

ISSN 1012-2354



ERCIYES ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ

ENSTİTÜSÜ DERGİSİ

*Erciyes University
Journal of
the
Institute
of
Science and Technology*

Cilt (Vol.): 35

Sayı (No): 1

Yüksek Yapılardaki Strüktürel Dışavurumun Bulanık Topsis Yöntemi ile Belirlenmesi

Sultan Şimşek
Erciyes Üniversitesi Mimarlık Fakültesi/ KAYSERİ
ORCID: 00 0000 0102 2345 6789

(Alınış / Received: 24.02.2019, Kabul / Accepted: 13.03.2019, Online Yayınlanma / Published Online: 30.04.2019)

Anahtar Kelimeler
Strüktür,
Dışavurum,
Strüktürel dışavurum,
Bulanık mantık,
BulanıkTOPSİS

Özet: Dünyada yüksek yapılar, zemin çizgisini dik yönde kesen aşırı yükseklikleri, en son yapısal teknoloji ve ürünlerini kullanıyor olmaları, estetik ve sanatsal özellikleri yönünden dikkatleri üzerine çekmektedir. Strüktür sistemindeki ve malzemedeki gelişmeler, yüksek yapıların daha da yükselmesi için en önemli faktörlerden biri olarak görülmektedir. Özellikle sanatsal özelliği yüksek yapılarda, strüktürün yapının cephesinden algılanması, başka bir deyişle dışavurulması, strüktürün estetik bir öğeye dönüşmesi açısından önemli olmaktadır. Bu bağlamda strüktürden; heykelsi ve tek defaya mahsus olarak tasarlanması, çelik gibi hafif ve endüstriyel malzemelerden yapılmış olması, dışardan ve içeriden görülebiliyor olması gibi beklentiler bulunmaktadır.

Bu çalışma kapsamında, strüktürel dışavurumcu olduğu literatürlerde kanıtlanmış olan Bank of China Kulesi (1990) ve Hong Kong & Şangay Bankacılık Şirketi (HSBC) (1985) binaları incelenerek hangisinin strüktürel dışavuruma daha yakın olduğu, belirlenen ölçütler kapsamında Bulanık TOPSİS yöntemi ile tespit edilmiştir.

Determination of Structural Expression in High Buildings by Fuzzy Topsis Method

Keywords
Structure,
Expression,
Structural expression,
Fuzzy logic,
Fuzzy TOPSIS

Abstract: Tall buildings all over the world attract the attention by virtue of their extreme heights which cut the ground line in perpendicular direction, utilization of the latest structural technology and products as well as their aesthetic and artistic characteristics. Developments with regard to structure system and materials are considered as one of the most significant factors for the rising of tall buildings more than their existing heights. Perception -in other words expression- of structure from the façade of building, particularly for the buildings with considerable artistic characteristics, has a significant role with regard to the transformation of structure into an aesthetic component. In this context, the structure is expected to be sculptural, designed for once, made up of light and industrial materials such as steel, and visible from both inside and outside.

Within the framework of this study, Bank of China (1990) and Hong Kong & Shanghai Banking Corporation (HSBC) (1985) buildings, which have been proven to be structural expressionist in the relevant literature, were examined and identified according to which one is closer to the structural expression within the scope of the determined criterions with the method of Fuzzy TOPSIS

1. Giriş

“Ekspresyonizm” ya da “Anlatımcılık” da denilen dışavurumculuk, 20. Yüzyıl başlarında Avrupa’da ortaya çıkan sanat ve mimarlık akımıdır. Güzel sanatlarda Rönesans’tan beri hüküm sürmüş doğaya uygun betimleme anlayışından bir kopuş olan sanatın asıl amacı, sanatçının duygularını ve iç dünyasını, renk, çizgi, düzlem ve kütle aracılığı ile anlatmasıdır. Bu duyguları daha güçlü yansıtabilmek için sanatçılar tasarımda denge ya da güzellik gibi geleneksel kavramlardan uzaklaşarak biçim bozma yöntemini yaygınlıkta uygulamışlardır [1].

Dışavurumcu mimaride form, tasarımda öncül ve vurgulanan bir noktadır. Heykelsi ve ifadeci form anlayışı tündengelimsel bir yöntem izlenerek tasarımın tümüne hâkimdir. Mimar konu hakkında tüm söylemek istediklerini ve iç dünyasından iletmeye çalıştığı fikirleri form üzerinden anlatmıştır. Form belki fonksiyonu takip etmez ama yapıda önemli fonksiyonlara karşılık gelen biçimler de genellikle abartılı ve dikkat çekici olmuştur. Buna göre Dışavurumcu Yapılarda heykelsi form, tasarımın içeriğini belirleyen dominant bir etken olarak karşımıza çıkmıştır [2]. Dışavurumcu yapı, ifadeci, tek defaya özgü, plastik nitelikleri yüksek, heykel döker gibi gerçekleştirilen bir mimarinin ürünü olarak tanımlanabilir. Bu yapıların tasarımında iki türlü davranış görülebilir. Birincisi; belirli bir fikrin ya da objenin sembolizmi olarak açıklanabilirken, ikincisi; etkili bir form arayışı neticesinde tek defaya özgü, plastik ve heykelsi bir forma ulaşmak olarak tanımlanabilir [3].

Dışavurumcu tavır doğal organizmalardakine benzer olarak form ve fonksiyonun karşılıklı ilişkisine sahiptir. Fonksiyonist tasarımlar genelde rasyonel makine estetiği olarak tanımlanmaktadır. Dışavurumcu tasarımlarda ise estetik kaygı ve fantastik bir bakış açısı güdülen yapıldığı halde, malzemenin ele alınışı, strüktür ve kullanılabilirlik açısından Fonksiyonist tasarımlardan daha az rasyonel değildir [4]. İlk dışavurumcu yapılardan Mendelsohn’ un Einstein Kule’si gözlem evi olarak belirgin bir işlev yüklenmiş, ancak burada önemli olan nokta, ifadeci tasarımcının bu belirgin rasyonalite içerisine kendi yorum ve fantezi dünyasını tasarıma katarak yapıyı ortaya çıkartmasıdır. **bknz Şekil 1.** Bruno Taut’un Cam Pavilyon’u ise bir sergi binası, sanat evi olarak yapılmış olmasına rağmen sembolik bir anlam taşımaktadır. **bknz Şekil 2.**



Şekil 1. Einstein Kulesi, Erich Mendelsohn, 1921 [25].



Şekil 2. Cam Pavyon, Bruno Taut, 1914 [26].

Dışavurumcular, biçimin üretiminde fonksiyonun ötesinde başka etkin kavramlara başvurumaktadırlar. Yapının biçim tasarımında mimar, bir düşünceye veya nesneye gönderme yapmak, tek defaya özgü, plastik ve heykelsi bir forma ulaşmak amacıyla olmuşlar ve fonksiyonu somutlaştırmada kişisel düşüncelerini, iç dünyalarını ve özgürlüklerini ön plana çıkartmışlardır. Dışavurumcu Mimari'nin ilk çıkış döneminde mimarlar rasyonalizmin katılığını coşkuyla kırmak konusunda kendilerini oldukça özgür bırakan tasarımlar yapmışlardır. Hem rasyonalizmin o dönemde fazla baskın olması hem de yaratımdaki bu fazla özgürlük anlayışından dolayı, ilk dönem dışavurumcu tasarımlar, az oranda gerçekleşen ve çoğunlukla ütöpik çalışmalar olarak kalmıştır [2]. İkinci dönem ise 1945'lerde yeniden canlanmış ve uygulama alanı bulmuştur. Bu dönemde mimarlar hareket ve dinamizm kattıkları güçlü, heykelsi formlar icat ederek, bütünüyle yeni ve dinamik bir simgesel mimarlık arayışına girişmişlerdir. Malzemeyi eğip bükerek farklı anlamlar kattıkları dışavurum döneminin en belirgin özellikleri strüktürde yapılan gelişmelerdir. Strüktürün dışarı yansıtılarak hareket ve dinamizm kazandırıldığı strüktürel dışavurum döneminde çok sayıda köprü, stadyum gibi geniş açıklıklı yapılar ve yüksek yapılar (kuleler) yapılmıştır.

Strüktürel dışavurum özellikle yüksek yapılarda estetik ve sanatsal bir değer olarak görülebilir. Bu yapılardan Bank of China Kulesi ve Hong Kong & Şangay Bankacılık Şirketi (HSBC) Genel Merkezi Binası strüktürel dışavurum konusunda öncü konumundaki ve her ikisi de kendi içinde değerlendirildiğinde tek defaya mahsus tasarlanmış, heykelsi görüntüsü olan ve strüktürün dışarı yansıtıldığı yapılardır. Bu iki yapının belirlenen ölçütler dikkate alınarak dışavurumcu olup olmadığına veya hangisinin diğerine göre daha üstün dışavurumcu özelliklere sahip olduğuna karar vermek zor görünmektedir. Burada olduğu gibi sayısal değer içermeyen subjektif değerlendirmelerle karar verilmesi gereken ve insanın düşünme sistemine yakın ve dilsel ifadelerin kullanıldığı durumlarda, değerlendirmeyi somut hale getirmek ve kolaylaştırmak için sayısal hesaplamalardan yararlanan Bulanık TOPSİS yöntemi kullanılmıştır. Bulanık TOPSİS yöntemi, hem yapıları hem de ölçütleri karar vericinin dilsel ifadeler kullanarak verdiği değerleri uygun ölçekler kullanarak, kendi içerisinde ve birbirleriyle kıyaslayarak sayısal değerlere dönüştüren bir yöntemdir.

2. Strüktürel Dışavurum

Modernizmle beraber yeni yapısal sistemlerin ve ileri teknolojilerin gelişmesi strüktürel dışavurumculuk hareketini ortaya çıkarmıştır [5]. Hareket, 1960'lı yıllarda başlamış ve 1970'lerden günümüze kadar gelerek 1980'lerde geç modernizm olarak bilinen mimari dönemde durmuştur. Birçok modernist yapı, strüktürel sistemlerini açık bir şekilde sergilemeye çalıştıklarından dolayı, açık bir strüktürel dışavurum özelliğine sahiptir. Ancak strüktürel dışavurumda yeni strüktürel sistemlerin ve yenilikçi yapı malzemelerinin rolünü vurgulamak için estetik kalite yeniden oluşturulmaya çalışılmıştır [6;7]. Bu şekilde strüktürel dışavurum, cephenin tasarımına egemen olmakta, binanın mimari ifadesiyle eş anlamlı hale gelmektedir. Bu dışavurum aynı zamanda, uluslararası üslup ve onun biçimciliği ile modern alandaki bir başka hareketle de tamamen uyumludur.

Strüktürel dışavurum kavramı ilk olarak yapısal malzeme ile beraber, eşsiz biçimlerin yaratılmasına uygun bir şekilde işlevsel bir yapı türü olan köprülerde ortaya çıkmıştır [8]. Köprü tasarımlarının çoğu, tarihsel olarak, estetiğe az veya hiç dikkat etmeyen strüktürel mühendislerin kontrolü altındaydı. Bununla birlikte, Robert Mailhart ve Cristian Menn gibi estetik açıdan duyarlı bazı mühendisler, köprünün doğal ortamlarında doğaya uygun estetik kaliteye sahip olması gerektiğini düşünmüşler ve yapısal işlevlerini sergileyerek dikkat çeken köprüler tasarlamaya başlamışlardır. John A. Roebling tarafından tasarlanan Brooklyn Köprüsü (1870) bu tür dışavurum özelliği gösteren bir köprüdür. **bknz Şekil 3.** Felix Candela ve Heinz Ishler, deniz kabuklarının

estetiklerinden ve takip ettikleri yapısal mantıktan ilham alarak hem zarafeti hem de gücü ortaya çıkarmışlardır. Benzer şekilde Pier Luigi Nervi, binaların yük atarımını görüntüleyen ve fiziksel çıkışlarla stres akışlarını eşleştiren tonozlu yapısal formlar da dahil olmak üzere bu yaklaşımı izleyen birçok farklı yapı tasarlamıştır. Bu strüktürel vizyonerler, yapıları işlevsel nesnelere olarak gören mekanik ve fiziksel kısıtlamaları sanatsal olarak yerine getirebilen sanat formları olarak görmektedir [8].



Şekil 3. Brooklyn Köprüsü, John A. Roebling, 1870 [28].

Başta köprüler olmak üzere, geniş açıklıklı strüktürler ve kuleler, geçmişte sanat eseri sayılabilecek çalışmalar olarak ön plana çıkmaktadır. 19. yy'dan itibaren yüksek yapıların kentlerde güç ve prestij sembolü sayılması ve daha fazla yükselme isteğinden kaynaklanan en yüksek yapıyı yapma yarışı, yüksek yapı strüktürel sistemlerinin gelişmesinde en önemli etkenlerden biridir [9].

Yüksek binalarda strüktürel dışavurum ifadesinin kökleri on dokuzuncu yüzyılda William Le Baron Jenney ve John Wellborn Root'un çalışmalarına dayanmaktadır. Her ikisi de mühendislik geçmişine sahip olmalarına rağmen Chicago'da mimar olarak çalışmışlardır. Her ikisi de Violette Duc tarafından tasarlanan ve etkilenen binaların görsel etkisiyle ilgilenmişlerdir. Jenney, Home Insurance Building'de iskelet çerçevesini kullanmış ancak duvar Romanesk canlandırma tarzında ki cepheyle kaplanmış olduğundan kullanılan sistem çok anlaşılmamıştır. Her ne kadar yapısal anlatım o zamanlar küçük küçük başlamış da olsa, onların projesi 1960'lar ve 1970'lerde üretilecek olan yeni formların habercisi idi [10;11].

Binalar yükseldikçe artan ağırlıkların mevcut strüktürel sistemle çözülemeyeceği, bu tür muazzam ve karmaşık yapılar için kullanılacak formun mimari işlevler ve estetikten ziyade sağlam mühendislik prensiplerinden üretileceği anlaşılmıştır. Başka bir ifadeyle, Louis Sullivan'ın mimarlık ilkesine dayanan form, işlevi takip etmelidir bakışı farklı bir perspektiften değerlendirilmiştir. Strüktürel sistemdeki kuvvet akışı formla belirlenmelidir. Böylece kuvvetler kontrol altına alınabilmektedir. Bu, işlevin formu izlediği anlamına gelmektedir [10].

Kavramı bir adım daha ileri götüren Khan, yüksek binaların yapısal sistemi dikey olarak ölçeklendiğinde, ağırlığının yarattığı yüklerin ve yüksek irtifalardan kaynaklanan artan rüzgârın katlanarak büyüdüğünü fark etti. Sonuç olarak Khan, ölçek etkisi üzerinde ayrıntılı çalışmalar yürütmüş ve yüksek binalarda çelik ve beton kullanımına yönelik yükseklik temelli yapısal sistem tablolarında devrimci gelişime yol açmıştır [12;11]). Khan, Chicago'daki Dewith Chestnut Apartmanı (1965) için geliştirdiği çerçeve sisteme ek olarak, ilk destekli çerçeve sistemini geliştirdi ve 1970 yılında Chicagos John Hancock Centre'da uyguladı [11]. **bknz Şekil 4.** Daha sonra çeşitli yenilikçi strüktürel sistemler, tasarımın önünü açarak tasarımcıların modern çağda birçok yüksek bina tarafından kullanılan geleneksel rijit çerçeve sistemden ayrılmasına neden oldu. Dewith Chestnut Apartmanı ve John Hancock Centre gibi yapılar strüktürel sistemlerini canlı bir şekilde çekici bir şekilde sergilemeleriyle strüktürel dışavurumculuğun örnekleri arasında yer almışlardır. Bu ve benzeri yapılarda, yer çekimi, rüzgâr ve depremlerin doğal güçlerine karşı olan yapısal eylem, yüksek yapı tasarımının önemli bir yönü haline gelmiştir[8].



Şekil 4. John Hancock Center, Fazlur Rahman Khan, 1969 [29].

Strüktürel dışavurumcu yapılar, özenle tasarlanan hassas detaylara, tasarımda esnekliğe ve optimum inşaat ekonomisine sahiptir. Tasarımın ana konsepti, binanın estetik ve sanatsal özelliğini ön plana çıkarmak için farklı strüktürel bileşenlerin kurgulanmasıdır. Çoğu zaman strüktürel bileşenler, mühendislik bilgisine dayanarak strüktürel sisteme yeni ve kararlı alternatifler sunmaktadır [27]. Strüktürel malzeme ve bileşenlerden işlevin gerekliliklerini yerine getirmesi beklenirken cephede sadece süsleme amaçlı kullanılması dışavurumcu bir tavır olarak görülmemektedir.

Strüktürel dışavurumcu yapılarda olması gerektiği varsayılan özellikler aşağıdaki gibi iki başlık altında incelenmektedir:

1. Strüktürel özellikler:

- a.Strüktürel elemanların içte ve dışta görünür olması [27],
- b.Strüktürel bileşenlerinin ortaya çıkarılması,
- c.Hafif ve endüstriyel malzeme kullanımı [27],
- d.Strüktürde basit geometrik formların seçilmesidir.

2. Mimari özellikler:

- a.Yapı dış tasarımında iç içe geçmiş bütünleşik formların kullanımı
- b.İç tasarımda esneklik,
- c.Şeffaf yüzeylerin oluşturulması
- d. Heykelsi dış görünümüne ulaşmak
- e.Tek defaya özgü tasarımlar yapılmasıdır.

Strüktürel dışavurum konusunda yüksek yapılar irdelendiğinde yukarıdaki özellikler dikkate alınarak iki yüksek yapının dışavurumcu olup olmadıkları, ne kadar yakın oldukları veya hangisinin diğerine göre dışavurumculuğa daha yakın olduğuna karar vermek elde sayısal veriler olmadan her zaman kolay olmamaktadır. Bu nedenle karar vericinin işini sayısal verilerle kolaylaştırmak için Bulanık TOPSİS yöntemi tercih edilmiştir.

3. Bulanık Topsis Yöntemi

Karar verme, insan yaşamının her alanında karşılaşılabileceği bir seçim yapma eylemidir. Birçok seçenek arasından sınırlama yapmak veya tek bir seçeneğin belirlenmesinde karar vermek, sezgisel olabileceği gibi mantık ve deneyimlerle de gerçekleştirilmektedir [13].

Karar verme ve değerlendirme sürecinde ortaya konan hedefin birçok parametre ile belirlendiği ve değerlendirilecek alternatiflerin her birinin kendine özgü avantajlarının bulunduğu durumlarda karar verme işi oldukça güçleşmektedir. Bu nedenle, 1960'lı yıllarda tüm kriterlerin değerlendirilmesi amacıyla Çok Kriterli Karar Verme Yöntemleri (ÇKKVY) geliştirilmeye başlanmıştır. Çoğunlukla kullanılan çok kriterli karar verme yöntemleri aşağıdaki gibidir [14]:

1. Analitik Hiyerarşi Süreci (AHS),

2. Bulanık Mantık ve Bulanık Küme Yöntemi,
3. Analitik Bilgi Ağı Süreci (ABAS),
4. İdeal Çözüme Dayalı Sıralama Tekniği (TOPSIS),
5. Eleme ve Seçme Yöntemi (ELECTRE),
6. Tercih Sıralaması Organizasyon Yöntemi (PROMETHEE),
7. Çok Kriterli Optimizasyon ve Uzlaşık Çözüm Yöntemi (VIKOR).

Bulanık karar vermenin ana çalışma alanı belirsizlik altında karar vermedir. Çünkü elimizde kriterlere, alternatiflere ve sonuçlara ilişkin sayısal değerler değil sözlü ifade edilen dilsel değerler mevcuttur ve bu durum belirsizlik oluşturmaktadır. Bulanıklık, kararlardaki belirsizliği ifade etmektedir. Bir olayın olup olmadığıyla ilgilenmeyerek, hangi dereceye kadar olduğunu ölçmektedir. Bulanık mantık, insanın karar verme ve değerlendirme süreçlerini sadece sonuç odaklı planlamak yerine sonuca ulaşmak için kullanılan her adımı titizlikle işin içine katan bir yöntemdir.

3.1. Bulanık mantık ve bulanık küme teorisi

Bulanık mantık (fuzzy logic) ilk defa 1965 yılında Lotfi A. Zadeh tarafından geliştirilmiştir. Esası Bulanık Küme Teorisine dayanan Bulanık Mantık, mantık kurallarının esnek ve bulanık bir şekilde uygulanmasıdır. Bulanık Küme Teorisi, temelde insan düşünce ve algılarındaki belirsizlikle ilgilenir ve bu belirsizliği sayısallaştırmaya çalışır. Bu sayede bulanık mantık, insanın sağduyusuna dayanılarak akıl yürütülen durumların matematiksel olarak modellenebilmesine imkân tanır ve oluşturulan modelde her şey bir değer ile ifade edilebilir [15; 16].

3.2. Bulanık TOPSİS yöntemi

Çok kriterli karar verme problemlerinde en çok rastlanılan yöntemlerden birisi ilk kez 1981 yılında önerilen TOPSIS yöntemidir [17]. Bir doğrusal ağırlıklandırma tekniği olan TOPSIS yönteminin en önemli özelliği, bu yöntemde pozitif ideal çözüme en yakın ve negatif ideal çözüme en uzak olan en uygun çözümün belirlenmesidir. Bu mesafelerin iki yönlü olması ile sadece maksimize edilecek durumlar değil minimize edilmesi gereken durumlar da göz önünde bulundurulur ve buna göre en uygun seçim yapılır [18]. Bununla beraber, gerçek hayatta pek çok durumda değerlendirme yaparken sayısal değerler yetersiz kalabilir çünkü insan düşünce ve yargıları özellikle tercihler genellikle belirsizlik içerir. Bu nedenle TOPSIS yöntemi bulanık veriler kullanılabilecek şekilde geliştirilmiştir [19]. Bulanık TOPSIS yöntemi belirli bir ölçüt ya da ölçütlere göre belirsizlik altında alternatifleri değerlendirip sıralanmasına ve en doğru seçim yapılmasına yardımcı olan bir yöntemdir. Bulanık TOPSIS yönteminin uygulama aşamaları aşağıdaki gibidir [20], [21]:

Adım 1: Uzman karar vericilerden bir grup oluşturulur. Karar vericilerin (KV) ardından ölçütler $K = \{K_1, K_2, \dots, K_n\}$ ve ölçütlerin ardında da alternatifler $A = \{A_1, A_2, \dots, A_m\}$ belirlenir. Alternatiflerin her bir kriter için değerlendirilmesinde ve kriterlerin önem ağırlıklarının belirlenmesinde dilsel ifadeler kullanılır. Karar vericiler de, ölçütleri ve alternatifleri bu dilsel ifadelerle değerlendirirler. Bu dilsel ifadeler, pozitif üçgen bulanık sayılarla Tablo 3.1'de belirtildiği gibi ifade edilebilmektedir.

Adım 2: Karar vericilerin dilsel ifadeleri kullanarak yaptıkları değerlendirmeler, Tablo 1'de gösterilen ölçek üzerinden üçgen bulanık sayılara dönüştürülür. K tane karar vericinin olduğu varsayılan bir karar verici grubunda, ölçütlerin önemi (W_j) ve her ölçüt ile ilgili olarak her alternatifin değerlendirmesi (X_{ij}) aşağıdaki denklemler ile hesaplanır.

$$\hat{W}_j = \frac{1}{K} [\hat{W}_j^1(+) \hat{W}_j^2(+) \dots (+) \hat{W}_j^K]$$

$$X_{ij} = \frac{1}{K} [X_{ij}^1(+) X_{ij}^2(+) \dots (+) X_{ij}^K]$$

(1)

Adım 3: Tüm alternatif ve kriterlerden oluşan bir bulanık çok kriterli karar verme problem matrisi (\tilde{D}) aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$\tilde{D} = \begin{bmatrix} X_{11} & X_{12} \cdots & X_{1n} \\ X_{12} & X_{22} \cdots & X_{2n} \\ X_{m1} & X_{m2} & X_{mn} \end{bmatrix} \quad (2)$$

X_{ij} ve W_j dilsel ifadeleri, üçgen bulanık sayılarla $X_{ij} = (a_{ij}, b_{ij}, c_{ij})$ ve $W_j = (\tilde{w}_1, \tilde{w}_2, \tilde{w}_3)$ olarak tanımlanır.

Tablo 1. Ölçüt ve alternatiflerin değerlendirilmesinde kullanılan dilsel ifadeler

Ölçütlerin Önem Ağırlığını Belirlemede Kullanılan Dilsel İfadeler		Alternatiflerin Değerlendirilmesinde Kullanılan Dilsel İfadeler	
Çok Yüksek (ÇY)	(0.8,1,1,)	Çok İyi (Çİ)	(8,10,10)
Yüksek (Y)	(0.7,0.8,0.9)	İyi (İ)	(7,8,9)
Biraz Yüksek (BY)	(0.5,0.65,0.8)	Biraz İyi (Bİ)	(5,6.5,8)
Orta (E)	(0.4,0.5,0.6)	Orta (E)	(4,5,6)
Biraz Düşük (BD)	(0.2,0.35,0.5)	Biraz Kötü (BK)	(2,3.5,5)
Düşük (D)	(0.1,0.2,0.3)	Kötü (K)	(1,2,3)
Çok Düşük (ÇD)	(0,0,0.2)	Çok Kötü (ÇK)	(0,0,2)

Adım 4: Bulanık karar matrisi normalize edilir ve normalize edilmiş bulanık karar matrisi \tilde{R} ile gösterilerek aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$\tilde{R} = [f_{ij}]_{m \times n} \quad (3)$$

B ve C elemanları, fayda ve maliyet kriterleri olmak üzere,

$$f_{ij} = \left(\frac{a_{ij}}{c_j}, \frac{b_{ij}}{c_j}, \frac{c_{ij}}{c_j} \right), j \in B$$

$$f_{ij} = \left(\frac{a_j^-}{c_{ij}}, \frac{b_j^-}{c_j}, \frac{c_j^-}{c_j} \right), j \in B$$

(4)

$$j \in B \text{ ise } *c_{ij} = \max_i c_{ij}$$

$$j \in B \text{ ise } a_j^- = \min_i a_{ij}$$

Yukarıda bahsedilen normalizasyon yöntemi, özelliğini $[0,1]$ aralığındaki normalize edilmiş üçgen bulanık sayılar için korumaktadır.

Adım 5: Normalize bulanık karar matrisinin oluşturulmasının ardından her bir kriterin farklı ağırlığı göz önünde bulundurularak, ağırlıklı normalize edilmiş ve bulanık karar matrisi aşağıdaki gibi oluşturulur:

$$\begin{aligned} \tilde{V} &= [\tilde{v}_{ij}]_{m \times n}, \\ i &= 1, 2, 3, \dots, m, \quad j = 1, 2, 3, \dots, n \\ \tilde{v}_{ij} &= \xi_{ij}(x) \hat{w}_j \text{ formülü ile hesaplanır.} \end{aligned} \quad (5)$$

Adım 6: Ağırlıklı normalize edilmiş bulanık karar matrisine göre, elemanlar $\tilde{v}_{ij}^+, \tilde{v}_{ij}^-$ normalize edilmiş pozitif üçgen bulanık sayılar ve bunlar $[0,1]$ kapalı aralığında olmaktadır. Bulanık pozitif ideal çözüm (FPIS, A^*) ve bulanık negatif ideal çözüm (FNIS, A^-) aşağıda belirtildiği gibi tanımlanır:

$$\begin{aligned} A^* &= (\tilde{v}_1^+, \tilde{v}_2^+, \dots, \tilde{v}_n^+) \\ A^- &= (\tilde{v}_1^-, \tilde{v}_2^-, \dots, \tilde{v}_n^-) \end{aligned} \quad (6)$$

Burada $j=1,2,3,\dots,n$ olmak üzere $\tilde{v}_j^+ = (1,1,1)$ ve $\tilde{v}_j^- = (0,0,0)$ olarak dikkate alınır.

Adım 7: Her bir alternatife A^* ve A^- den uzaklıkları d_i^* ve d_i^- aşağıdaki şekilde hesaplanır.

$$\begin{aligned} d_i^* &= \sum_{j=1}^n d(\tilde{V}_j, \tilde{V}_j^*), \quad i = 1, 2, \dots, m \\ d_i^- &= \sum_{j=1}^n d(\tilde{V}_j, \tilde{V}_j^-), \quad i = 1, 2, \dots, m \end{aligned} \quad (7)$$

Adım 8: Alternatiflerin sıralamasını belirlemek için her alternatife ait yakınlık katsayıları aşağıdaki gibi hesaplanır.

$$cci = \frac{d_i^-}{d_i + d_i^-}, \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (8)$$

Hesaplanan yakınlık katsayısına göre, alternatiflerin sıralaması belirlenerek en uygun olanı seçilir.

3.3. Örnek yüksek yapıların seçilmesi

Örnek olarak seçilen yapılar, Bank of China Kulesi ve Hong Kong & Şangay Bankacılık Şirketi (HSBC) Genel Merkezi Binası, strüktürel dışavurum konusunda literatürde adı geçen yüksek yapılar arasından seçilmiştir. Her ikisinin dönemi birbirine yakın görünmekle beraber, strüktürün dışarıdan algılandığı, strüktürel tasarım ve çağdaş malzeme kullanımı konusunda başarılı örneklerdir.

3.3.1. Bank of China Kulesi (1990), Hong Kong, Çin



Şekil 5. Bank of China Kulesi [30].

1990 yılında yapımı tamamlanan Bank of China Kulesi, 72 katlı ve 305 m yüksekliğinde Ieoh Ming Pei tarafından tasarlanmıştır. **bknz Şekil 5.**

Taşıyıcı sisteminde 4 adet köşe mega kolon ve bunları birleştiren mega çaprazlar olmasından dolayı kafes-tüp sistemin yanı sıra mega kolon, mega çerçeve veya uzay kafes sistem olarak da adlandırılmaktadır. Bank of China binası, kafes-tüp ve demet-tüpü çağrıştıran, mega kolonlu bir uzay kafes sistem görünümündedir [22].

Yapısal elemanların cephedeki formu plan düzleminden farklıdır. Üçüncü boyutta cephede ve mekanın içinde diagonal etki daha çok hissedilmektedir. Geometrik olarak kare kat planından azalarak üçgensel kat planıyla sonlanan yapı, fraktal bir düzen içerisinde yükselmektedir. Geometrik şekiller arasında en rijit davranışı üçgenler göstermektedir. Bu sebeple yapı üçgensel alanlara bölümlenmiş ve strüktür sistemiyle desteklenmiştir. Cephe yüzeyleri yükseklik boyunca düz bir şekilde devam etmemiş, üçgensel eğik yüzeylerle de tasarım kuvvetlendirilmiştir. Güçlü ve özgün strüktür düzeni biçimi oluşturmuş ve cephe yüzeyine sonradan herhangi bir süs öğesi eklenmesini gerektirmemiştir [23].

3.3.2. Hong Kong & Şangay Bankacılık Şirketi (HSBC) Genel Merkezi (1985), Hong Kong, Çin



Şekil 4.2. Hong Kong &Şangay Bankacılık Şirketi (HSBC) Genel Merkezi Binası [31]

1985’de yapımı tamamlanan HSBC binası Hong Kong’da 48 katlı ve 179 m yüksekliğinde Norman Foster tarafından tasarlanmıştır. **bnz Şekil 6.**

HSBC binası, ortasında bir atrium bulunan iki bölümden oluşmaktadır. Strüktürel sistem dörtlü çelik kolon gruplarından oluşmakta ve bu gruplar her katta kirişlerle birbirine bağlanmaktadır. Ayrıca 11, 20, 28, 35 ve 41, katlarda doğu-batı doğrultusunda iki kat yüksekliğindeki diyagonal bağlantılarla, kuzey-güney doğrultusunda da çapraz elemanlar ile bağlanmaktadır [24].

HSBC binasının modüler tasarımı üst üste getirilen prefabrike elemanlardan oluşmaktadır. Plan düzlemindeki dikdörtgen form, üçüncü boyutta parçalanarak strüktür sistemiyle bütünleşmiştir. Planda kullanılan 4'lü çelik kolon grupları ve cephedeki dört askı makasıyla desteklenen yapı, özgün strüktür sistemi ve cephe tasarımı ile kütle üzerinden okunabilmektedir. Strüktür sistemi ile bir bağ kurarak, doğu-batı cephelerine her katta üst üste tekrar edecek şekilde yerleştirilen servis mekânları monte edilmiştir. Cephe aynı zamanda servis mekanlarını bünyesinde taşımakta olup iç mekanda istenen serbestliğe olanak sağlamış ve servis sistemleri ömrünü doldurduğunda belli dönemlerde değiştirilmesine imkân tanıyan bir cephe yaklaşımı görülmektedir. Bakımlarını gerçekleştirmek amacıyla yerleştirilen kuleler ise kütleden algılanabilmektedir. Yapı kabuğunun kuzey-güney cepheleri, ofis mekânlarının doğal aydınlatmadan yararlanacak şekilde şeffaf tasarlanması ise strüktürel elemanların algılanmasını daha da kolaylaştırmıştır [23].

3.4. Değerlendirme ölçütlerinin belirlenmesi

Değerlendirme ölçütleri strüktürel dışavurumu en iyi ifade edeceği düşünülen strüktürel ve mimari özellikler dikkate alınarak seçilmiştir. **bnz Tablo 2.**

Tablo 2. Değerlendirme ölçütleri tablosu
DEĞERLENDİRME ÖLÇÜTLERİ

Strüktürel ölçütler	Mimari Ölçütler
İçte ve dışta görünen strüktürel elemanlar: Strüktürün ve strüktürel elemanların dışarıdan görünmesi gerekmektedir.	Yapı dış tasarımında iç içe geçmiş bütünleşik formlar: Dış cephe tasarımında asal formlar ve onların biraraya getirilmesiyle oluşan bütünleşik formlar tercih edilmektedir.
Hafif ve endüstriyel malzeme: Özellikle strüktürel malzemenin (çelik, beton vb.) teknolojiye uygunluğu, üretim ve montajda kolaylık ve hafif olması beklenmektedir.	Şeffaf yüzeyler: Cephede strüktürel elemanların dışında kalan yüzeylerde şeffaflık gerekmektedir.
Strüktürde basit geometrik formlar: Strüktürel çözümlerde, rijitlik özelliği yüksek üçgen ve türevi asal formların kullanılması esastır.	Heyselsi dış görünüm: Kütle etkisinin tek defaya mahsus ve heykelsi bir görünümde olması beklenmektedir.

4. Bulanık TOPSİS Yönteminin Uygulanması ve Bulgular

Veri hazırlama: Strüktürel dışavurum açısından değerlendirmeye alınan Bank of China Kulesi (1990) ve Hong Kong & Şangay Bankacılık Şirketi (HSBC) (1985) çalışma alanını oluşturmuştur. Her iki yapı da yapım dönemi, malzeme ve dışavurum özellikleri açısından benzerlik gösteren yapılardır ancak hangisinin daha dışavurumcu olduğuna karar vermek için karar vericilerin görüşlerine başvurulmuştur. Bir mühendis ve bir yüksek mimardan oluşan karar vericilerden, belirtilen ölçütlerin ağırlıklarının belirlenmesi ve seçilen ölçütlere göre puanlama yapmaları istenmiştir. Karar vericilerin ölçüt değerlendirmeleri ve ağırlık belirlenmeleri referans alınarak elde edilen değerler Bulanık TOPSİS yöntemiyle tespit edilmiştir.

Belirlenen ölçütler, tanımlar ve öncelikler Tabşo 3. performans ölçütleri tablosunda gösterilmiştir.

KATEGORİLER	KODLAR	PERFORMANS ÖLÇÜTLERİ
STRÜKTÜREL ÖLÇÜTLER	A1	İçde ve dışda görünen strüktürel elemanlar
	A2	Hafif ve endüstriyel mazleme
	A3	Strüktürde basit geometrik formlar
MİMARİ ÖLÇÜTLER	B1	Yapı dış tasarımında içice geçmiş bütünleşik formlar
	B2	Şeffaf yüzeyler
	B3	Heykelsi dış görünüm

Karar matrisinin normalleştirilmesi: TOPSİS yöntemine göre aşağıda tabloda gösterilen karar matrislerinin normalleştirilmesi süreci ile işe başlanacaktır. Karar matrisinin normalleştirilmesi; sütunlardaki her bir değer için ilgili sütundaki değerlerin kareleri toplamının kareköküne bölünüp tek paydaya indirilmesi suretiyle bulunur.

Karar vericiler tarafından ölçütlerin ağırlık oranları belirlenmiş ve puan değerlendirmeleri alınarak Tablo 4'de görülen şekilde karar matrisi oluşturulmuştur

	STRÜKTÜREL ÖLÇÜTLER			MİMARİ ÖLÇÜTLER		
	A1	A2	A3	B1	B2	B3
AĞIRLIK W	0,3	0,2	0,15	0,1	0,15	0,1
BANKNOF CHINA	85	80	75	45	55	75
HONGKONG HSBC	70	65	65	40	50	35

	A1	A2	A3	B1	B2	B3
BANKNOF CHINA	0,77193	0,77611	0,755689	0,747409	0,73994	0,906183
HONGKONG HSBC	0,635707	0,63059	0,654931	0,664364	0,672673	0,422885

Normalleştirilmiş karar matrisinin ağırlıklandırılması: Standart matris kriterleri ağırlık katsayıları (W) ile çarpılarak her bir kriterin ağırlıklandırılmış karar matrisi hesaplanır. Kriterlerin ağırlık değerleri karar alıcı tarafından belirlenir. **bknz Tablo 6.**

	A1	A2	A3	B1	B2	B3
BANKNOF CHINA	0,231579	0,15522	0,113353	0,074741	0,110991	0,090618
HONGKONG HSBC	0,190712	0,12612	0,09824	0,066436	0,100901	0,042289

Pozitif ve negatif ideal çözümlerin belirlenmesi: Ağırlıklı karar matrisinde her sütundan ideal çözüm için ideal ve negatif ideal çözüm için negatif ideal değerler seçilerek ideal ve negatif ideal çözüm setleri (İÇS) oluşturulur. Tablo 7'de pozitif ve negatif ideal çözüm setleri gösterilmektedir.

Bu çalışmada A ölçütleri ideal B ölçütleri ise daha az ideal olarak alınmıştır.

	A1	A2	A3	B1	B2	B3
V+	0,231579	0,15522	0,113353	0,066436	0,100901	0,042289
V-	0,190712	0,12612	0,09824	0,074741	0,110991	0,090618

Uzaklık değerlerinin hesaplanması ve performans sonuçları: Her kritere ait olan sütundaki değerlerden pozitif ideal ve negatif ideal değerler çıkarılarak pozitif ve negatif ideal çözüme uzaklık değerleri belirlenir. **bknz Tablo 8.**

Tablo 8. İdeal yakınlık ve uzaklık değerleri bulmak

	S+	S-	P
BANKNOF CHINA HONGKONG HSBC	0,0501	0,0524	0,5114
HSBC	0,0524	0,0501	0,4886

Tablo 9. Performans sonuçları

	p	oran	sıralama
BANKNOF CHINA	0,5114	51,14%	1
HONGKONG HSBC	0,4886	48,86%	2

Yapılan hesaplamalar sonunda Bank of China Kulesi'nin birinci olduğu görülmüştür. **bknz Tablo 9.** Yapıldıkları dönem ve strüktürel dışavurum olma özellikleri birbirine yakın olmasına rağmen karar vericiler tarafından, strüktürel ve mimari ölçütler bağlamında yapılan değerlendirmede Bank of China Kulesi, Hong Kong & Şangay Bankacılık Şirketi (HSBC) Genel Merkezi Binasına göre ön plana çıkmıştır.

5. Tartışma ve Sonuç

Bulanık TOPSİS yöntemiyle yapılan değerlendirmede Bank of China Kulesi %51.14 değerini alırken Hong Kong & Şangay Bankacılık Şirketi (HSBC) Genel Merkezi Binası %48.86 değerini almıştır. Bu değerlerin belirlenmesinde, karar vericilerin strüktürel ölçütleri daha ideale yakın ve mimari ölçütleri ise daha az ideale yakın olarak görmeleri etkili olmuştur. Bu durumda, Bank of China Kulesi strüktürel dışavurum özellikleri açısından daha başarılı bulunmuştur.

Strüktürel dışavurum konusunda belirlenen strüktürel ölçütler (A) mimari ölçütlere (B) göre daha yüksek değerler alarak daha ön plana çıkartılmıştır. Bank of China Kulesi'nde strüktürel ölçütlerden içte ve dışta görünen strüktürel elemanlar (A1), diğer ölçütlere göre en yüksek puanı, strüktürde basit geometrik formlar (A3) ise en düşük puanı almıştır. Hong Kong & Şangay Bankacılık Şirketi (HSBC) Genel Merkezi'nde ise hafif ve endüstriyel malzeme (A2) ve strüktürde basit geometrik formlar (A3) eşit değer almışlardır. Mimari ölçütlerden en yüksek puanı Bank of Chinada heykelsi dış görünüm (B3) alırken, Hong Kong & Şangay Bankacılık Şirketi (HSBC) Genel Merkezi'nde yapı dış tasarımında içi içe geçmiş bütünlüklü formlar (B1) ilk sırayı almıştır.

Buna göre strüktürel dışavurum konusunda strüktürün tavrı önemli olmaktadır. Çağdaş malzemeyle, daha anlaşılabilen basit formlarla ve strüktürün işlevine uygun şekilde tasarlanması ve dışarı yansıtılması durumu dışavurumcu tavrın ana konseptini oluşturmakta ve yeni nesil yapılara ilham kaynağı olmaktadır.

Kaynakça

- [1] Eczacıbaşı Ansiklopedisi, (1997). S:451.
- [2] Alemdar, H.K. (2011). Ekspresyonizm Kavramı ve Mimarlıkta Ekspresyonizm'in Frank Gehry Bağlımında İncelenmesi, İstanbul Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Yüksek Lisans Tezi.
- [3] Özer, F. (2009). Sözlü Bilgi, Evaluation of Industrial Design Ders Notları, İstanbul.
- [4] Santomaso, E. (1972). Origins and Aims of German Expressionist Architecture, Columbia University, s: 9-37.
- [5] Beedle, L.S., Ali, M.M.and Armstrong, P.J. (2007). The Skyscraper and the City: Design, Technology, and Innovation, Books 1 and 2, The Edwin Mellen Press, Lewiston, NY.
- [6] Ali, M.M. and Armstrong, P.J.(1995). Architecture of Tall Buildings, Council on Tall Buildings and Urban Habitat Monograph, McGraw-Hill, New York, NY.
- [7] Curtis, W. (1996). Modern Architecture Since 1990, London, UK: Phaidon Press.
- [8] Al-Kodmany, K. And Ali M. (2016). An Overview of Structural &Aesthetic Developments in Tall Buildings Using Exterior Bracing &Diagrid Systems, International Journal of High Rise Buildings Volume 5 Number 4,December 272-273.

- [9] Şimşek, S. (2018). Yüksek Yapılarda Strüktürel Sanat ve Mimari Biçimlenişe Yönelik Bir Tasarım Modeli, Mimar Sinan Güzel Sanatlar Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, İstanbul.
- [10] Billington, D.P. (1983). The Tower and the Bridge: The New Art of Structural Engineering, Princeton University Press, Princeton, N
- [11] Ali, M.M. (2001). Art of the Skyscraper: The Genius of Fazlur Khan, Rizzoli International Publications, New York, NY.
- [12] Khan, F.R.(1969). "Recent Structural Systems in Steel for High Rise Buildings", Proceedings of the BCSA Conference on Steel in Architecture, London, England, November 24-26.
- [13] Aytaç, M. & Gürsakal, N. (2015). Karar Verme, Bursa: Dora Basım.
- [14] Sürmeli, G. (2013). Lojistik Merkezi Seçimine Yönelik Bulanık Çok Ölçütlü Karar Verme Modeli: Doğu Anadolu Bölgesi İçin Bir Uygulama", Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Yüksek Lisans Tezi, İstanbul.
- [15] Zadeh, L.A. (1965). "Fuzzy Sets", Information and Control, 8:338-353.
- [16] Zadeh, L.A. (1968). "Fuzzy Algorithms", Information and Control, 12:94-102.
- [17] Hwang, C.L., Yoon, K. (1981). "Multiple Attributes Decision Making Methods and Applications", Springer, Berlin Heidelberg.
- [18] Özdemir A.I., Secme N.Y. (2009). " İki Aşamalı Tedarikçi Seçiminin Bulanık Topsis Yöntemi ile Analizi ", Afyon Kocatepe Üniversitesi, İ.İ.B.F Dergisi, C. X I, S II, 79-111.
- [19] Jahanshahloo, G.R., Hosseinzadeh, L.F., Izadikhah, M. (2006). " Extension of the TOPSIS method for Decision Making Problems with Fuzzy Data", Applied Mathematics and Computation, 181(2),1544-1551.
- [20] Chen, C.T. (2000). "Extensions of the Topsis for Group Decision-Making Under Fuzzy Environment", Fuzzy Sets and Systems. 114, pp.1-9.
- [21] Tekez, E.K. ve Bark, N. (2016). Mobilya sektöründe bulanık TOPSIS yöntemi ile tedarikçi seçimi, SAÜ Fen Bil Der 20. Cilt, 1. Sayı, s. 55-63.
- [22] Günel, M. H., Ilgın H. E. (2010). Yüksek binalar: taşıyıcı sistem ve aerodinamik form, Ankara: ODTÜ Mimarlık Fakültesi, 29, 30-37, 39-43, 48-52, 55-56, 76-77, 85,114, 118, 146-148, 154.
- [23] Kozan, F. (2016). Yüksek Yapılarda Cephe Biçimlenmesini Etkileyen Taşıyıcı Elemanların Strüktürel Analizi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Yüksek Lisans Tezi, Ankara.9.
- [24] Özgen, A., Sev, A. (2000). Çok katlı yüksek yapılarda taşıyıcı sistemler, İstanbul: Birsen Yayınevi, 22-23, 61-63, 244-245.
- [25] Einstein Kulesi, <https://www.arkitektuel.com/einstein-kulesi/> (Erişim tarihi, 06.01.2019)
- [26] Cam Pavyon, Bruno Taut, <http://v3.arkitera.com/v1/gununsorusu/2002/10/08.htm> (Erişim 06.01.2019)
- [27] Structural Expressionism <http://dnr.alaska.gov/parks/oha/styleguide/structuralexpressionism.htm> (Erişim tarihi, 06.01.2019).
- [28] Brooklyn Köprüsü, https://tr.wikipedia.org/wiki/Brooklyn_Köprüsü (Erişim tarihi, 06.01.2019).
- [29] John Hancock Tower, <http://spring2018.thedude.oucreate.com/page/80/> (Erişim tarihi, 06.01.2019).
- [30] Bank Of China, http://en.wikipedia.org/Bank_of_China (Erişim tarihi, 06.01.2019).
- [30] Hong Kong- HSBC, http://en.wikipedia.org/Hong_Kong-HSBC (Erişim tarihi, 06.01.2019).

Ekserji Analiz Metoduyla Füzeler ve İnsansız Hava Araçları (UAV) Tasarlanmış Bir Turbojet Motorunun Maksimum Çalışma Performansının Doğrulaması

Özgür BALLI*^{1,2}

* MSB Askeri Fabrikalar Genel Md.lüğü, 1'inci Hava Bakım Fabrika Md.lüğü, Tepebaşı/ESKİŞEHİR
¹balli07balli@yahoo.com, balli.o@hvkk.tsk.tr, Tel:536-6771826
²ORCID:0000-0001-6465-8387

(Alınış / Received: 16.01.2019, Kabul / Accepted: 09.02.2019, Online Yayınlanma/ Published Online: 30.04.2019)

Anahtar Kelimeler

Füzeler
İnsansız Hava Araçları
Turbojet Motoru
Exergy Analizi
Performans Parametreleri

Öz: Bu çalışma, füzeler ve insansız hava araçları için tasarlanan bir turbojet motorunun performans doğrulaması ekserji analiz metodu ile yapılmıştır. Bu araştırma için bazı ekserjetik performans doğrulama parametreleri geliştirilmiş ve kullanılmıştır. Bu parametreler, yeni geliştirilen motorun performans, sürdürülebilirlik ve çevresel etki seviyelerini belirlemek için motor tasarımcılarına yardımcı olacaktır. Maksimum çalışma şartları için incelenen turbojet motorunun ekserji verimi, iyileştirilmiş ekserji verimi, atık ekserji oranı, yakıt ekserjisi atık oranı, atık ekserji iyileştirme potansiyeli oranı, üretim kaybı oranı, yakıt ekserjisi iyileştirme potansiyeli oranı, atık ekserji maliyet akışı, çevresel etki faktörü, ekolojik etki faktörü, sürdürülebilirlik indeksi ve sürdürülebilir verimlilik faktörü; sırasıyla %9.71, %52.55, %90.29, %90.29, %90.29, %929.54, %81.52, 32.29×10^{-3} kW/\$, 9.295, 10.295, 0.108 ve 1.108 olarak hesaplanmıştır. Ekserjetik performans analiz sonuçları; motorun ekserji verimi arttırmak ve çevresel etkilerini azaltmak için tasarımcıların ve araştırmacıların kompresör ve yanma odasını iyileştirmeye odaklanmaları gerektiğini göstermiştir.

Maximum Operation Performance Evaluation of a Turbojet Engine Designed for Missiles and Unmanned Aerial Vehicles (UAV) with Exergy Analysis Methodology

Keywords

Missiles
Unmanned Aerial Vehicles
Turbojet Engine
Exergy Analysis
Performance Parameters

Abstract: In this study, performance evaluation of a turbojet engine designed for missiles and Unmanned Aerial Vehicles (UAV) is done with exergy analysis methodology. Some exergetic performance assessment parameters are developed and used for this investigation. These parameters help the engine designers to determine the levels of performance, sustainability and environmental impact of the new designed engine. The exergy efficiency, the improved exergy efficiency, the waste exergy ratio, the fuel exergy waste ratio, the waste exergy improvement potential ratio, the productivity lack ratio, the fuel exergy improvement potential ratio, the waste exergy cost rate, the environmental effect factor, the ecological effect factor, exergetic sustainability index and sustainable efficiency factor are estimated to be 9.71%, 52.55%, 90.29%, 90.29%, 90.29%, 929.54%, 81.52%, 32.29×10^{-3} kW/\$, 9.295, 10.295, 0.108 and 1.108 for the maximum operation mode of the investigated turbojet engine, respectively. The analyzing results of exergetic performance indicate that the designers and researchers shall focus on the improvement of engine compressor and combustor to progress the exergy efficiency of engine and to decrease the environmental impacts of engine.

1. Introduction

Aero-gas turbine engines can be used as power systems of various Unmanned Aerial Vehicles (UAV). These air vehicles are classified according to range, endurance, the altitude, flight speeds, and the sensor and payloads. Recently, interesting in small gas turbines has increased especially for remote control airplanes and the UAVs because of their extremely-high thrust-to weight ratio [1].

UAVs have various applications such as: agricultural purposes, photography, surveillance for enemy activity, pollution, sea-lane and coast line monitoring, herd driving and monitoring, coastguard applications, surveillance for illegal imports, fire services for forestry and detection, shadowing enemy vessels, decoying missiles by the emission of artificial signatures, reconnaissance, target designation and monitoring, land mines location and destruction [2].

UAV was the most dynamic growth sector of the world aerospace industry last decade. Annual global UAV expenditure is predicted to rise from its amount of about \$6.4 billion in 2014 to \$11.5 billion, totaling almost \$91 billion in the next ten years. It is noticed that 20% increasing in UAV manufacturing companies for the year of 2013, 40% increasing in air vehicles just in between 2011 and 2013, reaching up to 57 countries, 270 companies, and more than 960 air vehicles in the year of 2013[3].

All of small turbojet engine manufacturers (Teledyne, Microturbo, Hamilton Sundstrand and Williams International) produce turbofan or turbojet engines in the low thrust range for missile and UAV programs. The microturbo TRI 40 turbojet engine is rated at between 2.50 to 3.40 kN. TRI 40 is currently designed and used for the target drones, anti-ship missiles, and remotely piloted vehicles at 6,000 m at up to Mach 0.95 with JP8 or JP10 jet fuel. The TRI 60-1 turbojet engine is rated at 3.5 kN maximum continuous and it powers anti-ship missile (BAE Sea Eagle, P.3T) with the name of TRI 60-1 067. Moreover, it also powers the Mirach 600 and Meteor SpA Mirach 300. Another version, namely TRI 60-2, is a 3.7 kN thrust force and it is used for the Beech MQM-107B, Aerospatiale C.22 and Saab RBS15 anti-ship missiles, prototypes of some target drones (such as Hindustan Aeronautics Ltd (HAL) and Northrop NV-144/NV-151).

The TRI 60-3 is used in the Beech BQM-126 with 4.0 kN thrust force. This engine model has also been selected to provide power for MQM-107Bs for the U.S. Air Force. The TRI 60-5 is an engine variant producing 4.4 kN. It was selected to power the Beech MQM-107B Streaker target drone. The TRI 60-30 is an application for the Matra SCALP/APACHE and U.K. Storm Shadow with 5.33 kN thrust force [4].

On the other hand, the Williams F107-WR-101, -400, and -402 turbofan engine equip the General Dynamics BGM-109 Tomahawk (ground-launched cruise missile), Boeing AGM-86B (air-launched cruise missile) and sea-launched cruise missile with 2.67 kN thrust force. The F107-WR-103 turbofan, formerly known as the F107-WR-14A6, is the production model designated for the remainder of the ALCM buy. It is rated at approximately 14.44 kN, and incorporates the use of new materials in the turbine section for a much higher turbine inlet temperature. The F107-WR-104 is a possible development of the original WR19, with a substantial up rating to over 5.33 kN. The F107-WR-105/401 model offers an increase in thrust to 6.22 kN; 10:1 or better thrust-to-weight. The engine could repower all operational Air-Launched, Sea-Launched, and Ground-Launched Cruise Missiles now employing the F107. The F112-WR-100 is the USAF designation for the F107-WR-103 engine that has been identified as the propulsion engine for the General Dynamics Corp (Convair Division) AGM-129 Advanced Cruise Missile. While this engine variant's thrust rating is classified, we know that it is in the 3.3-kN class. The F112 also powered the Douglas/NASA X-36 test drones. The F121-WR-100 is the smallest Williams International engine. It was designated for the air-launched version of the TACIT RAINBOW. For this application, the engine was rated at 0.66 kN. In 1999, a scaled-down version of the F122, USAF designation F415, was selected to power the Raytheon Tactical Tomahawk cruise missile after the Teledyne F402 turbojet was deselected [5].

Air transportation has come to measure its technical improvement in the increasing efficiency of its power systems. Therefore, specific fuel consumption is very important one of the considered things because of a relationship between environmental impact (due to decreasing fuel consumption reduces CO₂ emissions), energetic and fuel consumption performance. So, the most direct way to improve air vehicle fuel efficiency is used new latest available technology for aircrafts [6].

In the open literature, the studies about the performance assessment of aero-engines are classified as follows: (i) related to the performance evaluation: specific fuel consumption, specific thrust, efficiencies (propulsive, thermal and overall) [7-9], (ii) exergy analysis for turbojet [10-15], turbofan [16-18] and turboprop/shaft engines [19-21] (iii) indicating the effect of exergetic efficiency-reference altitude for aircraft engines [22-23], (iv) determining the exergoeconomic analysis methods [11, 21, 24-25], (v) analyzing the exergy and environmental performance of aircraft engines on the various flight phases [26-27], (vi) evaluating the exergo-sustainability performance of turboprop [24, 28], and (vii) assessing the environmental damage cost analysis of turboprop engine [24].

In a thermal system, thermodynamic inefficiencies and their magnitude, location and sources are identified with the aid of exergy analysis. Exergetic information is very useful for improving the energetic efficiency and cost effectiveness of a system to comparing the similar thermal systems.

A Stand of Missile (SOM) was developed by Roketsan for Turkish Army Forces. During the design, research and development studies, the Microturbo TRI40 turbojet engine was used on the SOM. Then, Roketsan took a decision that a new design turbojet engine is developed and used on the SOM [29, 30]. The main goals of the present study are given as follows:

- Evaluating exergetic performance of a new designed turbojet.
- Determining the component exergy destructions.
- Component-based suggesting according to improved, modified or replaced for the best results of increasing the overall exergy efficiency of the engine.

2. Investigated Turbojet Engine and Its Technical Data

The investigated turbojet engine was developed for powering up the Stand of Missile (SOM) and it will be planned to use on Unmanned Aerial Vehicle (UAV). The engine generates 3500 N thrust power at maximum operation mode under the sea level conditions. The information about the general system description of turbojet engine, assumptions made and the specific heat capacity of combustion gases are given in this section.

2.1. General System Description of a Medium-Scale Turbojet Engine (TJE)

The investigated medium scale turbojet engine (TJE) was designed for using on the air-to-air and air-to-land types missiles. Under the standard day-sea level conditions (i.e., $T_0=288.15$ K, $P_0=101.325$ kPa), the TJE has the following specifications [31]:

- Maximum thrust: 3500 N.
- Compressor pressure ratio: 5.5
- Mass flow of air: 8.66 kg/s.
- Mass flow of fuel: 0.1574 kg/s.
- Air to Fuel ratio: 50.02
- Pressure loss in the combustion chamber: 5%
- High pressure turbine inlet gas temperature: 1083.15 K.
- High pressure turbine outlet gas temperature: 921.15 K.
- High pressure turbine expansion ratio: 2.68
- Outlet temperature and pressure for exhaust: 918.65 K and 193.6 kPa.
- Manufacturer selling price: 200000 \$.

For collecting the measurement data such as temperature, pressure and engine thrust; the thermocouples, the pressure transducers and the load cell were installed on the TJE engine as shown in Fig.1.

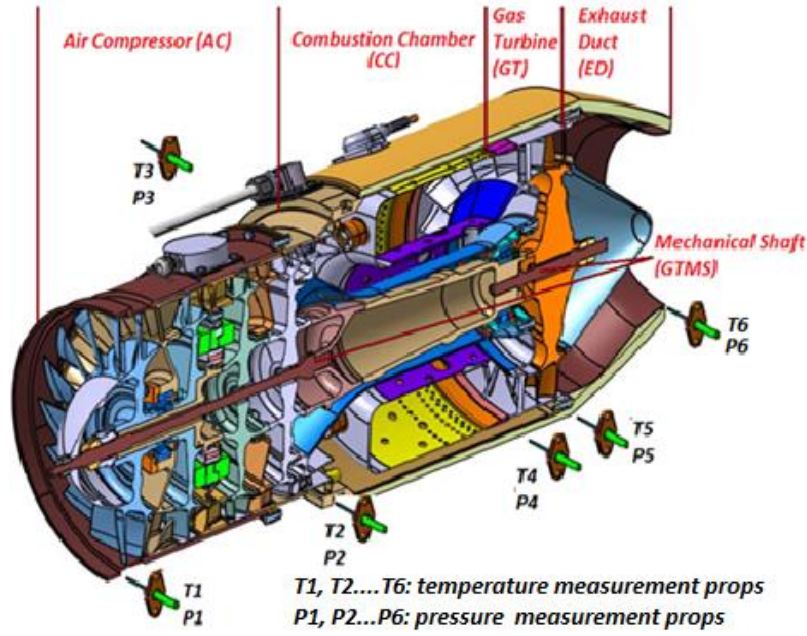


Fig.1.The cutaway of the turbojet engine (TJE) and measurement devices [31].

The engine thrust of the turbojet engine can be calculated from:

$$F = \dot{m}_{out} V_{out} - \dot{m}_{in} V_{in} + A_{out} P_{out} - A_{in} P_{in} \quad (1)$$

Due to the engine is operated in a ground test cell and/or a ground operation test, flight velocity ($V_{in} \cong 0$) is assumed as zero. The velocity of exhaust gases is found to be 396.94 m/s from eqn. (1) for 3500 N-maximum engine thrust.

The simplified schematic of the TJE is given in Fig 2. The TJE engine's main components are compressor (AC), combustion chamber (CC), gas turbine (or high pressure turbine) (GT), exhaust duct (ED) and the gas turbine mechanical shaft (GTMS).

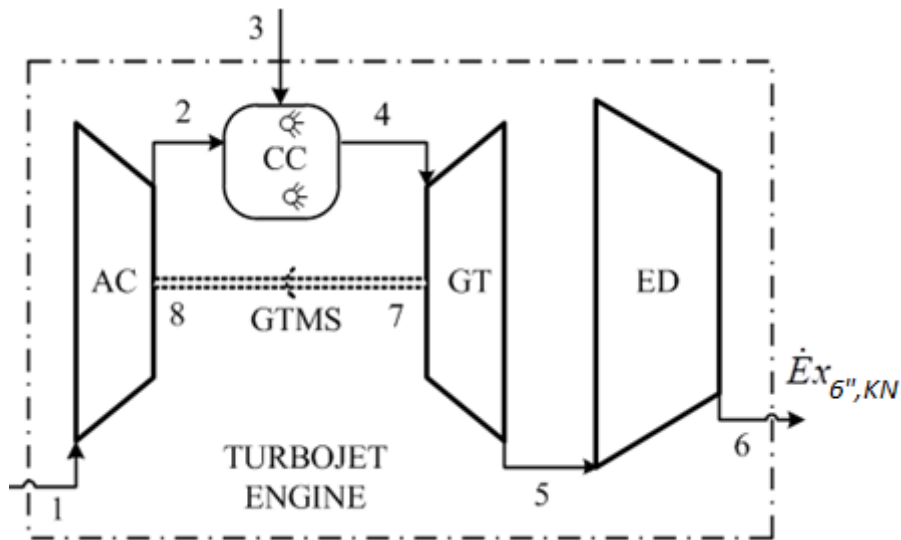


Fig.2. A simplified schematic of the investigated TJE.

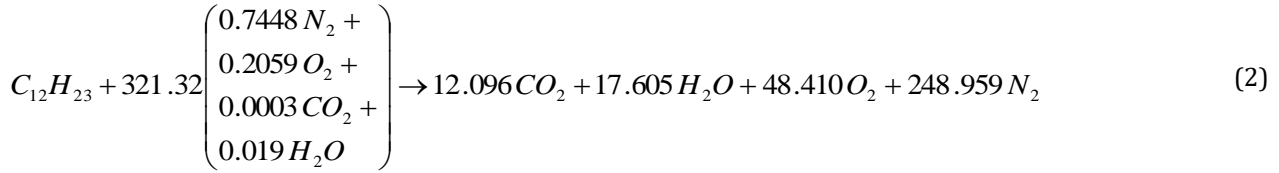
2.2. Assumptions

In this study, the assumptions made are listed as below:

- The fuel injected to combustion chamber was the JP-8 jet fuel.
- The chemical formula of jet fuel was assumed as $C_{12}H_{23}$ and The LHV was to be 42800 kJ/kg.
- The velocity of air mass flow entering the engine was taken zero due to the static run tests.
- The changes in the kinetic energy, the kinetic exergy, the potential energy and the potential exergy within the engine were assumed to be negligible.
- The cooling air mass flow was not considered for the analysis.
- The engine operated in a steady-state and steady flow.
- The principle of ideal-gas mixture was applied for the air and combustion gaseous.
- The combustion reaction was complete.
- The compressor and the gas turbine considered as adiabatic.
- The temperature and the pressure of the ambient air state were taken to be 288.15 K and 101.33 kPa, respectively.

2.3. Specific Heat Capacity of Emission Gases and Air

For 50.02 air-to fuel ratio, the general combustion reaction equation is obtained as follows:



After combustion reaction, the mass compositions of combustion gases are obtained to be 5.68% (0.500 kg/s) CO_2 , 3.38% (0.298 kg/s) H_2O , 16.53% (1.455 kg/s) O_2 and 74.41% (6.552 kg/s) N_2 . The universal gas constant (R_{gas}) of the emissions is estimated to be 0.29013kJ/kgK.

The air is composed of nitrogen 77.48%, oxygen 20.59%, carbon dioxide 0.03% and water vapor 1.90%. There are very small amount of argon, carbon monoxide, etc., in the air, which are neglected in this study. The pressured air mixed with fuel and burned in the combustion chamber to enable stable burning and the air-to-fuel ratio is to be at appropriate level. To have completed burning of fuel and to decrease the temperature, the air-to-fuel ratio in the combustion chamber is always higher than stoichiometric ratio. Because of this, there is a significant amount of oxygen within the combustion gases.

Based on mass rates of the emissions, the hot gases $c_{p,cg}$ value has been calculated in terms of temperature as shown in Eq. (3) by applying the $c_{p,cg}$ values of each emission [32];

$$c_{p,cg}(T) = 0.98853 + \frac{0.01176}{10^2} T + \frac{0.01523}{10^5} T^2 - \frac{0.06665}{10^9} T^3 \quad (3)$$

The ideal gas constant value of combustion gases was taken to be $0.2901 \text{ kJ}(kg - K)^{-1}$. The specific heat capacity of air is a function of temperature (in K) and it is determined from:

$$c_{p,a}(T) = 1.04841 - \left(\frac{3.83719 T}{10^4} \right) + \left(\frac{9.45378 T^2}{10^7} \right) - \left(\frac{5.49031 T^3}{10^{10}} \right) + \left(\frac{7.92981 T^4}{10^{14}} \right) \quad (4)$$

3. Exergy Analyzing Methodology

Exergy is a measure of the maximum work to be obtained from any system. Exergy analysis includes four variables as $\dot{E}x_F$ (fuel exergyrate), $\dot{E}x_{Pr}$ (product exergy rate), $\dot{E}x_D$ (exergy destruction rate) and $\dot{E}x_L$ (exergy loss rate).

3.1. Basic Exergy Terms

Exergy waste is a measure of the irreversibility of a process, and that it is proportional to the increase in entropy and it can be evaluated by calculating the entropy increase. Exergetic analysis helps to determine the best theoretical performance of power systems and its components [33].

Exergy balance is given as follows for any control volume at steady state [34-35]:

$$\dot{E}x_F = \sum \dot{E}x_{in,tot} = \dot{E}x_{Pr} + \sum_{k=1}^n \dot{E}x_{D,k} + \dot{E}x_L \quad (5)$$

The total specific exergy for a flow of matter through a system can be formulated from [24] neglecting nuclear, magnetism, electricity and surface tension effects:

$$\varepsilon_{tot} = \varepsilon^{PH} + \varepsilon^{KN} + \varepsilon^{PT} + \varepsilon^{CH} \quad (6)$$

$$\dot{E}x_{tot} = \dot{m}(\varepsilon^{PH} + \varepsilon^{KN} + \varepsilon^{PT} + \varepsilon^{CH}) \quad (7)$$

The specific physical exergy for air and combustion gaseous may be written as [36-38]:

$$\varepsilon^{PH} = c_{P(T)} \left[T - T_o - T_o \ln \left(\frac{T}{T_o} \right) \right] + RT_o \ln \left(\frac{P}{P_o} \right) \quad (8)$$

The specific kinetic exergy of air and combustion gases is determined from [36-38]:

$$\varepsilon^{KN} = \frac{V^2}{2000} \quad (9)$$

The specific chemical exergy of fuel can be determined as follows [36-38]:

$$\varepsilon_F^{CH} = LHV \xi \quad (10)$$

Where the ξ denotes the liquid fuel exergy grade function. The ξ of liquid fuels ($C_a H_b$) on a unit mass is obtained from [35-37]:

$$\xi \cong 1.04224 + 0.011925 \frac{b}{a} - \frac{0.042}{a} \quad (11)$$

ξ is calculated to be 1.0616 for JP-8 jet fuel ($C_{12}H_{23}$).

3.2. Exergetic balance equations for engine and main components

The exergetic balance equations for the whole engine and its components can be written as:

For Air Compressor (AC):

$$\dot{E}x_{D,AC} = \dot{W}_8 - (\dot{E}x_2 - \dot{E}x_1) \quad (12)$$

For Combustion Chamber (CC):

$$\dot{E}x_{D,CC} = \dot{E}x_3 - (\dot{E}x_4 - \dot{E}x_2) \quad (13)$$

For Gas Turbine (GT):

$$\dot{E}x_{D,GT} = (\dot{E}x_4 - \dot{E}x_5) - \dot{W}_7 \quad (14)$$

For Exhaust Duct (ED):

$$\dot{E}x_{D,ED} = \dot{E}x_5 - \dot{E}x_6 \quad (15)$$

For Gas Turbine Mechanical Shaft (GTMS):

$$\dot{E}x_{D,GTMS} = \dot{W}_7 - \dot{W}_8 \quad (16)$$

For TJE engine;

$$\sum \dot{E}x_{D,TJE} = \dot{E}x_{D,AC} + \dot{E}x_{D,CC} + \dot{E}x_{D,GT} + \dot{E}x_{D,ED} + \dot{E}x_{D,GTMS} \quad (17)$$

On the other hand; total exergy losses from TJE are calculated as follows:

$$\sum \dot{E}x_{L,TJE} = (\dot{E}x_{1,KN} + \dot{E}x_{3,F})_{TJE} - \dot{E}x_{6,KN,TJE} - \sum \dot{E}x_{D,TJE} \quad (18)$$

Total waste exergy is calculated by:

$$\dot{E}x_{WE,TJE} = \sum \dot{E}x_{D,TJE} + \sum \dot{E}x_{L,TJE} \quad (19)$$

3.3. Exergetic performance metrics for engine components

Several exergetic performance metrics are developed and identified as the following.

- *Exergetic efficiency* (ψ): The ψ of the k'th component is the ratio of product exergy to fuel exergy.

It can be given as follows:

$$\psi_k = \frac{\dot{E}x_{Pr,k}}{\dot{E}x_{F,k}} = 1 - \frac{\dot{E}x_{D,k}}{\dot{E}x_{F,k}} \quad (20)$$

- *Relative exergy destruction ratio* (α): The α is the ratio of the exergy destruction of to total exergy destruction within the system. It is accounted by:

$$\alpha_k = \frac{\dot{E}x_{D,k}}{\sum \dot{E}x_{D,TJE}} \quad (21)$$

- *Inlet exergy depletion ratio* (β): The β is the ratio of the exergy destruction to the fuel exergy of the k'th component as given in Eq.22:

$$\beta_k = \frac{\dot{E}x_{D,k}}{\dot{E}x_{F,k}} \quad (22)$$

- *Fuel exergy depletion ratio* (χ): The χ is the ratio of the exergy destruction of the fuel exergy. It is defined as follows:

$$\chi_k = \frac{\dot{E}x_{D,k}}{\dot{E}x_{3,F,TJE}} \quad (23)$$

- *Productivity lack ratio* (δ): The δ is identified as the ratio of the exergy destruction to the product exergy of a system. It is given as follows:

$$\delta_k = \frac{\dot{E}x_{D,k}}{\dot{E}x_{6^*,Pr,TJE}} \quad (24)$$

- *Product ratio indicator* (ϕ): The ϕ is the ratio of product exergy rate to the product exergy and is given as follows:

$$\phi_k = \frac{\dot{E}x_{Pr,k}}{\dot{E}x_{6^*,Pr,TJE}} \quad (25)$$

- *Fuel ratio indicator* (φ): The φ is calculated by dividing the fuel exergy to the total fuel exergy and given as follows:

$$\varphi_k = \frac{\dot{E}x_{F,k}}{\dot{E}x_{3,F,TJE}} \quad (26)$$

- *Exergetic improvement potential (ExIP)*: For the exergy consumption minimization, The maximum improvement can be achieved in the exergy efficiency for a power system. So, exergetic improvement potential (ExIP) must be defined. ExIP is written as follows:

$$\dot{E}xIP_k = (1 - \psi_k) \dot{E}x_{D,k} \quad (27)$$

- *Relative exergetic improvement potential ratio* (γ): The γ is the ratio of the exergetic improvement potential of k'th component to the total exergetic improvement potential of all components. The γ is calculated from:

$$\gamma_k = \frac{\dot{E}xIP_k}{\sum_{k=1}^n \dot{E}xIP_k} \quad (n = \text{number of components}) \quad (28)$$

- *Exergy destruction improvement ratio* (λ): The λ is the ratio of the exergetic improvement potential of k'th component to the exergy destruction rate of k'th component. High value of exergetic destruction improvement ratio demonstrates that exergetic improvement potential rate for a component occurs in high level. The λ is calculated from:

$$\lambda_k = \frac{\dot{E}xIP_k}{\dot{E}x_{D,k}} \quad (29)$$

- *Component inlet exergy improvement potential ratio* (μ): The μ is calculated by dividing the exergetic improvement potential rate of k'th component to the sum of the inlet flows as fuel exergy into the k'th component. It is estimated by:

$$\mu_k = \frac{\dot{E}xIP_k}{\dot{E}x_{F,k}} \quad (30)$$

- *Fuel exergy improvement potential ratio* (ν): The ν is the ratio of the exergetic improvement potential rate of k'th component to the total fuel exergy of the system. It is found by:

$$\nu_k = \frac{\dot{E}xIP_k}{\dot{E}x_{3,F,TJE}} \quad (31)$$

- *Improved exergetic efficiency* (Ψ): If an exergetic improvement is realized in a component, the fuel exergy rate required for a component decreases for constant production and the exergy efficiency of the component increases. This new value of exergetic efficiency can be named as the improved exergetic efficiency. The Ψ is calculated as follows:

$$\Psi_k = \frac{\dot{E}x_{Prk}}{\dot{E}x_{F,k} - \dot{E}xIP_k} \quad (32)$$

- *Exergy destruction cost rate* (π): Exergy consumption creates an extra monetary lost during a production. A system with lower exergy consumption has more useful product exergy and subsequently more potential to do work. A less efficient system has low useful product exergy and less potential to do work. The loss in production potential can be represented as a cost rate. The π is the ratio of the exergy destruction rate of k'th component to the selling price of the system. It can be taken from:

$$\pi_k = \frac{\dot{E}x_{D,k}}{SP_{TJE}} \quad (33)$$

- *Relative exergy destruction cost rate* (ϖ): The ϖ is the ratio of the exergy destruction cost rate of k'th component to the total exergy destruction cost rate within the system. This parameter indicates that which component of the system is more effective in the exergy destruction cost rate. The ϖ is estimated by:

$$\varpi_k = \frac{ExDCR_k}{\sum_{k=1..n} ExDCR} \quad (34)$$

- *Environmental effect factor (EEF)*: One of the sustainability indicators is the environmental effect factor which is calculated the ratio of inlet exergy destruction ratio to the exergy efficiency. Environmental impact factor indicates whether or not it damages the environment because of its unusable waste exergy output and exergy destruction. The *EEF* can be counted by;

$$EEF_k = \frac{\beta_k}{\psi_k} \quad (35)$$

• *Exergetic sustainability index (ExSI)*: Its function of environmental effect factor can be found out by ratio of 1 to the environmental effect factor. The range of this index is between 0 and ∞ . The higher efficiency means low exergy destruction ratio and low environmental effect factor as a result higher exergetic sustainability index. Measures to increase exergy efficiency can reduce environmental impact by reducing energy losses. Within the scope of exergy methods, such activities lead to increased exergy efficiency and reduced exergy consumption. The *ExSI* is figured out from:

$$ExSI_k = \frac{1}{EEF_k} \quad (36)$$

• *Sustainable efficiency factor (SEF)*: If a process or system uses low amount fuel or energy for the desired production, it is said that this process or system has high exergetic efficiency value as well as high sustainability level because low emissions are emitted to the environment. An increasing in the exergetic efficiency results a rising in the sustainability level of the system. Consequently, the sustainable efficiency factor can be used as a sustainability assessment parameter and the *SEF* is picked up as follows;

$$SEF_k = \frac{1}{1 - \psi_k} \quad (37)$$

• *Ecological effect factor (EcoEF)*: The *EcoEF* of the k'th component is estimated from following equation;

$$EcoEF_k = \frac{\dot{E}x_{F,k}}{\dot{E}x_{Pr,k}} = \frac{1}{\psi_k} \quad (38)$$

3.4. Exergetic performance metrics for whole engine

For whole engine the exergetic performance parameters can be written as following.

• *Exergetic efficiency (ψ)*: The ψ of the system is calculated by the ratio of the thrust power exergy rate to the sum of the inlet flows as fuel exergy. It can be estimated as follows:

$$\psi_{TJE} = \frac{\dot{E}x_{6',Pr}}{(\dot{E}x_1 + \dot{E}x_3)} = 1 - \frac{\sum \dot{E}x_{WE,TJE}}{(\dot{E}x_1 + \dot{E}x_3)} \quad (39)$$

• *Waste exergy ratio (X)*: The X is found out from the ratio of total waste exergy rate to sum of the inlet flows as fuel exergy as follows:

$$X_{TJE} = \frac{\dot{E}x_{WE,TJE}}{(\dot{E}x_1 + \dot{E}x_3)_{TJE}} \quad (40)$$

• *Fuel exergy waste ratio (Δ)*: The Δ is counted from the ratio of total waste exergy rate to the fuel exergy rate of system by following equation:

$$\Delta_{TJE} = \frac{\dot{E}x_{WE,TJE}}{\dot{E}x_{3,TJE}} \quad (41)$$

• *Productivity lack ratio factor (Φ)*: The Φ is identified as the ratio of total waste exergy rate to total thrust power exergy rate of system. It is assessed by:

$$\Phi_{TJE} = \frac{\dot{E}x_{WE,TJE}}{\dot{E}x_{6',Pr,TJE}} \quad (42)$$

• *Exergetic improvement potential ($\dot{E}xIP$)*: The $\dot{E}xIP_{TJE}$ expresses that how much the waste exergy rate is recovered by improving the exergy efficiency of the system. It is taken from:

$$\dot{E}xIP_{TJE} = (1 - \psi_{TJE}) \dot{E}x_{WE,TJE} \quad (43)$$

• *Waste exergy improvement potential ratio (Γ)*: The Γ is the ratio of exergetic improvement potential rate of the system to waste exergy rate of the system. It is estimated from:

$$\Gamma_{TJE} = \frac{\dot{E}xIP_{TJE}}{\dot{E}x_{WE,TJE}} \quad (44)$$

- *Fuel exergy improvement potential ratio* (Π): The Π is the ratio of exergetic improvement potential rate of system to fuel exergy rate of the system. It is calculated by:

$$\Pi_{TJE} = \frac{\dot{E}xIP_{TJE}}{\dot{E}x_{3,TJE}} \quad (45)$$

- *Improved exergetic efficiency* (Ψ): In accordance with the exergetic improvement potential rate that is realized within the system, the inlet exergy rate incoming to the system can be decreased and the exergy efficiency of the system can be increased. The Ψ_{TJE} is obtained from the following equation:

$$\Psi_{TJE} = \frac{\dot{E}x_{6',TJE}}{(\dot{E}x_1 + \dot{E}x_3 - \dot{E}xIP_{TJE})} \quad (46)$$

- *Waste exergy cost rate* (Θ): The Θ is explained as the ratio of waste exergy rate of system to system sellingprice. It is obtained from:

$$\Theta_{TJE} = \frac{\dot{E}x_{WE,TJE}}{SP_{TJE}} \quad (47)$$

- *Environmental effect factor* (EEF): The EEF is described as the ratio of waste exergy ratio of system to the exergetic efficiency of system. It is computed by:

$$EEF_{TJE} = \frac{X_{TJE}}{\Psi_{TJE}} \quad (48)$$

- *Exergetic sustainability index* ($\dot{E}xSI$): To calculate the $\dot{E}xSI$ of the system, it is applied the following equation:

$$ExSI_{TJE} = \frac{1}{EEF_{TJE}} \quad (49)$$

- *Sustainable efficiency factor* (SEF): The SEF of the system is derived from:

$$SEF_{TJE} = \frac{1}{1 - \Psi_{TJE}} \quad (50)$$

- *Ecological effect factor* ($EcoEF$): The $EcoEF$ of the system is estimated from following equation:

$$EcoEF_{TJE} = \frac{\dot{E}x_{3,TJE}}{\dot{E}x_{6',Pr,TJE}} = \frac{1}{\Psi_{TJE}} \quad (51)$$

4. Results and Discussions

In the current study, exergy analysis of a new design turbojet engine (TJE) used on missiles is evaluated. The product exergy (kinetic exergy rate of exhaust gases) of the engine is calculated to be 694.65 kW from eqn. (9) while the velocity of exhaust gases is found to be 396.94 m/s from eqn. (1). For 7151.7 kW- fuel exergy rate and 694.65 kW-product exergy rate at the maximum engine power operation, condition, the exergy efficiency of the engine is determined to be 9.71%. However, the temperature, pressure, mass flow, specific heat capacity and exergy rate at the TJE's stations numbered in Fig.2 for maximum operation mode are given in Table 1.

Table 1.The exergy rate and other thermodynamic properties of the TJE at maximum operation mode.

State no.	Fluid type/work	Pressure $P(kPa)$	Temperature $T(K)$	Mass flow rate $\dot{m}(kg s^{-1})$	Specific heat capacity $c_p (kJ(kg - K)^{-1})$	Exergy rate $\dot{E}x (kW)$
0	Air	101.33	288.15	0.000	1.00375	0.00
1	Air	101.33	288.15	8.66	1.00375	0.00
2	Air	557.29	503.25	8.66	1.02984	1706.29
3	Fuel	220.63	298.15	0.1574		7151.70
4	Combustion gases	529.42	1083.15	8.8174	1.20989	5629.53
5	Combustion gases	197.55	921.15	8.8174	1.17382	3577.80
6	Combustion gases	191.62	916.54	8.8174	1.17294	3520.33
7	Mechanical power					2021.22
8	Mechanical power					1983.46
6''	Kinetic energy/exergy					694.65

4.1. Exergetic performance results of engine components

As a result of the exergy analysis, the exergetic parameters for each component of the engine are presented in Tables 2-4 in addition to main exergy parameters.

Table 2.Exergy rate, exergetic efficiency and exergetic performance metrics of the engine components at maximum operation mode

Components	$\dot{E}x_F$ (kW)	$\dot{E}x_{Pr}$ (kW)	$\dot{E}x_D$ (kW)	ψ (%)	α (%)	β (%)	χ (%)	δ (%)	ϕ (%)	φ (%)
AC	1983.46	1706.29	277.18	86.026	7.633	13.974	3.876	39.902	245.633	27.734
CC	8857.99	5629.53	3228.46	63.553	88.905	36.447	45.143	464.761	810.412	123.859
GT	2051.73	2021.22	30.51	98.513	0.840	1.487	0.427	4.392	290.970	28.689
GTMS	2021.22	1983.46	37.76	98.132	1.040	1.868	0.528	5.435	285.534	28.262
ED	3577.80	3520.33	57.47	98.394	1.583	1.606	0.804	8.274	506.777	50.027

Table 3.Exergy rate, exergetic improvement potential and exergetic performance metrics of the engine components at maximum operation mode

Components	$\dot{E}x_F$ (kW)	$\dot{E}x_{Pr}$ (kW)	$\dot{E}x_D$ (kW)	$\dot{E}xIP$ (kW)	γ (%)	λ (%)	μ (%)	ν (%)	Ψ (%)
AC	1983.46	1706.29	277.18	38.734	3.181	13.974	1.953	0.542	87.739
CC	8857.99	5629.53	3228.46	1176.67	96.648	36.447	13.284	16.453	73.289
GT	2051.73	2021.22	30.51	0.454	0.037	1.487	0.022	0.006	98.535
GTMS	2021.22	1983.46	37.76	0.705	0.058	1.868	0.035	0.010	98.166
ED	3577.80	3520.33	57.47	0.923	0.076	1.606	0.026	0.013	98.419

Table 4.Exergy rate, exergy destruction cost rate and exergetic environmental performance metrics of the engine components at maximum operation mode

Components	$\dot{E}x_F$ (kW)	$\dot{E}x_{Pr}$ (kW)	$\dot{E}x_D$ (kW)	π ($10^{-3} kW/\$$)	ϖ (%)	EEF (-)	ExSI (-)	SEF (-)	EcoEF (-)
AC	1983.46	1706.29	277.18	1.386	7.633	0.162	6.156	7.156	1.162
CC	8857.99	5629.53	3228.46	16.142	88.905	0.573	1.744	2.744	1.573
GT	2051.73	2021.22	30.51	0.153	0.840	0.015	66.250	67.250	1.015
GTMS	2021.22	1983.46	37.76	0.189	1.040	0.019	52.534	53.534	1.019
ED	3577.80	3520.33	57.47	0.287	1.583	0.016	61.253	62.253	1.016

The main findings of the exergy analysis are summarized as follows:

- The real exergetic efficiency (ψ) values of the AC, CC, GT, GTMS and ED are calculated to be 86.03%, 63.55%, 98.51%, 98.13% and 98.39%, respectively. On the other hand, the improved exergy efficiency (Ψ) values of the AC, CC, GT, GTMS and ED are obtained to be 87.74%, 73.29%, 98.53%, 98.17% and 98.42%, respectively. The real and improved exergy efficiency values of the engine components are illustrated in Fig.3. Fig.3 indicates that the CC has the maximum improvement potential with 9.74% increasing in the exergy efficiency.

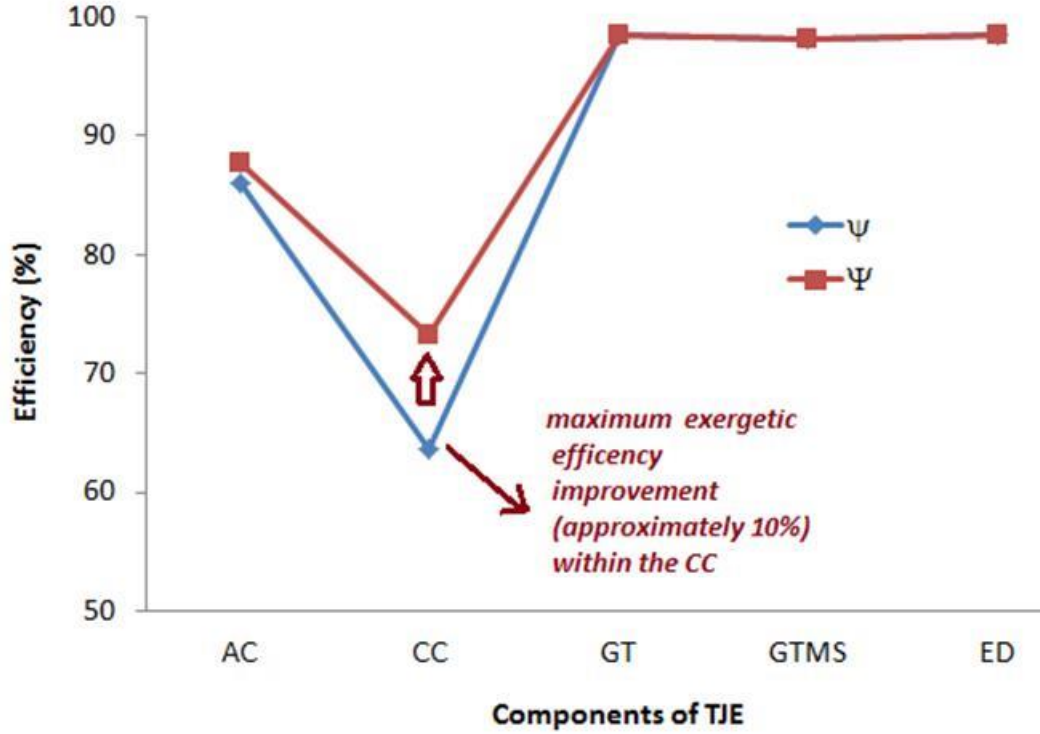


Fig.3. The real and improved exergy efficiency values of TJE's components.

- Between the components, the CC has the maximum exergy destruction rate with 3228.46 kW that is generates 88.90% of the total exergy destruction rate (3631.37 kW) within the engine. Because of this reason, the maximum values of the relative exergy destruction (α), the inlet exergy depletion ratio (β), the fuel exergy depletion ratio (χ), the productivity lack ratio (δ), the product ratio indicator (ϕ) and the fuel ratio indicator (φ) take place in the CC component with 88.90%, 36.45%, 45.14%, 464.76%, 810.41% and 123.86%, respectively.

- The CC has the maximum exergetic improvement potential ($\dot{E}xIP$) with 1176.67 kW hence it is the lowest exergy efficiency between the components. Furthermore, the CC owns the maximum values of the relative exergy improvement potential (γ), the exergy destruction improvement ratio (λ), the component inlet exergy improvement potential ratio (μ) and fuel exergy improvement potential ratio (ν) with 96.65%, 36.45%, 13.28% and 16.45%, respectively.

- The exergy destruction produces the cost rate because this portion of exergy rate is not converted to the desired product. The CC generates the maximum exergy destruction cost rate (π) with 16.14×10^{-3} kW/\$ between the components. Besides, the CC has the maximum relative cost rate ratio (ϖ) with 88.91%.

- When the environmental and sustainability indicators are examined for the engine components; the environmental effect factor (EEF), exergetic sustainability index ($ExSI$), sustainable efficiency factor (SEF) and ecological effect factor ($EcoEF$) are realized the maximum in the CC with 0.573, 1.744, 2.744 and 1.573, respectively.

The above-mentioned results clearly indicate that the CC has bad exergetic, environmental and sustainability performance metrics due to the combustion irreversibilities. Combustion of the fuel is a very complex phenomenon and it is highly thermodynamically irreversible process and limits the conversion of the fuel energy into the useful energy [39-40].

4.2. Exergetic performance metrics of whole engine

The exergy rate flows of the engine are 7151.7 kW-fuel exergy rate ($\dot{E}x_{3,F}$), 694.65 kW-product exergy rate ($\dot{E}x_{6,KN}$), 3631.37 kW-total exergy destruction rate ($\sum \dot{E}x_D$) and 2685.68 kW- exergy losses rate ($\dot{E}x_L$). The distribution of the fuel exergy inletting the engine is shown in Fig. 4. Fig.4 points out that the total exergy destruction rate is composed of 50.78% of fuel exergy rate while the exergy losses rate comprises 39.51% of fuel exergy rate. The exergetic performance parameters of whole engine are given in Table 5.

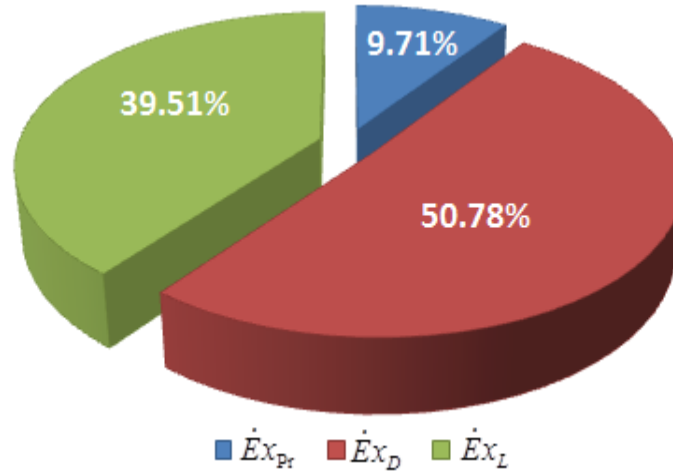


Fig. 4. Dividing the fuel exergy rate of the TJE into product exergy rate, exergy destruction rate and exergy losses rate.

Table 5. Exergy rate, exergetic efficiency and exergetic performance metrics of the whole engine at maximum operation mode

Parameters	Value	Parameters	Value	Parameters	Value
$\dot{E}x_F (kW)$	7151.70	$X(\%)$	90.29	$\Psi(\%)$	52.55
$\dot{E}x_{Pr} (kW)$	694.65	$\Delta(\%)$	90.29	$\Theta(10^{-3} kW/\$)$	32.29
$\dot{E}x_D (kW)$	3631.37	$\Phi(\%)$	929.54	$EEF(-)$	9.30
$\dot{E}x_L (kW)$	2825.68	$\dot{E}xIP (kW)$	5829.88	$ExSI(-)$	0.11
$\dot{E}x_{WE} (kW)$	6457.05	$\Gamma(\%)$	90.29	$SEF(-)$	1.11
$\psi (\%)$	9.71	$\Pi(\%)$	81.52	$EcoEF(-)$	10.30

The main results of the exergetic analysis of whole engine are outlined as follows:

- The real exergy efficiency (ψ) of the TJE is calculated to be 9.71% while the waste exergy rate ($\dot{E}x_{WE}$) is determined to be 6457.05 kW. If the necessary modification and improvements are realized on the engine, the 5829.88 kW-exergetic improvement potential rate ($\dot{E}xIP$) of 6457.05 kW-waste exergy rates can be regained theoretically. In this situation, the exergy efficiency of engine that named as the improved exergy efficiency (Ψ) is estimated to be 52.55%.
- The waste exergy ratio (X), the fuel exergy waste ratio (Δ) and the waste exergy improvement potential ratio (Γ) are determined to be 90.29%.

- The productivity lack ratio (Φ), the fuel exergy improvement potential ratio (Π) and the waste exergy cost rate (Θ) are obtained to be 929.54%, 81.52% and 32.29×10^{-3} kW/\$, respectively.
- On the other hand, when the environmental and sustainability indicators are examined for the whole engine; the environmental effect factor (EEF), exergetic sustainability index ($ExSI$), sustainable efficiency factor (SEF) and ecological effect factor ($EcoEF$) of the whole engine are determined to be 9.295, 0.108, 1.108 and 10.295, respectively. The results of environmental and sustainability metrics indicate that the engine exergy efficiency must advance the acceptable level between 20% and 30%. Particularly, the designers and researchers must focus on to improve the exergy efficiency of the CC component.

4.3. Comparing engine exergy efficiency performance with other investigated engines

The exergy efficiency values of new turbojet engine and other engines investigated in the previous studies are listed in Table 6. The exergy efficiency values of turbojet, turboprop and turbofan engines in the previous studies were estimated to be between 16.63% and 48.05% while the exergy efficiency of the new designed turbojet engine in this study is calculated to be 9.71%. When microjet engines are only taken into consideration, it is easily seen from Table 6 that the TRS18 micro turbojet is the highest exergy efficiency value with 48.05% [50]. This result indicates that the exergy efficiency of the engine, compared with other engines, is very low level. The designers and researchers must focus on the air compressor (AC) and combustion chamber (CC) to progress the engine exergy efficiency from 9.71% to the acceptable level between 20% and 30%.

Table 6. Comparing exergetic efficiency value of new engine with other engines.

Researcher	Investigated date	Engine Type	Exergy efficiency (%)
Aydin et al. [6]	2015	Turbofan	31.50
Balli [10]	2014	Turbojet	29.87
Balli et al. [11]	2008	Turbojet	34.84
Ehyaiei et al. [15]	2013	Turbojet	25.60
Balli and Hepbasli [19]	2013	Turboprop	23.80
Aydın et al. [21]	2012	Turboprop	30.00
Etele and Rosen [22]	2001	Turbojet	16.9
Aydın et al. [28]	2013	Turboprop	29.20
Balli [35]	2017	Turbofan	25.70
Balli [36]	2017	Turboprop	16.63
Balli [37]	2017	Turbojet	39.41
Balli [41]	2017	Turbofan	26.80
Sohret et al. [42]	2016	Turboprop	26.74
Bastani et al. [43]	2015	Turbofan	44.00
Sohret et al. [44]	2017	Micro turbojet	27.25
Struchtrup and Elfring [45]	2008	Turbofan	34.80
Balli [46]	2017	Turbofan	19.92
Balli et al [47]	2017	Turbojet	26.39
Balli et al [48]	2017	Turboprop	17.24
Balli et al. [49]	2017	Micro turbojet	17.02
Aydın et al. [50]	2018	TRS18 micro turbojet	42.00
Balli [51]	2019	Turbofan	48.05
Present study		Turbojet	9.71

5. Conclusion

This study presents some developed exergetic assessment parameters to analyze and evaluate the medium-scale turbojet engine designed for using on Missiles. These parameters help the engine designers to measure the level of engine performance, the environmental impacts of the engine and its sustainability.

The exergy efficiency, the improved exergy efficiency, the waste exergy ratio, the fuel exergy waste ratio, the waste exergy improvement potential ratio, the productivity lack ratio, the fuel exergy improvement potential ratio, the waste exergy cost rate, the environmental effect factor, the ecological effect factor, exergetic sustainability index and sustainable efficiency factor are estimated to be 9.71% 52.55%, 90.29%, 90.29%, 90.29%, 929.54%, 81.52%, 32.29×10^{-3} kW/\$, 9.295, 10.295, 0.108 and 1.108 for the maximum operation mode of the engine. The results of

exergetic, environmental and sustainability metrics indicate that the designers and researchers must focus on the air compressor (AC) and combustion chamber (CC) to progress the engine exergy efficiency from 9.71% to the acceptable level between 20% and 30%.

The recommended exergetic assessment metrics in this study can be beneficial to analyze the similar systems as the turbojet, the turboprop and the turbofan engines.

References

- [1] Turan O. Exergetic effects of some design parameters on the small turbojet engine for unmanned air vehicle applications. *Energy*, 2012, 46: 51-61.
- [2] Sohret Y, Dinc A, Karakoc TH. Exergy analysis of a turbofan engine for an unmanned aerial vehicle during a surveillance mission. *Energy*, 2015, 93:716-729.
- [3] Kaya N, Turan O, Midilli A, Karakoc TH. Exergetic sustainability improvement potentials of a hydrogen fueled turbofan engine UAV by heating its fuel with exhaust gasses. *Int. J. Hydrog. Energy*, 2016, 41(19):8307-8322.
- [4] Aviation Gas Turbine Forecast. The Market for Missile/Drone/UAV Engines 2010-2019. www.forecastinternational.com/
- [5] Aviation Gas Turbine Forecast. Williams International F107/F122/F41. Archived Report 2014. <https://www.forecastinternational.com/>
- [6] Aydın H, Turan O, Karakoc TH, Midilli A. Exergetic Sustainability Indicators as a Tool in Commercial Aircraft: A Case Study for a Turbofan Engine. *International Journal of Green Energy* 2015, 12:28-40.
- [7] Atashkari K, Nariman-Zadeh N, Pilechi A, Jamali A, Yao X. Thermodynamic pareto optimization of turbojet engines using multi-objective genetic algorithms. *Int J ThermSci*, 2005, 44(11): 1061-1071.
- [8] Homaifar A, Lai HY, McCormic E. System optimization of turbofan engines using genetic algorithms. *Appl Math Model*, 1994, 18(2):72-83.
- [9] Liu F, Sirignano WA. Turbojet and turbofan engine performance increases through turbine burners. *J Propul Power*, 2001, 17(3): 695-705.
- [10] Balli O. Afterburning effect on the energetic and exergetic performance of an experimental turbojet engine (TJE). *Int J Exergy*, 2014, 14 (2): 205-236.
- [11] Balli O, Aras H, Aras N, Hepbasli A. Exergetic and exergoeconomic analysis of an Aircraft Jet Engine (AJE). *Int J Exergy*, 2008, 5(5/6): 567-581.
- [12] Bejan A, Siems D. The need for exergy analysis and thermodynamic optimization in aircraft development. *Int J Exergy*, 2001, 1(1):14-24.
- [13] Roth BA, Mavris DN. A comparison of thermodynamic loss models suitable for gas turbine propulsion: theory and taxonomy; *AIAA paper*, 2000, pp. 3714.
- [14] Roth BA, Mavris DN. A comparison of thermodynamic loss models applied to the J79 Turbojet Engine. *Joint Propulsion Conference and Exhibit*, 36th, Huntsville, July, Alabama, USA; 2000.
- [15] Ehyaei MA, Anjiridezfuli A, Rosen MA. Exergetic analysis of an aircraft turbojet engine with an afterburner. *Thermal Science*, 2013, 17(4):1181-1194.
- [16] Turgut ET, Karakoc TH, Hepbasli A. Exergetic analysis of an aircraft turbofan engine. *Int J Energy Res*, 2007, 31(14): 1383-1397.
- [17] Turgut ET, Karakoc TH, Hepbasli A, Rosen MA. Exergy analysis of a turbofan aircraft engine. *Int J Exergy*, 2009, 6(2): 181-199.
- [18] Tona C, Raviolo PA, Pellegrini LF, Oliveria Jr S. Exergy and thermodynamic analysis of a turbofan engine during a typical commercial flight. *Energy*, 2010, 35(2): 952-959.
- [19] Balli O, Hepbasli A. Energetic and exergetic analyses of T56 turboprop engine. *Energy Convers Manag*, 2013, 73: 106-120.
- [20] Aydın H, Turan O, Karakoc TH, Midilli A. Component-based exergetic measures of an experimental turboprop/turboshaft engine for propeller aircrafts and helicopters. *Int J Exergy*, 2012, 11(3): 322-348.
- [21] Aydın H, Turan O, Midilli A, Karakoc TH. Exergetic and exergo-economic analysis of a turboprop engine: a case study for CT7-9C. *Int J Exergy*, 2012, 11(1): 69-82.
- [22] Etele J, Rosen MA. Sensitivity exergy efficiencies of aerospace engines to reference environment selection. *Int J Exergy*, 2001, 1(2): 91-99.
- [23] Turan O. Effect of reference altitudes for a turbofan engine with the aid of specific-exergy based method. *Int J Exergy*, 2012, 11(2): 252-270.
- [24] Balli O, Hepbasli A. Exergoeconomic, sustainability and environmental damage cost analyses of T56 turboprop engine. *Energy*, 2014, 64:582-600.
- [25] Turgut ET, Karakoc TH, Hepbasli A. Exergoeconomic analysis of an aircraft turbofan engine. *Int J Exergy*, 2009, 6(3): 277-294.
- [26] Atılğan R, Turan O, Altuntas O, Aydın H, Synlyo K. Environmental impact assessment of a turboprop engine with the aid of exergy. *Energy*, 2013, 58: 664-671.
- [27] Altuntas O, Karakoc TH, Hepbasli A. Exergoenvironmental analysis of pistonprop aircrafts. *Int J Exergy*,

- 2012,10(3): 290-298.
- [28] Aydın H, Turan O, Karakoc TH, Midilli A. Exergo-sustainability indicators of a turboprop aircraft for the phases of a flight. *Energy* 2013; 58: 550-560.
- [29] Roketsan. SOM Stand off Missile. <http://www.roketsan.com.tr/wp-content/uploads/2015/06/SOM-ENG-email1.pdf>
- [30] SavunmaSanayi.Org. SOM SeyirFüzesi (in Turkish). <http://www.savunma-sanayi.com/2016/01/som-seyir-fuzesi.html>
- [31] ASMC-1st Air Supply and Maintenance Center. *Technical Document of Turbojet Engine*. 2013.
- [32] Cengel YA, Boles MA. *Thermodynamics: An Engineering Approach*. 8th Edition, McGraw-Hill Education, 2 Penn Plaza, New York, NY 10121.ISBN-978-0-07-339817-4. 2014.
- [33] Jawad H, Jaber MY, Bonney M, Rosen MA. Deriving an exergetic economic production quantity model for better sustainability.*Applied Mathematical Modelling*, 2016, 40: 6026–6039.
- [34] Sohret Y, Ekici S, Altuntas O, Hepbasli A, Karakoc TH. Exergy as a useful tool for the performance assessment of aircraft gas turbine engines: A key review. *Progress in Aerospace Sciences*, 2016, 83:57–69.
- [35] Balli O. Advanced exergy analysis of a turbofan engine (TFE): Splitting exergy destruction into unavoidable/avoidable and endogenous/exogenous. *International Journal of Turbo&Jet Engines*. 2017. ISSN (Online) 2191-0332, ISSN (Print) 0334-0082. DOI:<https://doi.org/10.1515/tjj-2016-0074>.
- [36] Balli O. Advanced exergy analyses of an aircraft turboprop engine (TPE). *Energy*, 2017, 124: 599-612.
- [37] Balli O. Advanced exergy analyses to evaluate the performance of a military aircraft turbojet engine (TJE) with afterburner: Splitting exergy destruction into unavoidable/avoidable and endogenous/exogenous. *Applied Thermal Engineering*, 2017, 111:152-169.
- [38] Kotas, T.J. *The Exergy Method of Thermal Plant Analysis*, Reprint ed.,Kieger, Malabar.1995.
- [39] Tsatsaronis G, Morosuk T, Koch D, Sorgenfrei M. Understanding the thermodynamic inefficiencies in combustion processes. *Energy*, 2013, 62: 3-11.
- [40] Karimi MN, Kamboj SK. Exergy destruction and chemical irreversibilities during combustion in spark-ignition engine using oxygenated and hydrocarbon fuels. *International Journal of Mechanical and Industrial Engineering (IJMIE)*, 2012, 2(3): 7-11.
- [41] Balli O. Exergy modeling for evaluating sustainability level of a high by-passturbofan engine used on commercial aircrafts.*Applied Thermal Engineering*, 2017, 123:138-155.
- [42] Sohret Y, Sogut MZ, Karakoc TH, Turan O. Customised application of exergy analysis method to PW120A turboprop engine for performance evaluation. *Int J Exergy*, 2016, 20(1): 48-65.
- [43] Bastani M, Mokhtari H, Mostafavi Sani M. Bypass rate impact on turbofan engine parameters using energy and exergy analysis. *Int J of Engineering Sciencis&Research Technologies*, 2015, 4(4): 387-395.
- [44] Ekici S, Sohret Y, Coban K, Karakoc TH. Sustainability metrics of a small scale turbojet engine.*International Journal of Turbo&Jet Engines*. 2017.<https://doi.org/10.1515/tjj-2016-0036>
- [45] Struchtrup H, Elfring GJ. External losses in high-bypas turbofan air engines.*Int J Exergy*, 2008, 5: 400-412.
- [46] Balli O. Sustainable aviation metrics for an aircraft gas turbine engine from thermodynamics perspective. *International Symposium on Sustainable Aviation (ISSA-2017)*, 10-13 September 2017, Kiev, Ukraine.
- [47] Balli O, Adak I, Gunes S. Afterburner effect on the energetic and exergetic performance of J79-GE-17 engine with afterburner system used on F-4 Phantom II Aircrafts. *International Symposium on Sustainable Aviation (ISSA-2017)*, 10-13 September 2017, Kiev, Ukraine.
- [48] Balli O, SohretY, Karakoc TH. Exergy analysis of a new designed medium-scale turboprop engine used on unmanned aircraft vehicles (UAVs). *International Symposium on Sustainable Aviation (ISSA-2017)*, 10-13 September 2017, Kiev, Ukraine.
- [49] Balli O. Analyzing performance of an experimental micro turbojet engine with advanced exergy methodology. 2st International Mediterranean Science and Engineering Congress (IMSEC-2017), 25-27 October 2017, Cukurova University Congress Center, Adana, Turkey.
- [50] Aydın E, Turan O, Kose R. Exergy analysis of a target drone engine: an experimental study for TRS18. *International Journal of Exergy*, 2018, 27(2): 206–230.
- [51] Balli O. Thermodynamic, thermoeconomic, environmental performance analyses of a high bypass turbofan engine used on commercial aircrafts. *Sakarya University Journal of Science (SAUJS)*. [Accepted date: 22 January 2019, in press].

Nomenclature

A area (m²)

AC air compressor

CC Combustion chamber

c_p specific heat capacity (kJ/kg.K)

$EcoEF$ ecological effect factor (-)

ED exhaust duct

EEF environmental effect factor (-)

ET engine thrust (N, kN)

$\dot{E}x$ exergy rate (kW)

$\dot{E}xIP$ exergetic improvement potential (kW)

ESI exergetic sustainability index (-)

GT gas turbine

$GTMS$ gas turbine mechanical shaft

LHV lower heating value of fuel (kJkg⁻¹)

\dot{m} mass flow rate (kg/s, kg/h)

P pressure (kPa)

R universal gas constant(kJ kg⁻¹K⁻¹)

SEF sustainable efficiency factor (-)

T temperature (K)

TJE turbojet engine

V velocity (m/s)

\dot{W} work rate or power rate(KW)

Greek Letters

α relative exergy destruction ratio (%)

β inlet exergy depletion ratio (%)

χ fuel exergy depletion ratio (%)

δ productivity lack ratio (%)

ε specific exergy (kJ/kg)

ϕ product ratio indicator(%)

φ fuel ratio indicator(%)

γ relative exergetic improvement potential ratio(%)

λ exergy destruction improvement ratio(%)

μ component inlet exergy improvement potential ratio(%)

ν fuel exergy improvement potential ratio(%)

π exergy destruction cost rate (kW/\$)

ϖ relative exergy destruction cost rate (-)

ξ fuel exergy grade function (-)

ψ exergetic efficiency (%)

X waste exergy ratio (%)

Δ fuel exergy waste ratio (%)

Φ productivity lack ratio factor (%)

Γ waste exergy improvement potential ratio(%)

Π fuel exergy improvement potential ratio(%)

Θ waste exergy cost rate(kW/\$)

Ψ improved exergetic efficiency (%)

Subscripts

A air

AC air compressor

CC combustion chamber

Cg combustion gases

CH chemical

D destruction

ED exhaust duct

F inlet streams as a fuel

GT Gas turbine

GTMS gas turbine mechanical shaft

In input

K k'th component

KN kinetic

L losses

Out output

P pressure

PH physical

Pr product

PT potential

T temperature

TJE turbojet engine

Tot total

WE waste exergy

O dead state

Superscripts

CH chemical

KN kinetic

PH physical

PT potential

AES Şifreleme ve Esnek Kümeler Yardımıyla Elde Edilen Yeni Bir Kriptosistem

Emin AYGÜN

Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Fakültesi Matematik Bölümü / KAYSERİ

(Alınış / Received: 13.01.2019, Kabul / Accepted: 28.01.2019, Online Yayınlanma / Published Online: 30.04.2019)

Anahtar Kelimeler

Esnek kümeler,
İnvers ve Karakteristik çarpım,
Esnek şifreleme ve deşifreleme,
AES şifreleme

Özet: Molodtsov tarafından ortaya atılan esnek küme teorisi, belirsizlikle başa çıkmak için etkili bir matematiksel araç olarak görülmektedir. Bu teori, bilgi sistemleri, karar verme problemleri, optimizasyon teorisi, cebirsel yapılar ve matematiksel analiz gibi belirsizlik içeren birçok alana uygulandı. Bu çalışmada esnek matrisler üzerinde invers çarpım ve karakteristik çarpım olarak adlandırılan iki yeni işlem tanımlayacağız. Yeni kriptosistem metodunu esnek matrislerin invers çarpımı ve karakteristik çarpımını kullanarak ortaya koyacağız. Esnek şifrelemeyi ,esnek deşifrelemeyi tanımlayacağız ve AES şifreleme ile mukayese edeceğiz.

AES Encryption and A New Cryptosystem Obtained With Soft Set

Keywords

Soft Sets,
Inverse production and
characteristic production,
Soft encryption and soft
decryption,
AES encryption

Abstract: Soft set theory, proposed by Molodtsov, has been regarded as an effective mathematical tool to deal with uncertainties. This theory has been applied to many fields such as information systems, decision making problems, optimization theory, algebraic structure and basic mathematics analysis, etc. which contain uncertainties. In this work, we define two new operations on the set of soft matrices, called inverse production and characteristic production. We introduce soft cryptosystem as a new cryptosystem method by using inverse production and characteristic production of soft matrices. We define soft encryption, soft decryption and we will compare with AES encryption.

1. Giriş

Esnek kümeler teorisi, Molodtsov [1] tarafından belirsizlikle başa çıkmak için bir matematiksel araç olarak ortaya atıldı. Molodtsov [1], sürekli diferansiyellenebilir fonksiyonlar, oyun teorisi, işlem araştırmaları, Riemann integrasyonu, Perron integrasyonu, olasılık, ölçüm teorisi vb. alanlarda esnek küme teorisini kullanarak, başarılı çalışmalar yaptı. Ayrıca, yazar yaklaşık nesne kavramını formüle etti ve esnek küme teorisi isimli bir kitap yayınladı. Maji ve arkadaşları [2] karar verme problemleri için esnek küme teorisini araştırdılar. Teorik olarak, esnek kümeler üzerine çeşitli işlemler tanımladılar. Ali ve arkadaşları [3] esnek kümelerin bazı kavramlarını verdiler. Maji ve ark. ve Pawlak' ın yaklaşım küme teorisi yardımıyla, bir karar verme probleminde esnek kümelerin bir uygulamasını sundu ve esnek kümelerde bazı işlemleri tanımladı. Xiao ve ark. esnek küme temelli iş rekabet kapasitesi için yapay bir hesaplama metodu üzerine bir çalışma yaptı. Yang ve ark. esnek kümeler ve yaklaşım kümelere dayalı klinik teşhisin karar analizi ve indüksiyon başlıklı bir çalışma yaptı. Xiao ve ark. ile Pei ve Miao esnek tabanlı bilgi sistemleri üzerine çalışmalar sundular. Mushrif ve ark. esnek küme temelli sınıflandırmalar üzerine bir çalışma yaptı. Esnek kümelerin cebirsel özellikleri bazı yazarlar tarafından çalışılmaktadır. Sezgin ve Atagün [4] esnek küme üzerinde kesişim, genişletilmiş kesişim, kısıtlanmış birleşim, kısıtlanmış farkı tanımladılar ve her birinin kendi arasındaki bağlantılarını gösterdiler. Aktaş ve Çağman [5] esnek kümeleri, bulanık kümeler ve yaklaşım kümelerin ilgili kavramlarıyla karşılaştırdılar, ayrıca pek çok yeni

çalışmanın önünü açan “Esnek Grup Teorisi”ni literatüre kazandırdılar. Esnek grup yapısı üzerinde esnek altgrup, normal esnek altgrup, esnek homomorfizm gibi cebirsel yapılar tanımladılar. Acar ve diğerleri [6] esnek halkaları, Atagün ve Sezgin [7] esnek yakın halkaları tanımladılar. Sezgin ve Atagün [8] halka, cisim ve modülün esnek cebirsel yapısıyla ilgili çalıştılar. Bu çalışmada, Molodtsov’un [1] esnek küme tanımı kullanılarak esnek matrisler üzerinde invers çarpım ve karakteristik çarpım tanımlanmıştır. Yeni esnek şifreleme ve esnek deşifreleme metodu verilmiştir. AES şifreleme hakkında bilgi verilmiştir.

2. Materyal ve Metot

Esnek kümeler yardımıyla elde edilecek olan şifreleme yöntemini oluşturmak için bu bölümde, temel bilgi niteliğinde olan ve çalışmanın diğer kısımlarında sıkça kullanılan yapılar verilecektir.

Tanım 2.1.

[1] U evrensel küme ve E parametrelerin bir kümesi olsun. $P(U)$, U 'nin kuvvet kümesi ve $A \subset E$ olarak gösterilsin. Bir (F, A) sıralı ikilisi U üzerinde esnek küme olarak adlandırılır. Burada $F: A \rightarrow P(U)$ ile verilen bir dönüşümdür.

Tanım 2.2.

(f_A, E) ikilisi U üzerinde bir esnek küme olsun. Bu durumda $U \times E$ 'nin $R_A = \{ (u, e) : e \in A, u \in f_A(e) \}$ alt kümesine (f_A, E) ikilisinin bağıntı formu denir. R_A 'nın karakteristik fonksiyonu

$$X_{R_A}: U \times E \rightarrow \{0, 1\}$$

$$(u, e) \rightarrow X_{R_A}(u, e) = \begin{cases} 1, & (u, e) \in X_{R_A} \\ 0, & (u, e) \notin X_{R_A} \end{cases} \quad (1)$$

ile verilir. Eğer $a_{ij} = X_{R_A}(u_i, e_j)$ alınırsa,

$[a_{ij}] = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}$ matrisine U üzerinde (f_A, E) esnek kümesinin esnek matrisi denir. U üzerindeki tüm esnek matrislerin kümesi $SM_{m \times n}$ ile gösterilir. [7]

Tanım 2.3.

$[a_{ij}] \in SM_{m \times n}$ olsun.

i_1) Her i ve j için $a_{ij} = 0$ ise, $[a_{ij}]$ ya sıfır esnek matris denir ve $[0]$ ile gösterilir.

i_2) Her $j \in I_A = \{j: e_j \in A\}$ ve i için $a_{ij} = 1$ ise, $[a_{ij}]$ ya A -evrensel esnek matris denir ve $[\tilde{a}_{ij}]$ ile gösterilir.

i_3) Her i ve j için $a_{ij} = 1$ ise, $[a_{ij}]$ ya evrensel esnek matris denir ve $[1]$ ile gösterilir.

Tanım 2.4.

$[a_{ij}], [b_{ij}] \in SM_{m \times n}$ olsun. $[a_{ij}]$ ve $[b_{ij}]$ nin invers çarpımı “ \cdot_i ” ile gösterilir. $[a_{ij}] \cdot_i [b_{ij}] = [c_{ij}]$ olmak üzere

$$c_{ij} = \begin{cases} 1, & a_{ij} \neq b_{ij} \\ 0, & a_{ij} = b_{ij} \end{cases} \quad (2)$$

şeklinde tanımlanır.

Tanım 2.5.

$[a_{ij}], [b_{ij}] \in SM_{m \times n}$ olsun. Bu durumda $[a_{ij}]$ ve $[b_{ij}]$ 'nin " \cdot_c " karakteristik çarpımı $[a_{ij}] \cdot_c [b_{ij}] = [c_{ij}]$ burada her i, j için

$$c_{ij} = \begin{cases} 1, & a_{ij} = b_{ij} \\ 0, & a_{ij} \neq b_{ij} \end{cases} \quad (3)$$

şeklinde tanımlanır.

Tanım 2.6.

Herhangi bir $S \in SM_{5 \times 5}$ esnek matrisi herhangi bir $\pi \in S_5$ permütasyon grubuna göre düzenlenirken esnek matrisin her bir satırındaki elemanlar π 'de verilen sıraya göre yer değiştirir.

Örnek 2.6.

$$S = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \text{ esnek matrisini alalım.}$$

$\pi = (12543)$ olsun. S esnek matrisinin her satırını π 'e göre düzenleyelim. π de verilen sıralamayı dikkate alırsak $1 \rightarrow 2 \rightarrow 5 \rightarrow 4 \rightarrow 3 \rightarrow 1$ şeklindedir. O halde ilk satır düzenlenirken elemanlar bu sıralamaya göre yer değiştirecektir. İlk satırın düzenlenmiş hali 01111 olur. Her bir satıra bu işlem uygulanırsa

$$S_{\pi} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \text{ elde edilir}$$

Tanım 2.7.

Aes şifreleme algoritması, 128 bit veri bloklarını 128, 192 veya 256 bit anahtar seçenekleri ile şifreleyen bir blok şifre algoritmasıdır. 128 bit uzunluğunda olan veri, (4x4)'lük matrislerle bölünerek algoritmaya dahil olur. Bu matrise "durum" denilir ve her bir satırı kelime olarak adlandırılır. AES şifrelerken kullanacağı algoritmada anahtarın uzunluğuna göre döngü sayısının atamasını yapar. Bu döngüsel işlemin artmasıyla veri daha çok güvenilir hale gelir. Fakat aynı zamanda yapılacak olan döngüsel işlemlerin de artmasıyla hem işlem sayısı artar hem de bellek alanı artar. Özellikle 256 bit anahtar kullanımlarında döngüsel artım olduğu için algoritma hızı düşer.

Döngü Yapısı

Durum matrisinin oluşumuyla algoritma yürürlüğe girer. Döngü sayısı anahtar uzunluğuna göre değişir. Sadece son döngüde sütun karıştırma işlemi yapılmaz, tur anahtarları ile toplama işlemi yapılır ve şifrelenmiş blok elde edilir. Şifrelenmiş veriyi çözerken de bu alt işlemlerin tersi uygulanır. Döngüler durum matrislerinde 4 işlem gerçekleştirir.

1. Bayt Değiştirme

Değişiklik değerleri önceden hesaplanmış S-Kutusuna göre yapılır. S-Kutusu, durum matrisinin elemanları onaltılık tabana göre oluşturduğu için 16x16 boyutunda bir matristir denebilir.

2. Satır Kaydırma

Satır kaydırma işlemi yeni durum matrisi üzerinde yapılır. Bu işlemde matrisin ilk satırı aynı kalırken, ikinci satır 1 bayt, üçüncü satır 2 bayt, dördüncü satır ise 3 bayt sola ötelenir.

3. Sütun Karıştırma

Sütunları karıştırma işlemi, satır kaydırmadan elde edilen durum matrisinin her bir sütununu birbirinden bağımsız şekilde $a(x) = \{03\}x^3 + \{01\}x^2 + \{01\}x + \{02\}$ denklemiyle matris çarpımına tabi tutar.

4. Döngü Anahtarını Ekleme

AES algoritmasında her döngünün sonunda anahtar materyali eklenir. Bu anahtar, başlangıçta anahtar üretim bloğu tarafından üretilen anahtar dizisidir.

Tanım 2.8.

Aes deşifreleme algoritması, şifeli metni çözmek için uygulanan algoritmadır. Şifreli metni çözmek için uygulanan adımlar şifreleme işlemi için kullanılan adımların benzeridir fakat tersi şeklinde uygulanır. Şifrelemek için uygulanan dönüşümler tersine çevrilir ve şifreleme sırasının tersinden başlanır.

1. Ters Satır Kaydırma

Durum matrisi sola değil sağa doğru kaydırılır. İkinci satır bir bayt, üçüncü satır iki bayt, dördüncü satır üç bayt sağa doğru kaydırılır.

2. Ters Bayt Değiştirme

Şifre çözme işleminde de yine aynı şekilde bir S-kutusu kullanılır. Bu S-Kutusu aynı S-Kutusu değildir ve şifreleme için kullanılan kutunu tersidir.

3. Ters Sütun Değiştirme

Her sütun $a^{-1}(x) = \{0B\}x^3 + \{0D\}x^2 + \{09\}x + \{0E\}$ denklemi ile çarpılır ve elde edilen yeni sütun eskisinin yerine yazılır.

4. Döngü Anahtarını Ekleme

Döngü anahtarını eklemenin tersi yine kendisidir. AES algoritması şifreleme ve şifreyi çözmeye aynı anahtarı kullanan simetrik yapıya sahiptir.

3. Bulgular

Bu bölümde esnek şifreleme ve esnek deşifreleme algoritmaları verilip elde edilen yeni şifreleme yönteminin uygulaması yapılacaktır. Esnek kümeler, esnek matrisler ve keyfi olarak alınan $\pi \in S_5$ e bağlı olarak yeni şifreleme yöntemini ileri süreceğiz.

Harfler A B C D E F G H I J K L M N O P Q R S T U V W X Y Z Ç Ğ İ Ö Ş Ü

Numaralar 0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23 24 25 26 27 28 29 30 31

Harflerin ikili sistemde karşılıkları ;

Harfler A B C D ... Ş Ü

İkili sistem 00000 00001 00010 00011 11110 11111 şeklindedir.

Esnek matris S ile, mesaj M ve şifreli metin C ile ifade edilecektir. Esnek matrisin her bir satırı π 'e göre düzenlenerek elde edilen esnek matris S_{π} ile gösterilecektir.

Teorem 3.1. $S, M, C \in S_{m \times n}$ ve $\pi \in S_5$ olsun. Aşağıda farklı şifreleme yöntemleri verilmiştir.

i) $S_{\pi} \cdot_i M = C$

ii) $S_{\pi} \cdot_c M = C$

iii) $(S_{\pi} \cdot_i M) \cdot_c S_{\pi} = C$

Teorem 3.1. i) ile esnek şifreleme algoritması

1. Herhangi bir esnek küme alınır.
2. Esnek kümeye karşılık gelen esnek matris elde edilir.
3. Mesaj bloklara bölünür ve ikili sistemde karşılıkları bulunur.
4. Esnek matrisin her bir satırı alınan π 'e göre tekrar düzenlenir S_{π} elde edilir.
5. S_{π} ile mesajın invers çarpımı yapılır.
6. Elde edilen matristen her satırın harf karşılığı bulunup alıcıya gönderilir.

Örnek 3.1. Esnek küme $(f_A, E) = \{(e_1, \{u_1, u_2\}), (e_2, \{u_2, u_3, u_4\}), (e_4, \{u_1, u_5\}), (e_5, \{u_3, u_4\})\}$ olsun. Şifrelenmek istenilen mesaj YENİ ŞİFRELEME olsun. Esnek kümeye karşılık gelen matris

$$S = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \text{ olur.}$$

Mesaj bloklara bölünür. YENİŞ-İFREL-EMEEA ikili sistemdeki karşılıkları hesaplanır ve her blok bir matris oluşturur. Burada bloğun tamamlanması için son kısma mesajı bozmayan harf eklenmiştir.

YENİŞ- 11000, 00100, 01101, 11100, 11110

$$M = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$\pi = (13542) \in S_5$ alalım. Esnek matrisin her bir satırı π 'e göre düzenlenir. $1 \rightarrow 3 \rightarrow 5 \rightarrow 4 \rightarrow 2 \rightarrow 1$ olduğundan esnek matrisin satırındaki birinci eleman üçüncü elemanın yerine, üçüncü eleman beşinci eleman yerine, beşinci eleman dördüncü eleman yerine, dördüncü eleman ikinci elemanın yerine ve ikinci elemanda birinci elemanın yerine yazılır. Bu düzenlemeye göre her bir satır oluşturulur.

$$S_{\pi} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \text{ elde edilir.}$$

$$S_{\pi} \cdot_i M = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} = C$$

Mesajın şifrelenmiş bloğu UUÜOW olur. Mesajın diğer blokları da benzer işlemlerle bulunur.

Şifreli metin: UUÜOW-QVDWD-İİWSI bulunur ve alıcıya gönderilir.

Teorem 3.2. $S, M, C \in S_{m \times n}$ ve $\pi \in S_S$ olsun. Aşağıda Teorem 3.1. e göre farklı deşifreleme yöntemleri verilmiştir.

i) $C \cdot_i S_{\pi} = M$

ii) $C \cdot_c S_{\pi} = M$

iii) $S_{\pi} \cdot_i (C \cdot_c S_{\pi})$

Teorem 4.1. i) ile esnek deşifreleme algoritması

1. Şifrelemede kullanılan esnek küme alınır.
2. Esnek kümeye karşılık gelen esnek matris elde edilir.
3. Şifreli metin bloklara bölünür ve ikili sistemde karşılıkları bulunur.
4. Esnek matrisin her bir satırı alınan π' e göre tekrar düzenlenir S_{π} elde edilir.
5. Şifreli metin ile S_{π} 'nin invers çarpımı yapılır.
6. Elde edilen matrisin her satırının harf karşılığı bulunur ve mesaj deşifrelenmiş olur.

Örnek 4.1. Örnek 3.2. deki esnek kümeyi ve mesajı alalım.

$(f_A, E) = \{(e_1, \{u_1, u_2\}), (e_2, \{u_2, u_3, u_4\}), (e_4, \{u_1, u_5\}), (e_5, \{u_3, u_4\})\}$ olsun. Esnek kümeye karşılık gelen matris

$$S = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Şifreli metin UUÜOW- QVDWD- İİWSI bloklara bölünür ve ikili sistemdeki karşılıkları bulunur.

$$C = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \text{ elde edilir.}$$

Esnek matrisin her bir satırı $\pi = (13542)$ 'e göre düzenlenir.

$$S_{\pi} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$C \cdot_i S_{\pi} = M = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \text{ elde edilir.}$$

Her matrisin harf karşılıkları bulunur. YENİŞ-İFREL-EMEAA. Mesaj YENİ ŞİFRELEME deşifrelenmiş olur. Benzer şekilde diğer teoremler de kullanılarak şifreleme ve deşifreleme uygulanabilir.

4. Tartışma ve Sonuç

Elde edilen bulgulara göre esnek küme yardımıyla oluşturulan şifreleme algoritması güvenilir ve hızlıdır. Aes şifreleme algoritmasında kullanılan anahtarın uzunluğuna göre döngü sayısı arttığından işlem sayısı ve bellek alanı da artar. Şifrelemede güvenilirlik önemlidir ancak şifreleme hızı da kullanışlılığı etkiler. Aes şifreleme güvenli olmasına rağmen farklı anahtar uzunluklarının kullanılması algoritma hızını düşürür.

Teşekkür

Bu çalışma, Proje Numarası: FYL-2017-7109 olan "Esnek Kümeler Yardımıyla Elde Edilen Yeni Bir Kriptosistem" isimli Yüksek Lisans Tez Projesi ile Erciyes Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Koordinasyon Birimince Desteklenmiştir

Kaynakça

- [1] Molodtsov, D. 1999. Soft Set Theory-Firrst Results, Computers and Mathematics with Applications, 37 (1) (1999), 19-31.
- [2] Maji, P. K., Bismas, R., Roy, A.R. 2003. Soft Set Theory, Computers and Mathematics with Applications, 45(1) (2003), 550-562
- [3] Ali, M.I., Feng, F., Liu, X., Min, W.K., Shabir, M. 2009. On Some New Operations in Soft Set Theory, Comput. Math Appl. 57(9) (2009), 1547-1553
- [4] Sezgin A., Atagün A.O. 2011. On Operations of Soft Sets Comput. Math. Appl. , 61(5) (2011) 1457-1467.
- [5] Aktaş, H., Çağman, N. 2007. Soft Sets and Soft Groups, Information Sciences, 177(1) (2007), 2726- 2735.
- [6] Acar U., Koyuncu F. and Tanay B. 2010. Soft Sets and Soft Rings, Comput. Math. Appl. 59 (2010), 3458-3463.
- [7] Sezgin. A., Atagün A.O., Aygün E., 2011. A Note On Soft Near-Rings and Idealistic Soft Near-Rings, Filomat, 25(1) (2011), 53-68
- [8] Atagün A.O. and Sezgin A. 2011. Soft Substructures of Rings, Fields and Modules, Comput. Math. Appl., 61 (3) (2011) 592-601.
- [9] D.Molodtsov, 2004. The Theory of Soft Sets, URRS Puplichers. , Moscow, 2004, (in Russian)
- [10] D. Stinson. 1995. Cyryptography: Theory and Practice , CRC Press, New Jersey 573s.
- [11] C.F. Yang , A note on soft set theory. 2008. Computers and Matematics with Aplications. 2003. 56 (2008), 1899-1900. [Comput. Math. Appl. 45 (4-5) (2003), 555-562]
- [12] Atagün A.O., Aygün E. 2016. Groups of Soft sets. Journal of Intelligent & Fuzzy Systems 30 (2016) 729–733

Multiplication Operators On Grand Lorentz Spaces

Gökhan IŞIK¹, İlker ERYILMAZ^{2,*},

¹ Samsun Milli Eğitim Müdürlüğü, SAMSUN

^{2,*} Ondokuz Mayıs University, Faculty of Sciences and Arts, Department of Mathematics, SAMSUN
ORCID: /0000-0002-3590-892X

(Alınış / Received: 05.02.2019, Kabul / Accepted: 21.02.2019, Online Yayınlanma / Published Online: 30.04.2019)

Keywords

Grand Lorentz space,
Multiplication operator,
Compact operator

Abstract: Let (X, Σ, μ) be a σ -finite measure space, f be a complex-valued measurable function defined on X and $u: X \rightarrow \mathbb{C}$ be a measurable function such that $u \cdot f \in M(X, \Sigma)$ whenever $f \in M(X, \Sigma)$ where $M(X, \Sigma)$ is the set of all measurable functions defined on X . This gives rise to a linear transformation $M_u: M(X, \Sigma) \rightarrow M(X, \Sigma)$ defined by $M_u(f) = u \cdot f$, where the product of functions is pointwise. In case if $M(X, \Sigma)$ is a topological vector space and M_u is a continuous (bounded) operator, then it is called a multiplication operator induced by u . In this paper, multiplication operators on grand Lorentz spaces are defined and the fundamental properties such as boundedness, closed range, invertibility, compactness and closedness of these are characterized.

Büyük Lorentz Uzaylarında Çarpım Operatörleri

Anahtar Kelimeler

Büyük Lorentz uzayları,
Çarpım Operatörü,
Kompakt(tıkız) operatör

Öz: (X, Σ, μ) σ -sonlu bir ölçüm uzayı, $M(X, \Sigma)$, X üzerinde tanımlı tüm ölçülebilir fonksiyonlar ve $u: X \rightarrow \mathbb{C}$ ölçülebilir bir fonksiyon olsun. X üzerinde tanımlı kompleks değerli ölçülebilir herhangi bir f fonksiyonu için $u \cdot f \in M(X, \Sigma)$ olduğundan u fonksiyonu $M(X, \Sigma)$ üzerinde $M_u(f) = u \cdot f$, $M_u: M(X, \Sigma) \rightarrow M(X, \Sigma)$ şeklinde bir lineer operatör tanımlar. Eğer $M(X, \Sigma)$ bir topolojik vektör uzayı ve M_u operatöründe sürekli(sınırlı) bir operatör ise M_u 'ya u tarafından indirgenen bir çarpım operatörü denir. Bu çalışmada büyük Lorentz uzaylarında çarpım operatörleri tanımlandı ve sınırlılık, kapalı görüntü, terslenebilirlik, kompaktlık ve kapalılık gibi temel özellikleri karakterize edildi.

1. Introduction

Let (X, Σ, μ) be a σ -finite measure space and f be a complex-valued measurable function defined on X . The distribution function of f is defined by

$$D_f(\lambda) = \mu(\{x \in X : |f(x)| > \lambda\}) \text{ for all } \lambda \geq 0.$$

By f^* , we mean the non-increasing rearrangement of given function f as

$$f^*(t) = \inf\{\lambda > 0 : D_f(\lambda) \leq t\} = \sup\{\lambda > 0 : D_f(\lambda) > t\}, \quad t > 0.$$

Also, the average function of f is defined by

$$f^{**}(t) = \frac{1}{t} \int_0^t f^*(s) ds, \quad t > 0.$$

Note that $D_f(\cdot), f^*(\cdot)$ and $f^{**}(\cdot)$ are non-increasing and right continuous functions on $(0, \infty)$ [2]. For $p, q \in (0, \infty)$, we define

$$\|f\|_{p,q}^* = \begin{cases} \left(\frac{q}{p} \int_0^\infty \left(t^{\frac{1}{p}} f^*(t) \right)^q \frac{dt}{t} \right)^{\frac{1}{q}}, & q < \infty \\ \sup_{t>0} t^{\frac{1}{p}} f^*(t), & q = \infty \end{cases} \quad \text{and} \quad \|f\|_{p,q} = \begin{cases} \left(\frac{q}{p} \int_0^\infty \left(t^{\frac{1}{p}} f^{**}(t) \right)^q \frac{dt}{t} \right)^{\frac{1}{q}}, & q < \infty \\ \sup_{t>0} t^{\frac{1}{p}} f^{**}(t), & q = \infty \end{cases}.$$

For $0 < p, q < \infty$, the Lorentz spaces are denoted by $L(p, q)(X, \mu)$ (or in short, $L(p, q)(X)$) is defined to be the vector space of all (equivalence classes of) measurable functions f on X such that $\|f\|_{p,q}^* < \infty$ [2]. We know

that $\|f\|_{p,q}^* = \|f\|_p$ and so $L^p(X) = L(p, p)(X, \mu)$ where $L^p(X)$ is the usual Lebesgue space. Also, $L(p, q_1)(X, \mu) \subseteq L(p, q_2)(X, \mu)$ for $q_1 \leq q_2$. In particular,

$$L(p, q_1)(X) \subset L(p, p)(X) = L^p(X) \subset L(p, q_2)(X)$$

for $0 < q_1 < p < q_2 \leq \infty$ ([2, 6]). It is also known that if $1 < p < \infty$ and $1 \leq q \leq \infty$, then

$$\|f\|_{p,q}^* \leq \|f\|_{p,q} \leq \frac{p}{p-1} \|f\|_{p,q}^*$$

for each $f \in L(p, q)(X)$ and $(L(p, q)(X), \|\cdot\|_{p,q})$ is a Banach space [2].

The construction of the Lorentz space $L(p, q)(X)$ seems to be inspired by the Lebesgue space $L^p(X)$, where f is replaced by its non-increasing rearrangement and a suitable weight is multiplied. In [3], Iwaniec and Sbordone generalized the notion of Lebesgue space and introduced the so-called grand Lebesgue space denoted by $L^{(p)}$, which for $1 < p < \infty$ consists of all measurable functions f defined on $(0, 1)$ for which

$$\|f\|_p = \sup_{0 < \varepsilon < p-1} \left(\int_0^1 \varepsilon |f(x)|^{p-\varepsilon} dx \right)^{\frac{1}{p-\varepsilon}} < \infty.$$

The space L^p is a rearrangement invariant Banach function space for $0 < \varepsilon < p-1$ and $L^p \subset L^{p-\varepsilon} \subset L^{p-\varepsilon}$ holds [4]. For a measurable function f on $X = (0, 1)$, $\|f\|_{p,q}$ is defined as

$$\|f\|_{p,q} = \begin{cases} \sup_{0 < \varepsilon < q-1} \left(\frac{q}{p} \varepsilon \int_0^1 t^{\frac{q-1}{p}} (f^*(t))^{q-\varepsilon} dt \right)^{\frac{1}{q-\varepsilon}} & ; 1 < q < \infty \\ \sup_{0 < t < 1} t^{\frac{1}{p}} f^*(t) & ; q = \infty. \end{cases}$$

The grand Lorentz spaces $L_{p,q}$ consists of those complex-valued measurable functions defined on $X = (0, 1)$ such that $\|f\|_{p,q} < \infty$. Clearly, if $p = q$, then $L_{p,q}$ is equal to grand Lebesgue space L_p . To see this if one takes $p \in (1, \infty)$, then

$$\begin{aligned} \|f\|_{p,p} &= \sup_{0 < \varepsilon < p-1} \left(\frac{p}{p} \varepsilon \int_0^1 t^{\frac{p-1}{p}} (f^*(t))^{p-\varepsilon} dt \right)^{\frac{1}{p-\varepsilon}} = \sup_{0 < \varepsilon < p-1} \left(\frac{\varepsilon}{\mu(X)} \int_X (f^*(t))^{p-\varepsilon} dt \right)^{\frac{1}{p-\varepsilon}} \\ &= \sup_{0 < \varepsilon < p-1} \left(\int_0^1 |f(x)|^{p-\varepsilon} dx \right)^{\frac{1}{p-\varepsilon}} = \|f\|_p. \end{aligned}$$

Now, let's compare the norms of the classical Lorentz space with grand Lorentz spaces.

For $1 < p, q < \infty$, let's take a function $f \in L_{p,q}$. Then we get

$$\|f\|_{p,q} = \sup_{0 < \varepsilon < q-1} \left(\frac{q}{p} \varepsilon \int_0^1 t^{\frac{q-1}{p}} (f^*(t))^{q-\varepsilon} dt \right)^{\frac{1}{q-\varepsilon}} \leq \sup_{0 < \varepsilon < q-1} \left(\frac{q}{p} \varepsilon \int_0^1 \left(t^{\frac{1}{p}} f^{**}(t) \right)^{q-\varepsilon} t^{\frac{\varepsilon-1}{p}} dt \right)^{\frac{1}{q-\varepsilon}}$$

and using $t^{\frac{1}{p}} f^{**}(t) \leq \left(\frac{q}{p} \right)^{\frac{1}{q}} \|f\|_{pq}$, it can be obtained that

$$\begin{aligned} \|f\|_{p,q} &\leq \sup_{0 < \varepsilon < q-1} \left(\frac{q}{p} \varepsilon \int_0^1 \left(t^{\frac{1}{p}} f^{**}(t) \right)^{q-\varepsilon} t^{\frac{\varepsilon-1}{p}} dt \right)^{\frac{1}{q-\varepsilon}} \\ &\leq \sup_{0 < \varepsilon < q-1} \left(\frac{q}{p} \varepsilon \int_0^1 \left(\left(\frac{q}{p} \right)^{\frac{1}{q}} \|f\|_{pq} \right)^{q-\varepsilon} t^{\frac{\varepsilon-1}{p}} dt \right)^{\frac{1}{q-\varepsilon}} \leq \left(\frac{q}{p} \right)^{\frac{1}{q}} \|f\|_{pq}. \end{aligned}$$

In case of $q = \infty$, we get $\|f\|_{p,\infty} = \sup_{0 < t < 1} t^{\frac{1}{p}} f^*(t) \leq \sup_{0 < t < 1} t^{\frac{1}{p}} f^{**}(t) = \|f\|_{p,\infty}$.

Example 1.1. If E is a finite measurable set in Σ with characteristic function χ_E , then $\chi_E^*(t) = \chi_{[0, \mu(E)]}(t)$ and

$$\|\chi_E\|_{p,q} = \sup_{0 < \varepsilon < q-1} \left(\frac{q}{p} \varepsilon \int_0^{\frac{q-1}{\varepsilon}} (\chi_E^*(t))^{q-\varepsilon} dt \right)^{\frac{1}{q-\varepsilon}} = (q-1)(\mu(E))^{\frac{q}{p}}$$

for $1 < p, q < \infty$. On the other hand, if $q = \infty$, then $\|\chi_E\|_{p,\infty} = \sup_{0 < t < 1} t^p \chi_E^*(t) = (\mu(E))^{\frac{1}{p}}$. Therefore

$$\|\chi_E\|_{p,q} = \begin{cases} (q-1)(\mu(E))^{\frac{q}{p}} & , 1 < q < \infty \\ (\mu(E))^{\frac{1}{p}} & , q = \infty. \end{cases}$$

Let $u: X \rightarrow \mathbb{C}$ be a measurable function such that $u \cdot f \in M(X, \Sigma)$ whenever $f \in M(X, \Sigma)$. This gives rise to a linear transformation $M_u: M(X, \Sigma) \rightarrow M(X, \Sigma)$ defined by $M_u(f) = u \cdot f$, where the product of functions is pointwise. In case if $M(X, \Sigma)$ is a topological vector space and M_u is a continuous (bounded) operator, then it is called a multiplication operator induced by u .

Multiplication operators have been studied on various function spaces by various authors such as [1, 5-8]. Along the line of their arguments we will study the multiplication operators on the grand Lorentz spaces $L_{p,q}$. For this purpose, we will characterize the invertibility of M_u on $L_{p,q}$ and find necessary and sufficient conditions for Compact multiplication operators.

2. Bounded and Invertible Multiplication Operators

In this section boundedness and invertibility of multiplication operator M_u will be characterized in the terms of the boundedness and invertibility of the measurable function u respectively.

Example 2.1. Consider the complex-valued square integrable functions on the interval $[-3, 1]$. For each $k \geq 3$, define a sequence $(f_k)_{k \in \mathbb{N}}$ by $f_k: [-3, 1] \rightarrow \mathbb{C}, f_k(x) = x^{\frac{1}{k}}$. Since $\|f_k\|_2 = \frac{k}{k-2} \left[1 - (-3)^{\frac{k-2}{k}} \right] < \infty$ for all $k \geq 3$, we can say that $f_k \in L_2([-3, 1])$ for all $k \geq 3$. Let $u: [-3, 1] \rightarrow \mathbb{C}$ be a measurable function and define $M_u: L_2([-3, 1]) \rightarrow L_2([-3, 1])$ as $M_u(f) = u \cdot f$ for all $f \in L_2([-3, 1])$. If we examine the example, then we have that u must be invertible for M_u is invertible. It can also be observed that M_u is one to one (injective) on the set $supp(u) = \{x \in X : u(x) \neq 0\}$.

Remark 2.2. In general, the multiplication operators on measurable spaces is not injective. Indeed, for a measurable space (X, Σ, μ) , let $G = X - supp(u)$ with $\mu(G) > 0$. Then we have $(\chi_G \cdot u)(x) = \chi_G(x) \cdot u(x) = 0$ for all $x \in X$. This implies that $M_u(\chi_G) = 0$ and $Ker M_u \neq \{0\}$. Hence M_u is not injective.

On the contrary, if M_u is injective, then $\mu(X - supp(u))$ must be zero. On the other hand, if $\mu(X - supp(u)) = 0$ and μ is a complete measure, then $M_u(f) = 0$ implies that $f(x) \cdot u(x) = 0$ for all $x \in X$ and so $\{x \in X : f(x) \neq 0\} \subseteq X - supp(u)$ and $f = 0$ (a.e.) on X .

Proposition 2.3. M_u is injective on $K = L_{p,q}(supp(u)) = \{f \chi_{supp(u)} : f \in L_{p,q}(X)\}$.

Proof. To show that the operator M_u is injective, it is enough to show that $Ker M_u = \{0\}$. Indeed, if $M_u(\bar{f}) = 0$ with $\bar{f} \in K$, then $\bar{f}(x) \cdot u(x) = f(x) \cdot \chi_{supp(u)}(x) \cdot u(x) = 0$ for all $x \in X$. From this, we get $f(x) \cdot u(x) = 0$ for all $x \in supp(u)$ and so $f(x) = 0$. Therefore $\bar{f} = 0$ and $Ker M_u = \{0\}$.

Theorem 2.4. The linear transformation $M_u : f \rightarrow u \cdot f$ on grand Lorentz spaces $L_{p,q}$ is bounded for $1 < p, q \leq \infty$ if and only if u is essentially bounded. Moreover $\|M_u\| = \|u\|_\infty$.

Proof. Suppose that u is essentially bounded i.e. $u \in L_\infty(\mu)$ and $f \in L_{p,q}$. Since $|u(x)| \leq \|u\|_\infty$ for all $x \in X$, it can be written that $|(u \cdot f)(x)| \leq \|u\|_\infty |f(x)|$ and $\{x \in X : |(u \cdot f)(x)| > \lambda\} \subseteq \{x \in X : \|u\|_\infty |f(x)| > \lambda\}$. Therefore

$$D_{u \cdot f}(\lambda) = D_{M_u(f)}(\lambda) \leq D_f\left(\frac{\lambda}{\|u\|_\infty}\right)$$

and

$$\left\{ \lambda > 0 : D_f\left(\frac{\lambda}{\|u\|_\infty}\right) \leq t \right\} \subseteq \left\{ \lambda > 0 : D_{M_u(f)}(\lambda) \leq t \right\}, t > 0.$$

By using the definition of rearrangement, we have $(M_u(f))^* \leq \|u\|_\infty f^*(t)$ and

$$\begin{aligned} \|M_u(f)\|_{p,q} &= \sup_{0 < \varepsilon < q-1} \left(\frac{q}{p} \varepsilon \int_0^{\frac{q}{\varepsilon}} t^{\frac{q}{p}-1} \left((M_u(f))^*(t) \right)^{q-\varepsilon} dt \right)^{\frac{1}{q-\varepsilon}} \\ &\leq \sup_{0 < \varepsilon < q-1} \left(\frac{q}{p} \varepsilon \int_0^{\frac{q}{\varepsilon}} t^{\frac{q}{p}-1} (\|u\|_\infty f^*(t))^{q-\varepsilon} dt \right)^{\frac{1}{q-\varepsilon}} \\ &= \|u\|_\infty \sup_{0 < \varepsilon < q-1} \left(\frac{q}{p} \varepsilon \int_0^{\frac{q}{\varepsilon}} t^{\frac{q}{p}-1} (f^*(t))^{q-\varepsilon} dt \right)^{\frac{1}{q-\varepsilon}} = \|f\|_{p,q} \|u\|_\infty \end{aligned}$$

Consequently $\|M_u(f)\|_{p,q} \leq \|u\|_\infty \|f\|_{p,q}$. Also for $q = \infty$, we have

$$\|M_u(f)\|_{p,q} = \sup_{0 < t < 1} t^{\frac{1}{p}} (M_u(f))^*(t) \leq \sup_{0 < t < 1} t^{\frac{1}{p}} \|u\|_\infty f^*(t) = \|u\|_\infty \|f\|_{p,q}.$$

Thus, for any $f \in L_{p,q}$, for all $1 < p, q \leq \infty$ we obtain

$$\|M_u(f)\|_{p,q} \leq \|u\|_\infty \cdot \|f\|_{p,q} \quad (2.1)$$

Conversely, suppose that M_u is a bounded operator on grand Lorentz spaces for $1 < q < \infty$. If u is not an essentially bounded function, then we can write a set $G_k = \{x \in X : |u(x)| > k\}$ which has a positive measure for all $k \in \mathbb{R}$. Since the non-increasing rearrangement of the characteristic function χ_{G_k} is $(\chi_{G_k})^*(t) = \chi_{[0, \mu(G_k))}(t)$, we can get

$$\{x \in X : k \cdot \chi_{G_k}(x) > \lambda\} \subseteq \{x \in X : (\mathbf{u} \cdot \chi_{G_k})(x) > \lambda\}$$

and $D_{k \cdot \chi_{G_k}}(\lambda) \leq D_{M_u(\chi_{G_k})}(\lambda)$. Therefore

$$\{\lambda > 0 : D_{M_u(\chi_{G_k})}(\lambda) \leq t\} \subseteq \{\lambda > 0 : D_{k \cdot \chi_{G_k}}(\lambda) \leq t\}$$

for all $t > 0$ and $\inf\{\lambda > 0 : D_{k \cdot \chi_{G_k}}(\lambda) \leq t\} \leq \inf\{\lambda > 0 : D_{M_u(\chi_{G_k})}(\lambda) \leq t\}$.

As a result, $(M_u(\chi_{G_k}))^*(t) \geq k \cdot (\chi_{G_k})^*(t)$ and so

$$\begin{aligned} \|M_u(\chi_{G_k})\|_{p,q} &= \sup_{0 < \varepsilon < q-1} \left(\frac{q}{p} \varepsilon \int_0^{\frac{q}{p} \varepsilon} t^{\frac{q}{p}-1} \left((M_u(\chi_{G_k}))^*(t) \right)^{q-\varepsilon} dt \right)^{\frac{1}{q-\varepsilon}} \\ &\geq \sup_{0 < \varepsilon < q-1} \left(\frac{q}{p} \varepsilon \int_0^{\frac{q}{p} \varepsilon} t^{\frac{q}{p}-1} \left((k \cdot \chi_{G_k})^*(t) \right)^{q-\varepsilon} dt \right)^{\frac{1}{q-\varepsilon}} = k \| \chi_{G_k} \|_{p,q}. \end{aligned}$$

Besides these, for $q = \infty$ we have

$$\begin{aligned} \|M_u(\chi_{G_k})\|_{p,q} &= \sup_{0 < t < 1} t^{\frac{1}{p}} (M_u(\chi_{G_k}))^*(t) \\ &\geq \sup_{0 < t < 1} t^{\frac{1}{p}} k (\chi_{G_k})^*(t) = k \cdot \| \chi_{G_k} \|_{p,q}. \end{aligned}$$

This contradicts the boundedness of M_u . Hence u must be essentially bounded. Now for any $\delta > 0$, let $S = \{x \in X : |u(x)| \geq \|u\|_\infty - \delta\}$. Then

$$\{x \in X : (\|u\|_\infty - \delta) \chi_S(x) > \lambda\} \subseteq \{x \in X : (\mathbf{u} \cdot \chi_S)(x) > \lambda\}$$

and $D_{(\|u\|_\infty - \delta) \chi_S}(\lambda) \leq D_{\mathbf{u} \cdot \chi_S}(\lambda)$. Therefore

$$\{\lambda > 0 : D_{\mathbf{u} \cdot \chi_S}(\lambda) \leq t\} \subseteq \{\lambda > 0 : D_{(\|u\|_\infty - \delta) \chi_S}(\lambda) \leq t\}.$$

By using the infimum property, we get

$$\inf\{\lambda > 0 : D_{\mathbf{u} \cdot \chi_S}(\lambda) \leq t\} \geq \inf\{\lambda > 0 : D_{(\|u\|_\infty - \delta) \chi_S}(\lambda) \leq t\}$$

and $(M_u(\chi_S))^*(t) \geq (\|u\|_\infty - \delta) (\chi_S)^*(t)$ so $\|M_u\| \geq (\|u\|_\infty - \delta)$. As a result, $\|M_u\| \geq \|u\|_\infty$ and $\|M_u\| = \|u\|_\infty$ with 2.1.

We already know that if X and Y are Banach spaces and $F \in \mathcal{B}(X, Y)$, then F is bounded below if and only if F is 1-1 and has closed range. According to this knowledge, we can give the following corollary.

Corollary 2.5. $M_u : L_{p,q}(supp(u)) \rightarrow L_{p,q}(supp(u))$ has closed range if and only if M_u is bounded below on $L_{p,q}(supp(u))$.

This result is clear. Since M_u is 1-1 on $L_{p,q}(supp(u))$ by Proposition 2.3. Moreover, if μ is a complete measure and $u \neq 0$ a.e. on X , then we have the following result.

Corollary 2.6. If μ is a complete measure and $u \neq 0$ a.e. on X , then $M_u : L_{p,q}(X, \Sigma, \mu) \rightarrow L_{p,q}(X, \Sigma, \mu)$ has closed range if and only if M_u is bounded below on $L_{p,q}(X, \Sigma, \mu)$.

Theorem 2.7. The set of all multiplication operators on the grand Lorentz spaces $L_{p,q}$ for $1 < p, q < \infty$ is a maximal abelian subalgebra of $B(L_{p,q}, L_{p,q})$, Banach algebra of all bounded linear operators on $L_{p,q}$.

Proof. Let $H = \{M_u : u \in L_\infty\}$. Then H is a vector space under operations $+$: $\frac{H \times H}{(M_u, M_v)} \rightarrow \frac{H}{M_{u+v}}$, \cdot : $\frac{H \times H}{(k, M_u)} \rightarrow \frac{H}{M_{ku}}$ and a subalgebra of $B(L_{p,q}, L_{p,q})$. Consider the composition of operators such as $M_u \circ M_v = M_{uv}$, where $M_u, M_v \in H$. Let $u, v \in L_\infty$. Then $|u(x)| \leq \|u\|_\infty$ and $|v(x)| \leq \|v\|_\infty$ implies that $\|uv\|_\infty \leq \|u\|_\infty \|v\|_\infty$ and so the product is an inner operation, moreover the composition is associative, commutative and distributive respect to the sum and the scalar product, thus we can conclude that H is a subalgebra of $B(L_{p,q}, L_{p,q})$. Let T be any operator on $L_{p,q}$ such that $T \circ M_u = M_u \circ T$ for every $u \in L_\infty(\mu)$. Consider the unit function $e : X \rightarrow \square$ defined by $e(x) = 1$ for all $x \in X$ and $v = Te$. Then $T(\chi_E) = T(M_{\chi_E} e) = M_{\chi_E}(T(e)) = \chi_E v = M_v \circ \chi_E$ for all measurable set $E \in \Sigma$. Consequently $T = M_v$. Now, let us check that $v \in L_\infty(\mu)$ or not. If possible, the set $G_k = \{x \in X : |v(x)| > k\}$ has a positive measure for each $k \in \square$. Then

$$\|T(\chi_{G_k})\|_{p,q} = \|M_v(\chi_{G_k})\|_{p,q} \geq k \cdot \|\chi_{G_k}\|_{p,q}.$$

Therefore T is an unbounded operator that is a contradiction to the fact that T is bounded. Therefore $v \in L_\infty(\mu)$ and M_v is bounded by Theorem 2.4. Now, let $f \in L_{p,q}$ and $(s_n)_{n \in \square}$ be a nondecreasing sequence of measurable simple functions such that $\lim_{n \rightarrow \infty} s_n = f$. Then $T(f) = T(\lim_{n \rightarrow \infty} s_n) = \lim_{n \rightarrow \infty} T(s_n) = \lim_{n \rightarrow \infty} M_v(s_n) = M_v \lim_{n \rightarrow \infty} (s_n) = M_v(f)$. Therefore, we can conclude that $T \in H = \{M_u : u \in L_\infty\}$.

Corollary 2.8. The multiplication operator M_u on $L_{p,q}$ for $1 < p, q < \infty$ is invertible if and only if u is invertible in L_∞ .

Proof. Let M_u be invertible. Then there exists a $T \in B(L_{p,q}, L_{p,q})$ such that $T \circ M_u = M_u \circ T = I$. Let $M_v \in H$. Then $M_u \circ M_v = M_v \circ M_u$ and

$$T \circ M_v \circ (M_u \circ T) = (T \circ M_u) \circ M_v \circ T \Rightarrow T \circ M_v = M_v \circ T.$$

Therefore, we can conclude that T commute with H and so $T \in H$ by Theorem 2.7. Then there exists a $w \in L_\infty$ such that $T = M_w$ and $M_u \circ M_w = M_w \circ M_u = I$. This implies that $uw = wu = 1$ a.e, which means that u is invertible on L_∞ . On the other hand, assume that u is invertible on L_∞ , that is $\frac{1}{u} \in L_\infty$. Then $M_u \circ M_{1/u} = M_{1/u} \circ M_u = I$ which means that M_u is invertible on $B(L_{p,q}, L_{p,q})$.

3. Compact Multiplication Operators

In this section we will characterize the compact multiplication operators. A compact operator is a linear operator L from a Banach space X to another Banach space Y , such that the image under L of any bounded subset of X is a relatively compact subset (has compact closure) of Y . Such an operator is necessarily a bounded operator, and so continuous

Definition 3.1. Let T be an operator. A subspace K of a normed space X is said to be invariant under T (or simply T -invariant) whenever $T(K) \subseteq K$.

Lemma 3.2. Let $T : A \rightarrow A$ be an operator. If T is compact and N is a closed T -invariant subspace of A , then $T|_N$ is also compact.

Proof. Let $(g_k)_{k \in \mathbb{N}}$ be a bounded sequence in $N \subseteq A$. Then compactness property of T implies that there exists a subsequence $(g_{k_n})_{n \in \mathbb{N}}$ of $(g_k)_{k \in \mathbb{N}}$ such that $(T(g_{k_n}))_{n \in \mathbb{N}}$ converges in A . Since $(g_{k_n})_{n \in \mathbb{N}} \subseteq N$ and $(T(g_{k_n}))_{n \in \mathbb{N}} \subseteq T(N)$, then $(T(g_{k_n}))_{n \in \mathbb{N}}$ converges on N . Hence $T|_N$ is compact.

Theorem 3.3. Let M_u be a compact operator. Let $G_\delta(u) = \{x \in X : |u(x)| \geq \delta\}$ and $L_{p,q}(G_\delta(u)) = \{f \chi_{G_\delta(u)} : f \in L_{p,q}\}$ for any $\delta > 0$. Then $L_{p,q}(G_\delta(u))$ is closed invariant subspace of $L_{p,q}$ under M_u . Moreover M_u is a compact operator on $L_{p,q}(G_\delta(u))$.

Proof. We first show that $L_{p,q}(G_\delta(u))$ is a subspace of $L_{p,q}$. Let $\tilde{f}, \tilde{g} \in L_{p,q}(G_\delta(u))$ and $a, b \in \mathbb{C}$. Since $\tilde{f} = f \chi_{G_\delta(u)}$ and $\tilde{g} = g \chi_{G_\delta(u)}$ for any $f, g \in L_{p,q}$, we have $a\tilde{f} + b\tilde{g} = af \chi_{G_\delta(u)} + bg \chi_{G_\delta(u)} = (af + bg) \chi_{G_\delta(u)}$. By the definition of $M_u : L_{p,q}(G_\delta(u)) \rightarrow L_{p,q}(X, \Sigma, \mu)$, we have $M_u(\tilde{f}) = u \cdot \tilde{f} = u \cdot f \chi_{G_\delta(u)}$. Therefore $L_{p,q}(G_\delta(u))$ is an invariant subspace of $L_{p,q}$ under M_u . Now, let us show that $\overline{L_{p,q}(G_\delta(u))} \subseteq L_{p,q}(G_\delta(u))$. Let \tilde{g} be in $\overline{L_{p,q}(G_\delta(u))}$. Then there exists a sequence \tilde{g}_k in $L_{p,q}(G_\delta(u))$ such that $\tilde{g}_k \rightarrow \tilde{g}$ where $g_k \in L_{p,q}$ and $\tilde{g}_k = g_k \chi_{G_\delta(u)}$ for each $k \in \mathbb{N}$.

Since \tilde{g}_k is a Cauchy sequence in $\overline{L_{p,q}(G_\delta(u))}$, it can be written that for all $\varepsilon > 0$, there exists a $k_0 \in \mathbb{N}$ such that $\|\tilde{g}_k - \tilde{g}_r\|_{p,q} < \varepsilon$ for all $k, r > k_0$. Hence for all $k, r > k_0$, we can find a $\delta > 0$ such that

$$\delta(g_k - g_r) \leq (g_k - g_r) \chi_{G_\delta(u)} \text{ and } \delta(g_k - g_r)^* \leq (g_k - g_r)^* \chi_{[0, \mu(G_\delta(u))]}$$

Then $\|g_k - g_r\|_{p,q} \leq \alpha \|\tilde{g}_k - \tilde{g}_r\|_{p,q}$ for any constant α . Therefore $\{g_k\}_{k \in \mathbb{N}}$ is also a Cauchy sequence in $L_{p,q}$. Since $L_{p,q}$ is a Banach space, we can write that $g_k \rightarrow g$ for an element $g \in L_{p,q}$. Thus

$$\|g_k \chi_{G_\delta(u)} - g \chi_{G_\delta(u)}\|_{p,q} \leq \|g_k - g\|_{p,q}$$

and $\tilde{g}_k \rightarrow \tilde{g}$. Consequently $\tilde{g} \in L_{p,q}(G_\delta(u))$ and $M_u|_{L_{p,q}(G_\delta(u))}$ is a compact operator by Lemma 3.2.

Theorem 3.4. A multiplication operator M_u on $L_{p,q}$ is compact if and only if $L_{p,q}(G_\delta(u))$ is finite dimensional for each $\delta > 0$, where

$$G_\delta(u) = \{x \in X : |u(x)| \geq \delta\} \text{ and } L_{p,q}(G_\delta(u)) = \{f \chi_{G_\delta(u)} : f \in L_{p,q}\}.$$

Proof. If M_u is a compact operator, then $L_{p,q}(G_\delta(u))$ is a closed invariant subspace of $L_{p,q}$ under M_u and $M_u|_{L_{p,q}(G_\delta(u))}$ is a compact operator by Theorem 3.3. Let's take any $x \in X$. If $x \notin G_\delta(u)$ then for each $f \in L_{p,q}$, we

can obtain $\left(M_u|_{L_{p,q}(G_\delta(u))}(f)\right)^* = \left(u \cdot f \chi_{G_\delta(u)}\right)^* = 0$. Therefore $M_u|_{L_{p,q}(G_\delta(u))} = 0$. If $x \in G_\delta(u)$, then

$|u(x)| \geq \delta$ and note that $\left|(u \cdot f \chi_{G_\delta(u)})(x)\right| \geq \delta \left|(f \chi_{G_\delta(u)})(x)\right|$, $D_{f \chi_{G_\delta(u)}}\left(\frac{\lambda}{\delta}\right) \leq D_{(u \cdot f \chi_{G_\delta(u)})}(\lambda)$. Therefore

$\left\{\lambda > 0 : D_{(u \cdot f \chi_{G_\delta(u)})}(\lambda) \leq t\right\} \subseteq \left\{\lambda > 0 : D_{f \chi_{G_\delta(u)}}\left(\frac{\lambda}{\delta}\right) \leq t\right\}$ for all $t > 0$. By using this inclusion, we have

$$\delta \cdot \left(f \chi_{G_\delta(u)}\right)^*(t) \leq \left(u \cdot f \chi_{G_\delta(u)}\right)^*(t)$$

and

$$\begin{aligned} \left\|M_u\left(f \chi_{G_\delta(u)}\right)\right\|_{p,q} &= \sup_{0 < \varepsilon < q-1} \left(\frac{q}{p} \varepsilon \int_0^1 t^{\frac{q}{p}-1} \left(\left(M_u\left(f \chi_{G_\delta(u)}\right)\right)^*(t)\right)^{q-\varepsilon} dt\right)^{\frac{1}{q-\varepsilon}} \\ &\geq \sup_{0 < \varepsilon < q-1} \left(\frac{q}{p} \varepsilon \int_0^1 t^{\frac{q}{p}-1} \left(\delta \cdot \left(f \chi_{G_\delta(u)}\right)^*(t)\right)^{q-\varepsilon} dt\right)^{\frac{1}{q-\varepsilon}} \\ &\geq \delta \cdot \left\|f \chi_{G_\delta(u)}\right\|_{p,q}. \end{aligned}$$

Thus, in either case $M_u|_{L_{p,q}(G_\delta(u))}$ has a closed range in $L_{p,q}(G_\delta(u))$ and invertible. Being compact implies that $L_{p,q}(G_\delta(u))$ is finite dimensional.

Conversely, suppose that $L_{p,q}(G_\delta(u))$ is finite dimensional for each $\delta > 0$. In particular, $L_{p,q}(G_{1/n}(u))$ is finite dimensional for each $n \in \mathbb{N}$. Define a sequence $u_n : X \rightarrow \mathbb{C}$ as

$$u_n(x) = \begin{cases} u(x), & |u(x)| \geq 1/n \\ 0, & |u(x)| < 1/n \end{cases}$$

for all $n \in \mathbb{N}$. Since $u \in L_\infty$, it's easy to see that $u_n \in L_\infty$ for each $n \in \mathbb{N}$. Moreover for any $f \in L_{p,q}$,

$$D_{(u_n - u)f}(\lambda) = \mu\left(\{x \in X : |(u_n - u)f(x)| > \lambda\}\right)$$

and

$$\left((u_n - u)f\right)^*(t) = \inf\{\lambda > 0 : D_{(u_n - u)f}(\lambda) \leq t\}.$$

For any $\lambda > 0$, if $x \in G_{1/n}(u)$ then $\left((u_n - u)f\right)^*(t) = 0$ and $(u_n - u)f = 0$. If $x \notin G_{1/n}(u)$, then we get

$\left((u_n - u)f\right)^*(t) \leq \frac{1}{n} f^*(t)$ and $\left\|M_{(u_n - u)}(f)\right\|_{p,q} \leq \frac{1}{n} \|f\|_{p,q}$. This implies that M_{u_n} converges to M_u uniformly.

Since $L_{p,q}(G_{1/n}(u))$ is finite dimensional so M_{u_n} is finite rank operator. Therefore, M_{u_n} is a compact operator and so M_u is.

References

- [1] Abrahamese, MB.1978. Multiplication Operators, Lecture Notes in Math. 693, Springer-Verlag, 17-36.
- [2] Hunt, RA. 1966. On $L(p, q)$ spaces, L'enseignement Mathematique, TXII-4, 249-276.
- [3] Iwaniec, T., Sbordone, C. 1992. On the integrability of the Jacobian under minimal hypotheses, Arch. Rational Mech. Anal. 119, no. 2, 129–143.
- [4] Jain, P., Kumari, S. 2012. On grand Lorentz spaces and the maximal operator. Georgian Math. J. , 19, no. 2, 235–246.
- [5] Komal, BS., Gupta, S. 2001. Multiplication operators between Orlicz spaces, Integral Equations and Operator Theory, 41, 324-330.
- [6] Nakai, E. 1996. Pointwise multipliers on the Lorentz spaces, Mem. Osaka Kyoiku Univ., Natur. Sci. Appl. 45, No. 1, 1-7.
- [7] Singh, RK., Manhas, JS. 1993. Composition operators on function spaces, North Holland Math. Studies 179, Elsevier Science Publications Amsterdam, New York.
- [8] Takagi, H. 1993. Fredholm weighted composition operators, Integral Equations and Operators and Operator Theory, 16, 267-276.

MRI Kontrast Maddelerinin Gelişimi için Kuantum Kimyasal ve QSAR Çalışmaları

Murat Saraçoğlu*¹, Sedat Giray Kandemirli², Hakan Sezgin Sayiner³, Murat Alper Başaran⁴,
Fatma Kandemirli⁵

*¹Erciyes University, Faculty of Education, 38039, Kayseri, Turkey

²Uludağ University, Faculty of Medicine Radiology Department, 16059, Bursa, Turkey

³Adıyaman University, Faculty of Medicine, Department of Infectious Diseases, 02040, Adıyaman, Turkey

⁴Alanya Alaaddin Keykubat University, Faculty of Engineering, Department of Management Engineering, 07425, Antalya, Turkey

⁵Kastamonu University, Faculty of Engineering and Architecture, Biomedical Engineering Department, 37150, Kastamonu, Turkey

(Alınış / Received: 29.01.2019, Kabul / Accepted: 17.02.2019, Online Yayınlanma / Published Online: 30.04.2019)

Anahtar Kelimeler

Polyamino-polikarboksilik ligandlar,
MRI Kontrast Ajanlar,
DFT,
B3LYP,
Kuantum kimyasal hesaplamalar,
İstatistiksel analiz.

Öz: Bileşiklerin stabilitesini belirlemek için poliamino-polikarboksilik ligandları çalıştık. Bileşikler, Gaussian Program kullanılarak B3LYP / 6-311G(d,p) ve B3LYP / 6-311 ++ G(d,p) teorisi ile hesaplanmıştır. Tüm istatistiksel analizler sırasıyla; Mat Lab 7.9 ve SPSS 20.0 adı verilen iki farklı yazılım kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Gd (III) komplekslerinin kararlılık sabitlerinin tahmini için 37 poliamino-polikarboksilik ligandlarının için E_{HOMO} , E_{LUMO} , E_{HOMO} ve E_{LUMO} arasındaki enerji farkı (ΔE), iyonlaşma enerjisi (IE), mutlak elektronegatiflik (χ), mutlak sertlik (η), yumuşaklık (σ) gibi elektronik ve moleküler özellikler nötr moleküller için gaz fazı için DFT/B3LYP/6-311G(d,p) ve 6-311++ G(2d,2p) yöntemleri ile hesaplanmıştır.

The Quantum Chemical and QSAR Studies for the Development of MRI Contrast

Keywords

Polyamino-polycarboxylic ligands,
MRI Contrast Agents,
DFT,
B3LYP,
Quantum chemical calculations,
Statistical analysis

Abstract: We have studied polyamino-polycarboxylic ligands to determine the stability of the compounds. The compounds were calculated with the theory of B3LYP/6-311G(d,p) and B3LYP/6-311++G(d,p) by using Gaussian Program. All statistical analysis was conducted employing two different soft wares called Mat Lab 7.9 and SPSS 20.0, respectively. The electronic and molecular properties, such as the polarizability, E_{HOMO} , E_{LUMO} , the energy gap between E_{HOMO} and E_{LUMO} (ΔE), Ionization energy (IE), absolute electronegativity (χ), absolute hardness (η), softness (σ), of 37 polyamino-polycarboxylic ligands for prediction of stability constants of Gd(III) complexes were calculated with the DFT/B3LYP/6-311G(d,p) and 6-311++G(2d,2p) methods for gas phase for neutral molecules.

1. Introduction

The lanthanide series fall into a category called “hard” acids due to bonding with other elements is considered largely ionic or electrostatic. Gd^{3+} is toxic in biological systems due to having an ionic radius of 0.99 Å and very nearly equal to that of divalent Ca^{2+} . Gd^{3+} can make 8–9 inner-sphere water molecules each contributing a small amount of electron density to the highly charged Gd^{3+} ion, as a hydrated “aqua” ion below pH-6. When Gd ion makes chelation with ligands, ligands are placed instead of some of the water molecules. Ligands have more basic donor atoms such as amines (N) or carboxylates (O). The factors that affect the stability of the complex are temperature, pH, the structure of the ligand, charges on the central metal atom. As a general rule, as a general rule of thumb, Gd^{3+} ion makes the most stable complexes with the most basic donor atoms. Magnetic Resonance Imaging (MRI) contrast agents are used to enhance image contrast and to facilitate the appearance of lesions. Contrast materials used in RG studies are classified into two categories depending on the relaxation process [1-3]. T1 agents shorten the T1 relaxation times, causing the tissues to appear white (bright). T1 agents consist of gadolinium and manganese salts, and T2 agents shorten the T1 relaxation times, causing the tissues to appear white (bright). T2 agents are iron oxide-containing agents. Based on the tissues they act on contrast materials are classified as Nonspecific (extracellular) Agents which are gadolinium contrast agents used in routine MRI applications and tissue specific agents which are produced for targeted organs. These include agents for hepatocytes, agents for early nonspecific-late hepatocytes, agents for the reticuloendothelial system (RES), early-stage blood pools, and late-onset RES agents [4-6].

Gadolinium(III)[4,10-bis-carboxymethyl-7-({3-[3-(4-dimethylaminophenyl)-2-oxo-2H-chromen-7-yloxy]-propylcarbamoyl)methyl)-1,4,7,10-tetraazacyclododec-1-yl]-acetate), a myelin-targeting MR agent termed MIC was developed MIC has got coumarin binding moiety. It was demonstrated that MIC binds to myelin sheaths in vitro and in vivo and could be used to characterize myelin distribution based on T1w MR imaging in murine models [6, 7]. Then Gadolinium (E)-2,2',2''-(10-(2-((3-(4-((4-(4-(methylamino)styryl)phenoxy)methyl)-1H-1,2,3-triazol-1-yl)propyl)amino)-2-oxoethyl)-1,4,7,10-tetraazacyclododecane-1,4,7-triyl)triacetic acetate was synthesized a second type of myelin-targeted MR contrast agent bearing an aminostilbene moiety and compound binding to myelin was demonstrated both in vitro and in situ by fluorescent microscopy and in vivo by T1w MR imaging [8]. Porphyrazines (Pz) being a sub-class of tetrapyrrole macrocycles have been investigated for a number of tumor biology applications such as photodynamic therapy and near-infrared optical imaging [9-11]. Second generation Pz-Gd(III) conjugates were synthesized and reported that these compounds were indeed taken up by cells in vitro, warranting extensive in vivo MRI studies in athymic nude mouse tumor models of human breast cancer [12].

The first gadolinium-based contrast agent (GBCA), Gadopentetate dimeglumine (Magnevist) designed for magnetic resonance imaging (MRI) in 1988 and started to be used clinically. The reason for using Gd (III) ion is the appropriate combination of a large magnetic moment (spin-only $\mu_{\text{eff}} = \frac{1}{4} 7.94 \text{ BM}$, from seven half-filled f orbitals) and long electron spin deceleration time (10^{-8} to 10^{-9} s, from symmetric S electronic state) [13]. Gd^{3+} ion, in its free is exceptionally toxic for living systems, is a hard metal ion. It acts as an acceptor and form complexes with ligands.

Kiani-Anbouhi et al performed the quantitative structure-property relationships models for prediction of stability constants of Gd(III) complexes with polyamino-polycarboxylic ligands and they found a good quality of model ($Q^2=0.916$ and $R^2=0.935$) enables reliable prediction of stability constants for unmeasured complexes [14].

We have studied polyamino-polycarboxylic ligands to determine the stability of the compounds. The descriptors, such as exact E_{HOMO} , E_{LUMO} , ΔE , chemical hardness, chemical softness, chemical potential, sum of electronic and zero point energies, dipole moment, electronegativity, polarizability, electrophilicity index of the compounds were calculated with the theory of B3LYP/6-311G(d,p) and B3LYP/6-311++G(d,p) by using Gaussian Program [15]. All statistical analysis was conducted employing two different soft wares called Mat Lab 7.9 and SPSS 20.0, respectively.

2. Material and Method

The molecular sketches of the polyamino-polycarboxylic ligands were drawn using the GaussView 5.0. All the quantum chemical calculations were performed with complete geometry optimizations using the Becke's three-parameter hybrid functional [16-18] combined with the Lee, Yang, and Parr (LYP) correlation functional [19] denoted as B3LYP in the density functional theory with a standard Gaussian-09 software package [15]. 6-311G(d,p) and 6-311++G(2d,2p) basis sets were used for all the quantum chemical calculations. Fukui functions were performed with the AOMix program [20, 21] using single point calculations with the B3LYP/6-311G(d,p) basis sets.

In this study, 37 polyamino-polycarboxylic ligands (see **Table 1**) were chosen to describe the structure of the molecules constituting the series to study/ the highest occupied molecular orbital energy (E_{HOMO} , eV), the lowest

unoccupied molecular orbital energy (E_{LUMO} , eV) and other quantum chemical parameters were calculated. Recently, optimization of molecules with different basic sets and discussion of the results are widely used [22-42].

2.1. Computational details

In the section of this study, all calculations were carried out using DFT/B3LYP method. Optimization of synthesized molecules was performed with 6-311G(d,p) and 6-311++G(2d,2p) basis sets of Gaussian program [15]. This basis set is known as one of the basis sets that gives more accurate results in terms of the determination of electronic and geometries properties for a wide range of organic compounds [43]. Quantum chemical parameters for synthesized molecules such as the energy of the highest occupied molecular orbital (E_{HOMO}), the energy of the lowest unoccupied molecular orbital (E_{LUMO}), HOMO-LUMO energy gap (ΔE), ionization energy (IE), chemical hardness (η), softness (σ), electronegativity (χ), chemical potential (μ), dipole moment (DM), global electrophilicity (ω), sum of the total negative charge (TNC) and sum of electronic and zero-point energies (SEZPE) for gas phase of neutral molecules were calculated and discussed.

Molecular properties, related to the reactivity and selectivity of the compounds, were estimated following the Koopmans's theorem relating the energy of the HOMO and the LUMO. According to the DFT-Koopmans' theorem [44], the ionization potential (IE) can be approximated as the negative value of the highest occupied molecular orbital energy (E_{HOMO}), such as shown in equation 1:

$$IE = -E_{HOMO} \quad (1)$$

The negative value of the lowest unoccupied molecular orbital energy (E_{LUMO}) is similarly related to the electron affinity A [45] such as shown in equation 2:

$$A = -E_{LUMO} \quad (2)$$

Electronegativity is estimated using the following the equation from E_{HOMO} and E_{LUMO} :

$$\chi \cong -\frac{1}{2}(E_{HOMO} + E_{LUMO}) \quad (3)$$

Chemical hardness (η) measures the resistance of an atom to a charge transfer [46], it is estimated by using the equation from E_{HOMO} and E_{LUMO} :

$$\eta \cong -\frac{1}{2}(E_{HOMO} - E_{LUMO}) \quad (4)$$

Chemical potential (μ) and electronegativity (χ) can be calculated with the help of the following equations [43] from E_{HOMO} and E_{LUMO} :

$$\mu = -\chi \cong \frac{E_{HOMO} + E_{LUMO}}{2} \quad (5)$$

Electron polarizability, called chemical softness (σ), describes the capacity of an atom or group of atoms to receive electrons [46] and is estimated by using the equation:

$$\sigma = \frac{1}{\eta} \cong -\frac{2}{(E_{HOMO} - E_{LUMO})} \quad (6)$$

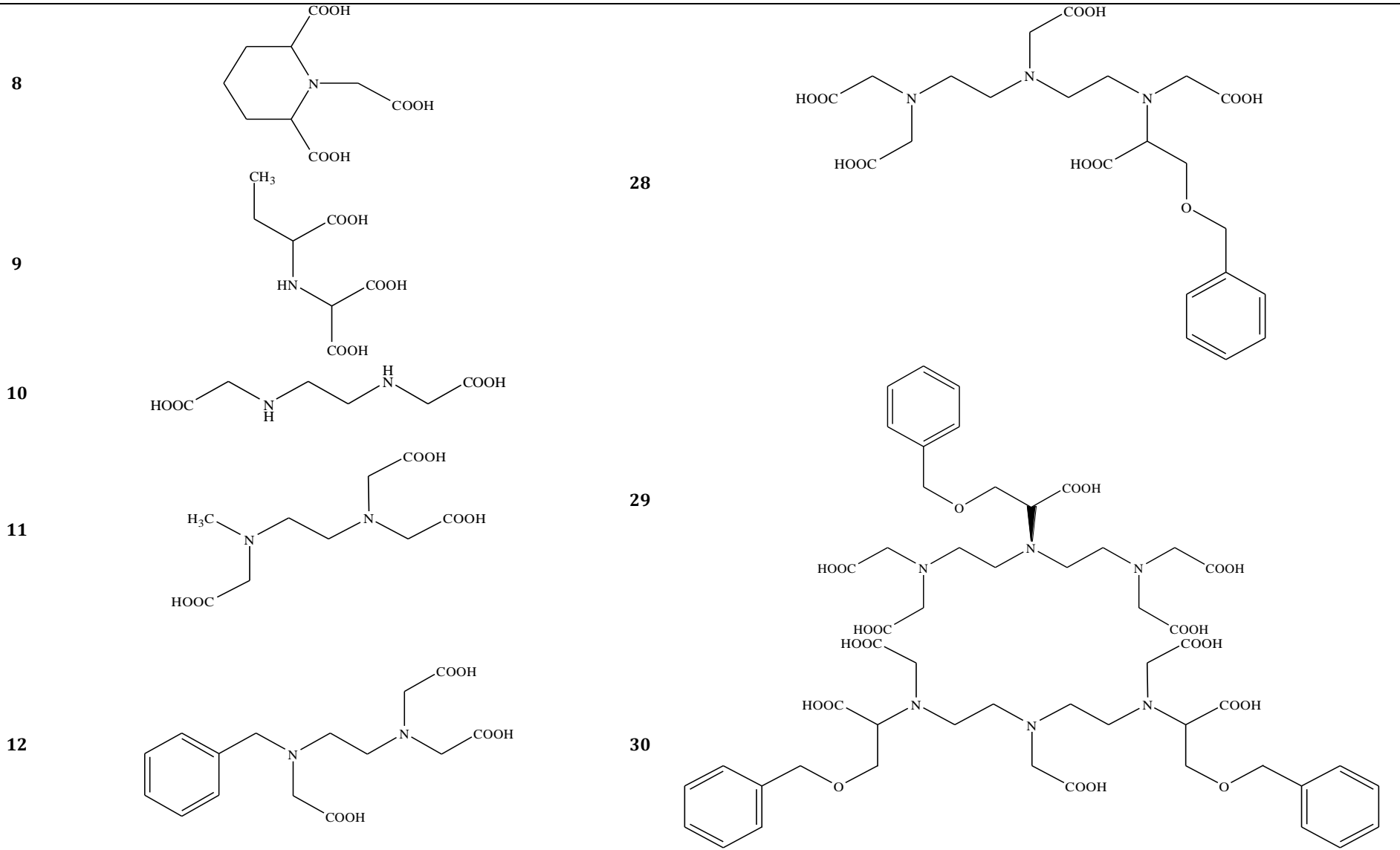
The global electrophilicity (ω) is a useful reactivity descriptor that can be used to compare the electron-donating abilities of molecules [47]. Global electrophilicity index is estimated by using the electronegativity and chemical hardness parameters through the equation:

$$\omega = \frac{\chi^2}{2\eta} \quad (7)$$

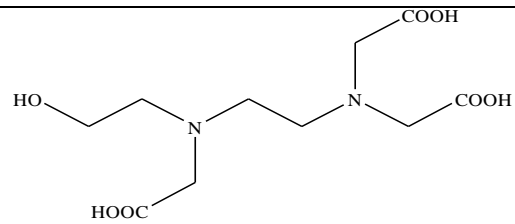
A high value of electrophilicity describes a good electrophile while a small value of electrophilicity describes a good nucleophile [48].

Table 1. The structure of investigated compounds.

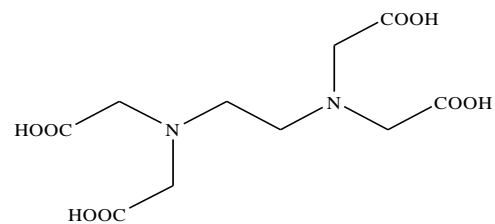
No	Compounds	No	Compounds
1		24	
2		25	
3		26	
4		27	
5			
6			
7			



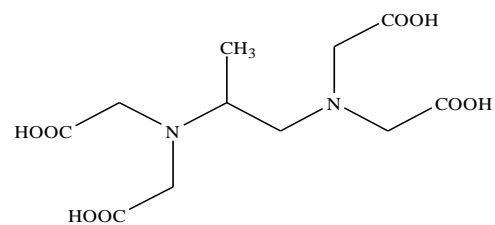
13



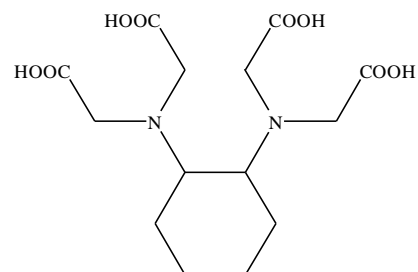
14



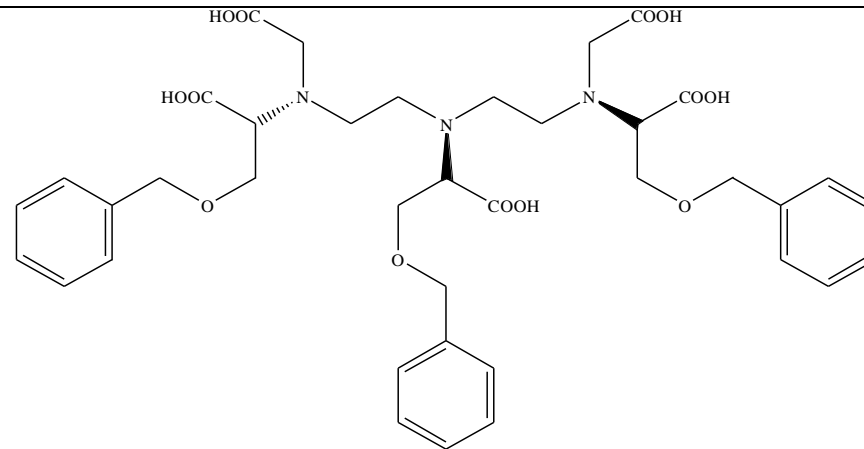
15



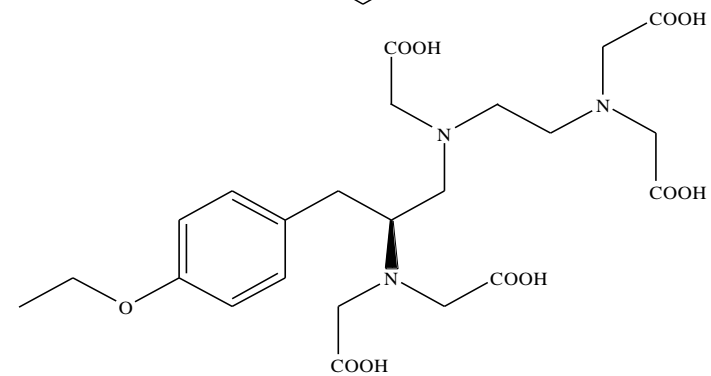
16



31

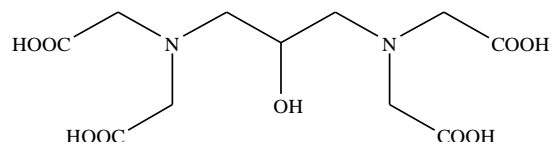


32

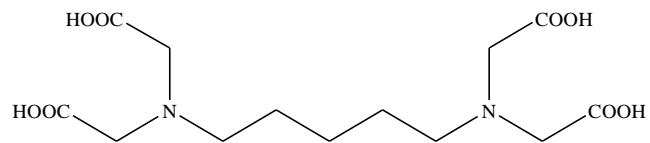


33

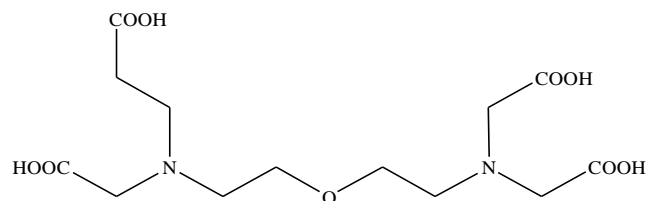
17



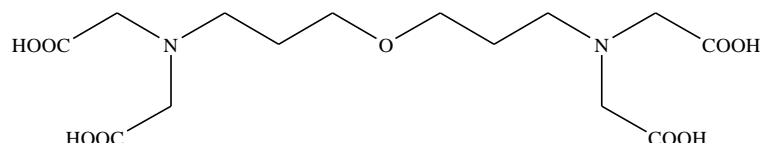
18



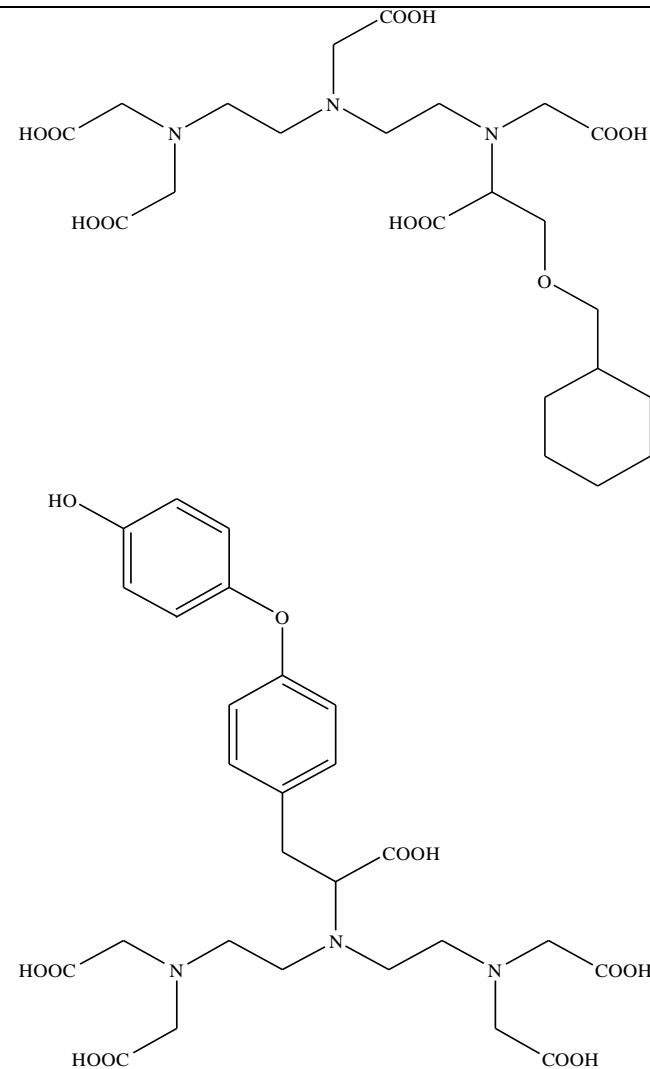
19

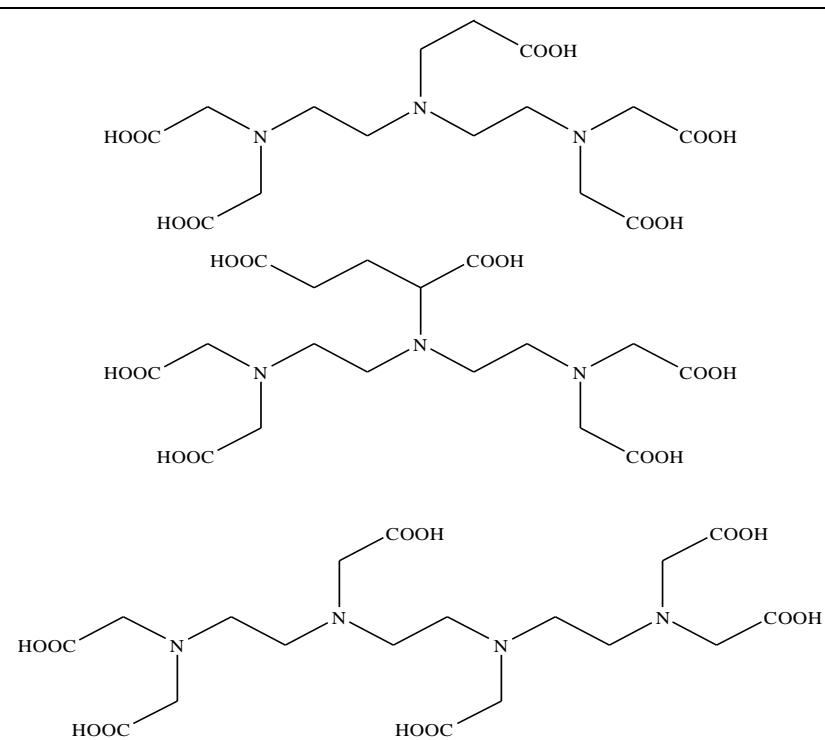
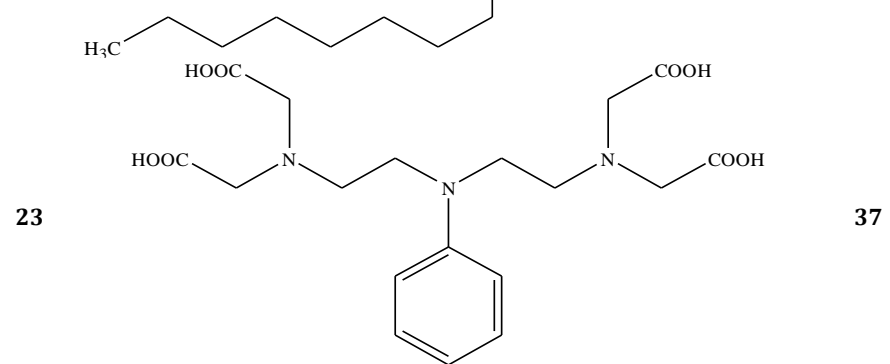
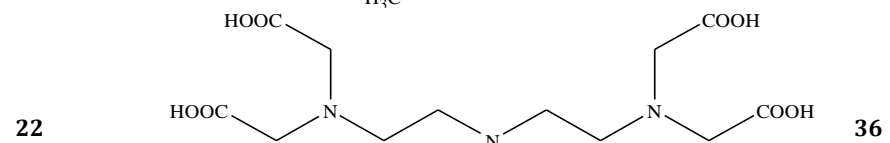
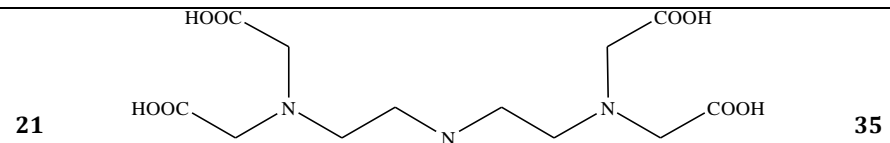


20



34





3. Results

3.1. Molecular structure

In this study, some of the electronic and molecular properties, such as the polarizability, E_{HOMO} , E_{LUMO} , the energy gap between E_{HOMO} and E_{LUMO} (ΔE), ionization energy (IE), absolute electronegativity (χ), absolute hardness (η), softness (σ), of 37 polyamino-polycarboxylic ligands for prediction of stability constants of Gd(III) complexes were calculated with the DFT/B3LYP/6-311G(d,p) and 6-311++G(2d,2p) methods for gas phase for neutral molecules, as shown in **Figures 1-7**.

According to the frontier molecular orbital theory (FMO), the chemical reactivity of molecule is a function of interaction between HOMO and LUMO levels of the reacting species [49]. HOMO and LUMO are known as frontier orbitals, and these energies of a molecule play important role in the determination of its molecular reactivity or stability. E_{HOMO} is associated with electron donating ability of a molecule and E_{LUMO} is associated with electron accepting ability of a molecule. High E_{HOMO} is essential for reaction with nucleophiles of molecule while low E_{LUMO} is essential for reaction with electrophiles [50]. E_{HOMO} values of the molecules being investigated were found for gas phase by using B3LYP/6-311G(d,p) and 6-311++G(2d,2p) methods. The molecules having high E_{HOMO} values tends to give electron easier and it is more prone to reaction. The electron donating trends for study molecules for gas can be written as for first five molecules: 33>30>37>28>31 with B3LYP/6-311G(d,p), and 33>37>28>31>30 with 6-311++G(2d,2p) method. E_{HOMO} values of these molecules: -5.18, -5.23, -5.38, -5.46, -5.55 eV for 6-311G(d,p) method (**Figure 1**) and -5.48, -5.61, -5.68, -5.74, -5.81 eV for 6-311++G(2d,2p) method (**Figure 2**), respectively. The molecules with the lowest E_{HOMO} values: 33<30<37<28<31 for 6-311G(d,p) method and 33<37<28<31<30 for 6-311++G(2d,2p) method can be written (see **Figures 1 and 2**).

E_{LUMO} shows that the ability of the molecule to accept electrons. Lower the value of E_{LUMO} better will be the ability to accept electrons. E_{LUMO} values of 37 molecules were found by using 6-311G(d,p) and 6-311++G(2d,2p) basic sets. The lowest E_{LUMO} values were seen at 1<15<10<18<14 for 6-311++G(2d,2p) method (**Figure 2**). Molecule 1 was found to be the easiest electron acceptor compound for 6-311G(d,p) and 6-311++G(2d,2p) methods.

HOMO-LUMO energy gap (ΔE), chemical hardness and softness are closely related to chemical properties [51-55]. Chemical hardness introduced in 1960s by Pearson [56] is defined as the resistance towards electron cloud polarization or deformation of chemical species. According to the Maximum Hardness Principle states; "a chemical system tends to arrange itself so as to achieve maximum hardness and chemical hardness can be considered as a measurement of stability" [56]. More stable molecules have large ΔE value and less stable molecules have small ΔE value. The most stable five molecules are found as 1>2>6>20>10 for 6-311G(d,p) and 1>2>6>10>4 for 6-311++G(2d,2p). The most unstable molecules are found as 31, 33 and 37 with 6-311++G(2d,2p) basic set (**Figure 3**). In general, ΔE values were found with 6-311G(d,p) to be larger than 6-311++G(2d,2p).

Ionization energy (IE) is one of the fundamental indicators of the chemical reactivity. IE (Eq. 1) can be approximated as the negative value of the E_{HOMO} . High values of the ionization energy evidence the chemical inertness and strong stability, whereas small ionization energy denotes high activity of the atoms and molecules [57]. According to ionization energy values, order of activity can be written as: 33>30>37>28>31 for 6-311G(d,p) method, and 33>37>28>31>30 for 6-311++G(2d,2p) method. Ionization energy values of these molecules were found as 5.18, 5.23, 5.38, 5.46, 5.55 eV for for 6-311G(d,p) method, and 5.48, 5.61, 5.68, 5.74, 5.81 eV for for 6-311++G(2d,2p) method, respectively. 33 molecule indicates the higher activity for both methods compared to that of other molecules. Because 33 has the lowest ionization energy value. It can be seen from **Figure 4** that the worst activity belongs to molecule 2.

The hardness and softness are widely used in chemistry for explaining stability of compounds. The hardness is just half the energy gap between the E_{HOMO} and E_{LUMO} (see **eq. 4**). According to Maximum Hardness Principle [58], chemical hardness is a measure of the stability of chemical species. High values of the hardness evidence strong stability as the chemical, whereas small values of hardness denote high reactivity of the atoms and molecules. Five molecules with the highest stability of chemical species are found as 1>2>6>20>10 for 6-311G(d,p) and 1>2>6>10>4 for 6-311++G(2d,2p). The first five unstable and reactivity compounds were found to be 30>28>33>37>34 for 6-311G(d,p) and 31>33>37>28>34 for 6-311++G(2d,2p).respectively. The calculated chemical hardness values are given in **Figure 5**.

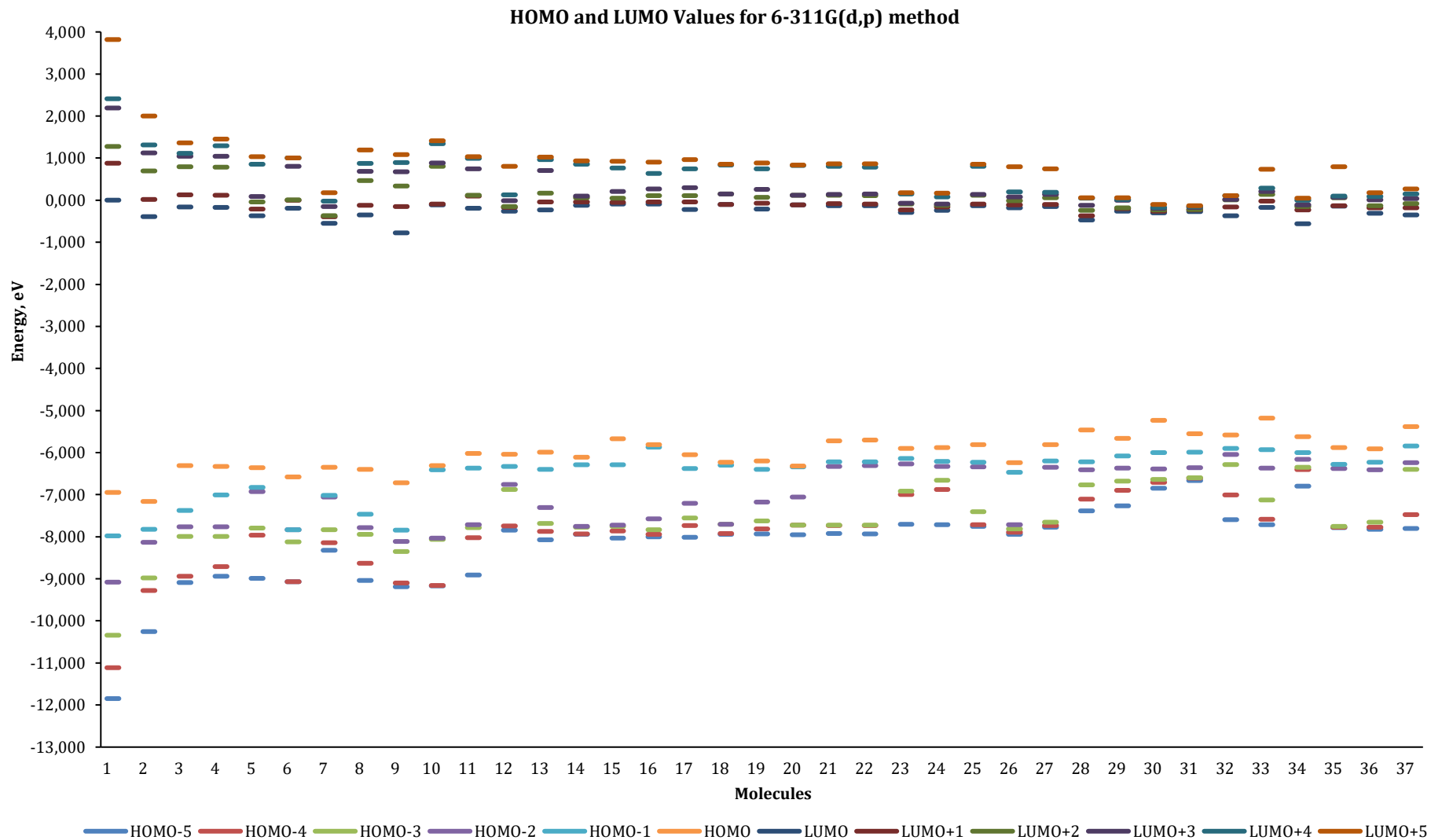


Figure 1. The calculated HOMO and LUMO parameters for the molecules under study using 6-311G(d,p) method.

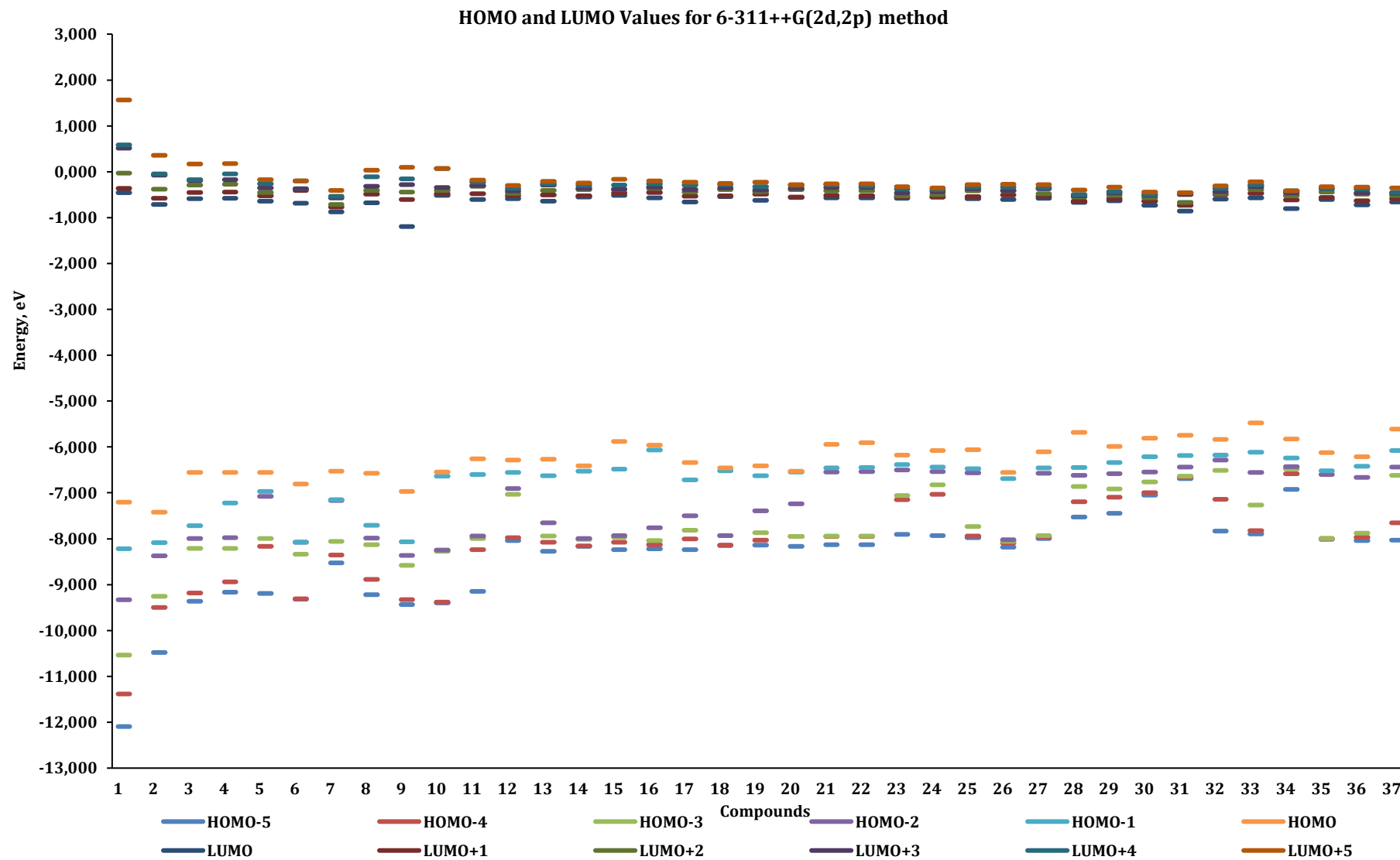


Figure 2. The calculated HOMO and LUMO parameters for the molecules under study using 6-311++G(2d,2p) method.

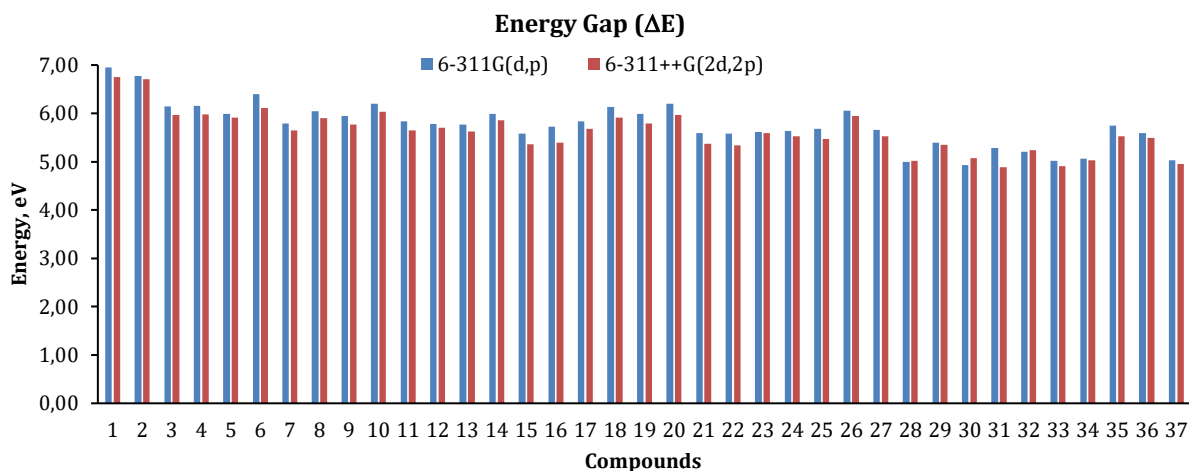


Figure 3. The calculated energy gap (ΔE) values for the molecules under study using B3LYP/6-311G(d,p) and 6-311++G(2d,2p) methods.

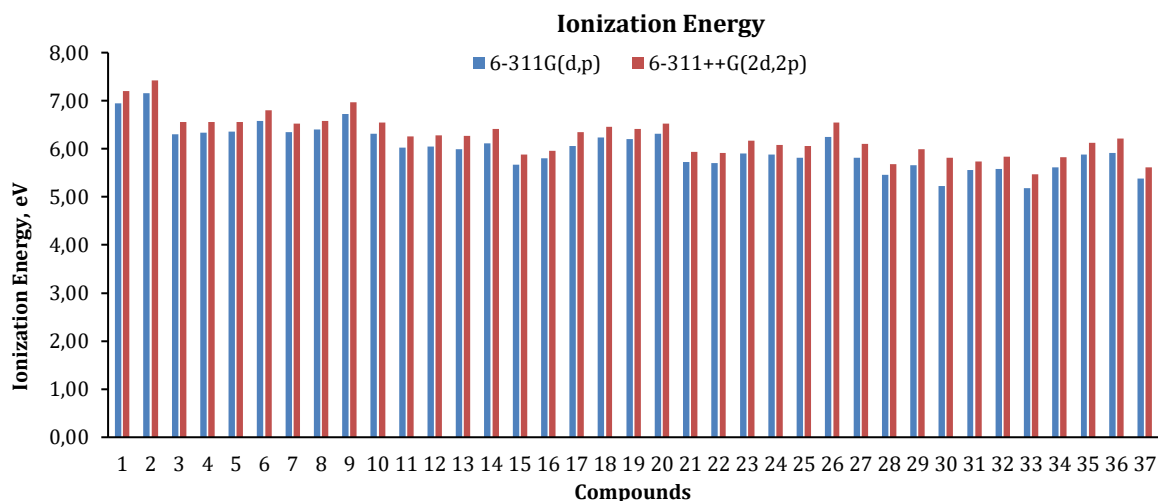


Figure 4. The ionization energy (IE) values for the molecules under study using B3LYP/6-311G(d,p) and 6-311++G(2d,2p) methods.

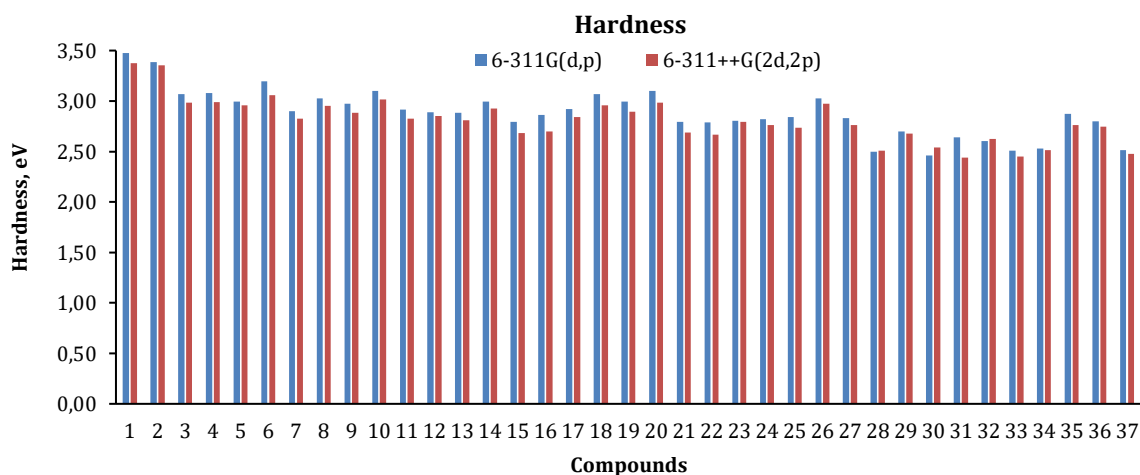


Figure 5. The calculated hardness (η) values for the molecules under study using B3LYP/6-311G(d,p) and 6-311++G(2d,2p) methods.

Softness is a measure of the polarizability and soft molecules give more easily electrons to an electron acceptor molecule [23], and they are more reactive. Low values of the softness evidence strong stability, whereas high values of softness denote high reactivity of molecules. On the basis of the calculated chemical softness values are given in **Figure 6**. According to softness values, electron donating trend of studied chemical compounds can be written as: 30>28>33>37>34 for 6-311G(d,p) and 31>33>37>28>34 for 6-311++G(2d,2p). The most difficult electron donating and unreactive molecules can be written as: 1<2<6<20<10 for 6-311G(d,p) basic set and 1<2<6<10<13 for 6-311++G(2d,2p) basic set.

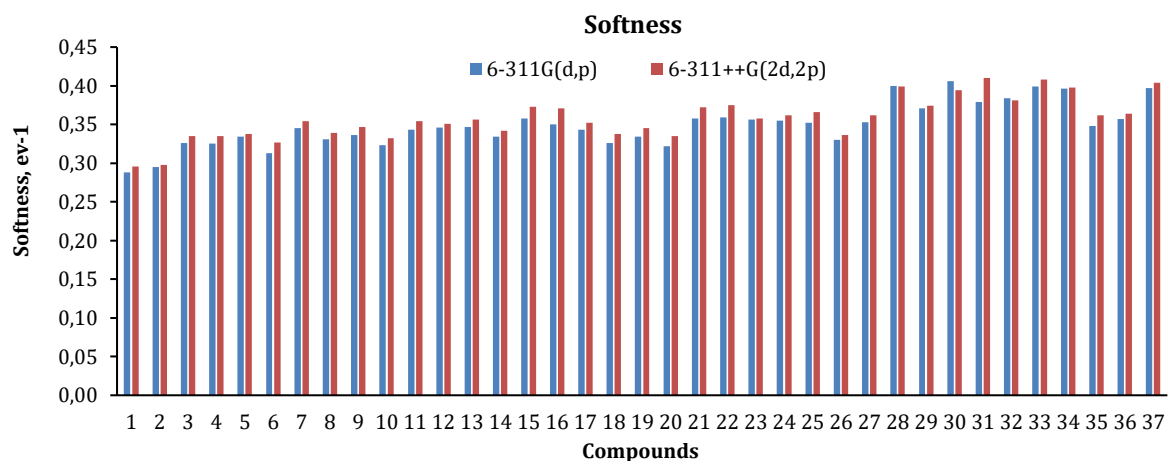


Figure 6. The calculated softness (σ) values for the molecules under study using B3LYP/6-311G(d,p) and 6-311++G(2d,2p) methods.

The average values of the HOMO and LUMO energies have been defined as the chemical potential (μ). The chemical potential was defined as the first derivative of the total energy with respect to the number of electrons. The negative of the chemical potential was known as the electronegativity (χ) (see **eq. 5**). Chemical potential, electronegativity and hardness are descriptors for the predictions about chemical properties of molecules [46]. Electronegativity that represents the power to attract the electrons of chemical species is a useful quantity in the prediction of inhibitive performance of molecules [23]. In generally, a molecule with lower electronegativity is given with easy electron donating tendency and it's known as more active [59]. The electronegativity values that can be seen in **Figure 7** were found for gas phase. According to electronegativity values, it can be seen from **Figure 7** that 33 is the most active compound than other all compounds for both basic sets.

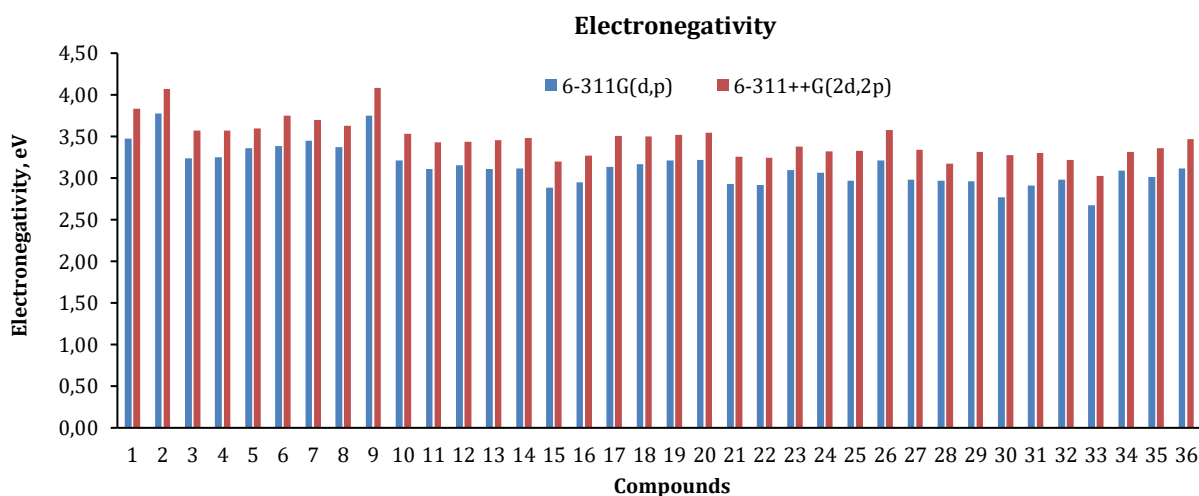


Figure 7. The calculated electronegativity (χ) values for the molecules under study using B3LYP/6-311G(d,p) and 6-311++G(2d,2p) methods.

Dipole moment (μ) is another indicator of reactivity of chemical compounds. Although some authors reported that there is no any remarkable relationship between dipole moment and reactivity [60, 53], several authors showed that increase of reactivity with the increasing of the dipole moment [53, 61]. In some studies, authors supported that increasing value of dipole moment facilitates the electron transport process [62, 63]. The calculated dipole moment values for molecules can be seen from **Tables 2** and **3**. According to dipole moment results, 34 have found to be the best active compound for both methods.

Recently, global electrophilicity (ω) have been used to by some authors as a useful information for explain the reactivity of the compounds [36, 64]. In generally, it's apparent that a good reactive compound has low electrophilicity values. 33 has found to be the best reactive compound for both methods, according to global electrophilicity results. This result can be seen from **Tables 2** and **3**.

Table 2. The calculated other quantum chemical parameter values by using B3LYP/6-311G(d,p) method.

Molecule	DM, Debye	MV, cm ³ /mol	TNC, eV	μ , eV	ω , eV	SEZPE, eV
1	1.192	54.212	-1.223	-3.472	1.736	-7739.965
2	1.998	100.385	-2.060	-3.777	2.107	-13941.574
3	1.480	112.434	-2.434	-3.236	1.705	-18126.684
4	1.707	155.753	-2.497	-3.253	1.718	-19195.699
5	2.229	159.490	-2.459	-3.361	1.885	-21296.875
6	2.799	127.389	-2.659	-3.383	1.790	-20142.622
7	2.174	206.230	-3.462	-3.449	2.053	-27497.999
8	3.084	173.566	-3.381	-3.374	1.882	-24387.570
9	1.728	119.732	-2.807	-3.749	2.365	-20142.907
10	0.001	113.164	-2.478	-3.214	1.667	-17585.713
11	1.697	188.037	-3.348	-3.107	1.654	-24856.078
12	1.388	231.111	-3.771	-3.153	1.719	-31142.625
13	2.610	194.641	-3.728	-3.110	1.677	-27972.434
14	0.001	188.861	-3.965	-3.117	1.621	-29988.422
15	1.092	214.866	-3.478	-2.883	1.488	-31057.652
16	1.805	206.766	-4.731	-2.948	1.519	-34233.173
17	3.311	231.874	-4.480	-3.134	1.683	-33105.087
18	2.015	237.570	-4.561	-3.166	1.634	-33196.259
19	2.366	283.449	-4.660	-3.209	1.720	-35243.188
20	2.492	280.837	-4.778	-3.217	1.668	-36312.413
21	2.064	287.167	-4.846	-2.929	1.534	-35771.083
22	2.026	383.514	-6.074	-2.916	1.525	-42186.853
23	2.400	342.921	-4.844	-3.097	1.710	-39919.018
24	1.429	274.950	-5.070	-3.063	1.664	-40988.248
25	3.345	240.974	-5.027	-2.969	1.551	-37818.113
26	1.132	202.910	-4.667	-3.214	1.705	-35120.652
27	1.642	263.991	-4.890	-2.978	1.567	-39834.102
28	3.128	354.337	-6.250	-2.966	1.761	-50305.979
29	1.805	325.245	-6.208	-2.963	1.627	-50305.903
30	3.174	446.959	-7.332	-2.767	1.554	-60777.884
31	3.456	730.999	-6.566	-2.912	1.604	-71249.703
32	2.466	375.083	-6.568	-2.979	1.703	-51375.572
33	2.609	322.501	-6.924	-2.674	1.426	-50403.026
34	4.312	404.180	-7.017	-3.089	1.888	-57570.845
35	2.748	328.706	-5.480	-3.011	1.579	-40903.417
36	1.398	356.000	-6.377	-3.113	1.732	-47104.966
37	1.568	335.569	-6.620	-2.865	1.631	-49680.083

The sum of the total negative charge (TNC) can be seen for both methods from **Table 2** and **3**. The TNC values have been found as -7.33, -7.02, -6.92, -6.62 and -6.57 eV for 6-311G(d,p) of 30, 34, 33, 37, 32, respectively. A typical electron density distribution of total electronic charge (TNC) values calculated with the 6-311G(d,p) and 6-311++G(2d,2p) basis sets. The negative charge densities have been shown to increase on active molecules.

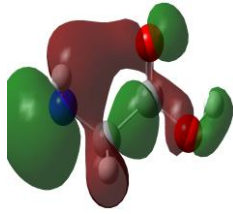
The results of other calculations by using 6-311G(d,p) and 6-311++G(2d,2p) basic sets, such as chemical potential (μ) values and sum of electronic and zero-point energies (SEZPE) can be seen in **Tables 2** and **3**.

Table 3. The calculated other quantum chemical parameter values by using 6-311++G(2d,2p) method.

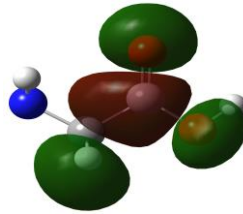
Molecule	DM, Debye	MV, cm ³ /mol	TNC, eV	μ , eV	ω , eV	SEZPE, eV
1	1.176	42.922	-1.232	-3.832	2.175	-7740.540
2	2.155	88.639	-2.062	-4.067	2.466	-13942.485
3	1.645	107.935	-3.030	-3.569	2.133	-18127.853
4	1.916	156.615	-3.158	-3.568	2.130	-19196.860
5	2.445	179.173	-4.436	-3.597	2.188	-21298.045
6	3.216	139.392	-3.813	-3.748	2.297	-20143.840
7	2.208	208.777	-4.608	-3.700	2.424	-27499.558
8	3.403	177.417	-2.000	-3.627	2.229	-24388.934
9	1.852	134.290	-3.506	-4.080	2.885	-20144.124
10	0.001	134.231	-2.664	-3.531	2.067	-17586.854
11	2.074	160.600	-4.340	-3.432	2.085	-24857.530
12	1.283	218.959	-6.315	-3.433	2.067	-31144.332
13	2.617	198.846	-4.904	-3.453	2.120	-27974.142
14	0.001	208.833	-5.413	-3.481	2.069	-29990.169
15	1.059	213.829	-5.027	-3.196	1.905	-31059.381
16	1.683	207.504	-5.200	-3.267	1.979	-34234.990
17	3.778	230.069	-6.551	-3.503	2.160	-33107.026
18	2.372	235.500	-6.146	-3.498	2.070	-33198.178
19	2.584	272.762	-5.509	-3.518	2.138	-35245.239
20	3.005	227.414	-6.652	-3.544	2.105	-36314.537
21	2.652	284.931	-6.465	-3.254	1.970	-35773.100
22	2.791	295.805	-7.558	-3.241	1.969	-42189.165
23	3.092	296.892	-6.863	-3.378	2.041	-39921.223
24	1.997	312.695	-7.918	-3.318	1.992	-40990.497
25	3.679	283.022	-6.637	-3.324	2.020	-37820.360
26	1.120	204.302	-6.447	-3.578	2.152	-35122.690
27	1.937	239.170	-7.015	-3.342	2.022	-39836.383
28	3.247	377.017	-8.859	-3.173	2.008	-50308.688
29	2.261	345.419	-9.268	-3.311	2.047	-50308.670
30	4.327	456.010	-9.027	-3.273	2.110	-60781.148
31	2.726	481.666	-10.504	-3.299	2.228	
32	2.931	451.093	-8.956	-3.216	1.972	-51378.324
33	2.138	399.106	-8.165	-3.024	1.864	-50405.701
34	4.736	493.275	-9.654	-3.314	2.184	-57573.996
35	3.195	262.465	-7.219	-3.361	2.046	-40905.767
36	3.011	253.511	-8.130	-3.465	2.188	-47107.617
37	1.560	314.521	-8.865	-3.135	1.984	-49682.795

The frontier MOs (HOMOs, LUMOs) and molecular electrostatic map (total electron density) of molecules are also given in **Figure 8**. According to the frontier molecular orbital theory (FMO), the chemical reactivity of molecule is a function of interaction between HOMO and LUMO levels of the reacting species [49]. HOMO and LUMO are known as frontier orbitals, and these a molecule play important role in the determination of its molecular reactivity or stability. Some researchers mention that Frontier orbital theory is useful in predicting the molecule's interaction center [65-67]. The electron-rich regions of the molecule can be said to be more active. The charge density distribution of HOMO and LUMO level of tetrazoles are shown in **Figure 8**.

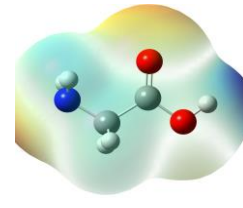
Figure 8 shows that the electron density increases around the oxygen atoms of the all molecules. This shows us that the molecule is easier to give electrons from these regions. In such studies, electronic charge analysis for atoms in the molecules is important because binding capability of a molecule depends also on electronic charge of the molecules. The binding facilitates as the negative charge on atoms increases [68].



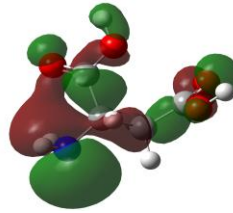
1-HOMO



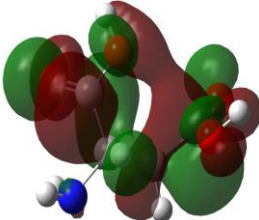
1-LUMO



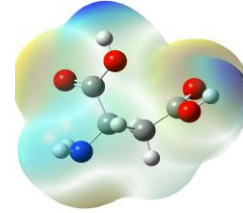
1-Total Density



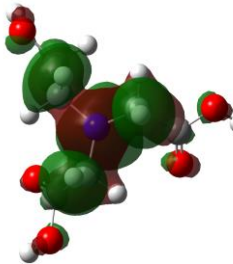
2-HOMO



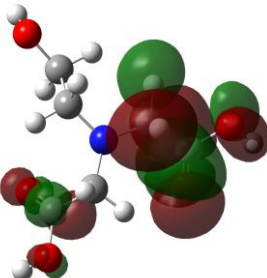
2-LUMO



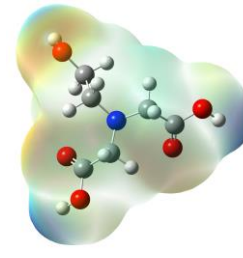
2-Total Density



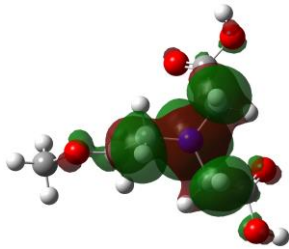
3-HOMO



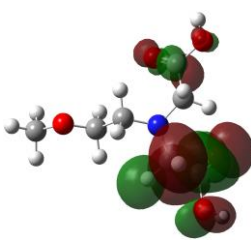
3-LUMO



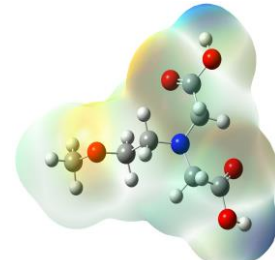
3-Total Density



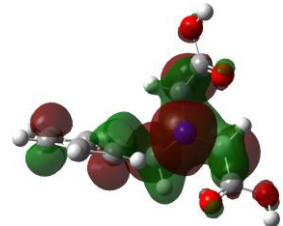
4-HOMO



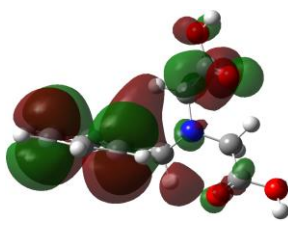
4-LUMO



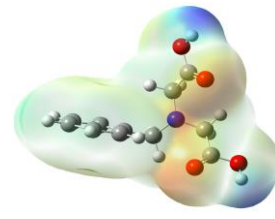
4-Total Density



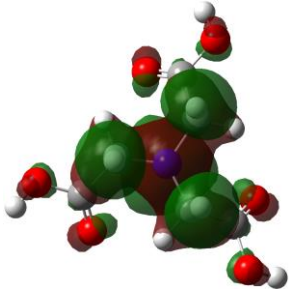
5-HOMO



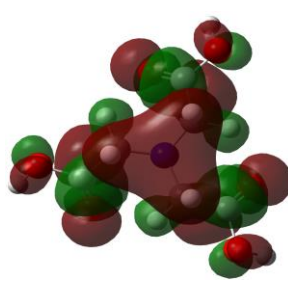
5-LUMO



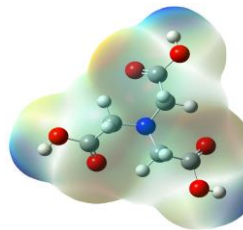
5-Total Density



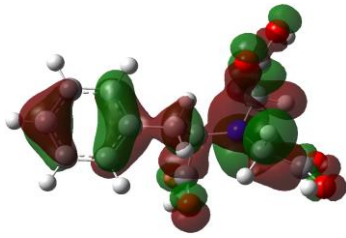
6-HOMO



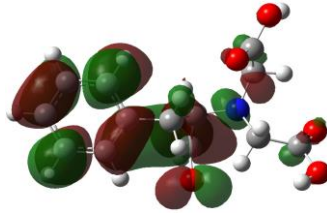
6-LUMO



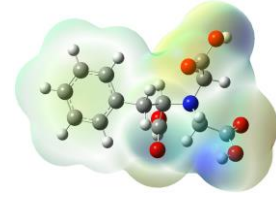
6-Total Density



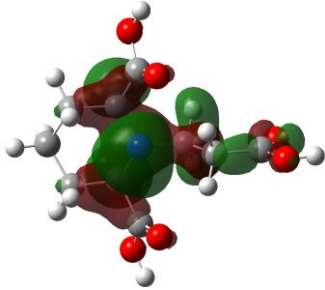
7-HOMO



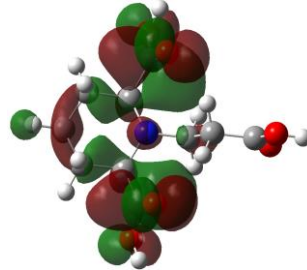
7-LUMO



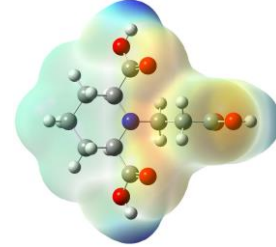
7-Total Density



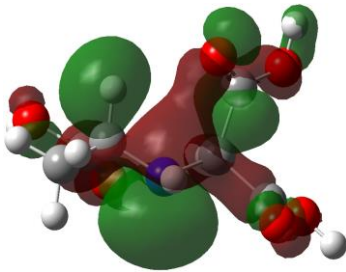
8-HOMO



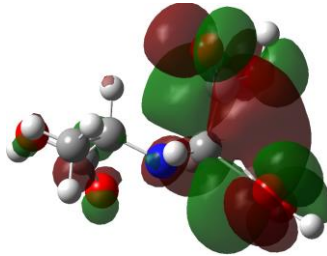
8-LUMO



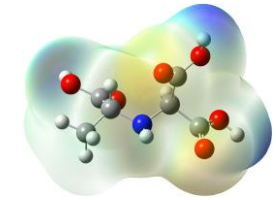
8-Total Density



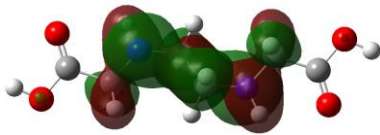
9-HOMO



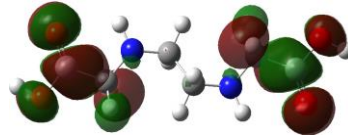
9-LUMO



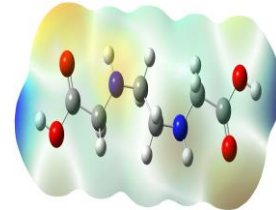
9-Total Density



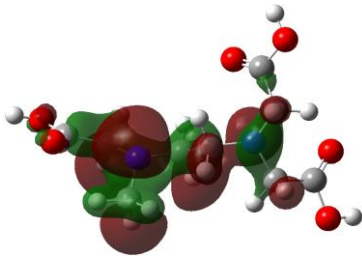
10-HOMO



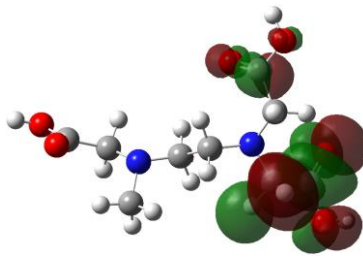
10-LUMO



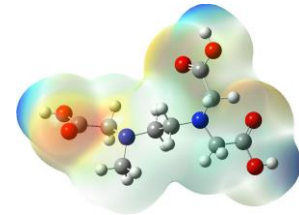
10-Total Density



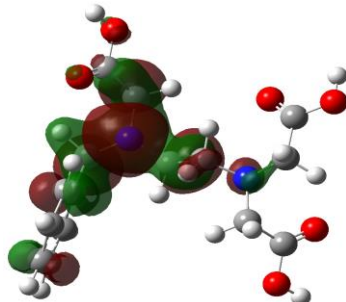
11-HOMO



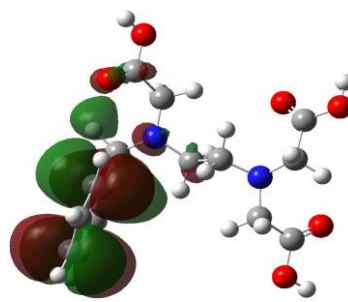
11-LUMO



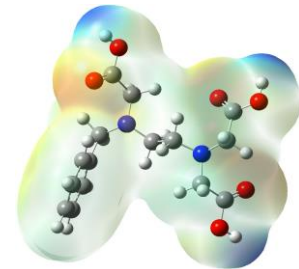
11-Total Density



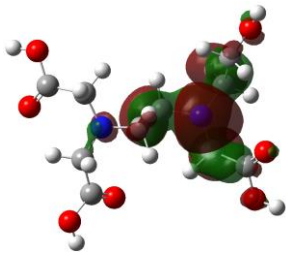
12-HOMO



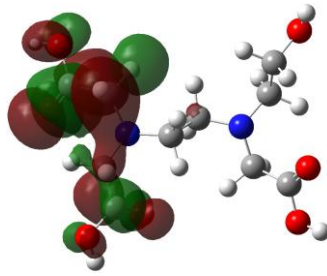
12-LUMO



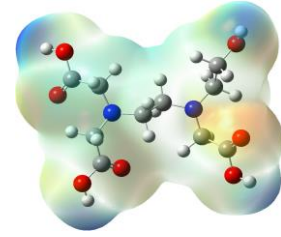
12-Total Density



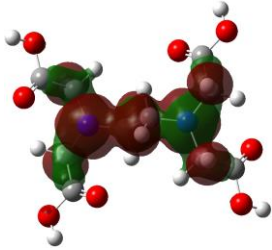
13-HOMO



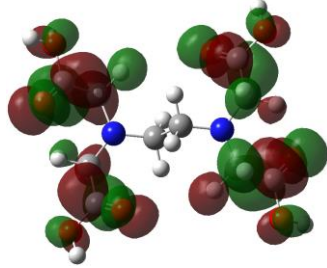
13-LUMO



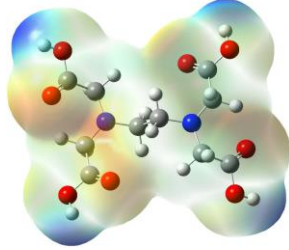
13-Total Density



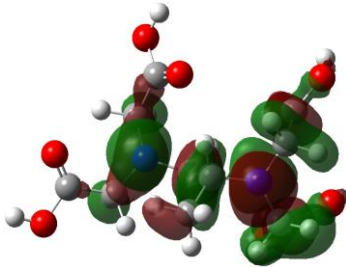
14-HOMO



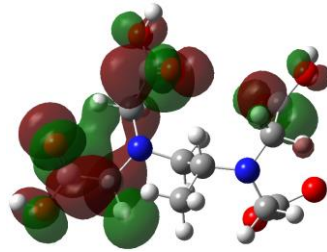
14-LUMO



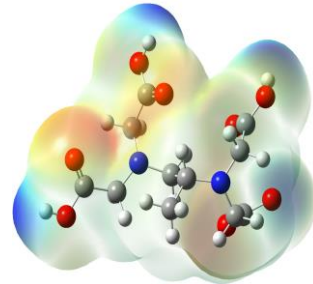
14-Total Density



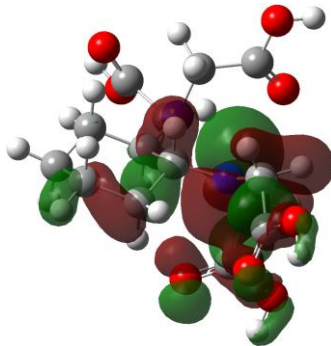
15-HOMO



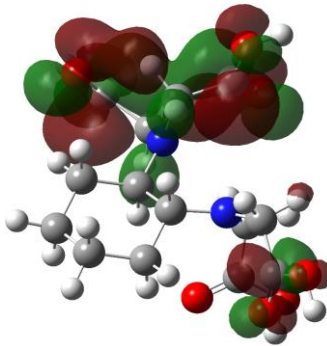
15-LUMO



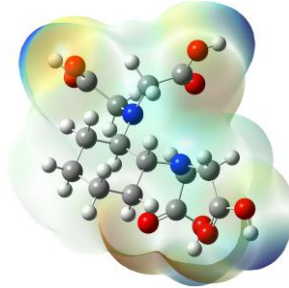
15-Total Density



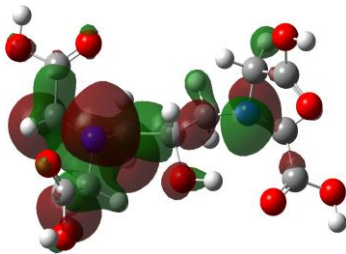
16-HOMO



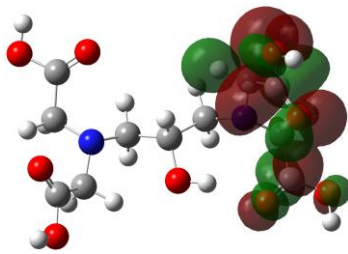
16-LUMO



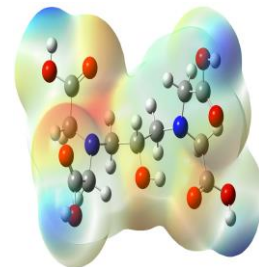
16-Total Density



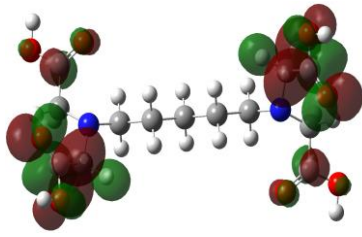
17-HOMO



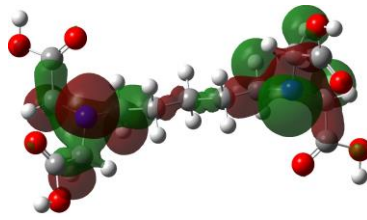
17-LUMO



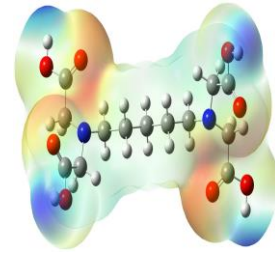
17-Total Density



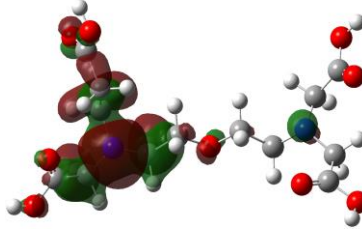
18-HOMO



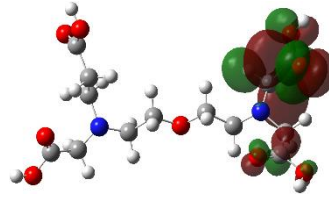
18-LUMO



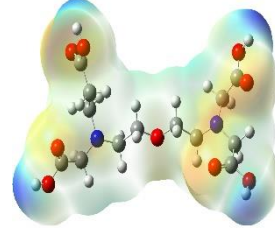
18-Total Density



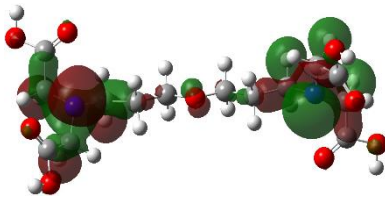
19-HOMO



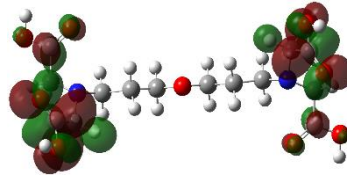
19-LUMO



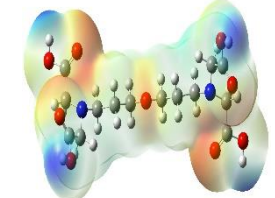
19-Total Density



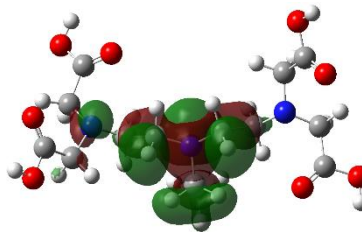
20-HOMO



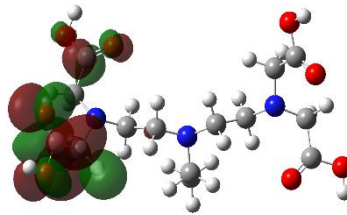
20-LUMO



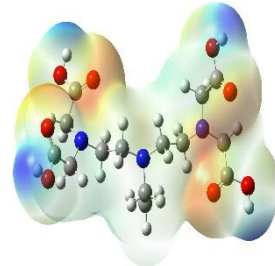
20-Total Density



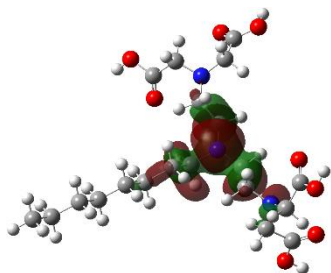
21-HOMO



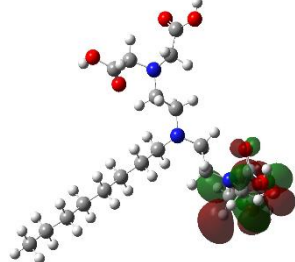
21-LUMO



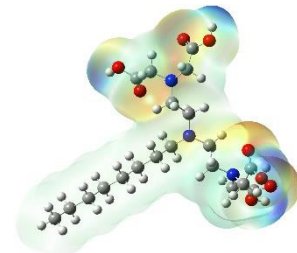
21-Total Density



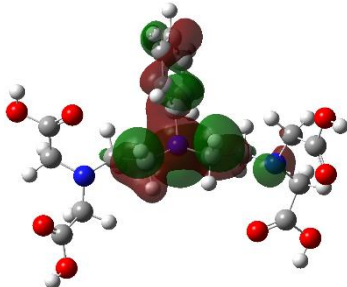
22-HOMO



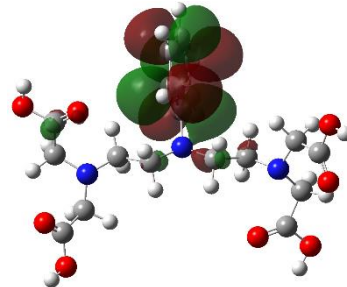
22-LUMO



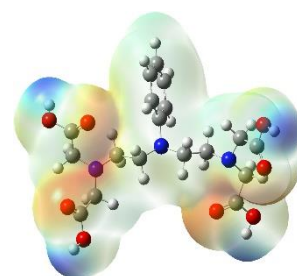
22-Total Density



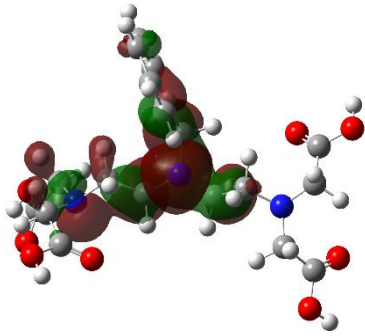
23-HOMO



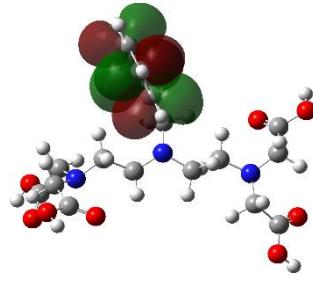
23-LUMO



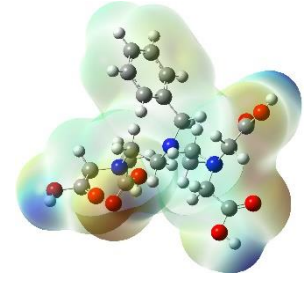
23-Total Density



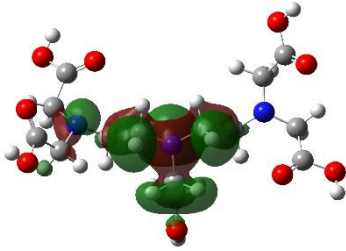
24-HOMO



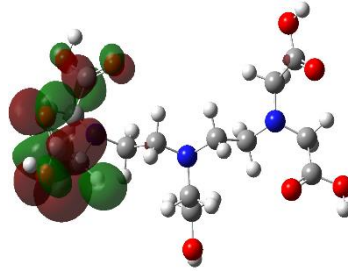
24-LUMO



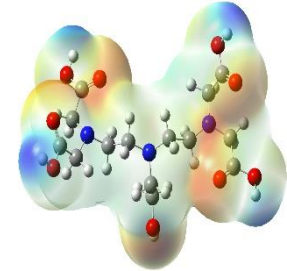
24-Total Density



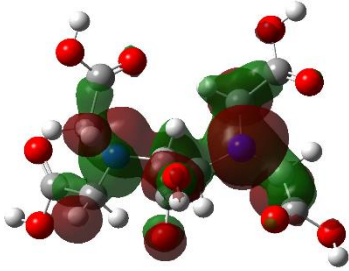
25-HOMO



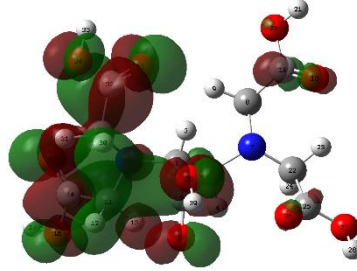
25-LUMO



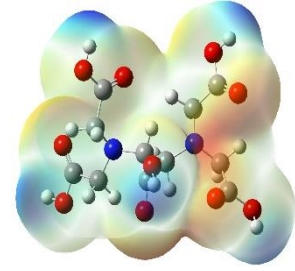
25-Total Density



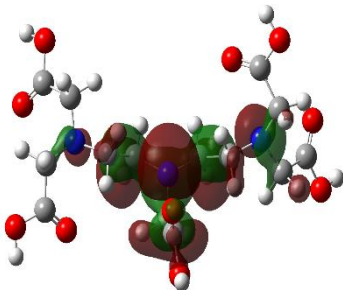
26-HOMO



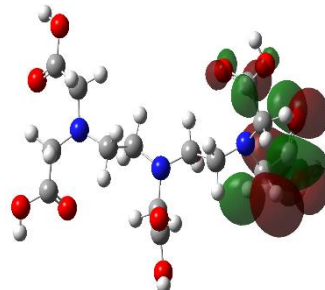
26-LUMO



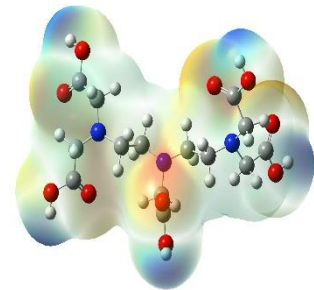
26-Total Density



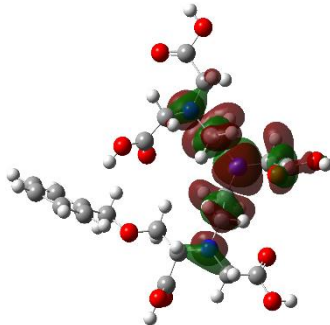
27-HOMO



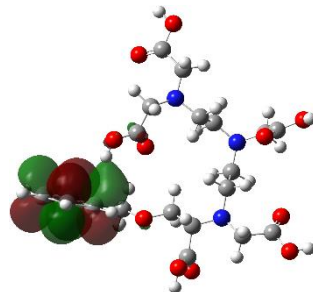
27-LUMO



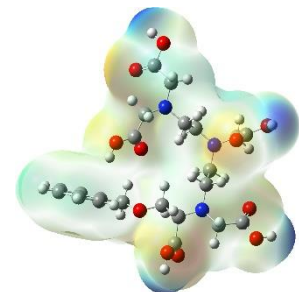
27-Total Density



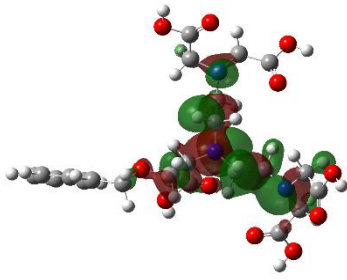
28-HOMO



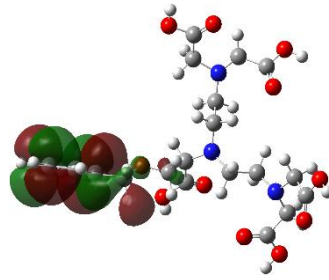
28-LUMO



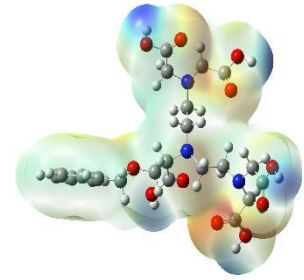
28-Total Density



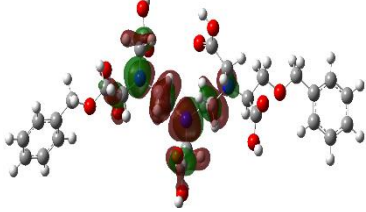
29-HOMO



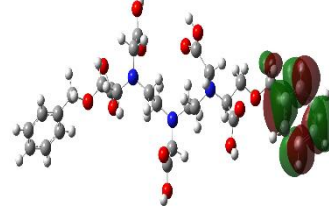
29-LUMO



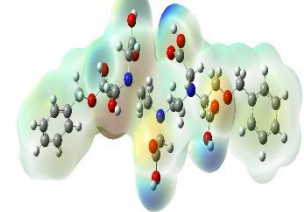
29-Total Density



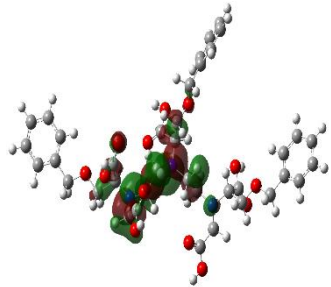
30-HOMO



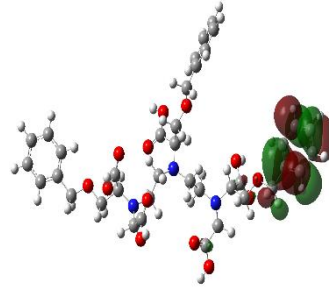
30-LUMO



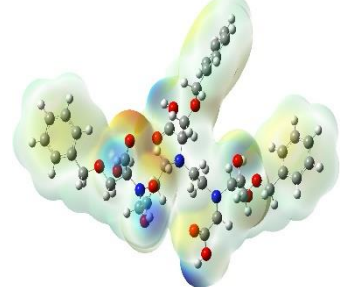
30-Total Density



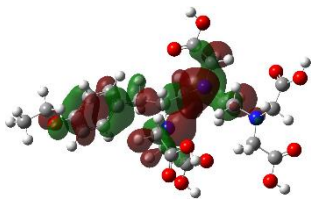
31-HOMO



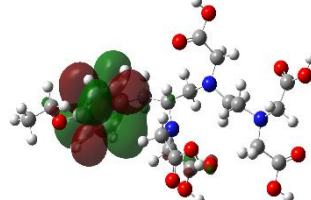
31-LUMO



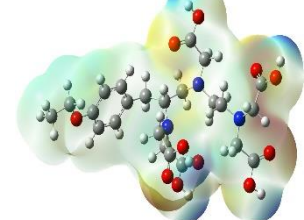
31-Total Density



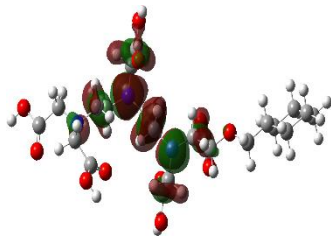
32-HOMO



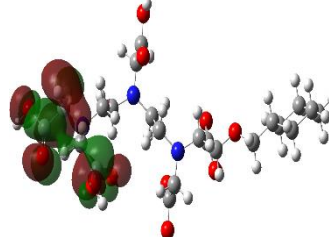
32-LUMO



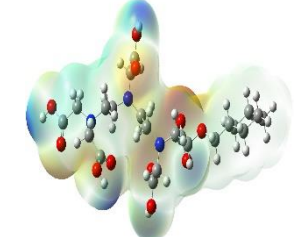
32-Total Density



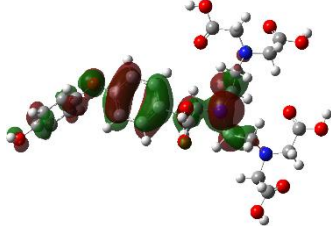
33-HOMO



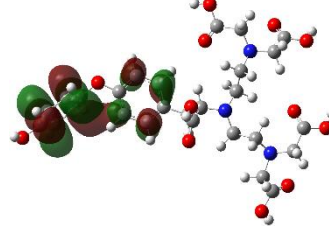
33-LUMO



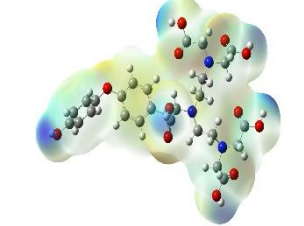
33-Total Density



34-HOMO



34-LUMO



34-Total Density

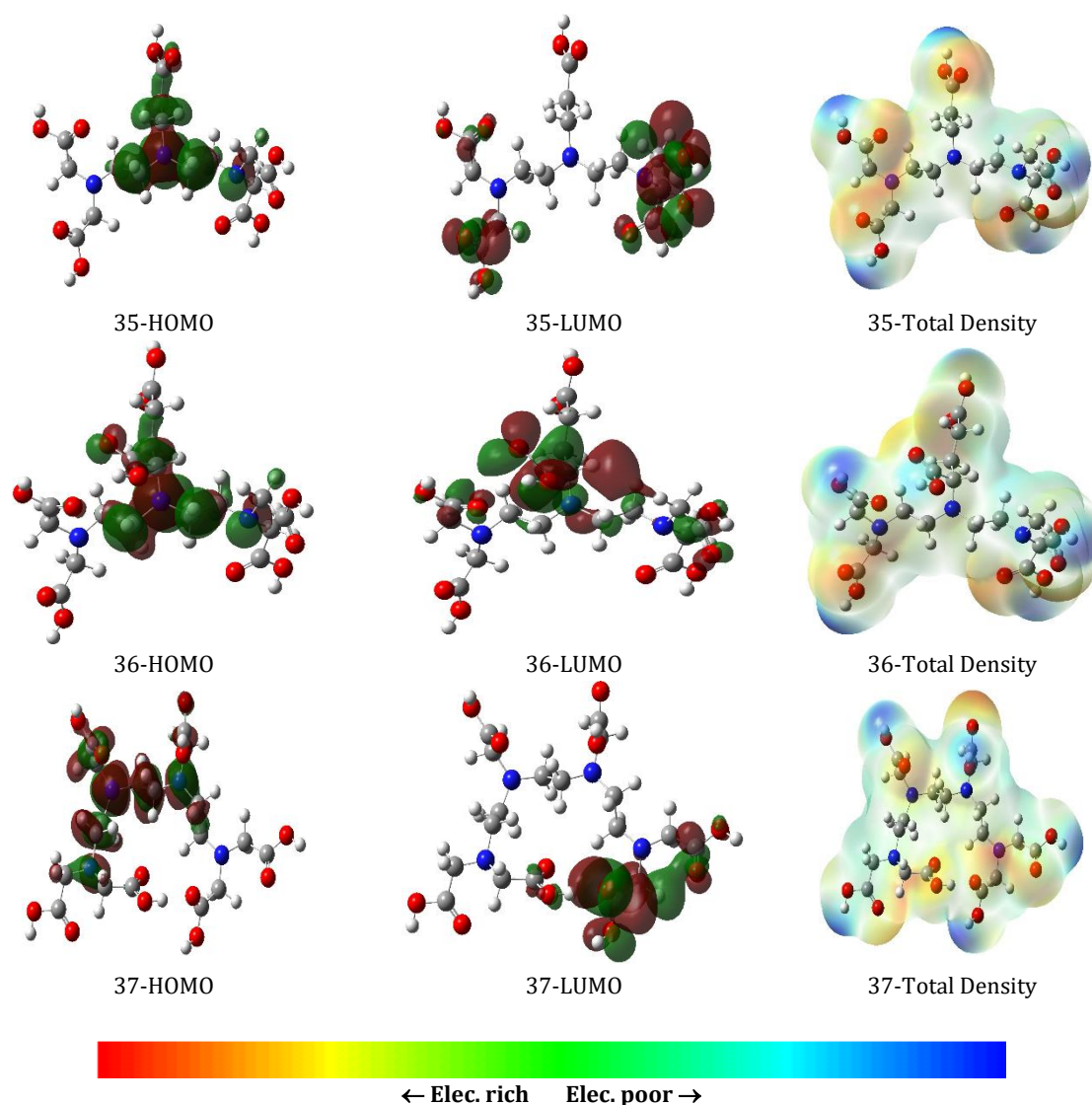


Figure 8. The frontier MOs (HOMOs, LUMOs) and molecular electrostatic map (total electron density) of molecules by using DFT/B3LYP/6-311++G(2d,2p) basic set.

The HOMO and LUMO orbitals contribution of the atoms for all molecules are shown in **Tables 4** and **5**. The HOMO and LUMO orbitals were calculated with AOMix program [20, 21] after optimization with DFT/B3LYP/6-311G(d,p) method for gas phase. It can be seen from **Table 4** that the HOMO orbitals of all molecules are composed mainly of **N** atoms. Similarly, the LUMO orbitals of all molecules are composed mainly of **C** atoms (see **Table 5**). For more details on HOMO and LUMO values, see supplementary Table S1.

3.2. Statistical Analysis

Twelve descriptors, namely, E_{HOMO} , E_{LUMO} , ΔE , DM, MV, TNC, η , σ , χ , μ , ω and SEZPE whose values were calculated by B3LYP/6-311G(d,p) method for 37 molecules was employed to construct a model between those variables and log K values. Factor analysis was conducted in order to determine the co-linearity among descriptor variables and to obtain the sets of descriptors that are statistically independent of each other. The descriptors pertinent to each factor with factor loadings are bold and summarized in **Table 6**. Therefore, while first factor consists of E_{HOMO} , ΔE , DM, MV, η , σ , χ , μ and SEZPE, the second factor composes of E_{LUMO} and ω . The total variance explained by two factors is 88.90.

Table 4. Represents the highest occupied molecular orbital (HOMO) population for the molecules under study by using AOMIX program after from B3LYP/6-311G(d,p) method.

Molecule	Calculated HOMO by using Aomix method
1	+ 19.6% 4PX(N3) + 15.9% 3PY(N3) + 11.4% 3PY(N3) + 10.4% 4PY(N3) + 8.0% 2PX(N3) + 5.7% 2PY(N3)
2	+ 23.1% 4PY(N5) + 20.3% 3PY(N5) + 10.2% 2PY(N5) - 5.6% 3PX(N5) - 4.5% 4PX(N5) - 3.5% 3S(N5)
3	+ 27.3% 3PZ(N6) + 21.7% 4PZ(N6) + 13.7% 2PZ(N6) - 3.2% 4S(N6) - 2.4% 2S(H15) - 2.4% 2S(H17)
4	+ 27.1% 3PZ(N6) + 21.5% 4PZ(N6) + 13.7% 2PZ(N6) - 3.2% 4S(N6) - 2.4% 2S(H19) - 2.4% 2S(H17)
5	+ 22.7% 3PZ(N5) + 17.8% 4PZ(N5) + 11.4% 2PZ(N5) + 3.1% 4S(N5) + 2.5% 2S(H18) + 2.1% 2S(H22)
6	+ 27.1% 3PZ(N7) + 21.3% 4PZ(N7) + 13.6% 2PZ(N7) - 3.2% 4S(N7) - 2.5% 2S(H15) - 2.5% 2S(H19)
7	- 10.2% 3PZ(N7) + 8.5% 3PY(N7) + 8.4% 4PY(N7) - 7.3% 4PZ(N7) - 5.1% 2PZ(N7) + 4.4% 2PY(N7)
8	+ 26.6% 3PZ(N23) + 21.5% 4PZ(N23) + 13.4% 2PZ(N23) - 3.2% 4S(N23) - 2.4% 2S(H13) - 2.4% 2S(H15)
9	+ 24.8% 3PY(N1) + 22.8% 4PY(N1) + 12.4% 2PY(N1) - 3.1% 4S(N1) - 3.0% 2S(H14) - 1.9% 3S(N1)
10	+ 12.5% 3PZ(N7) - 12.5% 3PZ(N9) + 11.5% 4PZ(N7) - 11.5% 4PZ(N9) + 6.4% 2PZ(N7) - 6.4% 2PZ(N9)
11	+ 12.6% 3PY(N7) + 10.6% 4PY(N7) + 10.3% 3PZ(N7) + 7.6% 4PZ(N7) + 6.4% 2PY(N7) + 5.2% 2PZ(N7)
12	+ 23.8% 3PZ(N7) + 18.9% 4PZ(N7) + 12.0% 2PZ(N7) + 3.3% 4S(N7) + 2.4% 2S(H31) + 2.0% 2S(H4)
13	+ 26.6% 3PZ(N7) + 21.3% 4PZ(N7) + 13.4% 2PZ(N7) + 3.3% 4S(N7) + 2.1% 2S(H13) + 2.1% 2S(H4)
14	+ 13.0% 3PZ(N7) - 12.9% 3PZ(N8) + 10.3% 4PZ(N7) - 10.3% 4PZ(N8) + 6.6% 2PZ(N7) - 6.5% 2PZ(N8)
15	+ 17.6% 3PZ(N6) + 14.3% 4PZ(N6) + 9.0% 2PZ(N6) - 6.4% 3PZ(N7) - 4.8% 4PZ(N7) - 3.3% 2PZ(N7)
16	+ 11.5% 3PX(N17) + 11.4% 3PY(N17) + 10.1% 4PX(N17) + 9.1% 4PY(N17) + 5.9% 2PX(N17) + 5.8% 2PY(N17)
17	+ 18.4% 3PZ(N6) + 14.5% 4PZ(N6) + 9.3% 2PZ(N6) + 3.8% 3PY(N6) + 3.1% 4PY(N6) + 3.0% 4S(N6)
18	+ 8.4% 3PZ(N6) - 8.4% 3PZ(N31) + 6.7% 4PZ(N6) - 6.7% 4PZ(N31) + 4.5% 3PY(N6) + 4.5% 3PY(N31)
19	+ 25.5% 3PZ(N28) + 20.3% 4PZ(N28) + 12.8% 2PZ(N28) + 2.8% 4S(N28) + 2.6% 2S(H25) + 2.4% 2S(H31)
20	+ 6.9% 3PZ(N35) - 6.9% 3PZ(N6) + 5.9% 3PY(N35) + 5.9% 3PY(N6) + 5.6% 4PZ(N35) - 5.6% 4PZ(N6)
21	+ 22.0% 3PZ(N43) + 18.1% 4PZ(N43) + 11.1% 2PZ(N43) - 4.0% 3PY(N43) - 3.2% 4S(N43) - 2.8% 4PY(N43)
22	+ 25.1% 3PZ(N43) + 19.9% 4PZ(N43) + 12.6% 2PZ(N43) + 3.2% 4S(N43) + 2.5% 2S(H24) + 2.4% 2S(H3)
23	+ 20.3% 3PZ(N43) + 16.8% 4PZ(N43) + 10.3% 2PZ(N43) + 3.7% 3PY(N43) + 3.0% 4PY(N43) - 2.7% 2S(H3)
24	+ 21.7% 3PZ(N43) + 17.1% 4PZ(N43) + 10.9% 2PZ(N43) + 2.9% 4S(N43) - 2.5% 3PY(N28) + 2.3% 2S(H24)
25	+ 23.0% 3PZ(N43) + 19.0% 4PZ(N43) + 11.6% 2PZ(N43) - 3.1% 4S(N43) - 2.5% 2S(H24) - 2.5% 2S(H3)
26	+ 18.1% 3PZ(N7) + 14.2% 4PZ(N7) + 9.1% 2PZ(N7) - 5.0% 3PZ(N6) - 4.1% 4PZ(N6) - 2.6% 2PZ(N6)
27	+ 23.8% 3PZ(N43) + 18.8% 4PZ(N43) + 12.0% 2PZ(N43) + 2.5% 4S(N43) + 2.4% 2S(H24) + 2.3% 2S(H3)
28	+ 23.2% 3PZ(N42) + 18.3% 4PZ(N42) + 11.7% 2PZ(N42) + 2.0% 3PZ(C21) - 1.9% 3PZ(N27) + 1.8% 3PZ(C2)
29	+ 17.9% 3PZ(N43) + 13.9% 4PZ(N43) + 9.0% 2PZ(N43) - 3.7% 3PX(N43) - 3.3% 4PX(N43) - 1.9% 2PX(N43)
30	+ 18.6% 3PZ(N41) + 14.6% 4PZ(N41) + 9.4% 2PZ(N41) - 6.6% 3PZ(N6) - 5.2% 4PZ(N6) - 3.4% 2PZ(N6)
31	+ 10.0% 3PZ(N41) + 8.1% 4PZ(N41) - 5.5% 3PZ(N6) + 5.1% 2PZ(N41) - 4.5% 4PZ(N6) - 4.1% 3PY(N6)
32	+ 12.4% 3PZ(N22) + 9.9% 4PZ(N22) + 6.3% 2PZ(N22) + 4.7% 3PX(N56) + 4.0% 4PX(N56) - 3.2% 3PX(N22)
33	+ 18.0% 3PZ(N42) + 14.0% 4PZ(N42) + 9.1% 2PZ(N42) - 8.0% 3PZ(N6) - 6.4% 4PZ(N6) - 4.1% 2PZ(N6)
34	+ 10.9% 3PZ(N42) + 9.0% 4PZ(N42) + 5.5% 2PZ(N42) - 4.2% 3PZ(C53) - 3.8% 3PZ(O61) + 3.7% 3PZ(C60)
35	+ 25.0% 3PZ(N43) + 20.2% 4PZ(N43) + 12.6% 2PZ(N43) - 3.1% 4S(N43) - 2.5% 2S(H24) - 2.4% 2S(H3)
36	+ 23.7% 3PZ(N43) + 19.4% 4PZ(N43) + 12.0% 2PZ(N43) - 2.7% 2S(H3) - 2.7% 4S(N43) - 2.1% 2S(H24)
37	+ 19.5% 3PZ(N6) + 15.3% 4PZ(N6) + 9.9% 2PZ(N6) - 4.7% 3PZ(N36) - 3.7% 4PZ(N36) - 2.4% 2PZ(N36)

Table 5. Represents the highest occupied molecular orbital (LUMO) population for molecules by using Aomix method after from B3LYP/6-311G(d,p) method.

Molecule	Calculated LUMO by using Aomix method
1	+ 24.7% 3PZ(C5) + 15.7% 4PZ(C5) + 12.9% 2PZ(C5) - 11.1% 3PZ(O2) - 7.0% 2PZ(O2) - 6.9% 4PZ(O2)
2	+ 12.6% 3PZ(C8) + 7.2% 4PZ(C8) + 6.5% 2PZ(C8) - 6.0% 3PZ(O3) - 5.2% 3PX(C8) + 3.8% 3PY(C9)
3	- 13.4% 3PZ(C12) + 8.3% 3PY(C12) - 7.5% 4PZ(C12) - 7.0% 2PZ(C12) + 6.2% 3PZ(O5) + 5.9% 4PY(C12)
4	- 11.5% 3PZ(C11) - 9.5% 3PX(C11) - 6.3% 4PZ(C11) - 6.1% 4PX(C11) - 6.0% 2PZ(C11) + 5.3% 3PZ(O4)
5	+ 8.6% 4PY(C16) - 8.0% 4PY(C10) + 7.0% 3PY(C16) - 6.7% 4PY(C15) + 6.7% 3PY(C7) + 6.6% 4PY(C7)
6	+ 4.4% 3S(H19) + 4.3% 3S(H15) + 4.3% 3S(H17) - 4.2% 3PZ(C13) - 4.1% 3PZ(C11) - 4.0% 3PZ(C12)
7	- 8.7% 3PX(C13) + 6.9% 4PZ(C15) - 6.3% 4PX(C13) + 6.2% 4PZ(C18) + 5.5% 3PZ(C18) + 5.5% 3PZ(C15)
8	+ 7.1% 3PX(C25) + 7.1% 3PX(C29) + 4.7% 4PX(C25) + 4.7% 4PX(C29) - 4.1% 3PZ(C25) - 4.1% 3PZ(C29)
9	+ 8.5% 3PX(C9) + 7.3% 4PX(C9) + 5.6% 3PX(C5) + 4.6% 3PY(C5) + 4.5% 3PZ(C9) + 4.3% 2PX(C9)
10	+ 12.3% 3PZ(C21) - 12.2% 3PZ(C17) + 7.4% 4PZ(C21) - 7.3% 4PZ(C17) + 6.4% 2PZ(C21) - 6.4% 2PZ(C17)
11	- 11.6% 3PZ(C19) - 9.4% 3PX(C19) - 6.5% 4PZ(C19) - 6.1% 2PZ(C19) - 6.0% 4PX(C19) + 5.4% 3PZ(O20)
12	+ 9.6% 4PX(C35) + 8.7% 4PX(C36) - 8.4% 4PX(C40) + 7.3% 3PX(C35) + 7.0% 3PX(C36) - 6.7% 3PX(C40)
13	- 12.6% 3PZ(C19) - 7.1% 4PZ(C19) + 6.6% 3PX(C19) - 6.6% 2PZ(C19) + 5.9% 3PZ(O20) + 4.6% 3S(H11)
14	+ 4.2% 3PZ(C19) + 4.1% 3PZ(C15) + 2.7% 3PX(C19) + 2.6% 3PX(C15) + 2.5% 3PZ(C26) + 2.4% 3PZ(C33)
15	+ 11.2% 3PZ(C18) + 6.8% 4PZ(C18) + 5.9% 2PZ(C18) - 5.6% 3PZ(O19) - 3.5% 3PX(C25) - 3.5% 2PZ(O19)
16	+ 13.6% 3PY(C43) + 8.6% 4PY(C43) + 7.4% 3PX(C29) + 7.1% 2PY(C43) - 5.5% 3PY(O44) + 4.9% 4PX(C29)
17	- 12.5% 3PX(C31) - 8.3% 4PX(C31) - 6.5% 2PX(C31) + 5.6% 3PX(O32) + 4.9% 3PZ(C31) + 4.3% 3S(H27)
18	- 6.6% 3PX(C42) + 6.4% 3PX(C10) - 4.2% 4PX(C42) + 4.1% 4PX(C10) + 3.7% 3PZ(C42) + 3.6% 3PZ(C10)
19	- 14.6% 3PX(C10) - 9.4% 4PX(C10) - 7.7% 2PX(C10) + 6.5% 3PX(O11) + 5.5% 3PZ(C10) + 4.9% 3S(H9)
20	+ 8.9% 3PX(C46) + 5.8% 4PX(C46) - 4.8% 3PX(C10) + 4.7% 2PX(C46) - 3.9% 3PX(O47) + 3.4% 3PZ(C46)
21	+ 13.6% 3PX(C39) + 8.5% 4PX(C39) + 8.1% 3PZ(C39) + 7.1% 2PX(C39) - 6.0% 3PX(O40) + 5.1% 4PZ(C39)
22	+ 18.0% 3PY(C39) + 10.5% 4PY(C39) + 9.4% 2PY(C39) - 8.2% 3PY(O40) - 5.2% 4PY(O40) - 5.1% 2PY(O40)
23	+ 12.4% 4PX(C46) + 12.1% 4PX(C47) + 9.9% 3PX(C47) + 9.5% 3PX(C46) + 5.5% 2PX(C47) + 5.3% 2PX(C46)
24	+ 11.2% 4PX(C48) + 10.2% 4PX(C52) + 8.5% 3PX(C52) + 8.0% 3PX(C48) - 6.1% 4PX(C50) - 5.8% 4PX(C49)
25	+ 13.3% 3PX(C39) + 8.3% 4PX(C39) + 7.8% 3PZ(C39) + 7.0% 2PX(C39) - 5.9% 3PX(O40) + 5.0% 4PZ(C39)
26	+ 6.4% 3PZ(C32) + 4.6% 3PZ(C14) - 4.1% 3PX(C14) + 3.7% 4PX(C36) + 3.5% 3PX(C36) + 3.5% 4PZ(C32)
27	- 11.6% 3PX(C39) - 10.1% 3PZ(C39) - 7.2% 4PX(C39) - 6.4% 4PZ(C39) - 6.1% 2PX(C39) - 5.3% 2PZ(C39)
28	+ 12.9% 4PY(C58) + 12.7% 4PY(C62) + 10.5% 3PY(C62) + 10.3% 3PY(C58) + 5.9% 2PY(C62) + 5.8% 2PY(C58)
29	+ 11.7% 4PY(C64) + 10.2% 3PY(C57) + 9.6% 3PY(C64) + 9.0% 4PY(C57) - 7.6% 4PY(C58) - 6.7% 4PY(C62)
30	+ 11.3% 4PZ(C75) + 10.3% 4PZ(C79) + 8.5% 3PZ(C79) + 8.4% 3PZ(C75) - 5.5% 4PZ(C81) - 5.4% 3PZ(C74)
31	+ 8.7% 4PZ(C74) + 7.9% 4PZ(C78) + 6.5% 3PZ(C78) + 6.3% 3PZ(C74) - 4.0% 3PZ(C73) - 4.0% 4PZ(C80)
32	+ 4.7% 4PZ(C40) + 4.5% 4PZ(C41) + 4.0% 3PZ(C40) + 3.6% 3PZ(C41) + 3.6% 4PX(C40) - 3.6% 4PY(C41)
33	- 14.9% 3PZ(C38) - 9.7% 4PZ(C38) - 7.8% 2PZ(C38) + 7.0% 3PZ(O39) + 4.5% 3S(H30) + 4.3% 2PZ(O39)
34	- 5.7% 4PY(C64) + 5.5% 4PY(C63) + 5.4% 4PY(C67) - 5.2% 4PY(C65) - 4.5% 3PY(C64) + 4.4% 3PY(C67)
35	- 10.9% 3PX(C39) - 6.8% 4PX(C39) - 5.7% 2PX(C39) + 5.0% 3PZ(C39) + 4.9% 3PX(O40) + 3.9% 3S(H31)
36	- 11.7% 3PY(C56) - 7.3% 4PY(C56) - 6.1% 2PY(C56) - 5.8% 3PX(C56) + 5.3% 3PY(O57) - 4.3% 4PX(C56)
37	+ 15.2% 3PX(C28) + 9.8% 4PX(C28) + 7.9% 2PX(C28) + 6.2% 3PZ(C28) - 5.3% 3PX(O29) + 3.4% 2PZ(C28)

Table 6. The results of factor analysis.

Descriptors	E _{HOMO}	E _{LUMO}	ΔE	DM	MV	TNC	η	σ	χ	μ	ω	SEZPE
Factor 1	- .909	.12	.976	-.537	-.859	.93	.971	-.972	.75	-.74	.12	.948
Factor 2	.09	.92	.13	-.357	.10	.09	.20	.13	.659	-.659	.93	0.1

In order to determine which descriptors to be used in the modelling, Genetic Algorithm based fitness function was employed to minimize the squared differences between the observed values and the estimated values of the dependent variable. Hence, four different sets of descriptors are determined. Those sets are denoted in **Table 7**.

Table 7. Four alternative sets of descriptors having minimized function values.

Descriptors	Sets			
	Set 1	Set 2	Set 3	Set 4
	E _{LUMO}	TNC	TNC	TNC
	TNC	DM	μ	ω

Using linear regression model with 20 percent holdout validation, which means that the total data set was randomly split into two non-overlapping sets. While randomly selected 30 molecules, 80 percent of data, was allocated for training set, 7 molecules, 20 percent of data, was used for validation set. The results of the models were summarized in **Table 8**.

According to **Table 8**, model 3 has the highest R² and Q² scores among others. Hence, the full coefficients of the model are expressed as follows:

$$\log K = 29.540 - 2.172 * \text{TNC} + 7.705 * \mu$$

Table 8. Findings related to four alternative models.

Descriptors	Model			
	1	2	3	4
	TNC and E _{LUMO}	TNC and DM	TNC and μ	TNC and ω
Coefficients	3.277/-3.085	-3.181/-0.557	-2.172/7.705	-2.781/-5.328
R ² ---Q ² values	0.78---0.80	0.78---0.83	0.81---0.83	0.79---0.81

The factor analysis results for the same molecules whose descriptor values were calculated by B3LYP/6-311++G(2d,2p) method are summarized in **Table 9**.

Table 9. The results of factor analysis.

Descriptors	E _{HOMO}	E _{LUMO}	ΔE	DM	MV	TNC	η	σ	χ	μ	ω	SEZPE
Factor 1	-.931	.046	.966	-.445	-.934	.916	.966	-.965	.830	-.830	.488	.954
Factor 2	.321	.954	-.04	-.454	-.009	-.04	-.04	.04	-.55	.55	-.86	-0.02

While first factor consists of E_{HOMO}, ΔE, MV, TNC, η, σ, χ, μ and SEZPE, the second factor composes of E_{LUMO}, DM and ω. The total variance explained by two factors is 88.37. The data set was split into two non-overlapping sets, which are training set and validation set. While 30 molecules randomly assigned to training set consisting of 80 percent of the data, the rest of the molecules, which is 7, is assigned to validation set accounting for 20 percent of the data set. Genetic Algorithm based minimization function just generates one set of descriptors, which are DM and TNC. Its model is given as follows:

$$\log K = 3.447 - 0.491 * \text{DM} - 2.151 * \text{TNC}$$

The R² and Q² values are 0.74 and 0.87, respectively. All calculations were done by SPSS 24.0 and Mat Lab 7.9 software.

4. CONCLUSIONS

A series of 37 polyamino-polycarboxylic ligands for prediction of stability constants of Gd(III) complexes were synthesized and find molecular properties, quantum-chemical calculations by using DFT/B3LYP method with basis sets of the 6-311G(d,p) and 6-311++G(2d,2p). Quantum chemical features such as HOMO, LUMO, HOMO-LUMO energy gap, ionization energy, chemical hardness, chemical softness, electronegativity, chemical potential, dipole moment etc. values for gas phase of neutral molecules were calculated and discussed. According to E_{HOMO} and I results, the electron donating trends for study molecules for gas can be written as for first five molecules: The electron donating trends for study molecules for gas can be written as for first five molecules: 33>30>37>28>31 with B3LYP/6-311G(d,p), and 33>37>28>31>30 with 6-311++G(2d,2p) method. According to energy gap (ΔE), hardness and softness results, the most stable five molecules are found as 1>2>6>20>10 for 6-311G(d,p) and 1>2>6>10>4 for 6-311++G(2d,2p). The most unstable molecules are found as 31, 33 and 37 with 6-311++G(2d,2p) basic set. In general, ΔE values were found with 6-311G(d,p) to be larger than 6-311++G(2d,2p).

4.1. Statistical Conclusion

Two different methods, namely, B3LYP/6-311G(d,p) and B3LYP/6-311++G(2d,2p), are employed to calculate the values of twelve descriptor variables, namely, E_{HOMO} , E_{LUMO} , ΔE , DM, MV, TNC, η , σ , χ , μ , ω and SEZPE. While the first method is used for 37 molecules, the second one is employed for 35 molecules. Those descriptor variables are used to construct models against the values of log K. Before constructing models for each method, those descriptors are factor analysed in order to determine independent set of variables due to existence of co-linearity among them. Then, Genetic Algorithm based minimization function is used in order to determine candidate set of variables in the construction of models. While Genetic Algorithm based minimization, function provides four different sets of variables to choose from since function values are same for the first method, it provides just one set of variables for the second method.

Using those sets of variables generates the better model with the highest R^2 and Q^2 values when compared with others. The linear regression function composes of the descriptors, namely, TNC and μ based on the method called B3LYP/6-311G(d,p). The similar model is constructed based on the method called B3LYP/6-311++G(2d,2p) with descriptors, namely, DM and TNC.

Rererences

- [1] De Haenx, C. 2001. *Top. Magn. Reson. Imaging*, 12, 221-230.
- [2] Westbrook, C., Kaut, C. 1998. *MRI in Practice*, 2th ed, Blackwell Science, 215-218.
- [3] Kirchin, M. A., Runge, V. M. 2003. *Top. Mag. Res. Ima.*, 14, 426-435.
- [4] Reimer, P., Schneider, G., Schima, W. 2004. *Eur. Radiol.*, 14, 559-578.
- [5] Sheppard, D., Allan, L., Martin, P., Mc Leay, T., Milne, W., Houston, J. G. 2004. *J. Magn. Reson. Imaging*, 20, 256-263.
- [6] Frullano, L., Wang, C., Miller, R. H., Wang, Y. 2011. *J. Am. Chem. Soc.*, 133, 1611-1613.
- [7] Frullano, L., Zhu, J., Wang, C., Wu, C., Miller, R. H., Wang, Y. 2012. *J. Med. Chem.*, 55, 94-105.
- [8] Frullano, L., Zhu, J., Miller, R. H., Wang, Y. 2013. *J. Med. Chem.*, 28, 1629-1640.
- [9] Fuchter, M. J., Zhong, C., Zong, H., Hoffman, B. M., Barrett, A. G. M. 2008. *Aust. J. Chem.*, 61, 235-255.
- [10] Lee, S., Vesper, B. J., Zong, H., Hammer, N. D., Elseth, K. M., Barrett, A. G. M., Hoffman, B. M., Radosevich, J. A. 2008. *Metal-Based Drugs*, 30, 3914-3918.
- [11] Trivedi, E. R., Vesper, B. J., Weitman, H., Ehrenberg, B., Barrett, A. G. M., Radosevich, J. A., Hoffman, B. M. 2010. *Photochem Photobiol*, 86, 410-417.
- [12] Trivedi, E. R., Ma, Z., Waters, E. A., Macrenaris, K. W., Subramanian, R., Barrettf, A. G. M., Meade, T. J., Hoffman, B. M. 2014. *Contrast Media Mol. Imaging*, 9, 313-322.
- [13] Vlaardingerbroek, M. T., Boer, J. A. 2003. *Magnetic Resonance Imaging: Theory and practice*; Springer, Verlag: Heidelberg, Germany.
- [14] Kiani-Anbouhi, R., Shahabi, S., Ganjali, M. R., Norouzi, P. 2011. Prediction of Gd(III) complexes stability constants for the development of MRI contrast agents, *Int. Conf. on Biology, Environment and Chemistry IPCBEE*, IACSIT Press, Singapore, 24, 381-385.
- [15] Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; Scuseria, G. E.; Robb, M. A.; Cheeseman, J. R.; Scalmani, G.; Barone, V.; Mennucci, B.; Petersson, G. A.; Nakatsuji, H.; Caricato, M.; Li, X.; Hratchian, H. P.; Izmaylov, A. F.; Bloino, J.; Zheng, G.; Sonnenberg, J. L.; Hada, M.; Ehara, M.; Toyota, K.; Fukuda, R.; Hasegawa, J.; Ishida, M.; Nakajima, T.; Honda, Y.; Kitao, O.; Nakai, H.; Vreven, T.; Montgomery, J. A., Jr.; Peralta, J. E.; Ogliaro, F.; Bearpark, M.; Heyd, J. J.; Brothers, E.; Kudin, K. N.; Staroverov, V. N.; Kobayashi, R.; Normand, J.; Raghavachari, K.; Rendell, A.; Burant, J. C.; Iyengar, S. S.; Tomasi, J.; Cossi, M.; Rega, N.; Millam, J. M.; Klene, M.; Knox, J. E.; Cross, J. B.; Bakken, V.; Adamo, C.; Jaramillo, J.; Gomperts, R.; Stratmann, R. E.; Yazyev, O.; Austin, A. J.; Cammi, R.; Pomelli, C.; Ochterski, J. W.; Martin, R. L.; Morokuma, K.; Zakrzewski, V. G.; Voth, G. A.; Salvador, P.; Dannenberg, J. J.; Dapprich, S.; Daniels, A. D.; Farkas, Ö.; Foresman, J. B.; Ortiz, J. V.; Cioslowski, J.; Fox, D. J. *Gaussian, Inc.*, Wallingford CT, 2009.
- [16] Petersson, G. A., Bennett, A., Tensfeldt, T. G., Al-Laham, M. A., Shirley, W. A., J. Mantzaris, J. 1988. *Chem. Phys.*, 89, 2193-2218.
- [17] Becke, A. D. 1993. *J. Chem. Phys.*, 98, 5648-5653.
- [18] Costa, J. M., Llush, J. M. 1984. *Corros. Sci.*, 24, 929-933.
- [19] Lee, C., Yang, W., Parr, R. G. 1988. *Phys. Rev. B*, 41, 785-789.
- [20] Gorelsky, S. I. 2009. AOMix: Program for molecular orbital analysis, University of Ottawa, Ottawa, Canada, <http://www.sg-chem.net>.
- [21] Gorelsky, S. I., Lever, A. B. P. 201. *J. Organomet. Chem.*, 635, 187-196.
- [22] Saracoglu, M., Elusta, M. I. A., Kaya, S., Kaya, C., Kandemirli, F. 2018. *Int. J. Electrochem. Sci.*, 13, 8241-8259.
- [23] Kaya, S., Kaya, C., Guo, L., Kandemirli, F., Tüzün, B., Uğurlu, İ., Madkour, L. H., Saracoglu, M. 2016. *J. Mol. Liq.*, 219, 497-504.
- [24] Ebenso, E. E., Arslan, T., Kandemirli, F., Love, I., Öğretir, C., Saracoglu, M., Umoren, S. A. 2010. *Int. J. Quantum Chem.*, 110, 2614-2636.

- [25] Amin, M. A., Ahmed, M. A., Arida, H. A., Arslan, T., Saracoglu, M., Kandemirli, F. 2011. *Corros. Sci.*, 53, 540-548.
- [26] Amin, M. A., Ahmed, M. A., Arida, H. A., Kandemirli, F., Saracoglu, M., Arslan, T., Basaran, M. A. 2011. *Corros. Sci.*, 53, 1895-1909.
- [27] Zor, S., Saracoglu, M., Kandemirli, F., Arslan, T. 2011. *Corrosion*, 67, 125003-1-11.
- [28] Kandemirli, F., Saracoglu, M., Bulut, G., Ebenso, E., Arslan, T., Kayan, A. 2012. *ITB J. Science (J. Math. and Fund. Sci.)*, 44A, 35-50.
- [29] Amin, M. A., Hazzazi, O. A., Kandemirli, F., Saracoglu, M. 2012. *Corrosion*, 68, 688-698.
- [30] Kandemirli, F., Saracoglu, M., Amin, M. A., Basaran, M. A., Vurdu, C. D., (2014). *Int. J. Electrochem. Sci.*, 9, 3819-3827.
- [31] Amin, M. A., El-Bagoury, N., Saracoglu, M., Ramadan, M. 2014. *Int. J. Electrochem. Sci.*, 9, 5352-5374.
- [32] Kandemirli, F., Vurdu, C. D., Saracoglu, M., Akkaya, Y., Cavus, M. S. 2015. *Int. Res. J. Pure Appl. Chem.*, 9, 1-16.
- [33] El-Bagoury, N., Amin, M. A., Saracoglu, M. 2015. *Int. J. Electrochem. Sci.*, 10, 5291-5308.
- [34] İlhan, İ. Ö., Çadır, M., Saracoglu, M., Kandemirli, F., Kökbudak, Z., Akkoç, S. 2015. *Chem. Sci. Rev. Lett.*, 4, 838-850.
- [35] Amin, M. A., Fadlallah, S. A., Alosaimi, G. S., Kandemirli, F., Saracoglu, M., Szunerits, S., Boukherroub, R. 2016. *Int. J. Hyd. Energy*, 41, 6326-6341.
- [36] Tazouti, A., Galai, M., Touir, R., Touhami, M. E., Zarrouk, A., Ramli, Y., Saraçoğlu, M., Kaya, S., Kandemirli, F., Kaya, C., 2016. *J. Mol. Liquids*, 221, 815-832.
- [37] Amin, M. A., Saracoglu, M., El-Bagoury, N., Sharshar, T., Ibrahim, M. M., Wysocka, J., Krakowiak, S., Ryl, J. 2016. *Int. J. Electrochem. Sci.*, 11, 10029-10052.
- [38] Saracoglu, M., Kandemirli, F., Ozalp, A., Kokbudak, Z. 2017. *Chem. Sci. Rev. Lett.*, 6, 1-11.
- [39] Saracoglu, M., Kandemirli, F., Ozalp, A., Kokbudak, Z. 2017. *Int. J. Sci. Eng. Inv.*, 6, 50-57.
- [40] Madkour, L. H., Kaya, S., Kaya, C., Guo, L. 2016. *J. Taiwan Inst. Chem. Eng.*, 68, 461-480.
- [41] Saracoglu, M., Kandemirli, S. G., Başaran, A., Sayiner, H., Kandemirli, F. 2011. *Curr. HIV Res.*, 9, 300-312.
- [42] Saracoglu, M., Kandemirli, F., Amin, M. A., Vurdu, C. D., Cavus, M. S., Sayiner, G. 2015. *The Quantum Chemical Calculations of Some Thiazole Derivatives, Proceedings of the 3rd International Conference on Computation for Science and Technology (ICCST-3), Conference Paper, Published by Atlantis Press*, 5, 149-154.
- [43] Pearson, R. G. 1986. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.*, 83, 8440-8441.
- [44] Khaled, K. F. 2010. *Electrochim. Acta*, 55, 6523-6532.
- [45] Pauling, L. 1960. *The Nature of the Chemical Bond*. Cornell University Press, Ithaca, New York.
- [46] Özalp, Z., Kökbudak, M., Saracoglu, F., Kandemirli, İ.Ö., İlhan, C.D., Vurdu, 2015. *Chem. Sci. Rev. Lett.*, 4, 719-728.
- [47] Chattaraj, P. K., Sarkar, U., Roy, D. R. 2006. *Chem. Rev.*, 106, 2065-2091.
- [48] Ebenso, E. E., Kabanda, M. M., Arslan, T., Saracoglu, M., Kandemirli, F., Murulana, L. C., Singh, A. K., Shukla, S. K., Hammouti, B., Khaled, K. F., Quraishi, M. A., Obot, I. B., Edd, N. O. 2012. *Int. J. Electrochem. Sci.*, 7, 5643-5676.
- [49] Musa, A. Y., Kadhum, A. H., Mohamad, A. B., Rohoma, A. B., Mesmari, H. 2010. *J. Mol. Struct.*, 969, 233-237.
- [50] Rauk, A. 2001. *Orbital interaction theory of organic chemistry*. 2nd ed; Wiley Sons, New York, USA.
- [51] Obi-Egbedi, N. O., Obot, I. B., El-Khaiary, M. I. 2011. *J. Mol. Struct.*, 1002, 86-96.
- [52] Djenane, M., Chafaa, S., Chafai, N., Kerkour, R., Hellal, A. 2019. *J. Mol. Struct.*, 1175, 398-413.
- [53] Bhawsar, J., Jain, P., Valladares-Cisneros, M. G., Cuevas-Arteaga, C., Bhawsar, M. R. 2018. *Int. J. Electrochem. Sci.*, 13, 3200-3209.
- [54] Obot, I. B., Obi-Egbedi, N. O., Eseola, A. O. 2011. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 50, 2098-2110.
- [55] Obot, I. B., Obi-Egbedi, N. O., Ebenso, E. E., Afolabi, A. S., Oguzie, E. E. 2013. *Res. Chem. Intermed.*, 39, 1927-1948.
- [56] Pearson, R. G. 1963. *J. Am. Chem. Soc.*, 85, 3533-3539.
- [57] Bhawsar, J., Jain, P., Valladares-Cisneros, M. G., Cuevas-Arteaga, C., Bhawsar, M. R. 2018. *Int. J. Electrochem. Sci.*, 13, 3200-3209.
- [58] Pearson, R. G. 1993. *Acc. Chem. Res.*, 26, 250-255.
- [59] Verma, C., Quraishi, M. A., Kluza, K., Makowska-Janusik, M., Olasunkanmi, L. O., Ebenso, E. E. 2017. *Sci. Rep.*, 7, 44432-1-17.
- [60] Gece, G. 2008. *Corros. Sci.*, 50, 2981-2992.
- [61] Gao, G., Liang, C. 2007. *Electrochim. Acta*, 52, 4554-4559.
- [62] Sahin, M., Gece, G., Karci, F., Bilgic, S. 2008. *J. Appl. Electrochem.*, 38, 809-815.
- [63] Quraishi, M. A., Sardar, R. 2003. *J. Appl. Electrochem.*, 33, 1163-1168.
- [64] Kaya, S., Banerjee, P., Saha, S. K., Tüzün, B., Kaya, C. 2016. *RSC Adv.*, 6, 74550-74559.
- [65] Khaleda, K. F., Al-Qahtani, M. M. 2009. *Mater. Chem. Phys.*, 113, 150-158.
- [66] Guan Luo, Y. C., Han, K. N. 1998. *Corrosion*, 54, 721-731.
- [67] Martinez, S., Štagljar, I. 2003. *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)*, 640, 167-174.
- [68] Gece, G., Bilgiç, S. 2009. *Corros. Sci.*, 51, 1876-1878.

Karar Destek Sistemleri Kullanarak Safranbolu Tabakhane Binasının Yeniden Kullanım Olanaklarının Değerlendirilmesi

Ömer Özeren*¹, Mustafa Korumaz²

*¹Konya Teknik Üniversitesi Mimarlık Fakültesi Mimarlık Bölümü, KONYA

²Konya Teknik Üniversitesi Mimarlık Fakültesi Mimarlık Bölümü, KONYA

ORCID: 0000-0002-7930-1740¹, 0000-0001-6337-9087²

(Alınış / Received: 11.03.2019, Kabul / Accepted: 28.03.2019, Online Yayınlanma / Published Online: 30.04.2019)

Anahtar Kelimeler

AHP, Safranbolu, Koruma,
Tabakhane, Yeniden
İşlevlendirme

Öz: Safranbolu tarihi ve kültürel zenginliği ile UNESCO tarafından kabul edilen dünya mirası kentleri arasındadır. Kent merkezinin bulunduğu çukur bölgesi, dönemin ticaret merkezidir. Farklı gelir kaynaklarına sahip olan kent deri sektöründe döneminde önemli merkezlerden birisidir. Bu sebeple döneminde aktif olarak işletilen 48 adet tabakhane atölyesi hizmet vermekteydi. Günümüze ulaşan tescilli 12 adet tabakhane binası bulunmaktadır. Bunlardan kaderine terk edilmiş Safranbolu Tabakhane Binasının yeniden kentte kazandırılması ve yeni işlevin belirlenmesi kentte tartışılan bir konudur.

Makalenin amacı, Safranbolu Tabakhane Binasının yeniden işlevlendirilme aşamasında bilimsel altyapıya sahip, farklı kriterlerin değerlendirildiği bir karar verme süreci gerçekleştirmektir. Çalışma içeriğinde, anket çalışmalarından yararlanarak, AHP metodu ile analitik bir karar verme süreci gerçekleştirilmiştir. Yapıya verilecek işlevin belirlenmesinde paydaşların katılımı ile müze işlevi en çok puanı almış, yeni işlev olarak önerilmiştir

Examination Of Safranbolu Tannery Buildings Refunction Process Using With Decision Support Systems

Keywords

Adaptive Reuse, AHP,
Safranbolu, Protection,
Tannery

Abstract: Safranbolu is among the world heritage cities which are accepted by UNESCO with its historical and cultural richness. The pit area where the city center is located is the trade center of the period. The city, which has different sources of income, is one of the important centers in the period of leather industry. For this reason, there are 48 tannery workshops active during the period. There are 12 registered tannery building that has survived. The purpose of this study is to restore the abandoned Safranbolu Tannery Building, which is one of them, to the city. AHP method was used to make scientific based analytical decision by using survey studies. As a result of the analytical calculations with the participation of stakeholders in the determination of the function to be given to the structure, the museum function received the most points among the alternative functions.

1. Giriş

Tabakhane binaları, inşa edildiği ve işletildiği dönemlerde kentlerin sanayi merkezleri olmuş ve nüfusun büyük bölümünün istihdamlarını sağlayarak kentlerin ekonomilerine katkı sağlamışlardır. Her ne kadar dini, siyasi ve askeri yapılar kadar kentsel alanda baskın olmasalar da, mütevazı duruşları ile dönemlerinin modern fabrikaları olan bu yapılar, yapım teknikleri ile de inşa edildiği dönemlerinin güçlü özelliklerini barındırmaktadır.

Kentlerin hafızalarında önemli yerleri olan bu yapılar, zaman içerisinde teknolojik gelişmeler neticesinde terk edilmiş ve işlevlerini yitirmişlerdir. Günümüzde atıl halde bulunan bu yapıların birçoğu zamanla harap olup gitmektedir. Kentlerin kimliklerinin oluşmasında önemli yerleri olan bu gibi yapılar kentlere yeniden kazandırılmazlarsa geçmiş ile bağlar kopacak, kültürel değerler unutulup yeni nesillere aktarılamayacaktır. Bu nedenle endüstriyel miras olan tabakhane binaları hem tarihsel hem kültürel değerler açısından korunmalı ve yeniden kullanılarak yaşatılmalıdır.

Tabakhane Binaları, Geleneksel Türk evleriyle tanınan Safranbolu'nun 19. yüzyılda ticari lokomotifi olduğu deri sektörünün birincil elemanıdır. Çukur mevkiinde bulunan 3.dereceden tescilli 12 tabakhane binası bulunmakla birlikte, dönemlerinde bu bina sayılarının 40 ve üzerinde olduğu bilinmektedir. Aktif olarak işletildikleri dönemlerde bu yapılar şehrin hayvancılık ve tarımdan sonra en büyük iş kolu kabul edilmektedir. Ayrıca tabakhane yapıları, derilerin işlenerek farklı ürünlerin üretilmesiyle, kentte sektörün alt kollarının gelişmesinde önemli yer teşkil etmişlerdir. Bu sayede ticaret hacmi artan kentin ekonomik gücü sayesinde sivil mimari yapılarına kaynak temin edilmiştir.

2. Metot

Bu çalışmanın değerlendirme yöntemi AHP (Analytic Hierarchy Process)'dir. Bu yöntemi kullanarak farklı paydaşların katılımları ile tarihi yapılar için en uygun fonksiyonun seçiminin yapılması hedeflenmiştir. AHP analiz yöntemi, sistematik olarak yeni işlev alternatiflerinin karşılaştırılması ve etken faktörlerin ağırlıklarının bulunması ile en uygun çözümün bulunması konusunda yardımcı olmuştur.

Tabakhane Binaları İçin İşlev Araştırması: Tabakhane yapılarının yeni işlevi seçilirken kentsel ölçekte bir anket çalışması yapılmıştır. Böylece kentlinin konu ile ilgili düşüncelerinin tespit edilmesi amaçlanmıştır. Bu anket çalışması ile kentlinin gereksinim duydukları fonksiyonların belirlenmesi, kentlinin kültürel miras ile ilgili karar verme sürecinde katılımlarının sağlanması hedeflenmiştir. Kentlinin yapı için uygun gördüğü fonksiyonlar ve önem sıraları belirlenmeye çalışılmıştır. 150 kişinin katıldığı anket çalışmasında, Tabakhane binaları ile ilgili kentlinin görüş ve fikirleri elde edilmiştir. Anket sonucunda en çok beş oyu alan alternatifler belirlenmiştir. Bunlar; Kültür Merkezi, Müze, Eğitim Yapısı, Otel ve Kafe-Restoran'dır.

Değerlendirme yönteminde kullanılacak kriterler ise literatür araştırmaları doğrultusunda, altı madde ile ilişkilendirilmiştir. Bu kriterler, Kültürel, Ekonomik, Mimari, Çevresel, Sosyal ve Süreklilik olarak belirlenmiştir. Belirlenen kriterler doğrultusunda, alternatifler ile beraber alanlarında uzman 10 kişi ile birlikte, ayrıca meslek ayrımı yapmadan kentliden oluşan 10 kişilik denek grupları ile AHP (Analytic Hierarchy Process) değerlendirmesi yapılmıştır. Anket sonucunda AHP analiz yönteminin matris hesaplamaları yapılmış ve bu hesaplama sonucunda, etken faktörlerin önem sıralamaları elde edilmiştir. Faktörlerin belirlenen önem derecesine göre kentli ile yapılan ankette elde edilen veriler doğrultusunda 5 fonksiyon türünün en uygun olanı saptanmıştır.

3. Kaynak Araştırması

AHP (Analytic Hierarchy Process) karmaşık sorunlara yönelik karar verme sürecini kolaylaştırmak için, çoklu kriterlere göre sayısal tabanlı bir karar verme süreci olup, AHP niteliksel özelliklerden niceliksel sonuçlar elde etme yöntemidir [1]. AHP analizi, problemi oluşturan elamanların önem sıralamasının gösterilmesine yönelik sistematik bir süreçtir ve farklı faktörlerin analizlerini yaparak, hangisinin daha önemli olduğunu tespit eder. Değerlendirme sonucunda ise, en önemli etken belirlendiği gibi, alternatif öneriler de elde edilebilir [2]. AHP, T. Saaty tarafından 1970'li yıllarda geliştirilen çok kriterli karar verme tekniğidir [3]. Bu yöntemin seçim sürecinde kullanılmasında en büyük etken nitel ve nicel birden fazla kriterin değerlendirilmesini içeren bir yöntem olmasıdır. Bu yöntemle karmaşık gibi görünen problemler, belirlenen ana hedeften alt kriterlere uzanan bir hiyerarşik yapı içerisinde gösterilebilmektedir [4].

Yedla ve Shrestha [5] AHP yöntemi ile taşımacılık alternatiflerinin seçimi üzerine çalışmışlardır. Yurdakul [6] AHP ve hedef programlama yöntemini kullanarak bilgisayar üretim teknolojilerinin seçimini yapmıştır. Tzeng vd., [7] AHP ve TOPSIS kullanarak toplu taşıma için yakıt seçimi yapmışlardır. Awasthi ve Chauhan [8] AHP yöntemi ile çevre dostu ulaştırma modunun seçimi üzerine çalışmışlardır. Ersöz, Kabak vd., [9] ANP ve TOPSIS yöntemleri ile lisansüstü öğrenimde ders seçimi üzerine çalışmışlardır. Ömürbek vd., [10] AHP ve TOPSIS yöntemleri ile kurumsal proje yönetimi yazılım geliştirmede kullanılacak programın seçilmesi üzerine çalışmışlardır. Keleş ve Tunca [11] bu yöntem teknokent seçimi yapmışlardır. Hamurcu ve Eren [12] AHP yöntemi ile monoray güzergâh seçimi, çok kriterli karar verme yöntemleri ile monoray seçimi yapmışlardır. Harputliligil [13] "Yapı Elde Etme Sürecinde Mimari Tasarım Kalitesinin Ölçülmesi Ve Arttırılmasına Yönelik Analitik Hiyerarşi Prosesi Tabanlı Karar Destek Yaklaşımı Ve Örnek Olaylarla Sınanması" isimli tez çalışmasında, AHP tabanlı mimari tasarım kalitesinin değerlendirilmesi yaklaşımları, AHP metodu ile analizler uygulama biçimleri ölçülebilir tasarım

kriterleri incelenmiştir. Çoklu karar verme süreçleri ile örnek olaylar incelenmiştir. Alternatiflerin ve kriterlerin seçilmesi incelenmiştir. Bilimsel verilerin AHP tabanlı Expert Choice programına girilmesi, program aracılığı ile analizlerin yapılması ve AHP değerlendirme yönteminin profesyonel yazılımlar ile hesaplamaları incelenmiştir. Huey-Jiun, Zhi-Teng [14] "A multi-objective decision-making process for reuse selection of historic buildings" isimli makalesinde, tarihi binaların yeniden kullanılması için önerilen AHP metodu, tarihi binalarının yeniden kullanım olanakları ve kullanım kriterleri incelenmiştir. Çalışmadaki veriler incelenerek, metodun uygulanması için hiyerarşi tablosu detaylı olarak oluşturulmuştur. Yetim [15] "Gazi Üniversitesi Gazi Eğitim Fakültesi İlköğretim Matematik Öğretmenliği Programı Birinci Sınıf Öğrencilerinin Bu Programı Seçmelerinde Etkili Olan Öncelikli Faktörlerin Analitik Hiyerarşi Prosesi Metodu İle Analizi" isimli makalesinde, AHP metodu anket uygulamaları ve çoklu karar verme süreçleri incelenmiştir. Hiyerarşi tablosu, öz vektör ve diğer veriler detaylı olarak incelenmiştir. Anket sorularının hazırlanması ve cevaplarının ortalamaları alınarak tablolara işlenmesi incelenmiştir.

4.Safranbolu Tabakhane Binası

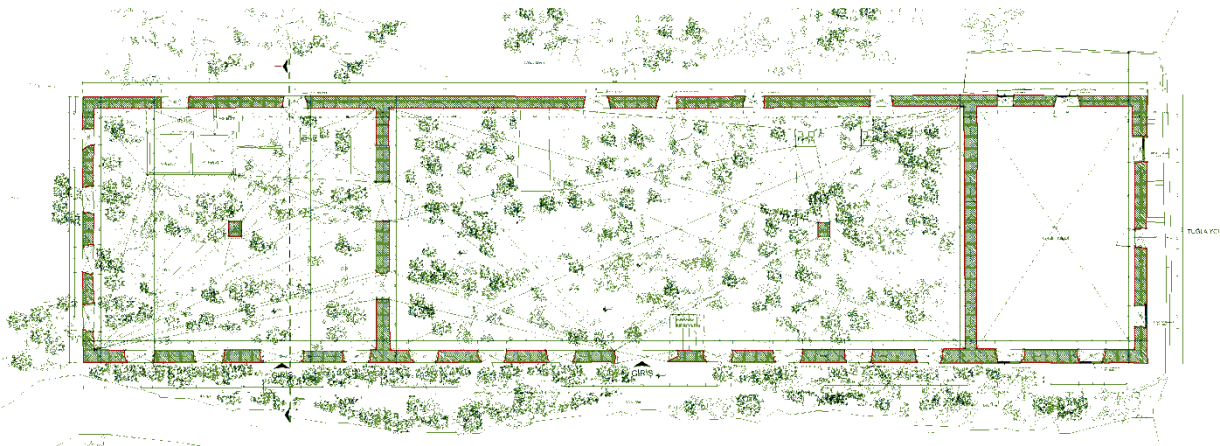
Yapı 429 Ada 2 ve 3. parselde bulunmaktadır. Bina deri imalathane binası olarak yapılmıştır. Yapı günümüzde iki şahsa aittir. Taşınmaz Kültür ve Tabiat Varlıkları Yüksek Kurulu'nca 997 sayılı kararlı 3.5.1985 tarihinde yapı tescillenmiştir. Ankara Kültür ve Tabiat Varlıkları Koruma Kurulu'nca 27.11.1990 tarihinde 1500 sayılı kanunla tescil durumunun devamına karar verilmiştir. Yapının tescil numarası E69A'dır [16]. Bölgede tescilli 12 deri imalathane binası vardır.



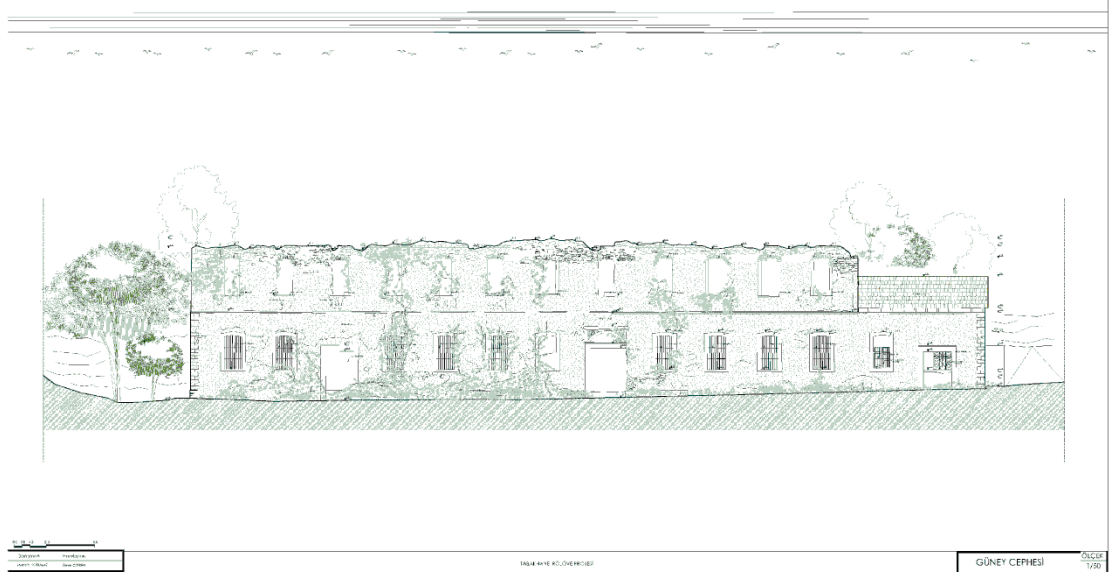
Şekil 1.Tabakhane Binasının 1900'lü yıllara ait fotoğrafı



Şekil 2.Tabakhane Binasının günümüze ait genel bakış



Şekil 3.Tabakhane Binası Plan



Şekil 4.Tabakhane Binası Güney Cephe

5.Alan Çalışması-Safranbolu Tabakhane Binası Yeni İşlevi Karar Verme Süreci

Herhangi bir konu ile ilgili karar verme süreci iki türlü yaklaşımla olabilir. Bu yaklaşımlardan birincisi sezgisel karar verme sürecidir. Hislere, duygulara dayalı, hızlı gelişen ve objektif olmayan bir karar verme sürecidir. Bir konu ile ilgili sezgilerin ön planda olduğu, hata yapma olasılığı yüksek bir süreçtir. İkinci yöntem ise, mantıksal karar verme sürecidir. Bu yöntem analitik ve sistematik bir hesaplama doğrultusunda verilen kararları içermektedir [17]. Sezgisel yöntemlerle yapıları yeniden işlev verilmesi uygulamalarının geneline yönelik değerlendirmeler yapmak hem zor hem de hatalı karar verme olasılığını yükseltmektedir. Bu yüzden bu çalışma kapsamında AHP (Analytic Hierarchy Process) sayısal değerlendirme tekniğini temel alan bir yöntem kullanılmıştır. Böylelikle yeniden işlev verilecek olan Tabakhane Binasına uygulanacak işlevin belirlenmesine yönelik sözel, sezgisel betimlemeye dayalı ve niteliksel verilerden hareketle sayısal, analitik ve niceliksel veriler elde edilmiştir. Bu kapsamda çalışmanın teorik alt yapısı, 6 değerlendirme ölçütü ile belirlenmiştir. Bu ölçütler Huey-Jiun, Zhi-Teng'dan alınmıştır. Bu değerlendirme içerisindeki ölçütler AHP yöntemi ile karşılaştırılarak derecelenmiş ve ölçütlerin önem sıraları elde edilmiştir. Sonrasında, tabakhane binasına verilecek yeni işlev alternatifleri AHP yöntemi ile değerlendirme ölçütlerine göre karşılaştırılıp derecelendirilerek, en yüksek puanı alan fonksiyon, tabakhane binasının yeni işlevine yönelik sonucu elde edilmiştir.

5.1. Ana Kriterler Seçimi, Değerlendirme Süreci

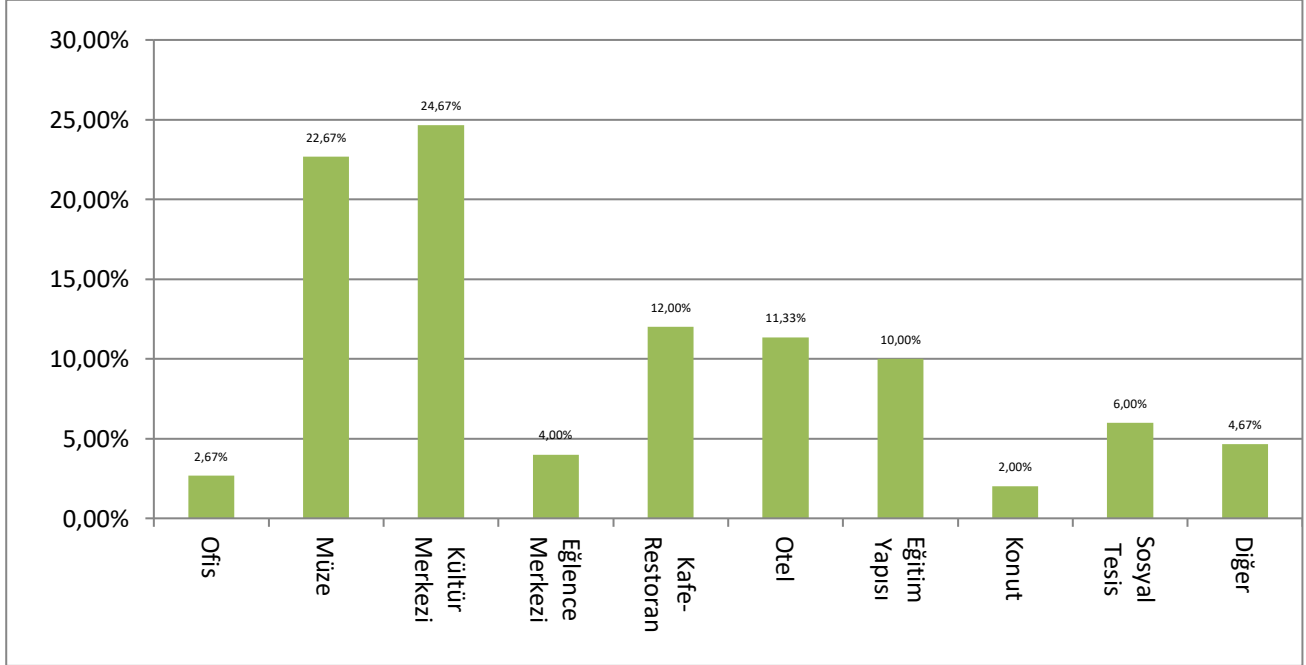
Feilden ve Jokilehto'e göre [18] tarihi bir bölgenin sosyal ve ekonomik faaliyetlerini iyileştirmek için gerekli veya özgün işlevsel canlılığını yitirmiş olan tarihi kent içerisinde tarihi binalar ve kentsel alanlarda harap hale gelen yapıların yeniden işlevlendirilmesinin amacı, koruma ve sürdürülebilirliktir. Bu kavramlar göz önüne alınarak yapılan literatür araştırmasında, özellikle Huey-Jiun, Zhi-Teng çalışmasından ve uzman görüşleri doğrultusunda 6 kriter belirlenmiştir (Tablo 1). Kriterlerin ağırlıklarının belirlenmesinde AHP yöntemi kullanılmıştır. Değerlendirme için veri toplama aşamasında yapılan anket çalışmasında her katılımcı ile yüz yüze görüşülmüştür. Katılımcıların anket sorularını anlamak için yönelttikleri sorular herhangi bir yönlendirme olmadan cevaplandırılmıştır. Anket çalışmasının ardından elde edilen veriler AHP tabanlı Expertchoice 11 yazılımı yardımıyla analiz edilmiştir.

Tablo 1. Seçim kriterlerinin tanımı

Kriterler	Tanımlar
Kültür Bakımından	Tarihsel Değer, Sanatsal Değer, Bütünlük veya Özgünlük koşulları
Ekonomik Bakımdan	Finansal Kaynaklar, İlk yatırım ve sonrası için bakım ihtiyaçları, Karlılık, Piyasadan Talep
Mimari Bakımdan	Binanın fiziksel durumu, Mimari karakter ve biçim, Mekan Kullanımları ve kazanımları, Yapısal değeri, Malzeme özellikleri
Çevresel Bakımdan	Bağlamsal değer ve çevresel etki, Arazi kullanımı, İmar planı, Bölgenin Potansiyeli, Bölgesel Politikalar
Sosyal Bakımdan	Yeni kullanıma sunulan kullanımların mevcut yapı ile uyumu, Kamu yararı, Sosyal Değer, Halkın bilinçlendirilmesi katılımı ve desteklenmesi
Süreklilik Bakımından	Yeterli koruma ve yönetim sistemi, Gelecekteki değişim fizibilitesi, Ekolojik ve Kültürel sürdürülebilirlik

5.2. Alternatiflerin Seçimi

Belirlenen fonksiyonlar interaktif ortamda 150 kişiyle yapılan değerlendirme sonucunda en çok tercih edilen 5 fonksiyon (Grafik 1.), alternatifler olarak belirlenmiştir. Bu belirlenen alternatif fonksiyonlar MS Excel formatında oluşturulan tabloya işlenmiştir. Çıkan sonuçlar sırasıyla Kültür Merkezi, Müze, Kafe-Restoran, Otel, Eğitim Yapısıdır.

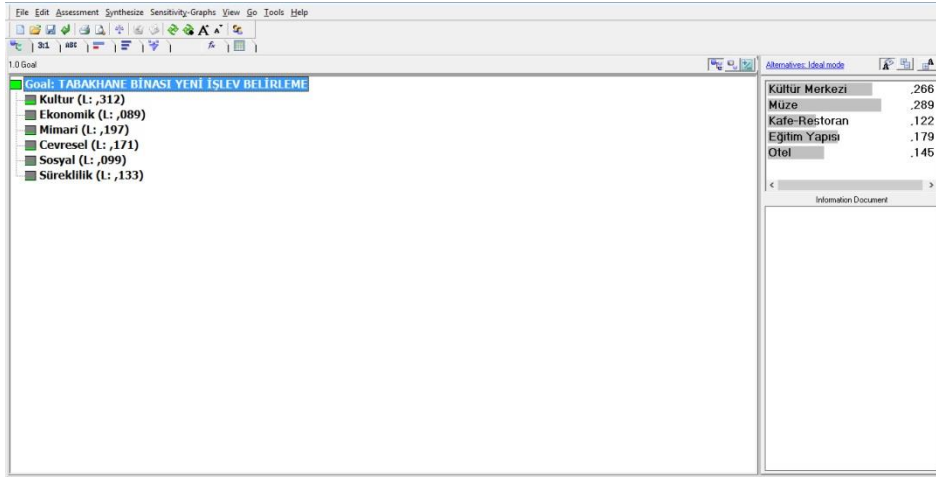
Grafik 1. Alternatiflerin sonuç tablosu

5.3. Ön Sonuçlar, Alan Çalışması Sonuçları

Çalışma Tabakhane binasına yeni verilecek fonksiyon alternatiflerinin değerlendirilmesi AHP ile yapılmıştır. Safranbolu tabakhane binasının yeni işlevini seçmelerinde etkili olan kriterlerin ağırlıklarını belirlemek için bir anket formu düzenlenmiştir. Bu anket formu 20 kişiye uygulanarak ikili karşılaştırmalarda kullanılmak üzere teknik uzman ve genel kullanıcıların oluşturduğu 20 kişinin yargıları elde edilmiştir. Bu kişiler 10'ar kişilik 2 ekibe ayrılmıştır. Teknik ekibi oluşturan 5 mimar, 1 makine mühendisi, 2 inşaat mühendisi, 1 elektrik mühendisi, 1

akademisyenden oluşan birinci ekip ve kullanıcılardan oluşan toplumun farklı kesimlerinden 10 kişilik karma ikinci ekipten oluşturulmuştur.

Üç düzeyli olarak problemin hiyerarşik yapısında ilk düzey hedefi yani Tabakhanenin yeni işlevinin; ikinci düzey kriterleri, üçüncü düzey ise alternatif fonksiyonları göstermektedir. Belirtilen 6 kriter için ikili karşılaştırma matrisi oluşturulmuştur. Bu matris, teknik ekip ve kullanıcıların Ankete verdikleri ikili karşılaştırma değerlerinden elde edilmiştir. Yargılar verilirken de şu soru sorulmuştur. “Tabakhane binasına verilecek yeni işlev düşünüldüğünde her bir kriter bir diğerinden ne kadar daha önemlidir?”, Yargılar, AHP için önerilen temel ölçek çizelgesi kullanılarak verilmiştir. Burada, birden çok karar verici olduğu için ikili karşılaştırmada her bir ikili karşılaştırma değeri için tek bir değer olacağından, 1–9 aralığında verilen her bir ikili karşılaştırma değerinin çarpımının o kadar dereceden kökü alınarak tek bir değer elde edilmiştir.



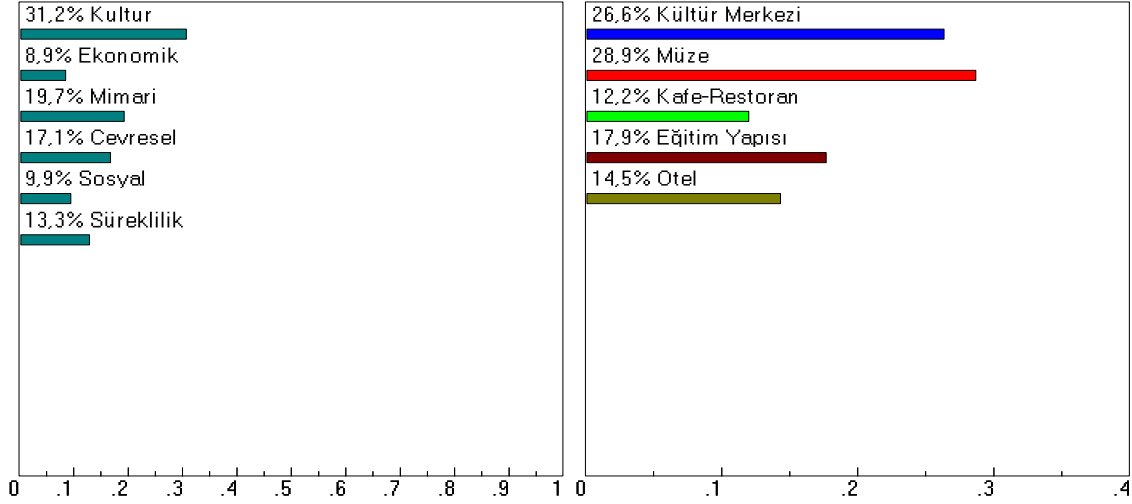
Şekil 5. AHP Çözüm Sonuçlarını Gösteren Program Arayüzü

Çıkan değerler hiyerarşi tablosunda bulunan öğelerin görelî önem değerleri ve tutarsızlık oranlarının hesaplanması için Expertchoice 11 programına girilmiştir. Programa ilk aşamada hedef ‘Tabakhane Binası Yeni İşlev Belirleme’ olarak tanımlanmıştır. Hedef tanımlandıktan sonra kriterler ve alternatifler sırasıyla programa girilmiş ve değerler ikili karşılaştırma alanına tanımlanmıştır. Bir sonraki aşamada program ikili karşılaştırma matrislerin analizlerini gerçekleştirmiştir. Kriterlerin ve alternatiflerin kendi aralarında karşılaştırılması yapılmıştır. Eşit ağırlıklarının değerlendirilmesi belirlenmiştir. Her bir ikili karşılaştırma matrisine ilişkin tutarlılık oranı bulunmuştur. Son olarak hedefe en uygun seçilecek alternatifin belirlenmiştir. Program kullanım kolaylığı sayesinde çıkan sonuçlar farklı değerlendirmelere imkân sağlamaktadır. Bireysel veya grup olarak katılımcıların değerlendirmelerine ulaşılabilir. Bu sayede farklı grupların tabakhane binasına yeni işlev belirleme aşamasında, kriterlerin görelî önem değerlerine ulaşabilmekteyiz. Tüm katılımcıların, teknik ekip ve kullanıcıların değerlendirme sonuçları program tarafından ayrı ayrı elde edilmiştir. Elde edilen sonuçlar aşağıda sırası ile verilmektedir.

Anket yapılan **tüm katılımcıların** sonuçlarının eşit ağırlıklarda değerlendirilmesi ile ortaya çıkan sonuçlara göre:

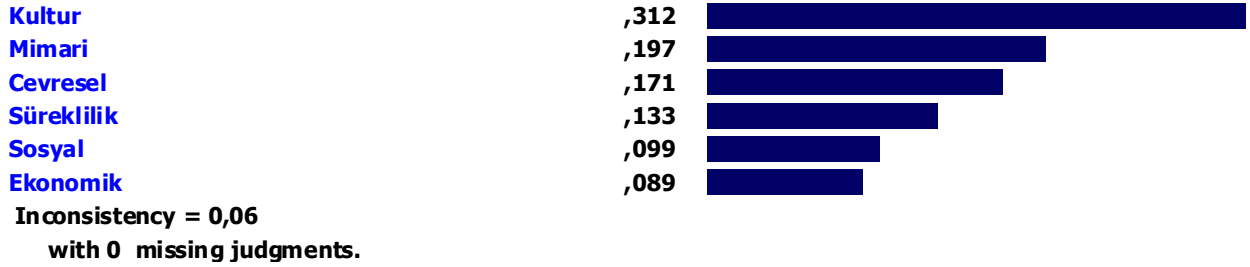
- Katılımcıların düşüncelerine göre ölçütler sırasıyla kültür (%31,2), ekonomik (%8,9), mimari (%19,7), çevresel (%17,1), sosyal (%9,9), süreklilik (%13,3)'dür (Grafik 2,3).
- Belirlenmiş öncelik oranları gözetilerek alternatiflerin değerlendirilmesinde, Müze diğer alternatiflere göre daha yüksek puan alarak yeni verilecek fonksiyon olarak bulunmuştur (Grafik 2,4).
- Katılımcıların düşüncelerine göre belirlenecek yeni işlev bakımından alternatifler Müze (%28,9), Kültür Merkezi (%26,6), Eğitim Yapısı (%17,9), Otel (%14,5), Kafe-Restoran (%12,9) olarak sıralanmıştır (Grafik 2,4).

Grafik 2. Ana ölçütlerin öncelikleri ve iki yapının değerlendirilmesi



Katılımcıların düşüncelerine göre ana ölçütler bağlamında alternatiflerin kıyaslaması yapılabilmektedir. Alternatifler altı ana ölçütün hangi yüzdelik dilemlerle diğer fonksiyonların ana ölçütüne oranla katılımcılarca öncelik gösterildiği anlaşılabilir.

Grafik 3. Tutarlılık oranı $0,06 < 0,10$ olduğu için tutarlıdır.



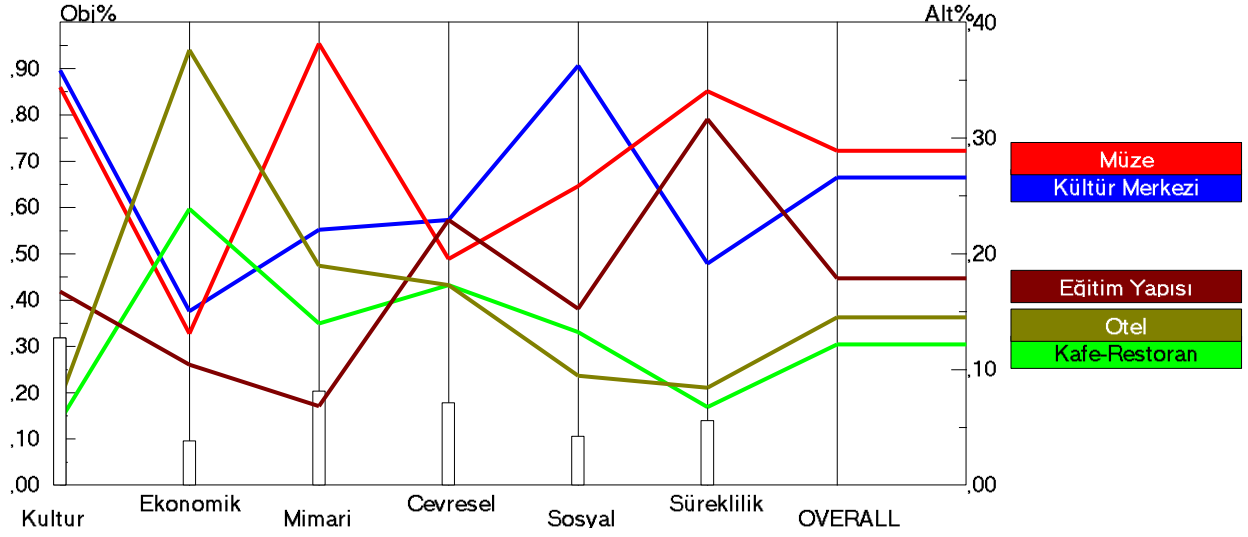
Grafik 4. Toplam Tutarlılık oranı $0,05 < 0,10$ olduğu için tutarlıdır.

Facilitator instance – Synthesis with respect to: Goal: TABAKHANE BİNASI YENİ İŞLEV BELİRLEME

Overall Inconsistency = ,05



Grafik 5. Alternatiflerinin ana ölçütler bağlamında karar eşik nokta analizleri

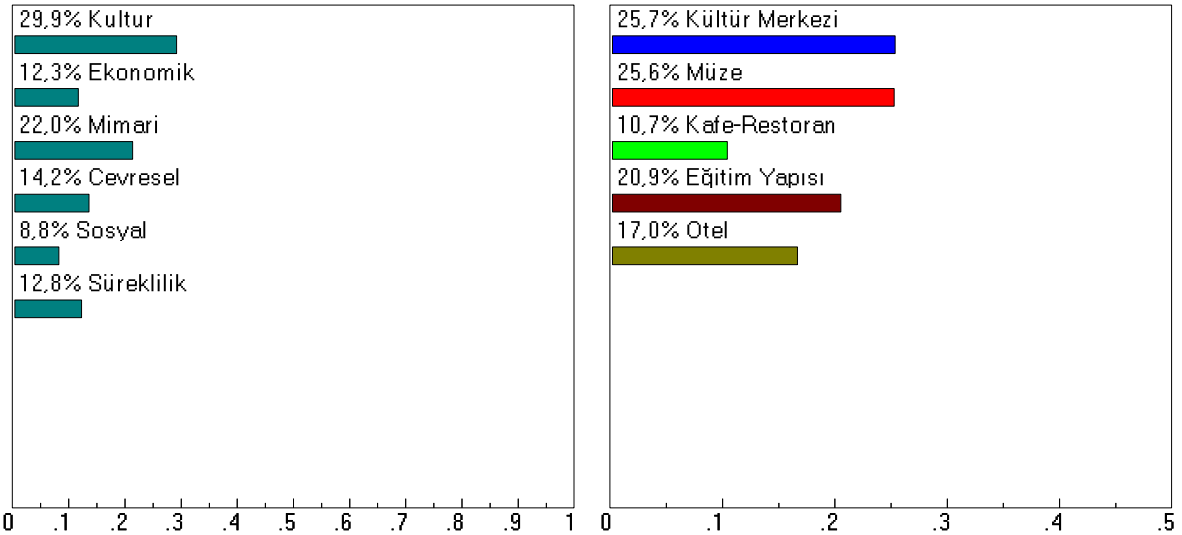


Anket yapılan **teknik ekipten** oluşan katılımcıların sonuçlarının eşit ağırlıklarda değerlendirilmesi ile ortaya çıkan sonuçlara göre:

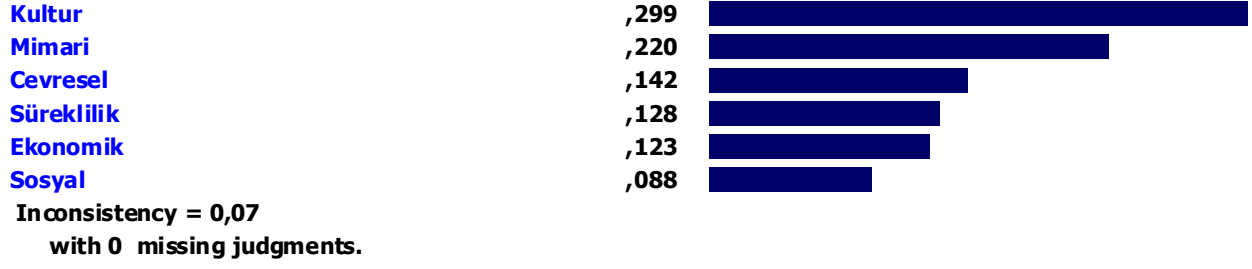
Katılımcıların düşüncelerine göre ölçütler sırasıyla kültür (%29,9), ekonomik (%12,3), mimari (%22,0), çevresel (%14,2), sosyal (%8,8) süreklilik (%12,8)'dir (Grafik 5,6).

Katılımcıların düşüncelerine göre belirlenecek yeni işlev bakımından alternatifler Kültür Merkezi (%25,7), Müze (%25,7), Eğitim Yapısı (%20,9), Otel (%17,0), Kafe-Restoran (%10,7) olarak sıralanmıştır (Grafik 7,8).

Grafik 6. Ana ölçütlerin teknik ekip öncelikleri ve iki yapının değerlendirilmesi



Grafik 7. Tutarlılık oranı $0,07 < 0,10$ olduğu için tutarlıdır.



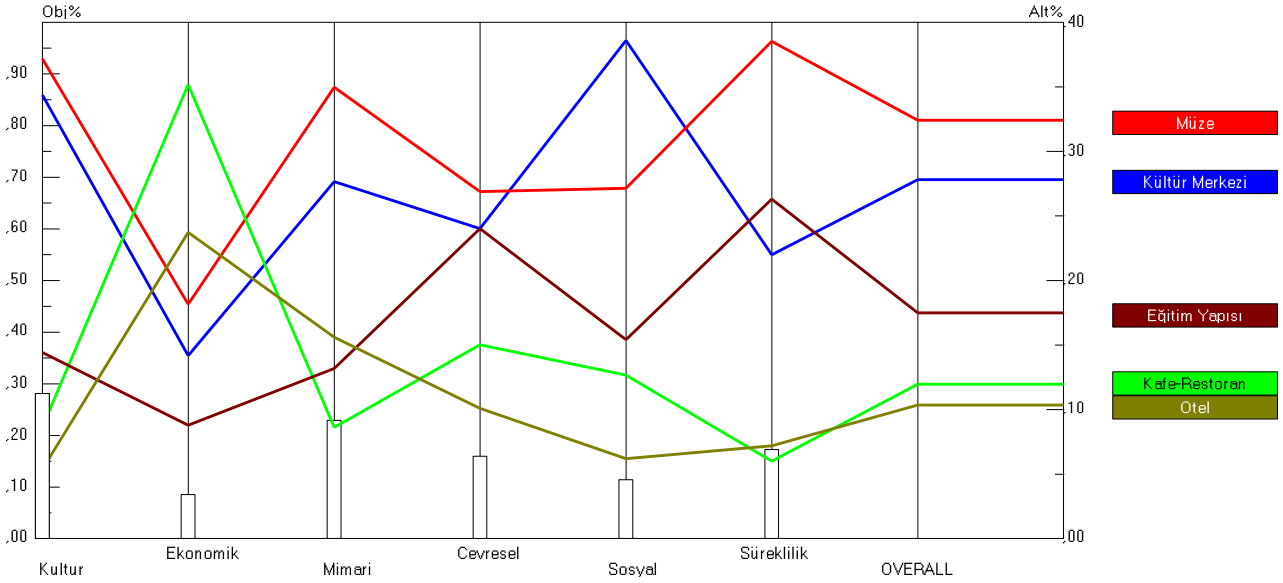
Grafik 8. Toplam Tutarlılık oranı $0,05 < 0,10$ olduğu için tutarlıdır.

Facilitator instance -- Synthesis with respect to: Goal: TABAKHANE BİNASI YENİ İŞLEV BELİRLEME

Overall Inconsistency = ,05



Grafik 9. Alternatiflerinin ana ölçütler teknik ekip bağlamında karar eşik nokta analizleri

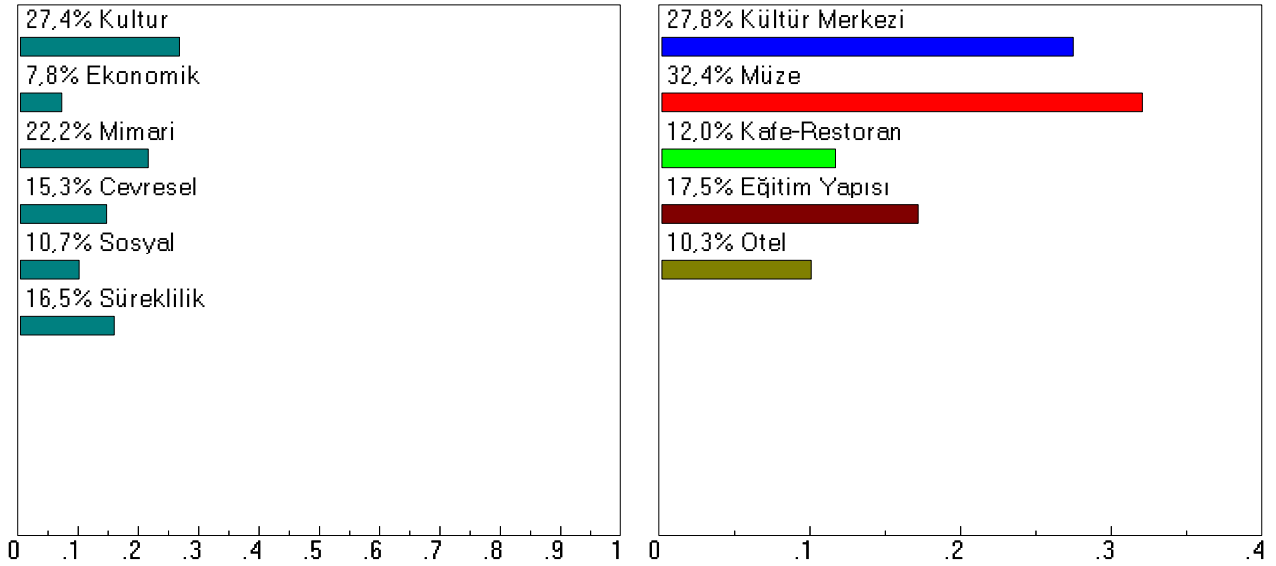


Anket yapılan **genel kullanıcılardan** oluşan katılımcıların sonuçlarının eşit ağırlıklarda değerlendirilmesi ile ortaya çıkan sonuçlara göre:

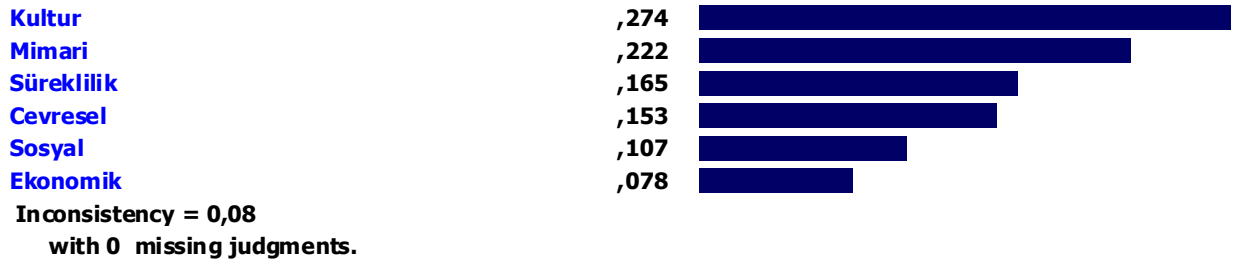
Katılımcıların düşüncelerine göre ölçütler sırasıyla kültür (%27,4), ekonomik (%7,8), mimari (%22,0) çevresel (%15,3) sosyal (%10,7) süreklilik (%16,5)'dir (Grafik 10,11)

Katılımcıların düşüncelerine göre belirlenecek yeni işlev bakımından alternatifler; Müze (%32,4), Kültür Merkezi (%27,8), Eğitim Yapısı (%17,5), Kafe-Restoran (%12,0), Otel (%10,3), olarak sıralanmıştır (Grafik 11,12).

Grafik 10. Ana ölçütlerin kullanıcı öncelikleri ve iki yapının değerlendirilmesi



Grafik 11. Tutarlılık oranı $0,08 < 0,10$ olduğu için tutarlıdır.



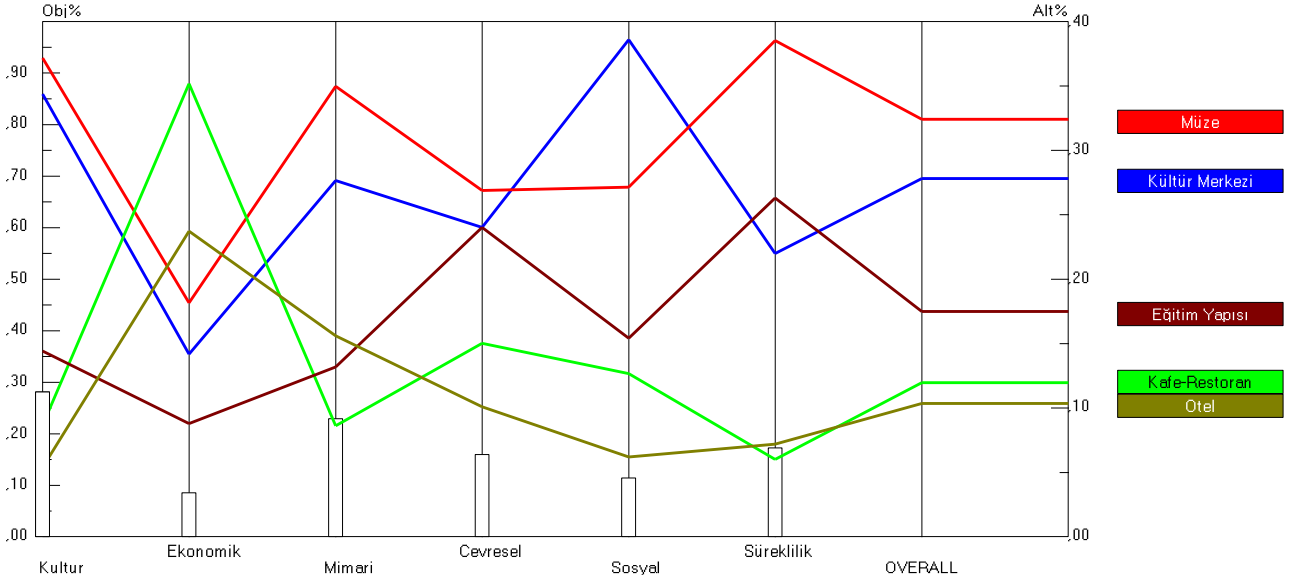
Grafik 12. Toplam Tutarlılık oranı $0,05 < 0,10$ olduğu için tutarlıdır.

Facilitator instance -- Synthesis with respect to: Goal: TABAKHANE BİNASI YENİ İŞLEV BELİRLEME

Overall Inconsistency = ,06



Grafik 13. Alternatiflerinin ana ölçütler kullanıcılar bağlamında karar eşik nokta analizleri



AHP analitik karar verme süreci tabanlı hazırlanan Expertchoice 11 yazılımında gerçekleşen değerlendirmede kısaca şu sonuçlar elde edilmiştir:

- Karar verme sürecinde, farklı paydaşlar bireysel veya grup olarak yeni fonksiyon ile ilgili karar verme süreci gerçekleştirebilir.
- Öncelikler ve ölçütler çerçevesinde alternatifler arasından seçim yapılabilir.
- Meslek adamları dışında diğer karar vericiler için mümkün olduğunca, ölçütler için açıklayıcı ek tanımlamalar yapmak gerekebilmektedir.
- Oluşturulan 2 ekip arasında farklılıklar ön plana çıkmaktadır. Karar verme sürecinde bu katılımcılara özel değerlendirmeler yapılabilir. Örneğin; 1.Ekipte sıralama Kültür Merkezi, Müze, Eğitim Yapısı, Otel, Kafe-Restoran sıralanırken, 2.Ekipte Müze, Kültür Merkezi, Eğitim Yapısı, Kafe-Restoran, Otel, olarak sıralanmıştır. Bu sıralamalara göre 1.ekipte Kültür Merkezi en öncelikli alternatifken 2. ekipte Müze ilk alternatif olarak belirlenmiştir.
- Katılımcıların kriterler hakkındaki öncelikleri birbirlerinden farklılıklar göstermektedir. Kriterlerin seçimindeki öncelikler sıralarına göre her iki grupta da Kültür kriteri önde çıkmıştır. Ardından mimari her iki grupta da ikinci sırada yer alırken çevresel, süreklilik, ekonomik ve sosyal yönlerden kriterlerin ağırlık önem dereceleri farklılık göstermiştir.
- Alternatiflerin kriterlere göre öncelik sırası ortaya konurken, her alternatifin üstün ve eksik yanları da belirlenebilmektedir.
- Her bir alternatifin olumlu ve olumsuz yönleri analiz edilerek verilecek yeni işlev için olumlu değerler gözüne alınarak karma bir fonksiyon kavramı verilebilir.
- Değerlendirme sonuçları ile Tabakhane binasına verilecek yeni işlev gerçekleştirilebilecek olası restorasyon projesi için kullanılabilir.

6.Sonuçlar

Çalışma, kullanıldığı dönemde kent için önemli yeri bulunan tabakhane binasına yeni işlev önerisi vererek, yapıya yeni işlev verilirken sayısal verilerden faydalanıp paydaşların katılımına olanak sağlamaktadır. Safranbolu tabakhane binası bulunduğu konum sebebiyle günümüzde kent ile entegrasyonu sağlanamamış ve atıl vaziyettedir. Kentsel hafıza yitirmekte ve bu durumdan kent olumsuz etkilenmektedir. Binanın yıkılıp kaybolma tehlikesi vardır. Mevcut durumu ile sürdürülebilir değildir.

Yapıya verilecek yeni işlev seçimiyle kent kültürü, ekonomisi, turizmi ve tarihi dokusu dikkate alınarak kent ile bütünleştirilip kente kazandırılması gerektiği sonucuna varılmıştır. Alternatif yeni fonksiyonların belirlenmesinde yapılan anket çalışması ile kentin her kesiminden kişilerin görüşü alınmaya çalışılmıştır. Yapıya yeni işlev verilirken, analizler ve araştırmalar yapılarak yapıya verilecek yeni işlevin sadece tasarım ekibinin kararlarıyla değil, paydaşların katılımı ile kent için daha uygun, ortak akılla yeni işlevin belirlenmesinin gerekli olduğu anlaşılmıştır. Uygulanan çalışmada analitik hiyerarşi metodu ile katılımcıların bireysel ve ortak düşünceleri ayrı ayrı analiz edilebilmiştir. Paydaşların düşüncelerini kriterler bağlamında öncelikler ve buna bağlı olarak alternatifleri seçimleri sayesinde, tabakhane binasına verilecek yeni işlev belirlenmiştir. Kriterlerin önceliklerinin farklı analizlerle ortaya çıkmasından dolayı yapıya gerçekleştirilecek olası işlev değişikliğinde, bu analizler farklı tasarımların ortaya çıkmasında, analitik bir bakış açısı getirecektir. AHP uygulamasında, Tabakhane binasına müze işlevinin verilmesi yönünde bir sonuca ulaşılmıştır. Kriterlerin kendi aralarında kıyaslanması neticesinde kültür kriteri en önemli ölçüt olarak karşımıza çıkmıştır. Kriterlerin ağırlık değerleri ile kentli tarafından talep edilen alternatifler irdelendiğinde kent için birçok kültürel birime ihtiyaç olduğu belirlenmiştir.

Bu çalışma ile ayrıca, tabakhane bölgesindeki diğer tabakhane binalarını da yeni işlevler verilerek kente kazandırılmasında örnek olabileceği düşünülebilir. Bunun neticesinde bölgesel olarak eski çarşının ardından kente yeni bir kültürel bölge kazandırılacağı ve böylelikle UNESCO dünya mirası listesinde olan kentin turizm, tarihi ve kültürel değerleri ile birlikte ülke ve kent için daha önemli yararlar sağlayabilecektir.

Kaynaklar

- [1] Kurttila, M., 2000, Utilizing the Analytic Hierarchy Process (AHP) in SWOT Analysis a hybrid method and its application to a forest-certification case, *Forest Policy and Economics* 1, 41-52.
- [2] Xu, Z., 2004, A Practical Method for Improving Consistency of Jugment Matrix in the AHP, *Journal of Systems Science and Complexity*, 17(2),169.
- [3] Wind, Y ve Saaty, T. L. 1980, Marketing Application of the Analytic Hierarchy Process, *Management Science*, 26(7), s. 641-658.
- [4] Saaty, T.L. ve Özdemir, M.S. 2003, Negative Priorities in the Analytic Hierarchy Process, *Mathematical and Computer Modelling*, 37(9-10), s. 1063-1075.
- [5] Yedla, A. ve Shrestha, R. M., 2003, Multi-criteria approach for the selection of alternative options for environmentally sustainable Transport System İn Delhi, *Transportation Research Parta: Policy And Practice*, 37(8), 717-729
- [6] Yurdakul, M. , 2013., Analitik ağ süreci yöntemi ile en uygun pazarlama stratejisinin belirlenmesi, *Dumlupınar Üniversitesi, Sosyal Bilimler Dergisi*, 211-226
- [7] Tzeng, G., Lin, C. ve Opricovic, S. , 2005., Multi-criteria analysis of alternative-fuel buses for public transportation, *Energy Policy*, 33(11)
- [8] Awasthi, A. ve Chauhan, S., 2011., Using AHP and dempster shafer theory for evaluating sustainable transport solutions, *Environmental Modelling & Software*, 26, 787-796
- [9] Ersöz, F. ve Kabak, M., vd. , 2011., Lisansüstü öğrenimde ders seçimine yönelik bir model önerisi, *Afyon Kocatepe Üniversitesi, İİBF Dergisi*, 12(2)
- [10] Ömürbek,N. ve Makas,Y., Vd. , 2015., AHP Ve TOPSIS Yöntemleri İle Kurumsal Proje Yönetim Yazılımı Seçimi, *Süleyman Demirel Üniversitesi Sosyal Bilimler Enstitüsü Dergisi*
- [11] Keleş, M. ve Tunca K., vd. 2015., Hiyerarşik Electre Yönteminin Teknokent Seçiminde Kullanımı Üzerine Bir Çalışma, *Süleyman Demirel Üniversitesi İktisadi ve İdari Bilimler Fakültesi Dergisi*, 20(1)
- [12] Hamurcu, M. ve Eren, T. 2015. , Ankara Büyükşehir Belediyesi'nde Çok Ölçütlü Karar Verme Yöntemi İle Monoray Güzergâh Seçimi, *Transist 8. Uluslararası Ulaşım Teknolojileri Sempozyumu ve Fuarı, İstanbul*, 410-419, 17-19

- [13] Harputlilgil T. 2012, Yapı Elde Etme Sürecinde Mimari Tasarım Kalitesinin Ölçülmesi Ve Arttırılmasına Yönelik Analitik Hiyerarşi Prosesi Tabanlı Karar Destek Yaklaşımı Ve Örnek Olaylarla Sınanması, Doktora Tezi, Gazi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.
- [14] Huey-Jiun W. ve Zhi-Teng Z. 2010, A multi-objective decision-making process for reuse selection of historic buildings. Expert Systems with Applications 37 ,1241-1249
- [15] Yetim S.,2008,Gazi Üniversitesi Gazi Eğitim Fakültesi İlköğretim Matematik Öğretmenliği Programı Birinci Sınıf Öğrencilerinin Bu Programı Seçmelerinde Etkili Olan Öncelikli Faktörlerin Analitik Hiyerarşi Prosesi Metodu İle Analizi, Cilt:16 No:2 Kastamonu Eğitim Dergisi 589-606
- [16] Fidan, F., 2011, Safranbolu'da Tabakhane Bölgesi Örneğinde Endüstriyel Alanların İncelenmesi, Kamusal Fonksiyonlarla Yeniden Değerlendirilmesi, Yıldız Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Mimarlık Anabilim Dalı, Yüksek Lisans Tezi, İstanbul
- [17] Korumaz, M.,2011,Türkiye'de Tarihi Yapılarda Façadısım (Cephecilik) Uygulamalarının Koruma Kapsamında Değerlendirilmesi, Doktora tezi, Selçuk Fen Bilimleri Enstitüsü, Konya
- [18] Feilden, B.M. ve Jokilehto J., 1998, Management Guidelines For World Cultural Heritage Sites, ICCROM (International Centre for the Study of the Preservation and Restoration of Cultural Property), Roma, İtalya

Yazar Notu: Bu çalışma Dr.Öğr. Üyesi Mustafa KORUMAZ tarafından danışmanlığı yapılan Selçuk Üniversitesi, Mimarlık Fakültesi, Mimarlık Bölümü "Fen Bilimleri Enstitüsü'nde yapılmış Ömer ÖZEREN'in "Karar Destek Sistemleri Kullanarak Safranbolu Tabakhane Binasının Yeniden Kullanım Olanaklarının Değerlendirilmesi" Konu Başlıklı, Yüksek Lisans Tez çalışmasından türetilmiştir.