balakrishnan ve Labra [28] sansürlenmiş örneklemeler için doğrusal ve doğrusal olmayan karma etkili modellerin parametrelerini ML yöntemini kullanarak tahmin etmiştir.

Literatür taramasından görüleceği üzere örneklemelerin modellenmesinde birçok istatistiksel dağılım kullanılmıştır. Örneğin, simetrik verilerin dağılımlarının modellenmesinde Normal dağılım, simetrik ve kalın kuyruklu verilerin dağılımlarının modellenmesinde Normal dağılıma alternatif olarak t dağılımı ve çarpık verilerin dağılımlarının modellenmesinde ise çarpık Normal dağılım ya da çarpık t dağılımı gibi dağılımlar kullanılmıştır. Normal dağılıma alternatif olarak Basso, Lachos, Cabral, ve Ghosh [29], Flecher, Naveau ve Allard [30], Garcia, Gomez-Deniz ve Vazquez-Polo [31], Mameli [32], Mudholkar ve Hutson [33] çarpık Normal dağılımın değişik türlerini verilerin modellenmesinde kullanmıştır. Jones ve Faddy [34] t dağılımına alternatif olarak farklı bir çarpık t (JFST) dağılımı önermiştir. Acitas, Senoglu ve Arslan [35], Acitas, Kasap, Senoglu ve Arslan [36], Acitas, Kasap, Senoglu ve Arslan [37], Arslan [38], Arslan ve Senoglu [39] çarpık t dağılımının farklı türlerini verilerin modellenmesinde

kullanmışlardır. Acitas, Kasap, Senoglu ve Arslan [36] tam örneklem durumunda JFST dağılımı için bir adım M tahmin edicisini ele almıştır.

Literatürdeki çalışmalardan farklı olarak bu çalışmada JFST dağılımının tercih edilmesinin nedeni simetrik veya çarpık birçok farklı verinin dağılımının modellenmesinde kullanılabilecek esnek bir dağılım olmasıdır. Bu çalışmada, Tip II sansürlenmiş örneklem için JFST dağılımının konum ve ölçek parametrelerinin ML ve uyarlanmış en çok olabilirlik (modified maximum likelihood – MML) tahmin edicileri elde edilmiştir. JFST dağılımına ilişkin elde edilen olabilirlik denklemlerinde konum ve ölçek parametreleri doğrusal olmayan ifadeler içerisinde yer almaktadır. Dolayısıyla konum ve ölçek parametrelerinin tahmin edicileri kapalı formda elde edilememektedir. Konum ve ölçek parametresinin tahmin edicileri kapalı formda elde edilemediği için olabilirlik denklemlerinin çözümünde Newton-Raphson (NR) yöntemi kullanılmıştır, ayrıca bkz. Arslan [38] ve Arslan ve Senoglu [39]. Olabilirlik denklemlerinin NR yardımıyla elde edilen çözüm değerleri konum ve ölçek parametrelerinin ML tahmin değerleri olarak adlandırılmaktadır.

JFST dağılımının çarpık ve simetrik durumları için sırasıyla Tip II (tek taraflı) ve çift taraflı Tip II sansürleme uygulanmıştır. Çift taraflı Tip II sansürleme şeması Tip II sansürlemenin genel hali olarak görülmektedir. Çift taraflı Tip II sansürleme altında elde edilen çıkarımlarda soldan sansür sayısı (r_1) veya sağdan sansür sayısı (r_2) sıfır olarak alındığında Tip II sansürleme için çıkarımlar elde edilebilmektedir.

Bu çalışmanın geri kalanı şu şekilde düzenlenmiştir. Öncelikle, JFST dağılımı tanıtılmış ve dağılım ile ilgili betimleyici bilgiler verilmiştir. Daha sonra, çift taraflı Tip II sansürlü örneklem için JFST dağılımının konum ve ölçek parametrelerinin ML ve MML tahmin edicileri elde edilmiştir. Ayrıca, MC simülasyon çalışması kullanılarak elde edilen tahmin edicilerin etkinlikleri karşılaştırılmıştır. Son olarak, bu çalışmada elde edilen bulgular sonuç ve tartışma kısmında verilmiştir.

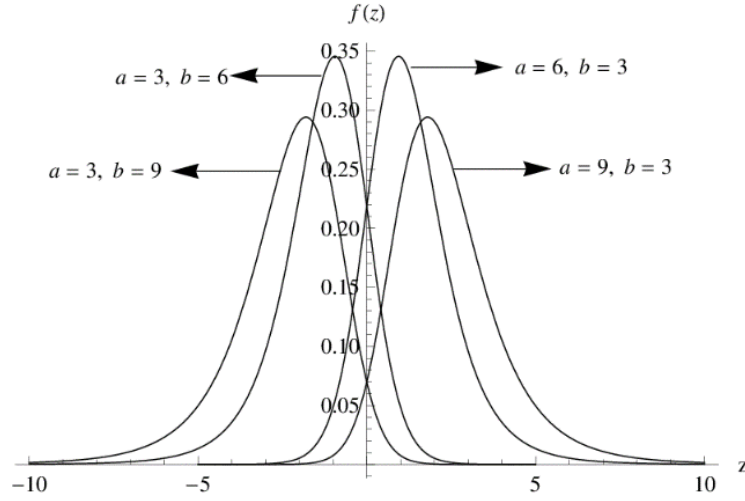
2. JFST DAĞILIMI

JFST dağılımı Jones ve Faddy [34] tarafından t dağılımına alternatif olarak önerilmiştir. Konum parametresi μ , ölçek parametresi σ ve şekil parametreleri a, b olan JFST (μ, σ, a, b) dağılımına ilişkin olasılık yoğunluk fonksiyonu (o.y.f.) (1)' de verildiği gibidir:

$$f_{JFST}(z) = \sigma^{-1} C_{a,b}^{-1} \left\{ 1 + \frac{z}{\sqrt{v+z^2}} \right\}^{a+0.5} \left\{ 1 - \frac{z}{\sqrt{v+z^2}} \right\}^{b+0.5}, \quad z, \mu \in R, \quad a, b, \sigma \in R^+. \quad (1)$$

Burada, $C_{a,b}^{-1} = 2^{v-1} B(a, b) \sqrt{v}$, $v = a + b$ ve $z = \frac{(y-\mu)}{\sigma}$ olarak ifade edilir. Ayrıca, $B(\cdot, \cdot)$ beta fonksiyonunu göstermektedir.

JFST dağılımı şekil parametrelerinin aldığı değerlere bağlı olarak sağa çarpık, sola çarpık veya simetrik olabilmektedir. $a > b$ için JFST dağılımı sağa çarpık, $a < b$ için JFST dağılımı sola çarpıktır. Ayrıca, şekil parametrelerinin eşit ($a=b$) olması halinde JFST dağılımı $2a$ serbestlik dereceli t dağılımına dönüşmektedir. Bunun ile birlikte, $a \rightarrow \infty$ ve $b \rightarrow \infty$ durumunda JFST dağılımı Normal dağılıma yakınsamaktadır, bkz. [36]. Şekil 1' de farklı şekil parametreleri değerleri için JFST dağılımının o.y.f.'nin grafikleri verilmiştir.



Şekil 1. Farklı şekil parametreleri için JFST dağılımının o.y.f.' nun grafikleri

JFST(0, 1, a, b) dağılımının birinci ve ikinci momentleri sırasıyla,

$$E[Z] = \frac{(a-b)\sqrt{(a+b)} \Gamma(a-\frac{1}{2})\Gamma(b-\frac{1}{2})}{2 \Gamma(a)\Gamma(b)} \quad (2)$$

ve

$$E[Z^2] = \frac{(a+b)(a-b)^2 + a - 1 + b - 1}{4(a-1)(b-1)} \quad (3)$$

olarak verilir. Ayrıca, farklı şekil parametreleri için JFST dağılımının çarpıklık ve basıklık değerleri için bkz. Acitas, Kasap, Senoglu ve Arslan [36].

3. ÇİFT TARAFLI TİP II SANSÜRLENMİŞ ÖRNEKLEMLER İÇİN JFST DAĞILIMININ KONUM VE ÖLÇEK PARAMETRELERİNİN TAHMİNİ

Bu bölümde, çift taraflı Tip II sansürlenmiş örneklem için JFST dağılımının konum ve ölçek parametrelerinin ML ve MML tahmin edicileri elde edilmiştir. Çift taraflı Tip II sansürlenmiş örneklem için olabilirlik fonksiyonu (likelihood function- L):

$$L = [F(z_{r_1+1})]^{r_1} \prod_{i=r_1+1}^{n-r_2} f(z_i) [1 - F(z_{n-r_2})]^{r_2} \quad (4)$$

şeklinde genel formda yazılabilir. Burada, r_1 soldan (alttan) sansürleme sayısını ve r_2 sağdan (üstten) sansürleme sayısını göstermektedir. Ayrıca, $F(\cdot)$ dağılım fonksiyonu ve $z_i = (y_i - \mu)/\sigma$, $i = r_1 + 1, \dots, n - r_2$ dir. $r_1 = 0$ veya $r_2 = 0$ olarak alındığında Tip II sansürlenmiş örneklem için olabilirlik fonksiyonu elde edilir. Bu çalışmada JFST dağılımının çarpık ve simetrik durumları için çift taraflı Tip II sansürlenmiş örneklem altında konum ve ölçek parametrelerinin ML ve MML tahmin edicileri elde edilmiştir.

3.1. Konum ve Ölçek Parametrelerinin ML Tahmini

Eşitlik (4)' te verilen olabilirlik fonksiyonunun logaritması alınarak log-olabilirlik (log likelihood- $\ln L$) fonksiyonu elde edilir. $\ln L$ fonksiyonunun μ ve σ parametrelerine göre türevleri alınarak sıfıra eşitlenir. Elde edilen denklemler olabilirlik denklemleri olarak adlandırılır. Olabilirlik denklemleri μ ve σ için çözülerek $\hat{\mu}$ ve $\hat{\sigma}$ tahmin değerleri elde edilir. $\ln L$ fonksiyonunun μ ve σ için türevleri alındığında sırasıyla (5) ve (6)' da verilen olabilirlik denklemleri elde edilir:

$$\frac{\partial \ln L}{\partial \mu} = -\frac{(a+0.5)}{\sigma} \sum_{i=r_1+1}^{n-r_2} \frac{v}{(v+z_i^2)^{\frac{3}{2}}+z_i(v+z_i^2)} + \frac{(b+0.5)}{\sigma} \sum_{i=r_1+1}^{n-r_2} \frac{v}{(v+z_i^2)^{\frac{3}{2}}-z_i(v+z_i^2)} - \frac{r_1 f(z_{r_1+1})}{\sigma F(z_{r_1+1})} + \frac{r_2 f(z_{n-r_2})}{\sigma (1-F(z_{n-r_2}))} = 0 \quad (5)$$

ve

$$\frac{\partial \ln L}{\partial \sigma} = -\frac{n-r_1-r_2}{\sigma} - \frac{(a+0.5)}{\sigma} \sum_{i=r_1+1}^{n-r_2} Z_i \left(\frac{v}{(v+z_i^2)^{\frac{3}{2}}+z_i(v+z_i^2)} \right) + \frac{(b+0.5)}{\sigma} \sum_{i=r_1+1}^{n-r_2} Z_i \left(\frac{v}{(v+z_i^2)^{\frac{3}{2}}-z_i(v+z_i^2)} \right) - Z_{r_1+1} \frac{r_1 f(z_{r_1+1})}{\sigma F(z_{r_1+1})} + Z_{n-r_2} \frac{r_2 f(z_{n-r_2})}{\sigma (1-F(z_{n-r_2}))} = 0. \quad (6)$$

Olabilirlik denklemleri doğrusal olmayan ifadeler içerdiğinden konum ve ölçek parametrelerin ML tahmin değerleri elde edilirken iteratif yöntemlere ihtiyaç duyulmaktadır. Dolayısıyla, (5) ve (6) denklemlerinin çözümleri NR yöntemi yardımı ile bulunabilir. Burada, NR yöntemi ile (5) ve (6)' da verilen denklemlerin kökleri bulunurken iterasyonun başlangıç değerlerinin belirlenmesi gerekmektedir. Bu çalışmada başlangıç değerleri olarak konum ve ölçek parametrelerinin MML tahmin değerleri kullanılmıştır. Ayrıca, durdurma kriteri olarak, $\varepsilon = 1 \times 10^{-4}$ olarak alınmıştır.

İteratif yöntemler kullanılırken bazen köke yakınsamama, yanlış köke yakınsama ya da birden fazla kökün olması gibi problemler ile karşılaşılabilir. Bu tür problemler olabilirlik denklemlerinin çözümünde zorluklar çıkarmaktadır.

3.2. Konum ve Ölçek Parametrelerinin MML Tahmini

ML tahminleri elde edilirken iteratif yöntemlerden kaynaklı oluşan problemler ile karşılaşmamak için Tiku [2, 3] MML yöntemini önermiştir. MML tahmin edicileri elde edilirken ilk olarak; olabilirlik denklemleri sıra istatistikleri cinsinden yeniden (7) ve (8) şeklinde yazılır:

$$\frac{\partial \ln L}{\partial \mu} = -\frac{(a+0.5)}{\sigma} \sum_{i=r_1+1}^{n-r_2} \frac{v}{(v+z_{(i)}^2)^{\frac{3}{2}}+z_{(i)}(v+z_{(i)}^2)} + \frac{(b+0.5)}{\sigma} \sum_{i=r_1+1}^{n-r_2} \frac{v}{(v+z_{(i)}^2)^{\frac{3}{2}}-z_{(i)}(v+z_{(i)}^2)} - \frac{r_1 f(z_{(r_1+1)})}{\sigma F(z_{(r_1+1)})} + \frac{r_2 f(z_{(n-r_2)})}{\sigma (1-F(z_{(n-r_2)}))} = 0 \quad (7)$$

ve

$$\frac{\partial \ln L}{\partial \sigma} = -\frac{n-r_1-r_2}{\sigma} - \frac{(a+0.5)}{\sigma} \sum_{i=r_1+1}^{n-r_2} Z_{(i)} \left(\frac{v}{(v+z_{(i)}^2)^{\frac{3}{2}}+z_{(i)}(v+z_{(i)}^2)} \right) - Z_{(r_1+1)} \frac{r_1 f(z_{(r_1+1)})}{\sigma F(z_{(r_1+1)})} + \frac{(b+0.5)}{\sigma} \sum_{i=r_1+1}^{n-r_2} Z_{(i)} \left(\frac{v}{(v+z_{(i)}^2)^{\frac{3}{2}}-z_{(i)}(v+z_{(i)}^2)} \right) + Z_{(n-r_2)} \frac{r_2 f(z_{(n-r_2)})}{\sigma (1-F(z_{(n-r_2)}))} = 0. \quad (8)$$

Doğrusal olmayan terimler belirlenir. (7) ve (8)' de yer alan doğrusal olmayan ifadeler;

$$g_1(z_{(i)}) = \frac{v}{(v+z_{(i)}^2)^{\frac{3}{2}}+z_{(i)}(v+z_{(i)}^2)}, \quad g_2(z_{(i)}) = \frac{v}{(v+z_{(i)}^2)^{\frac{3}{2}}-z_{(i)}(v+z_{(i)}^2)},$$

$$g_3(z_{(r_1+1)}) = \frac{f(z_{(r_1+1)})}{F(z_{(r_1+1)})} \text{ ve } g_4(z_{(n-r_2)}) = \frac{f(z_{(n-r_2)})}{1-F(z_{(n-r_2)})}$$

olarak tanımlanmıştır. Doğrusal olmayan terimler sıra istatistiklerinin beklenen değerleri etrafında Taylor serisine açılır ve serinin ilk iki terimi kullanılarak doğrusal formda (9)' da verilen şekilde yazılır:

$$g_1(z_{(i)}) \cong \alpha_{1i} - \beta_{1i}z_{(i)}, g_2(z_{(i)}) \cong \alpha_{2i} - \beta_{2i}z_{(i)},$$

$$g_3(z_{(r_1+1)}) \cong \alpha_{3r_1+1} - \beta_{3r_1+1}z_{(r_1+1)} \text{ ve } g_4(z_{(n-r_2)}) \cong \alpha_{4n-r_2} - \beta_{4n-r_2}z_{(n-r_2)}. \quad (9)$$

Burada;

$$\beta_{1i} = \frac{v[3t_{(i)}\sqrt{v+t_{(i)}^2}+v+3t_{(i)}^2]}{[(v+t_{(i)}^2)^{3/2}+t_{(i)}(v+t_{(i)}^2)]^2}, \beta_{2i} = \frac{v[3t_{(i)}\sqrt{v+t_{(i)}^2}-v-3t_{(i)}^2]}{[(v+t_{(i)}^2)^{3/2}-t_{(i)}(v+t_{(i)}^2)]^2},$$

$$\beta_{3r_1+1} = \frac{f'(t_{(r_1+1)})}{F(t_{(r_1+1)})} - \left(\frac{f(t_{(r_1+1)})}{F(t_{(r_1+1)})}\right)^2, \beta_{4n-r_2} = \frac{f'(t_{(n-r_2)})}{1-F(t_{(n-r_2)})} - \left(\frac{f(t_{(n-r_2)})}{1-F(t_{(n-r_2)})}\right)^2,$$

$$\alpha_{1i}=g_1(t_{(i)}) + t_{(i)}\beta_{1i}, \alpha_{2i}=g_2(t_{(i)}) + t_{(i)}\beta_{2i}, \alpha_{3r_1+1} = \frac{f(t_{(r_1+1)})}{F(t_{(r_1+1)})} + t_{(r_1+1)}\beta_{3r_1+1}$$

ve

$$\alpha_{4n-r_2} = \frac{f(t_{(n-r_2)})}{1-F(t_{(n-r_2)})} + t_{(n-r_2)}\beta_{4n-r_2}$$

olarak bulunur. (9)' da verilen doğrusal ifadeler kullanılarak olabirlik denklemleri yeniden düzenlenir.

Yeni denklemler uyarlanmış olabirlik denklemleri olarak adlandırılır. Uyarlanmış olabirlik denklemleri (10) ve (11)' de verildiği şekilde yazılır:

$$\frac{\partial \ln L^*}{\partial \mu} = -\frac{(a+0.5)}{\sigma} \sum_{i=r_1+1}^{n-r_2} (\alpha_{1i} - \beta_{1i}z_{(i)}) + \frac{(b+0.5)}{\sigma} \sum_{i=r_1+1}^{n-r_2} (\alpha_{2i} - \beta_{2i}z_{(i)})$$

$$- \frac{r_1}{\sigma} (\alpha_{3r_1+1} - \beta_{3r_1+1}z_{(r_1+1)}) + \frac{r_2}{\sigma} (\alpha_{4n-r_2} - \beta_{4n-r_2}z_{(n-r_2)}) = 0 \quad (10)$$

ve

$$\frac{\partial \ln L^*}{\partial \sigma} = -\frac{n-r_1-r_2}{\sigma} - \frac{(a+0.5)}{\sigma} \sum_{i=r_1+1}^{n-r_2} z_i (\alpha_{1i} - \beta_{1i}z_{(i)}) + \frac{(b+0.5)}{\sigma} \sum_{i=r_1+1}^{n-r_2} z_i (\alpha_{2i} - \beta_{2i}z_{(i)})$$

$$- \frac{r_1}{\sigma} z_{r_1+1} (\alpha_{3r_1+1} - \beta_{3r_1+1}z_{(r_1+1)}) + \frac{r_2}{\sigma} z_{n-r_2} (\alpha_{4n-r_2} - \beta_{4n-r_2}z_{(n-r_2)}) = 0. \quad (11)$$

Uyarlanmış olabirlik denklemleri (10) ve (11)' in çözülmesi ile MML tahmin edicileri (12)' de verildiği şekilde elde edilir:

$$\hat{\mu}_{MML} = K + D\hat{\sigma}_{MML} \text{ ve } \hat{\sigma}_{MML} = \frac{B+\sqrt{B^2+4AC}}{2A}. \quad (12)$$

Burada,

$$A = n - r_1 - r_2,$$

$$m = \sum_{i=r_1+1}^{n-r_2} [(a + 0.5)\beta_{1i} - (b + 0.5)\beta_{2i}] + r_1\beta_{3r_1+1} + r_2\beta_{4n-r_2},$$

$$K = \frac{\sum_{i=r_1+1}^{n-r_2} [(a+0.5)\beta_{1i} - (b+0.5)\beta_{2i}]y_{(i)}}{m} + \frac{r_1\beta_{3r_1+1}y_{(r_1+1)} + r_2\beta_{4n-r_2}y_{(n-r_2)}}{m},$$

$$D = \frac{\sum_{i=r_1+1}^{n-r_2} [(b+0.5)\alpha_{2i} - (a+0.5)\alpha_{1i}]}{m} - \frac{r_1\alpha_{3r_1+1} + r_2\alpha_{4n-r_2}}{m},$$

$$B = \sum_{i=r_1+1}^{n-r_2} [(b + 0.5)\alpha_{2i} - (a + 0.5)\alpha_{1i}](y_{(i)} - K) - r_1\alpha_{3r_1+1}(y_{(r_1+1)} - K) + r_2\alpha_{4n-r_2}(y_{(n-r_2)} - K)$$

ve

$$C = \sum_{i=r_1+1}^{n-r_2} [(a + 0.5)\beta_{1i} - (b + 0.5)\beta_{2i}](y_{(i)} - K)^2 + r_1\beta_{3r_1+1}(y_{(r_1+1)} - K)^2 + r_2\beta_{4n-r_2}(y_{(n-r_2)} - K)^2$$

olarak tanımlanmıştır. $\hat{\sigma}_{MML}$ ' in paydasındaki $2A$ ifadesi $2\sqrt{A(A-1)}$ ile değiştirilerek yan düzeltmesi yapılmıştır.

Dikkat edilmelidir ki, çift taraflı Tip II sansürlenmiş örneklem durumunda elde edilen ML ve MML tahmin edicilerinde $r_1 = 0$ ve $r_2 = 0$ olarak alındığında tam örneklem için ML ve MML tahmin edicileri elde edilir.

4. MONTE CARLO SİMÜLASYONU

Bu bölümde, MC simülasyonu kullanılarak ML ve MML tahmin edicilerinin etkinlikleri karşılaştırılmıştır. Simülasyon çalışması boyunca $\mu = 0$ ve $\sigma = 1$ olarak alınmıştır. Simülasyonda farklı örneklem hacimleri ($n = 10, 15, 20$) kullanılmıştır. JFST dağılımının simetrik olduğu $a = b = 3$ ve $a = b = 15$ durumlarda sağdan ve soldan $[|0.5+n(0.1)|]$ değerinde sansürleme yapılmıştır. JFST dağılımının çarpık olduğu $a=3, b=6$ ve $a=3, b=9$ durumlarda soldan $[|0.5+n(0.1)|]$ değerinde sansürleme yapılmıştır. Başka bir ifade ile; JFST dağılımının çarpık ve simetrik durumları için sırasıyla Tip II ve çift taraflı Tip II sansürleme uygulanmıştır. Tüm simülasyonlar $N = [100,000/n]$ tekrar ile gerçekleştirilmiştir. Burada, $[\cdot]$ tam değer fonksiyonu olarak tanımlanmıştır.

Tahmin edicilerin oransal etkinlikleri (relative efficiency-RE) (13) eşitliği kullanılarak

$$RE = \frac{MSE(\hat{\theta}_{MML})}{MSE(\hat{\theta}_{ML})} \quad (13)$$

şeklinde hesaplanmıştır. Ayrıca, hata kareler ortalaması (Mean Square Error-MSE) değerleri (14)' de verilen

$$MSE(\hat{\theta}) = Var(\hat{\theta}) + [Bias(\hat{\theta})]^2 \quad (14)$$

eşitliği kullanılarak hesaplanmıştır. Burada; $Bias(\cdot)$ ilgilenilen parametre için simülasyon sonucunda elde edilen tahmin değerlerinin ortalaması ile parametrenin gerçek değeri arasındaki farkı göstermektedir. $Var(\cdot)$ ise simülasyon sonucunda ilgilenilen parametre için elde edilen tahmin değerlerinin varyansını göstermektedir. Tip II sansürlenmiş örneklem için $JFST(\mu, \sigma, a, b)$ dağılımının μ ve σ parametrelerinin ML ve MML tahmin edicilerinin simülasyon ile elde edilmiş yan (bias) ve MSE değerleri Tablo 1' de verilmiştir.

Tablo 1. $\hat{\mu}$ ve $\hat{\sigma}$ ' nın MC simülasyonu yardımıyla elde edilmiş yan ve MSE değerleri

			$\hat{\mu}$					$\hat{\sigma}$					
			MML		ML			MML		ML			
r_1	r_2	n	Yan	MSE	Yan	MSE	RE	Yan	MSE	Yan	MSE	RE	
$a=b=3$	1	1	10	-0.003	0.132	-0.003	0.131	1.008	-0.085	0.131	0.088	0.093	1.409
	1	1	15	-0.003	0.090	-0.002	0.090	1.000	-0.049	0.079	0.071	0.064	1.234
	2	2	20	-0.002	0.064	-0.002	0.064	1.000	-0.042	0.052	0.038	0.044	1.182
$a=b=15$	1	1	10	0.007	0.108	0.007	0.108	1.000	-0.037	0.094	0.078	0.072	1.301
	1	1	15	-0.001	0.077	-0.002	0.077	1.000	-0.020	0.065	0.061	0.054	1.204
	2	2	20	0.001	0.053	0.001	0.053	1.000	-0.014	0.041	0.021	0.035	1.171
$a=3, b=6$	1	0	10	-0.008	0.191	0.097	0.187	1.021	-0.077	0.105	0.049	0.076	1.382
	1	0	15	-0.005	0.127	0.064	0.125	1.016	-0.050	0.063	0.032	0.051	1.235
	2	0	20	-0.007	0.098	0.042	0.095	1.011	-0.043	0.045	0.011	0.037	1.216
	5	0	50	-0.002	0.036	0.022	0.036	1.000	-0.017	0.016	0.010	0.015	1.067
$a=3, b=9$	1	0	10	-0.009	0.376	0.153	0.354	1.062	-0.071	0.104	0.025	0.078	1.333
	1	0	15	-0.006	0.246	0.096	0.235	1.047	-0.040	0.061	0.020	0.050	1.220
	2	0	20	-0.001	0.182	0.062	0.176	1.034	-0.036	0.041	0.001	0.037	1.108
	5	0	50	-0.001	0.068	0.025	0.067	1.015	-0.018	0.016	0.002	0.015	1.067

Tablo 1 incelendiğinde,

Konum parametresi için;

JFST dağılımının simetrik ya da çarpık olduğu durumlarda, ML ve MML tahmin edicilerinin neredeyse yansız çıktığı söylenebilir. Ayrıca örneklem hacmi arttıkça her iki tahmin edici içinde MSE değerlerinin azaldığı görülmektedir.

JFST dağılımının simetrik olduğu $a=b=3$ için küçük örneklem hacimlerinde, ML tahmin edicisinin MML' e göre çok az da olsa etkin olduğu fakat örneklem hacminin artması ile ML ve MML tahmin edicilerinin etkinliklerinin eşit olduğu söylenebilir. JFST dağılımının Normal dağılıma yakınsadığı değerler $a=b=15$ için tüm örneklem hacimlerinde, ML ve MML tahmin edicilerinin etkinliklerinin eşit olduğu Tablo 1' den görülmektedir.

JFST dağılımının çarpık olduğu $a=3$ ve $b=6,9$ için küçük örneklem hacimlerinde, ML tahmin edicisinin MML' e göre daha etkin olduğu fakat örneklem hacminin artması ile ML ve MML tahmin edicilerinin etkinlikleri arasındaki farkın azaldığı söylenebilir. JFST dağılımı çarpıklaştıkça küçük örneklem hacimlerinde MML tahmin edicinin yansızlık özelliğini koruduğu fakat çok azda olsa etkinliğinin azaldığı Tablo 1' den görülmektedir.

Ölçek parametresi için;

JFST dağılımının simetrik ya da çarpık olduğu durumlarda, ML ve MML tahmin edicilerinin küçük örneklem hacimlerinde az da olsa yanlı çıktıkları fakat örneklem hacmi arttıkça yan miktarlarının azaldığı söylenebilir. Ayrıca örneklem hacmi arttıkça her iki tahmin edici içinde MSE değerlerinin azaldığı görülmektedir.

JFST dağılımının simetrik olduğu $a=b=3$ ve $a=b=15$ için küçük örneklem hacimlerinde, ML tahmin edicisinin MML' e göre daha etkin olduğu fakat örneklem hacminin artması ile ML ve MML tahmin edicilerinin etkinlikleri arasındaki farkın azaldığı Tablo 1' den görülmektedir.

JFST dağılımının çarpık olduğu $a=3$ ve $b=6,9$ için küçük örneklem hacimlerinde, ML tahmin edicisinin MML' e göre daha etkin olduğu fakat örneklem hacminin artması ile ML ve MML tahmin edicilerinin etkinlikleri arasındaki farkın azaldığı söylenebilir.

Ayrıca, JFST dağılımının çarpık olduğu büyük örneklem hacimleri ($n>100$) için gerçekleştirilen MC simülasyonu sonucunda konum ve ölçek parametresinin ML ve MML tahmin edicilerinin etkinliklerinin eşit olduğu görülmüş fakat Tablo1' de verilmemiştir.

5. SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu çalışmada çift taraflı Tip II sansürlenmiş örneklem için JFST dağılımının konum ve ölçek parametrelerinin ML ve MML tahmin edicileri elde edilmiştir. Ayrıca, MC simülasyonu kullanılarak ML ve MML tahmin edicilerinin etkinlikleri karşılaştırılmış ve küçük örneklem hacimlerinde MML tahmin edicisinin neredeyse ML tahmin edicisi kadar etkin çıktığı ve büyük örneklem hacimlerinde ise ML ve MML tahmin edicilerinin etkinliklerinin eşit olduğu görülmüştür.

Bu çalışma sonucunda, ML tahmin değerleri elde edilirken karşılaşılabilecek hesaplama zorluklarından kaçınmak için iteratif yöntemlere ihtiyaç duymayan ve örneklem hacmi arttıkça ML ile aynı sonuçları veren MML tahmin edicilerinin kullanılabilceği gösterilmiştir.

KAYNAKLAR

- [1] Tiku, M. L. A Note on Estimating the Location and Scale Parameters of the Exponential Distribution. Aust. J. Stat. 1967a; 9: 49-54.
- [2] Tiku, M. L. Estimating the Mean and Standard Deviation from a Censored Normal Sample. Biometrika 1967b; 54: 155-165.
- [3] Tiku, M. L. Estimating the Parameters of Normal and Logistic Distributions from Censored Samples. Aust. J. Stat. 1968a; 10: 64-74.
- [4] Tiku, M. L. Estimating the Parameters of Log-Normal Distribution from Censored Samples. Amer. Stat. Assn. 1968b; 63: 134-140.
- [5] Tiku, M. L. Estimating the Mean and Standard Deviation from Progressively Censored Normal Samples. J. Indian Agric. Stat. 1968c; 20: 20-25.
- [6] Tiku, M. L. Estimating the Means and Standard Deviation from Two Censored Normal Samples. Biometrika 1971; 58: 241-242.
- [7] Tiku, M. L. Testing Group Effects from Type II Censored Normal Samples in Experimental Design. Biometrics 1973; 29: 25-33.
- [8] Tiku, M. L. Estimating and Testing Group Effects from Type I Censored Normal Samples. Commun. Stat. – Theor. Meth. 1977; 6(15): 1485-1501.
- [9] Balakrishnan, N., ve Mi, J. Existence and Uniqueness of the MLEs for Normal Distribution based on General Progressively Type-II Censored Samples. Statistics & Probability Letters 2003; 64: 407-414.
- [10] Senoglu, B., ve Tiku, M. L. Censored and Truncated Samples in Experimental Design Under Non-Normality. Statistical Methods 2004; 6(2): 173-199.

- [11] Wu, J.W., Lee, W.C., ve Shen, S.C. Computatioanl Comparison of Prediction Future Lifetime of Electronic Components with Pareto Distribution based on Multiply Type II Censored Samples. *Applied Mathematics and Computation* 2007; 374-406.
- [12] Cristan, A. C. Using the EM algorithm for Inference in Mixture of Distributions with Censored but Partially Identifiable Data. *Computational Statistics & Data Analysis* 2007; 51: 2769-2781.
- [13] Vaughan, D. C., ve Tiku, M. L. Testing the Equality of Location Parameters of Exponential Populations from censored samples. *Commun. Stat.-Theor. Meth.* 1993; 22: 2567-2581.
- [14] Balakrishnan, N., ve Kateri, M. On the Maximum Likelihood Estimation of Parameters of Weibull Distribution based on Complete and Censored Data. *Statistics and Probability Letters* 2008; 78: 2971-2975.
- [15] Sun, X., Zhou, X., ve Wang, J. Confidence Intervals for the Scale Parameter of Exponential Distribution based on Type II Doubly Censored Samples. *Journal of Statistical Planning and Inference* 2008; 138: 2045-2058.
- [16] Balakrishnan, N., ve Dembinska, A. Progressively Type-II Right Censored Order Statistics from Discrete Distributions. *Journal of Statistical Planning and Inference* 2008;138: 845-856.
- [17] Deng, J., ve Pandey, M. D. Cross Entropy Quatile Function Estimation from Censored Samples Using Partial Probability Weighted Moments. *Journal of Hydrology* 2008; 363: 18-31.
- [18] Saffari, S. E., Adnan, R., ve Greene, W. Parameter Estimation on Hurdle Poisson Regression Model with Censored Data. *Jurnal Teknologi* 2012; 189-198.
- [19] He, Q., ve Nagaraja, H. Fisher Information in Censored Samples form Downton's Bivariate Exponential Distribution. *Journal of Statistical Planning and Inference* 2012; 142: 1888-1898.
- [20] Ortega, E. M., Cordeiro, G. M., ve Lemonte, A. J. A Log-Linear Regression Model for the Beta-Birnbaum-Saunders Distribution with Censored Data. *Computational Statistics and Data Analysis* 2012; 56: 698-718.
- [21] Lopez, O., ve Saint-Pierre, P. Bivariate Censored Regression Relying on a New Estimator of the Joint Distribution Function. *Journal of Statistical Planning and Inference* 2012; 142: 2440-2453.
- [22] Basak, I., ve Balakrishnan, N. Estimation for Three-Parameter Gamma Distribution Based on Progressively Censored Data. *Statistical Methodology* 2012; 9: 305-319.
- [23] Saffari, S. E., Adnan, R., ve Greene, W. Investigating the Impact of Excess Zeros on Hurdle-Generalized Poisson Regression Model with Right Censored Count Data. *Statistica Neerlandica* 2013; 67: 67-80.
- [24] Balakrishnan, N., ve Davies, K. F. Pitman Closeness Results for Type-I Censored Data from Exponential Distribution. *Statistics and Probability Letters* 2013; 83: 2693-2698.
- [25] Rastogi, M. K., ve Tripathi, Y. M. Estimation Using Hybrid Censored Data from a Two-Parameter Distribution with Bathtub Shape. *Computational Statistics and Data Analysis* 2013; 67: 268-281.
- [26] Pradhan, B., ve Kundu, D. Inference and Optimal Censoring Schemes for Progressively Censored Birnbaum-Saunders Distribution. *Journal of Statistical Planning and Inference* 2013; 143: 1098-1108.

- [27] Cramer, E., ve Balakrishnan, N. On some Exact Distributional Results Based on Type-I Progressively Hybrid Censored Data from Exponential Distributions. *Statistical Methodology* 2013; 10: 128-150.
- [28] Matos, L. A., Lachos, V. H., Balakrishnan, N., ve Labra, F. V. Influence Diagnostics in Linear and Nonlinear Mixed-Effects Models with Censored Data. *Computational Statistics and Data Analysis* 2013; 57: 450-464.
- [29] Basso, R.M., Lachos, V.H., Cabral, C.R.B ve Ghosh P. Robust mixture modeling on scale mixtures of skew-normal distributions. *Computational Statistics and Data Analysis* 2010; 54: 2926-2941.
- [30] Flecher, C., Naveau, P. ve Allard, D. Estimating the closed skew-normal distribution parameters using weighted moments. *Statistics and Probability Letters* 2009; 79: 1977-1984.
- [31] Garcia, V.J., Gomez-Deniz, E. ve Vazquez-Polo, F.J. A new skew generalization of the normal distribution: Properties and applications. *Computational Statistics and Data Analysis* 2010; 54: 2021-2034.
- [32] Mameli, V. The Kumaraswamy skew-normal distribution. *Statistics and Probability Letters* 2015; 104: 75-81.
- [33] Mudholkar, G.S. ve Hutson, A.D. The epsilon-skew-normal distribution for analyzing near-normal data. *Journal of Statistical Planning and Inference* 2009; 83: 291-309.
- [34] Jones, M.C. ve Faddy, M.J. A skew extension of the t-distribution, with applications. *J.R. Stat. Soc. Ser. B* 2003; 65: 159-174.
- [35] Acitas, S., Senoglu, B. ve Arslan, O. Alpha-Skew Generalized t distribution. *Revista Colombiana de Estadística* 2015; 38(2): 353-370.
- [36] Acitas, S., Kasap, P., Senoglu, B., ve Arslan, O. One-step M-estimators: Jones and Faddy's skewed t-distribution. *Journal of Applied Statistics* 2013; 40(7): 1545-1560.
- [37] Acitas, S., Kasap, P., Senoglu, B. ve Arslan, O. Robust estimation with the skew t2 distribution. *Pakistan Journal of Statistics* 2013; 29(4): 409-430.
- [38] Arslan, M.S.T. Tam ve Sansürlü Örneklemeler için Deney Tasarımı Model Parametrelerinin Dayanıklı Tahmini, Doktora Tezi, Eskişehir Osmangazi Üniversitesi, Eskişehir, Türkiye, 2015.
- [39] Arslan, T. ve Senoglu B. Statistical Inference for the Location Model when the Distribution of the Error Terms is Jones and Faddy's Skew t : Type II Censored Samples. *International Conference on Trends and Perspectives in Linear Statistical Inference (LINSTAT'16)*; August 22-25 2016; Istanbul, Turkey: pp. 28