

ISSN 1012-2354



ERCIYES ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ

ENSTİTÜSÜ DERGİSİ

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

Cilt (Vol.): 38

Sayı (No):2



ERCİYES ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ DERGİSİ

Erciyes University Journal of Institute of Science and Technology

ISSN: 1012-2354



Genel Yayın Yönetmeni

Prof. Dr. Recai KILIÇ, Erciyes Üniversitesi

İmtiyaz Sahibi

Prof. Dr. Mustafa ÇALIŞ, Erciyes Üniversitesi

Baş Editör

Prof.Dr. Emel KIZILKAYA AYDOĞAN, Erciyes Üniversitesi

Editör

Prof. Dr. M. Duran TOKSARI, Erciyes Üniversitesi

Prof. Dr. M. Gökhan HALICI, Erciyes Üniversitesi

Düzenleme Editörleri

Hüseyin ÖZKAYA

Ali Yankı TEKOL

Editörler Kurulu

Prof.Dr. Mehmet AKKURT, Erciyes Üniversitesi, akkurt@erciyes.edu.tr

Prof. Dr. Musa SARI, Gazi Üniversitesi, msari@gazi.edu.tr

Prof. Dr. Orhan BÜYÜKGÜNGÖR, Ondokuz Mayıs Üniversitesi, orhanb@omu.edu.tr

Prof. Dr. Hasan KÜÇÜKBAY, İnönü Üniversitesi, hasan.kucukbay@inonu.edu.tr

Prof. Dr. Kamil KOÇ, Manisa Celal Bayar Üniversitesi, kamil.koc@cbu.edu.tr

Prof. Dr. Tuncay CANDAN, The American University of the Middle East, tuncay.candan@aum.edu.kw

Prof. Dr. Derviş KARABOĞA, Erciyes Üniversitesi, karaboga@erciyes.edu.tr

Prof.Dr. M. Tamer ŞENEL, Erciyes Üniversitesi, senel@erciyes.edu.tr

Prof. Dr. Doğan IŞIK, Erciyes Üniversitesi, dogani@erciyes.edu.tr

Prof. Dr. Burak UZAL, Abdullah Gül Üniversitesi, burak.uzal@agu.edu.tr

Prof. Dr. Niğmet UZAL, Abdullah Gül Üniversitesi, nigmet.uzal@agu.edu.tr

Prof. Dr. Murat GÖKÇEK, Ömer Halisdemir Üniversitesi, mgokcek@ohu.edu.tr



ERCİYES ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ DERGİSİ

Erciyes University Journal of Institute of Science and Technology

ISSN: 1012-2354



Yayın Danışma Kurulu

Prof. Dr. Ülkü YETİŞ, Ortadoğu Teknik Üniversitesi

Prof. Dr. Filiz B. DİLEK, Ortadoğu Teknik Üniversitesi

Prof. Dr. Gülçin BÜYÜKÖZKAN, Galatasaray Üniversitesi

Prof. Dr. Ceyda OĞUZ, Koç Üniversitesi

Prof. Dr. Yaman BARLAS, Boğaziçi Üniversitesi

Prof. Dr. Levent KANDİLLER, Yaşar Üniversitesi

Prof. Dr. Cengiz KAHRAMAN, İstanbul Teknik Üniversitesi

Prof. Dr. Metin DAĞDEVİREN, Gazi Üniversitesi

Prof. Dr. Cevriye Temel GENCER, Gazi Üniversitesi

Prof. Dr. Mehmet TANYAŞ, Maltepe Üniversitesi

Prof. Dr. Tuncay CANDAN, Ömer Halisdemir Üniversitesi

Prof. Dr. Li TONGXING, Linyi University

Prof. Dr. Panos M. PARDALOS, University of Florida

Prof. Dr. José Machado Minho, University

Prof. Dr. Petraq PAPAJORGJË, University of New York Tirana

Prof. Dr. Fatih ALTUN, Erciyes Üniversitesi

Prof. Dr. Şahin YILDIRIM, Erciyes Üniversitesi

Prof. Dr. Derviş KARABOĞA, Erciyes Üniversitesi

Prof. Dr. Orhan BÜYÜKGÜNGÖR, Ondokuz Mayıs Üniversitesi



ERCİYES ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ DERGİSİ

Erciyes University Journal of Institute of Science and Technology

ISSN: 1012-2354



Cilt 38, Sayı 2, Hakem Kurulu

Prof. Dr. Bayram ÇEKİM, Gazi Üniversitesi

Prof. Dr. Enis GÜNAY, Erciyes Üniversitesi

Prof. Dr. Ercan KARAKÖSE, Kayseri Üniversitesi

Prof. Dr. Erkan BEŞDOK, Erciyes Üniversitesi

Prof. Dr. Hamza MENKEN, Mersin Üniversitesi

Prof. Dr. Mustafa Serdar GENÇ, Erciyes Üniversitesi

Prof. Dr. Necati TAŞKARA, Selçuk Üniversitesi

Prof. Dr. Neşe DİKMEN, Isparta Uygulamalı Bilimler Üniversitesi

Prof. Dr. Özden ÜSTÜN, Dumlupınar Üniversitesi

Prof. Dr. Serpil HALICI, Pamukkale Üniversitesi

Prof. Dr. Tarık ÇAKAR, İstanbul Gelişim Üniversitesi

Doç. Dr. Ali Ekber IRMAK, Muğla Sıtkı Koçman Üniversitesi

Doç. Dr. Aytaç YILDIZ, Bursa Teknik Üniversitesi

Doç. Dr. Çağatay CEYLAN, İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü

Doç. Dr. Engin Cemal MENGÜÇ, Kayseri Üniversitesi

Doç. Dr. Ersin TEMEL, Giresun Üniversitesi

Doç. Dr. Fatih Ahmet ÇELİK, Bitlis Eren Üniversitesi

Doç. Dr. Hilal KAZAN, Antalya Bilim Üniversitesi

Doç. Dr. Mehmet BİLİM, Nuh Naci Yazgan Üniversitesi

Doç. Dr. Mehmet DÖRDÜNCÜ, Erciyes Üniversitesi

Doç. Dr. Metin YAZGI, İstanbul Teknik Üniversitesi

Doç. Dr. Nihan GÜNGÖR, Gümüşhane Üniversitesi

Doç. Dr. Oğuz OĞUR, Giresun Üniversitesi

Doç. Dr. Özer SEVİM, Kırıkkale Üniversitesi

Doç. Dr. Ramazan Köprü, Işık Üniversitesi

Doç. Dr. Sadık Alper YILDIZEL, Karamanoğlu Mehmetbey Üniversitesi

Doç. Dr. Sedat ŞENGÜL, Trakya Üniversitesi

Doç. Dr. Uğur FİDAN, Afyon Kocatepe Üniversitesi
Doç. Dr. Volkan ESKİZEYBEK, Çanakkale Onsekiz Mart Üniversitesi
Doç. Dr. Yılmaz DELİCE, Kayseri Üniversitesi
Dr. Öğr. Üyesi Abdullah AKKAYA, Ahi Evran Üniversitesi
Dr. Öğr. Üyesi Ahmet Emin KARKINLI, Niğde Ömer Halisdemir Üniversitesi
Dr. Öğr. Üyesi Dilek ÇAM, İnönü Üniversitesi
Dr. Öğr. Üyesi Ece AVULOĞLU YILMAZ, Amasya Üniversitesi
Dr. Öğr. Üyesi Eda DAĞDEVİR, Kayseri Üniversitesi
Dr. Öğr. Üyesi Emine Feyza ŞÜKÜR, Samsun Üniversitesi
Dr. Öğr. Üyesi Ertan KÖSEDAĞ, Van Yüzüncü Yıl Üniversitesi
Dr. Öğr. Üyesi Fatih Doğan KOCA, Erciyes Üniversitesi
Dr. Öğr. Üyesi Gülgün ÇAKMAK ARSLAN, Düzce Üniversitesi
Dr. Öğr. Üyesi Hacımurat DEMİR, Aksaray Üniversitesi
Dr. Öğr. Üyesi Hasan Ulus, Selçuk Üniversitesi
Dr. Öğr. Üyesi İlyas KARASU, Adana Alparslan Türkeş Bilim ve Teknoloji Üniversitesi
Dr. Öğr. Üyesi İsmail GÜÇLÜ, Sinop Üniversitesi
Dr. Öğr. Üyesi Kenan ALTUN, Sivas Cumhuriyet Üniversitesi
Dr. Öğr. Üyesi Nihal ŞİMŞEK ÖZEK, Atatürk Üniversitesi
Dr. Öğr. Üyesi Ömer GENÇ, Niğde Ömer Halisdemir Üniversitesi
Dr. Öğr. Üyesi Ömer AYDIN, Erciyes Üniversitesi
Dr. Öğr. Üyesi Ömür ŞAHİN, Erciyes Üniversitesi
Dr. Öğr. Üyesi Serhan İLKENTAPAR, Erciyes Üniversitesi
Dr. Öğr. Üyesi Tuğba TUNACAN, Bolu Abant İzzet Baysal Üniversitesi
Arş. Gör. Eda Gizem KOÇYİĞİT, Dokuz Eylül Üniversitesi
Arş. Gör. Feride ŞENER, İstanbul Teknik Üniversitesi
Arş. Gör. Mehmet Akif GÜNEN, Gümüşhane Üniversitesi
Arş. Gör. Metehan ARDAHANLI, Erzurum Teknik Üniversitesi
Arş. Gör. Dr. Mine ALTUNBEK, Yeditepe Üniversitesi
Arş. Gör. Dr. Mithat GÜLLÜ, Erciyes Üniversitesi
Arş. Gör. Mevlüt HAKAN, Erciyes Üniversitesi
Arş. Gör. Selen ÇAKMAKYAPAN ERGÜLER, İstanbul Medeniyet Üniversitesi
Öğr. Gör. Dr. Deniz YILDIZ, Ordu Üniversitesi

Öğr. Gör. Dr. Salih HİMMETOĞLU, Kayseri Üniversitesi

Cilt: 38 Sayı: 2

Ağustos 2022

İçindekiler

Sayfalar	Makaleler	Türü
168-179	Thermally Exfoliated Graphene Oxide (TEGO) Reinforced Fast-Cure Epoxy Resin: Cure Behavior and Flexural Properties	Araştırma Makalesi
180-189	A Phenomenological Approach to Heavy Majorana Mass Neutrinos in Dileptonic and Trileptonic Channels at Hadron Colliders	Araştırma Makalesi
190-200	Cilt Kanseri Görüntü Sınıflandırması için Görüntü Ön İşlemenin Evrimsel Sinir Ağları Performansı Üzerindeki Etkileri	Araştırma Makalesi
201-217	Evolutionary Image Resizing based Accuracy Optimization for Aerial Triangulation	Araştırma Makalesi
218-232	Design of Neural Network Predictor for A Finite Element Analysis of Thermal and Mechanical Stresses Caused in the Jawbone of Implantology	Araştırma Makalesi
233-241	RF ve Mikrodalga Devre Tasarımında Dielektrik Taban Kayıp Çarpanının Mikroserit Hat Güç Kayıplarına Etkisinin Araştırılması	Araştırma Makalesi
242-249	Elektromanyetik Alan Etkili Fitzhugh-Nagumo Nöron Modeline Rotasyon Kontrol İşleminin Uygulanması	Araştırma Makalesi
250-260	Farklı Kristal Yönelimine Sahip Cu Nano Tellerine Uygulanan Mekanik Çevrimin Moleküler Dinamik Benzetimi ile İncelenmesi	Araştırma Makalesi
261-267	Predicting Liver Disease Using Decision Tree Ensemble Methods	Araştırma Makalesi
268-279	Küresel Bulanık TOPSIS Yöntemi ile 3. Part Tersine Lojistik Hizmet Sağlayıcı Seçimi	Araştırma Makalesi
280-291	Farklı Hacimlerdeki Uçucu Külün Isı İle Kürlenmiş Hava Sürükleyici Katkılı Çimento Harçlarına Etkisi	Araştırma Makalesi
292-313	Türkiye'nin Farklı İklim Bölgelerinde Yer Alan Eğitim Yapısı Dersliklerinin TS EN 17037 "Binalarda Gün ışığı Kullanımı" Standartı Çerçevesinde Değerlendirilmesi	Araştırma Makalesi
314-323	Farklı Rüzgar Hızlarında Çoklu Bina Etrafındaki Rüzgar Yükünün Sayısal olarak İncelenmesi	Araştırma Makalesi
324-334	Sağdan Kesilmiş Lomax Dağılımının İstatistiksel Özellikleri ve Bir Uygulama	Araştırma Makalesi
335-348	Bicomplex Numbers with respect to the Geometric Calculus and Some Inequalities	Araştırma Makalesi
349-356	Determinants and Inverses of Circulant Matrices with Gaussian Pell Numbers	Araştırma Makalesi
357-370	W-İr Alaşım Schottky Engel Diyotların Performansının Sonlu Elemanlar Metoduyla İncelenmesi	Araştırma Makalesi
371-382	Elektrikli Araç Şarj İstasyon Yerlerinin Akış Yakıt İkmal Yer Modeli Kullanılarak Belirlenmesi	Araştırma Makalesi
383-392	Infrared Spectroscopic and Calorimetric Studies of the Interaction of Cholecalciferol with Sphingomyelin Model Membranes	Araştırma Makalesi
393-400	Synthesis, Characterization and Catecholase Activities of Azo Containing Schiff Base Ligands and Their Transition Metal Complexes	Araştırma Makalesi
401-415	Determination of Expression Levels of Fatty Acid Desaturase-2 Genes in Safflower (<i>Carthamus tinctorius</i> L.) Varieties Exposed to Copper	Araştırma Makalesi
416-425	TRAIL bağlı altın nanoparçacıkların glioblastoma TRAIL direncindeki etkisinin incelenmesi	Araştırma Makalesi

Thermally Exfoliated Graphene Oxide (TEGO) Reinforced Fast-Cure Epoxy Resin: Cure Behavior and Flexural Properties

Sinem Elmas^{1,2,3}, Hatice S. Sas^{1,2,3*}

¹Integrated Manufacturing Technologies Research and Application Center. Sabanci University. Orhanli-Tuzla. 34956 ISTANBUL, TURKEY

²Faculty of Engineering and Natural Sciences. Sabanci University. Orhanli-Tuzla. 34956. ISTANBUL, TURKEY

³Composite Technologies Center of Excellence. Sabanci University-Kordsa. Istanbul Technology Development Zone. Pendik. 34906 ISTANBUL, TURKEY

(Alınış / Received: 12.04.2022, Kabul / Accepted: 31.05.2022, Online Yayınlanma / Published Online: 23.08.2022)

Keywords

Fast-cure epoxy resin,
Cure kinetic,
Thermally exfoliated
graphene oxide (TEGO),
Flexural properties

Abstract: Fast-cure epoxy resin systems allow being manufacturing of composite parts in minutes. However, the brittle nature of the polymer limits its usage due to crack initiation and growth. Nanofillers are widely used to enhance the epoxy resin's mechanical performance. However, final mechanical properties are typically governed by the process parameters, including curing temperature and time; therefore, the curing behavior of nano-integrated composites should also be characterized. Thermally exfoliated graphene oxide (TEGO) has an outstanding effect on the mechanical properties of the polymer matrix, even at low loading amounts. This study introduced TEGO into the fast cure epoxy resin system, and the cure kinetics was characterized using dynamic differential scanning calorimetry (DSC). TEGO modification increased curing time, but the system still maintains fast cure properties. Dynamic mechanical analysis (DMA) illustrated the glass transition temperature (T_g) of TEGO-fast cure epoxy resin nanocomposite increased by 10°C. Moreover, flexural tests revealed that flexural stress was increased by 12.85% with even a low percentage of TEGO addition. Scanning electron microscopy was used for fracture surface analysis of the samples, and toughening mechanisms were addressed.

Termal Genleştirme Yöntemiyle Üretilen Grafen Oksit (TEGO) ile Güçlendirilmiş Hızlı Kürlenen Epoksi Reçine: Kür Davranışı ve Eğilme Özellikleri

Anahtar Kelimeler

Hızlı kürlenen epoksi
reçine,
Kür kinetiği,
Termal genleştirme
yöntemiyle üretilen
grafen oksit (TEGO),
Eğilme özellikleri

Öz: Hızlı kürlenen epoksi reçine sistemleri, kısa süre içinde kompozit üretimini sağlamaktadır. Ancak, epoksi polimerin kırılgan yapısı nedeniyle çatlak başlangıcı ve büyümesi kullanım alanını kısıtlamaktadır. Nano boyuttaki katkıları epoksi reçinenin mekanik performansını artırmak için yaygın olarak kullanılmaktadır. Ürünün nihai mekanik özellikleri tipik olarak, kütleme sıcaklığı ve süresi gibi proses parametreleri tarafından yönetilmektedir, bu nedenle, nano-takviyeli kompozitlerin kür davranışı karakterize edilmelidir. Termal genleştirme yöntemiyle üretilen grafen oksit (TEGO), polimer matrisine düşük yüzdelerde eklenmesi durumunda bile polimer matrisinin mekanik özellikleri üzerinde önemli bir etkiye sahiptir. Bu çalışmada, TEGO hızlı kürlenen epoksi reçine sistemine dahil edilmiş ve nanokompozitlerin kür kinetiği dinamik diferansiyel tarama kalorimetrisi (DSC) ile analiz edilmiştir. TEGO modifikasyonu kürlenme süresini arttırmış olmasına rağmen sistem hala hızlı kürlenme özelliklerini korumaktadır. Dinamik mekanik analizi (DMA) sonucunda, TEGO içeren epoksi nanokompozitin camsı geçiş sıcaklığının (T_g) 10°C arttığı bulunmuştur. Ayrıca, eğilme testi sonuçları eğilme stresinin de %12,85 oranında arttığını ortaya koymuştur. Kırılma yüzeyleri, taramalı elektron mikroskobu ile analiz edilmiştir ve sertleşme mekanizmaları ele alınmıştır.

*Corresponding Author, email: hatice.sas@sabanciuniv.edu

1. Introduction

Epoxy resin systems are the most salient thermosetting polymer materials due to outstanding properties such as high mechanical properties, and thermal stability, excellent resistance against heat and many chemicals [1]–[3]. Epoxy polymers are extensively used in polymer composite materials as primary matrix. In aviation and automotive industry, they are used in the way that advanced composites, adhesive, and surface dressing. However, the epoxy resins cure cycle requires many hours. Exothermic heat release limited to ramp rates to ease the overheating risk. From an economic point of view, such long cure cycles also increase manufacturing costs [1].

Due to environmental regulations, the automotive industry is motivated to adopt lightweight structural composite parts. However, faster cure cycles are demanded in the automotive industry to achieve mass production and reduce the overall manufacturing time [4], [5]. To overcome in shortcomings, fast cure epoxies are developed, allowing for manufacturing the composite parts in minutes [6]. Fast-cure epoxy resin curing reaction is highly exothermic compared to conventional epoxy systems. This may lead to significant temperature gradients over the thickness and temperature overshoot which could result in the degradation and breakdown of the epoxy polymer [1], [6], [7].

Nanocomposites can be defined as polymer matrix that contain homogeneously dispersed nanofillers. Nanofillers are improved the polymer's properties [8]. Although the many advanced properties of epoxy resin, high crosslinking density gives it a brittle nature. The brittle nature of the polymer leads to crack initiation and growth and restricts its usage in some areas [9]. To improve the epoxy resin properties, nanofillers are used widely. One of the main ideas behind the integration of nanofillers into the polymer is to enhance the properties of the final composite material by improving the matrix material properties [10]. The filler's structure and concentration are essential for achieving optimum properties. Also, the capability of the Van der Waals interactions or covalent bond formation of the filler with the epoxy matrix is an important factor. Nanoparticles positively affect epoxy's thermal and mechanical properties because of their superior specific surface area and small size. In the fast-cure epoxy resin systems, nanoparticles also integrated to matrix for reduce the temperature exotherm [6]. Graphene has a two-dimensional structure composed of carbon atoms layers arranged as a honeycomb network. The hexagonal lattice of the carbon atoms leads to a high surface area. Despite graphene's light and thin structure, it is extremely durable and electrically and thermally conductive [11]. Graphene and derivatives are used widely as reinforcement material in polymer matrix due to, even at very low percentages, having a significant influence on the polymer's mechanical performance [11], [12]. However, the dispersion of graphene-based nano reinforcements into epoxy resin depends on the surface chemistry of graphene and its surface functional groups. Thermally exfoliated graphene oxide (TEGO) is obtained by removing most functional groups from the graphene oxide by thermal treatment. The hydrophilic feature of the graphene oxide altered by removal of oxygen groups, increases the exfoliation ratio, which makes it easier to control surface chemistry and enhances interactions between TEGO and the polymer matrix, hence improving the mechanical properties [12], [13].

There are several studies about nano reinforcement integration into the epoxy polymer matrix and its effect on the properties in the literature. Senis et al. [14] have distributed graphene oxide (GO) into a conventional epoxy resin to improve the mechanical performance of the epoxy composite. They measured mechanical performance of composites through an interlaminar shear strength test and found an increase up to 0.63 vol% GO content, and strength decreased above this content due to agglomeration. Monfared Zanjani et al. [12] dispersed TEGO into a conventional epoxy system with three different percentages: 0.0125 wt%, 0.025 wt%, and 0.05 wt%. They have found a gradual improvement in flexural strength of the nanocomposite up to the 0.025 wt% TEGO content, and finally they observed 85% flexural modulus, and 64% flexural strength improvement by integration of 0.05 wt% TEGO into resin system. Keller et al. [6] have integrated to silica nano reinforcement to reduce the high exothermic reaction of fast cure epoxy resin and studied the curing behavior. They have observed total heat of curing reaction was decreased with 20 wt% of silica nanoparticles addition, which provides a more controllable manufacturing process. In addition, they have found the tensile Young's modulus increased from 3.58 to 4.62 GPa. Nonahal et al. [15] have designed epoxy/amine-functionalized GO nanocomposites by using 0.1 wt% of GO and amine modified GO nanosheets. They have observed a reduction in activation energy of cure reaction after amine-functionalized GO integration into epoxy, indicating a faster cure reaction than neat and GO integrated epoxy. They have supported interfacial adhesion by scanning electron microscopy (SEM) micrographs taken from fracture surface of nanocomposites and stated GO has a poor dispersion compared to functionalized GO.

Process parameters like the temperature of curing and time have influence on the final mechanical performance of the nanocomposites. Therefore, in consequence of the literature review, to the best of our knowledge, the effect of a graphene-based nano additive on cure kinetics and flexural properties of a fast-cure epoxy resin system was

not investigated. The present study aimed to analyze the effect of nano reinforcement on the cure kinetics of the fast-curing epoxy resin system and improvement on the flexural properties of fast-cure epoxy nanocomposites. Although the cure kinetics of conventional epoxy systems have been studied in the literature, fast-curing epoxy systems have their characteristics of cure behavior. In line with these aims, TEGO was chosen as a nano additive and integrated into a fast cure epoxy resin system by 0.05 wt.% as indicated in Monfared Zanjani et al.'s [12] study. The change in cure kinetics with TEGO integration was characterized by dynamic scanning calorimetry (DSC) analysis and modeled through a diffusion-controlled autocatalytic equation. In addition, the gel time measurement was performed to a better understanding the change in rheological behavior of fast-cure epoxy resin. Thermomechanical and flexural properties of the nanocomposite specimens were analyzed through dynamic mechanical analysis (DMA) and three-point bending tests, respectively. To understand failure the fracture surfaces of specimens were analyzed by scanning electron microscopy (SEM).

2. Material and Method

2.1. Materials

Thermally exfoliated graphene oxide (TEGO) Grade-2 with a bulk density of 0.022 g.ml^{-1} and an average of 23 layers was supplied by Nanografen Co., Turkey. The oxygen content is about <4% (provided by the manufacturer). Three-component fast cure epoxy resin system (CM11), epoxy, hardener, and catalyst were supplied by KORDSA, Turkey, and ethyl alcohol (with 99.9% purity) was purchased from ISOLAB.

2.2. Preparation of neat fast cure epoxy and fast cure epoxy / TEGO nanocomposites

The three-component fast cure epoxy resin system that contains epoxy, hardener and the catalyst was used to prepare a neat epoxy composite. Epoxy was put into the oven at 85°C , and the hardener and the catalyst were put at room temperature one night before as recommended by the manufacturer. The weight percentage of TEGO was determined as 0.05 wt.%, as suggested in Monfared Zanjani et al.'s [12] study. For TEGO modification, firstly, 0.05 wt.% of TEGO was dispersed into 20 ml of ethyl alcohol by using a probe sonicator (Hielscher UP200Ht) at 0.5 cycle and 90 amplitude for 2 hours as shown in experimental scheme (Figure 1). Then, the TEGO+ethanol mixture was combined with hot epoxy liquid and sonicated for another 2 hours with an interval of 2 minutes each 5 minutes of sonication. The mixture was left in oven at the 85°C and the ethanol is evaporated for one night. The epoxy is mixed with hardener and catalyst by a weight percentage of 78.6:12.7:8.7. A thinky planetary vacuum mixer (PULSAR) was used for the mixing process at 0.02 kPa, 800 rpm for 4 minutes. A hole was made on the thinky mixer box' cover, and degassing was ensured under vacuum. After that small amount of uncured resin was separated and stored at -18°C for dynamic scanning calorimeter and gel time analysis. The remaining resin was poured into the pre-heated at 140°C , and the release agent applied Teflon molds. The curing was done in the furnace at 140°C for 5 minutes. The specimens were cut by a 3-axis computer numerical control (CNC) laser cut machine (POYSAN) in specified dimensions for characterization.

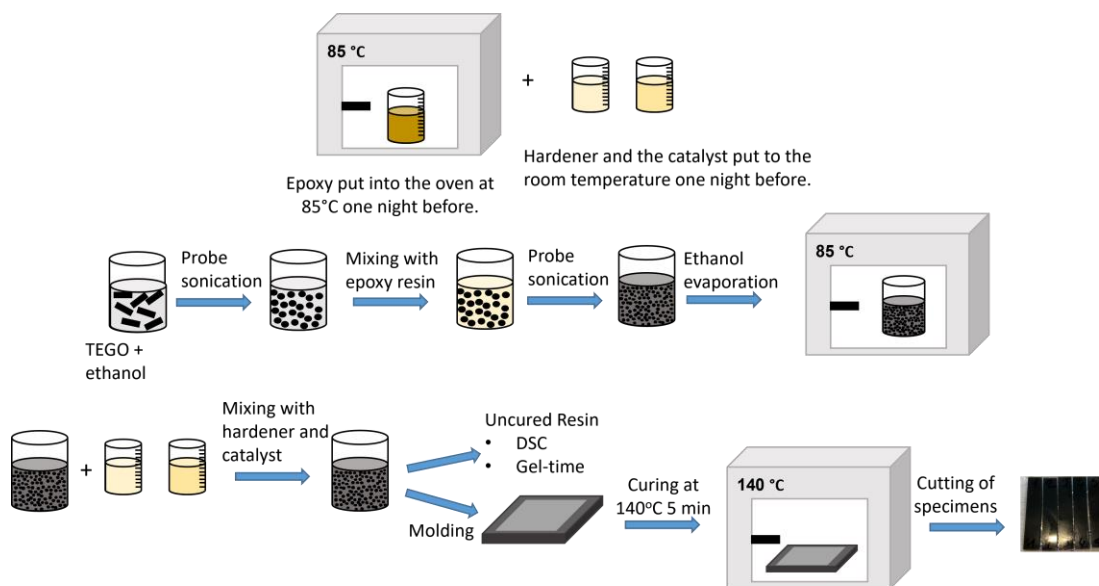


Figure 1. The experimental route of TEGO sheets dispersion into the fast cure epoxy resin by sonication process

2.3. Characterization

Dynamic Scanning Calorimeter (DSC) analyze were performed by utilizing the Mettler Toledo DSC⁺³ instrument under the nitrogen (N₂) environment with an airflow rate of 50 ml/min with approximately a sample mass of approximately 10 mg. Cure reactions of both neat fast cure epoxy, and TEGO-fast cure epoxy were studied by dynamic DSC within a temperature range from 25 to 300 °C at four heating rates of 5, 10, 15, and 20 °C/min. Cure time in different isothermal temperatures was analyzed by Mettler Toledo DSC+3 STArE SW16.30 software.

The degree of cure (α) was calculated according to equation (1); the ratio of the heat of cure reaction, ΔH_t (the area of the under the curve a given temperature T) by total heat of cure reaction (ΔH) [15].

$$\alpha = \frac{\Delta H_t}{\Delta H} \quad (1)$$

Moreover, the fast cure epoxy resin system cure kinetic is analyzed by a fitting study via a MATLAB script through a diffusion-controlled autocatalytic equation [16].

$$\frac{d\alpha}{dt} = K_1 \alpha^{m_1} (1 - \alpha)^{n_1} + \frac{K_2 \alpha^{m_2} (1 - \alpha)^{n_2}}{1 + e^{(D(\alpha - (\alpha_{C0} + \alpha_{CT} T))})} \quad \text{with } K_i = A_i e^{-\frac{E_{A_i}}{RT}}, i = 1, 2 \quad (2)$$

where $d\alpha/dt$ is the cure rate, D is the diffusion constant, α_{C0} are the critical cure degree at absolute zero, α_{CT} critical resin degree of cure with temperature and m_1, m_2, n_1, n_2 are model parameters; K_1 and K_2 are the Arrhenius temperature dependency, A is the preexponential coefficient, E_A is the activation energy, T is the absolute temperature, R is the universal gas constant.

The fast cure epoxy resin gel time measurement was carried out by Anton Paar MCR 702 TwinDrive rheometer at 120 °C with a 1Hz constant frequency and controlled strain of 0.01%.

Dynamic mechanical analysis (DMA) is performed with two repeats by Mettler Toledo DMA/SDTA861e instrument in single cantilever mode at 1Hz frequency with a heating rate of 3 °C/min within a temperature range from 25 to 300 °C with the specimens in a dimension of 80 mm x 10 mm x 4±0.2 mm according to ASTM D7028-07 standard.

The mechanical performance was characterized by a three-point bending test according to ASTM D790-03 standard using Instron Universal Testing Machine (5982) equipped with a static load cell of ±100 kN. The test was done on five specimens with 76.8mm x 12.7mm x 4±0.2 mm dimensions and a 1.7 mm/min crosshead rate. After that, fracture surface of the specimens was analyzed by scanning electron microscopy (SEM). The images were taken using Leo Supra35VP field emission scanning electron microscopy by utilizing the secondary electron mode at electron high tension (EHT) = 3 kV and a working distance of 6 mm after coated with carbon solution to increase conductivity.

3. Results

3.1. Effect of the TEGO on the curing behavior

The final mechanical performance of nano-reinforced epoxy nanocomposites highly depends on the interfacial adhesion between the nanofiller and the epoxy matrix. In order to understand network formation with TEGO modifications, dynamic DSC analysis was performed at four heating rates: 5, 10, 15, 20 °C/min. Heat flow curves as a function of temperature were given in Figure 2, and the main parameters of the curing such as glass transition temperature of uncured state (T_{g0}), onset temperature (T_{onset}), the peak temperature (T_{peak}), the end temperature (T_{end}) and the total heat of reaction (ΔH) were summarized in Table 1.

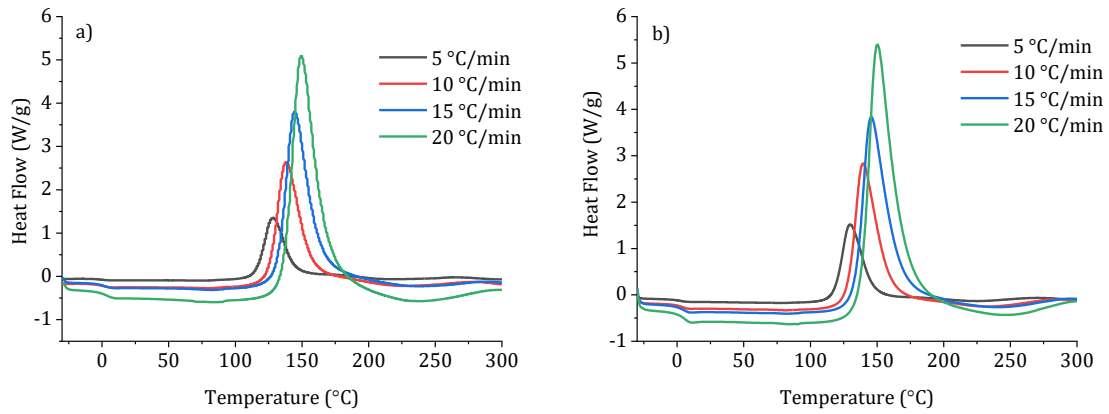


Figure 2. Dynamic DSC thermograms at various heating rates 5, 10, 15, and 20 °C/min as a function of the temperature of a) neat fast cure epoxy, b) TEGO-fast cure epoxy

Table 1. The main curing parameters: glass transition temperature of uncured state (T_{g0}), onset temperature (T_{onset}), the peak temperature (T_{peak}), the end temperature (T_{end}), and the total heat of reaction (ΔH) obtained from dynamic DSC

Heating rate (°C/min)	Neat fast cure epoxy				TEGO- fast cure epoxy			
	5	10	15	20	5	10	15	20
T_{g0} (°C)	0.20	0.46	1.78	3.32	2.51	2.97	3.55	4.84
T_{onset} (°C)	116.07	125.68	132.13	136.74	118.22	127.99	133.65	138.18
T_{peak} (°C)	128.05	137.92	144.44	149.48	129.80	139.60	145.55	150.50
T_{end} (°C)	144.85	157.91	164.80	170.32	147.82	161.12	168.82	172.88
ΔH (J/g)	311.59	347.42	350.29	389.96	380.38	447.76	428.67	461.24

As given in Table 1, the T_{g0} , T_{onset} , T_{peak} , and T_{end} temperatures of TEGO included fast cure epoxy resin shifted to higher temperature values compared to neat fast cure resin. The increase of the T_{g0} , T_{onset} , T_{peak} , and T_{end} temperatures can be ascribed to raising of the viscosity of the system due to TEGO sheets hindering the mobility of the polymeric chains [17]. The peaks of the curing curves did not become wider with TEGO integration, indicating a homogeneous network formation [18]. Also, an increase in the ΔH is observed for the resin system integrated TEGO. The increase in enthalpy can be assigned to the decreased chain mobility of the polymer due to the epoxy resin units bound to TEGO [15], [18]. Obviously, T_{g0} , T_{onset} , T_{peak} , and T_{end} raised to higher temperature values as the heating rate increased in neat fast cure epoxy and TEGO-fast cure epoxy samples. Due to high heating rates, the resin remains shorter at any temperature and the resin reaches the gel point quicker, hence, the T_{g0} , T_{onset} , T_{peak} , and T_{end} temperatures shift higher values and increase in ΔH [19].

The degree of cure (α) of the neat fast cure epoxy and the TEGO-fast cure epoxy resin was evaluated as a function of temperature (Figure 3). The sigmoidal pattern of the curves indicates the autocatalytic signature of the epoxy curing reaction [20]. The degree of cure of the TEGO-fast cure epoxy resin shifts to higher temperatures, which means that curing begins at higher temperatures due to retardation effect of the TEGO [15].

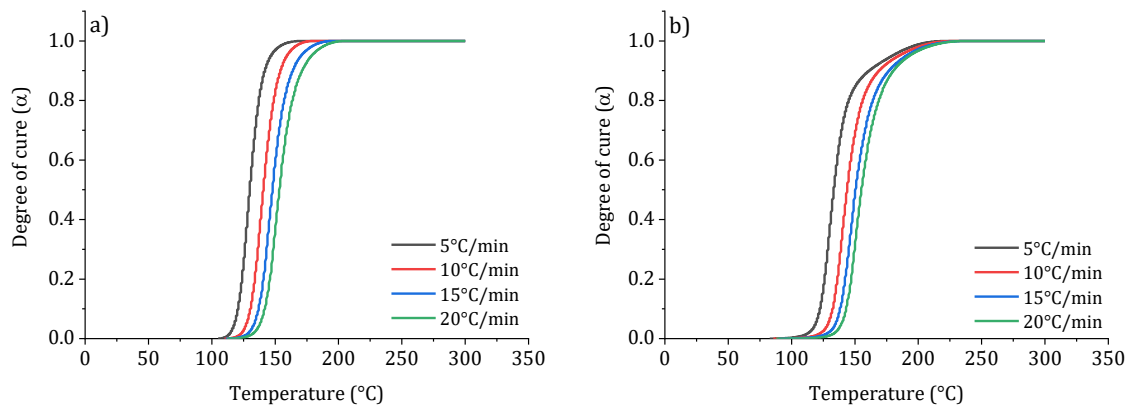


Figure 3. Degree of cure (α) curves at various heating rates 5, 10, 15, and 20 °C/min as a function of the temperature of a) neat fast cure epoxy, b) TEGO-fast cure epoxy

To understand the TEGO retardant effect on the curing time, different isothermal temperatures were also analyzed by Mettler Toledo DSC⁺³ STARe SW16.30 software. The software is used model free kinetics to calculate the cure degree at desired temperature. Firstly, exothermic reaction is measured with dynamic scanning at various dynamic heating rates. Experimental cure degree is calculated from dynamic DSC results as function of temperature, then model free kinetic program calculates the activation energy and finally, results from preceding steps are used make calculation of degree of cure at any isothermal temperature [21]. The degree of cure curves at the selected temperatures are given in Figure 4 and the required cure time summarized at Table 2 as a function of the cure degree and the isothermal temperature. The time required for curing after TEGO modification was greater for each cure degree, and the cure retardancy effect is more prominent at higher temperatures Table 2. The curing time is increased almost two times at 150 °C but since the curing still takes about 10 minutes in total, the epoxy system maintains its fast-curing feature. At higher temperatures, the curing time shortens, and the interactions between the epoxy and amine groups of the hardener become harder in the presence of TEGO due to chain restrictions. The restrictive effect of TEGO is not dominant as there will be time for crosslinking reaction at relatively low temperatures. Therefore, the cure delay effect is become more dominant at high temperatures [15], [19].

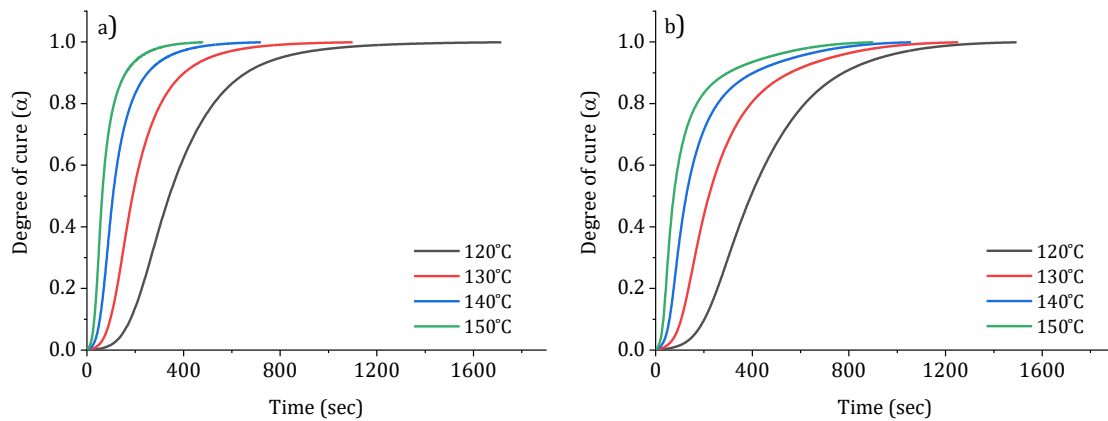


Figure 4. The degree of cure (α) evolution at isothermal temperatures of a) neat fast cure epoxy, b) TEGO-fast cure epoxy

Table 2. The degree of cure time calculated by Mettler Toledo DSC⁺³ STARe SW16.30 software at isothermal temperatures

Temperature (°C)	Neat fast cure epoxy				TEGO - fast cure epoxy			
	120	130	140	150	120	130	140	150
Degree of cure (α)	Time (min)				Time (min)			
0.10	3.00	1.61	0.89	0.50	3.36	1.76	0.95	0.53
0.20	3.79	2.06	1.16	0.67	4.26	2.27	1.24	0.70
0.30	4.41	2.42	1.37	0.79	5.00	2.69	1.49	0.85
0.40	5.02	2.77	1.57	0.91	5.75	3.14	1.77	1.02
0.50	5.68	3.15	1.79	1.05	6.57	3.67	2.11	1.24
0.60	6.46	3.61	2.07	1.22	7.53	4.33	2.56	1.55
0.70	7.43	4.22	2.46	1.47	8.72	5.22	3.21	2.02
0.80	8.74	5.10	3.05	1.87	10.30	6.57	4.28	2.85
0.90	10.99	6.71	4.20	2.69	12.95	9.27	6.74	4.98
0.95	13.44	8.50	5.49	3.62	15.57	12.16	9.60	7.67
0.97	15.40	9.89	7.29	4.35	17.33	13.96	11.36	9.34
0.99	20.07	13.01	8.62	5.82	20.60	17.04	14.22	11.97

A fitting study can predict the cure behavior of epoxy resin via a MATLAB script. The dynamic DSC results were fitted simultaneously to the model described by Arikian et al.'s study [16], and one set of model parameters was obtained to fitting. Models fitting quality is presented in Figure 5, and the model parameters of equation (2) are given in Table 3. The degree of cure of neat fast cure epoxy resin and TEGO - fast cure epoxy system was precisely characterized by the kinetic model. The model correctly predicts the experimental degree of cure in dynamic conditions neat, whether or TEGO is added. The fitting accuracy is better in the case of TEGO containing fast cure

epoxy resin with a higher correlation factor (R^2) value of 0.9526 and 0.9942 at the 20°C/min heating rate, neat fast cure epoxy and TEGO-fast cure epoxy, respectively. The slight difference between numerical and experimental values may be due to increased viscosity once the reaction reaches the vitrification threshold [15]. It is observed from the model parameters that the activation energies (E_{A1} and E_{A2}) increased with TEGO modification. Amino groups are attached to the TEGO surface and enhances the dispersion of TEGO into epoxy, increased the viscosity, hence the activation energy of the reaction [22].

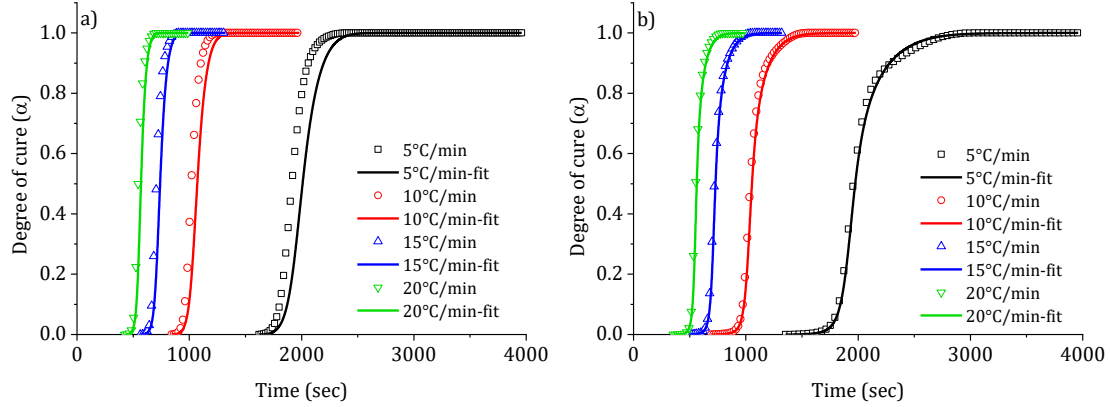


Figure 5. Degree of cure (α) profiles at dynamic heating rates a) neat fast cure epoxy, b) TEGO-fast cure epoxy. The experimental data were compared with the model predictions (continuous lines)

Table 3. Fast cure epoxy resin and TEGO (0.05wt %) / fast cure epoxy systems cure kinetics model parameters

Model Parameters	Neat fast cure epoxy	TEGO - fast cure epoxy
1 st reaction Pre-exponential cure rate coefficient (A_1) (1/s)	1.14E+07	3.69E+07
Activation energy of reaction I (E_{A1}) (kJ/mol)	76.0800	90.5300
2 nd reaction Pre-exponential cure rate coefficient (A_2) (1/s)	1.37E+07	6.35E+07
Activation energy of reaction II (E_{A2}) (kJ/mol)	71.7400	74.4400
1 st exponential constant (m_1)	0.4591	0.0010
2 nd exponential constant (m_2)	0.8640	3.2810
3 rd exponential constant (n_1)	1.1140	0.8959
4 th exponential constant (n_2)	1.7600	1.6979
Diffusion Constant (D)	2.5711	5.4658
Critical α at 0 K (α_{c0})	0.0095	0.0135
Increase in α with temperature (α_{CT}) (1/K)	0.0021	0.0016

To address the retardation effect of TEGO, gel time of the neat and TEGO - fast cure epoxy is measured at 120 °C isothermal temperature. Indeed, the gel time increased from 3.20 to 5.65 min with TEGO integration into the fast cure epoxy resin, as shown in Figure 6. It provides more time in the liquid composite molding manufacturing processes before the matrix reaches the gel point and solidifies, indicating more controllable production [6], [23].

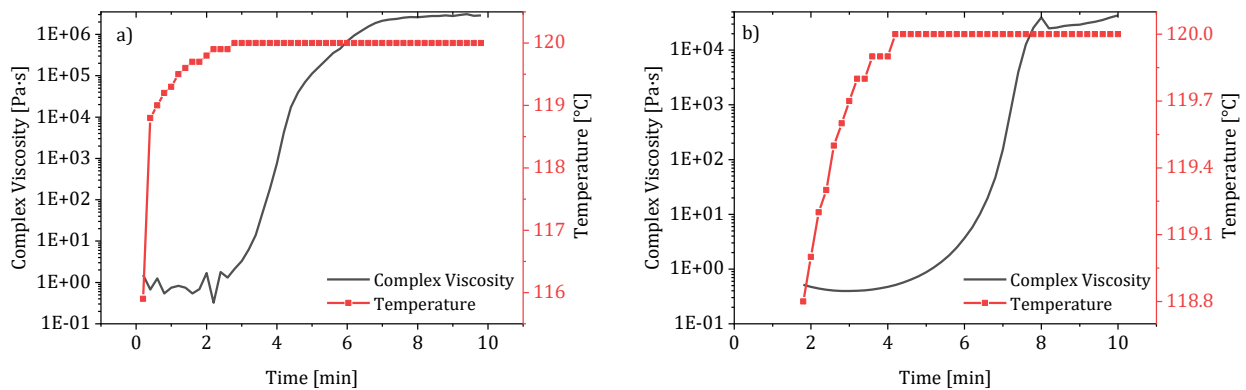


Figure 6. The gel time measurement at 120°C of a) neat fast cure epoxy, b) TEGO-fast cure epoxy.

3.2. Effect of the TEGO on thermomechanical performance

Dynamic mechanical analysis (DMA) was performed to characterize the thermo-mechanical properties of neat fast cure epoxy and TEGO-fast cure epoxy resin nanocomposites. The analysis describes the interactions between the fast-cure epoxy resin polymer chains and TEGO. Storage modulus (E'), loss modulus (E''), and tan delta ($\tan \delta$) graphs are presented in Figure 7. The storage modulus of the TEGO-fast cure epoxy nanocomposite is 1135.83 MPa at room temperature, which is slightly higher compared to the neat fast cure epoxy nanocomposite. The addition of TEGO sheets into fast-cure epoxy resin enhances the E' over the entire temperature range. The higher E' in the glass transition area is shown that the TEGO layers have strong covalent interaction with the epoxy matrix and formed covalent bonds that eventuated in an important stress transfer at the interface, that promotes to the increase of the E' . The maximum E'' value of the nanocomposite decreased relatively, from 71.64 MPa to 69.31 MPa. This suggests that TEGO nanoparticles decrease the additional internal friction with the polymer chains since the loss modulus is associated with the polymer chains' energy dissipation [18]. $\tan \delta$ is known as the ratio of the E'' to the E' , and the glass transition temperature (T_g) corresponds to temperature at maximum $\tan \delta$ value. As shown in Figure 8.c, the T_g of the TEGO-fast cure epoxy nanocomposite is 10°C higher than neat fast cure epoxy. The increase in T_g can be explained as excellent TEGO dispersion into the fast cure epoxy matrix, and due to the high surface area and the morphology of graphene nature might slightly increase the T_g value [24], [25].

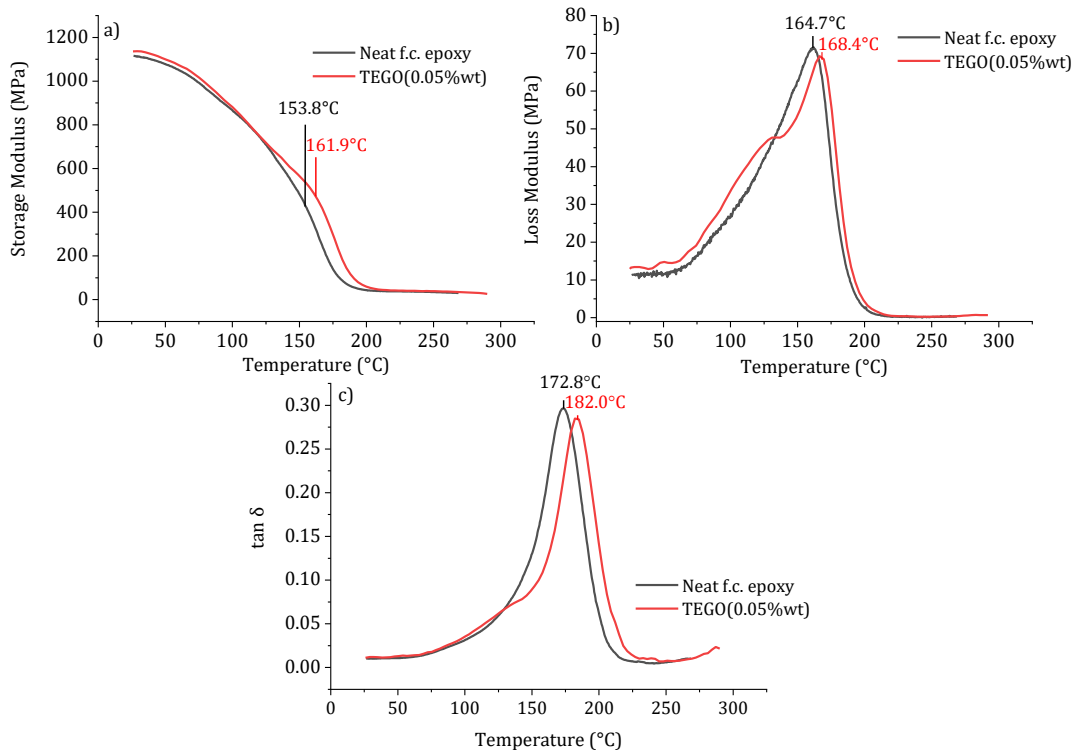


Figure 7. DMA thermograms of neat fast cure epoxy and TEGO-fast cure epoxy nanocomposites for a) storage modulus (E'), b) loss modulus (E''), and c) $\tan \delta$.

3.3. Effect of the TEGO on flexural properties

Figure 8.a shows the flexural stress-strain curves of the neat fast cure epoxy and TEGO - fast cure epoxy nanocomposites, and Figure 8. b-d shows changes in flexural stress, strain, and modulus with TEGO integration. It is found that the flexural stress is increased by 12.85% with TEGO modification. The TEGO-fast cure epoxy nanocomposite required more strain before failure as the strain at breaks is increased by 34.21% [26]. Overall, an enhancement in flexural properties is found out with the TEGO modification to fast cure epoxy resin. Even such a low loading amount, TEGO has a significant influence on the flexural properties of fast cure epoxy resin due to good adhesion into the matrix and specific large surface area [14]. The graphene existence in the matrix is improved to matrix stress transfer hence the flexural properties. The modification of TEGO into the resin improves the fracture path hence the strength of the nanocomposites. The nano reinforcement provides more resistance to damage of the epoxy nanocomposites due to their small size and high specific surface area [11]. Neat fast cure epoxy nanocomposite is more brittle and resistance to crack growth is weak [10]. Homogeneously dispersed TEGO nanofiller can improved the interfacial properties due to matrix compatible functional groups and provide an efficient stress distribution. Also, rough surfaces ease the energy dissipation during failure, that shows the

strengthening effect of TEGO nanofiller and enhance the flexural properties of nanocomposite [12], [26], [27]. For a better understanding of the failure mechanism, the specimens' fracture surface was examined by SEM (Figure 9). It is clearly shown that from Figure 9.a, the fracture surface of the neat fast cure epoxy nanocomposite is smooth as a brittle characteristic of epoxy resin systems. The cracks propagated in straight line and moved without diversion on the fracture surface [28]. On the contrary, the TEGO-fast cure epoxy nanocomposite fracture surface is rougher compared to the neat fast-cure epoxy nanocomposite, as seen in Figure 9.b, and no apparent crack was observed on the surface. The uniform roughness and the micro voids that marked in the Figure 9.b is indicated the homogeneous dispersion of TEGO nano reinforcement into the epoxy matrix. The rough fracture surface is related to creating additional surfaces during fracture due to nanoparticle reinforcement. The TEGO sheets lead to effective load distribution and act as an obstacle to preventing crack growth [12], [15], [29].

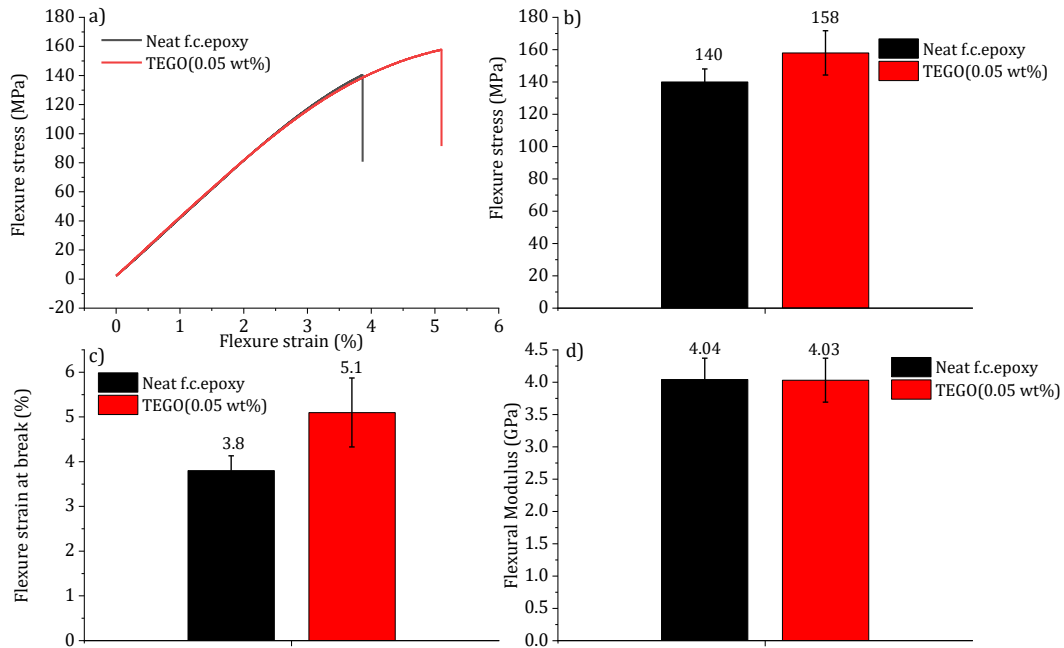


Figure 8. Flexural test results for neat fast cure epoxy and TEGO-fast cure epoxy nanocomposites, a) representative stress-strain curves, and b-d) bar charts for stress, strain, and modulus, respectively

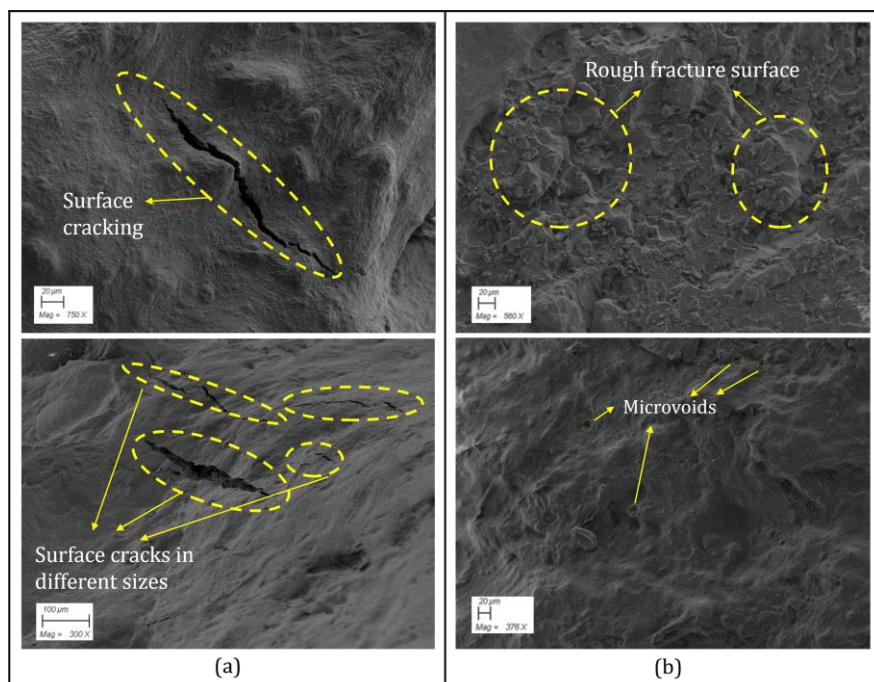


Figure 9. SEM images of three-point bending samples fracture surface at different magnifications of a) neat fast cure epoxy nanocomposite and b) TEGO- fast cure epoxy nanocomposite

4. Discussion and Conclusion

In this study effect of the thermally exfoliated graphene oxide (TEGO) modification to the fast-cure epoxy resin system on the cure kinetics and flexural properties are investigated. 0.05 wt.% TEGO was distributed homogeneously into the fast cure epoxy resin system by sonication method. The DSC results revealed that the addition of TEGO hinders the curing of fast-cure epoxy. Curing time was increased as TEGO existence restricted the mobility of polymer chains. The restriction effect is more significant at higher temperatures as the time is less for crosslinking. The cure kinetics of the fast-cure epoxy resin is also characterized by a fitting study via a MATLAB script with a diffusion-controlled autocatalytic equation. The script predicts the experimental degree of cure with higher accuracy in the case of TEGO- fast cure epoxy resin with a correlation factor (R^2) value of 0.9942. The results of the DMA analysis show that the thermomechanical properties improved as the T_g increased about 10 °C. The flexural strength and strain of TEGO-fast cure epoxy nanocomposites are improved by about 12.85% and 34.21%, respectively. Contrary to epoxy's brittle smooth surface structure, a rougher fracture surface was observed in the SEM images after TEGO modification. Also, the crack growth is prevented as the TEGO sheets act as an obstacle. The large surface area and good adhesion properties of the TEGO greatly influence the mechanical properties even at low percentages. In future studies, the effect of TEGO modified fast cure epoxy resin on the fiber-reinforced composite production process, and the effect on the final product quality.

Acknowledgment

The authors thank Assoc. Prof. Dr. Burcu Saner Okan for her contribution on nano reinforcement supply and Samet Ozyigit for his assistance on the experimental procedure of nano reinforcement dispersion. This research is financially supported by the Scientific and Technological Research Council of Turkey (TUBITAK) under TUBITAK 2244 - Industrial Ph.D. Fellowship Program KORDSA Teknik Tekstil A.S. and Sabanci University [Grant no: 118C043].

References

- [1] D. Incerti, D. Carolan, and A. Fergusson, "Fast vs tough; The effect of faster cure cycles on the fracture properties of toughened epoxies," *Int. SAMPE Tech. Conf.*, vol. 2019-May, no. May, 2019, doi: 10.33599/nasampe/s.19.1491.
- [2] D. A. Lakho, D. Yao, K. Cho, M. Ishaq, and Y. Wang, "Study of the Curing Kinetics toward Development of Fast-Curing Epoxy Resins," *Polym. - Plast. Technol. Eng.*, vol. 56, no. 2, pp. 161–170, 2017, doi: 10.1080/03602559.2016.1185623.
- [3] P. Murias, Ł. Byczyński, H. Maciejewski, and H. Galina, "A quantitative approach to dynamic and isothermal curing of an epoxy resin modified with oligomeric siloxanes," *J. Therm. Anal. Calorim.*, vol. 122, no. 1, pp. 215–226, 2015, doi: 10.1007/s10973-015-4703-0.
- [4] D. B. Bender, T. Centea, and S. Nutt, "Fast cure of stable semi-pregs via VBO cure," *Adv. Manuf. Polym. Compos. Sci.*, vol. 6, no. 4, pp. 245–255, 2020, doi: 10.1080/20550340.2020.1869891.
- [5] M. A. Khan, C. Pasco, N. Reynolds, and K. Kendall, "Shear deformability characteristics of a rapid-cure woven prepreg fabric," *Int. J. Mater. Form.*, vol. 14, no. 1, pp. 133–142, 2021, doi: 10.1007/s12289-019-01532-0.
- [6] A. Keller, K. Masania, A. C. Taylor, and C. Dransfeld, "Fast-curing epoxy polymers with silica nanoparticles: properties and rheo-kinetic modelling," *J. Mater. Sci.*, vol. 51, no. 1, pp. 236–251, 2015, doi: 10.1007/s10853-015-9158-y.
- [7] A. Keller, C. Dransfeld, and K. Masania, "Flow and heat transfer during compression resin transfer moulding of highly reactive epoxies," *Compos. Part B Eng.*, vol. 153, no. May, pp. 167–175, 2018, doi: 10.1016/j.compositesb.2018.07.041.
- [8] E. F. Sukur and G. Onal, "Long-term salt-water durability of GNPs reinforced basalt-epoxy multiscale composites for marine applications," *Tribol. Int.*, vol. 158, no. November 2020, p. 106910, 2021, doi: 10.1016/j.triboint.2021.106910.
- [9] M. A. Downey and L. T. Drzal, "Toughening of aromatic epoxy via aliphatic epoxy copolymers," *Polymer (Guildf)*, vol. 55, no. 26, pp. 6658–6663, 2014, doi: 10.1016/j.polymer.2014.10.052.
- [10] E. F. Sukur, S. Kocaman, and G. Önal, "Mechanical, tribological and thermal properties of epoxy based phenolic nanocomposites reinforced with graphene nanoplatelet," *Comput. Res. Prog. Appl. Sci. Eng. CRPASE Trans. Mech. Eng.*, no. Special Issue, pp. 2–9, 2020, [Online]. Available: <https://www.researchgate.net/publication/344041047>.
- [11] U. Szeluga, S. Pusz, B. Kumanek, K. Olszowska, A. Kobylukh, and B. Trzebicka, "Effect of graphene filler

structure on electrical, thermal, mechanical, and fire retardant properties of epoxy-graphene nanocomposites - a review," *Crit. Rev. Solid State Mater. Sci.*, vol. 46, no. 2, pp. 152–187, 2021, doi: 10.1080/10408436.2019.1708702.

- [12] J. S. Monfared Zanjani, B. S. Okan, Y. Z. Menciloglu, and M. Yildiz, "Nano-engineered design and manufacturing of high-performance epoxy matrix composites with carbon fiber/selectively integrated graphene as multi-scale reinforcements," *RSC Adv.*, vol. 6, no. 12, pp. 9495–9506, 2016, doi: 10.1039/C5RA23665G.
- [13] B. Saner Okan, "Fabrication of multilayer graphene oxide-reinforced high density polyethylene nanocomposites with enhanced thermal and mechanical properties via thermokinetic mixing," *Turkish J. Chem.*, vol. 41, no. 3, pp. 381–390, 2017, doi: 10.3906/kim-1608-53.
- [14] E. C. Senis, I. O. Golosnoy, J. M. Dulieu-Barton, and O. T. Thomsen, "Enhancement of the electrical and thermal properties of unidirectional carbon fibre/epoxy laminates through the addition of graphene oxide," *J. Mater. Sci.*, vol. 54, no. 12, pp. 8955–8970, 2019, doi: 10.1007/s10853-019-03522-8.
- [15] M. Nonahal *et al.*, "Design, preparation, and characterization of fast cure epoxy/amine-functionalized graphene oxide nanocomposites," *Polym. Compos.*, vol. 39, no. S4, pp. E2016–E2027, Dec. 2018, doi: 10.1002/PC.24415.
- [16] M. H. Arikan, F. Eroglu, V. Eskizeybek, E. F. Sukur, M. Yildiz, and H. S. Sas, "A Systematic Characterization Approach for Vacuum Bag Only Prepregs towards an Accurate Process Design," *Materials (Basel)*, vol. 15, no. 2, pp. 1–19, 2022, doi: 10.3390/ma15020451.
- [17] C. Monteser, M. Blanco, E. Aranzabe, A. Aranzabe, and J. L. Vilas, "Effects of graphene oxide and chemically reduced graphene oxide on the curing kinetics of epoxy amine composites," vol. 44803, pp. 12–16, 2017, doi: 10.1002/app.44803.
- [18] A. Surnova, D. Balkaev, D. Musin, R. Amirov, and A. M. Dimiev, "Fully exfoliated graphene oxide accelerates epoxy resin curing, and results in dramatic improvement of the polymer mechanical properties," *Compos. Part B Eng.*, vol. 162, pp. 685–691, 2019, doi: 10.1016/j.compositesb.2019.01.020.
- [19] X. Zhao, Z. Huang, P. Song, H. Yang, and Y. Zhang, "Curing kinetics and mechanical properties of fast curing epoxy resins with isophorone diamine and N-(3-aminopropyl)-imidazole," *J. Appl. Polym. Sci.*, vol. 136, no. 37, pp. 1–10, 2019, doi: 10.1002/app.47950.
- [20] L. Li, H. Zou, M. Liang, and Y. Chen, "Study on the effect of poly(oxypropylene)diamine modified organic montmorillonite on curing kinetics of epoxy nanocomposites," *Thermochim. Acta*, vol. 597, pp. 93–100, Dec. 2014, doi: 10.1016/J.TCA.2014.10.008.
- [21] "Online Tutorial on Differential Scanning Calorimetry (DSC)." <https://www.mt.com/se/sv/home/library/videos/lab-analytical-instruments/dsc-online-training-course-video-28.html> (accessed Apr. 04, 2022).
- [22] M. Jouyandeh *et al.*, "Curing epoxy resin with anhydride in the presence of halloysite nanotubes: the contradictory effects of filler concentration," *Prog. Org. Coatings*, vol. 126, no. October 2018, pp. 129–135, 2019, doi: 10.1016/j.porgcoat.2018.10.007.
- [23] J. B. Robles, L. Hong, M. A. Octeau, and A. Yousefpour, "Material Characterization of Graphene Enhanced Composites for Resin Transfer Moulding," *11th Can. Conf. Compos.*, no. July, pp. 1–7, 2018.
- [24] M. Fang, Z. Zhang, J. Li, H. Zhang, H. Lu, and Y. Yang, "Constructing hierarchically structured interphases for strong and tough epoxy nanocomposites by amine-rich graphene surfaces," *J. Mater. Chem.*, vol. 20, no. 43, pp. 9635–9643, 2010, doi: 10.1039/c0jm01620a.
- [25] Y. J. Wan *et al.*, "Grafting of epoxy chains onto graphene oxide for epoxy composites with improved mechanical and thermal properties," *Carbon N. Y.*, vol. 69, pp. 467–480, 2014, doi: 10.1016/j.carbon.2013.12.050.
- [26] R. Umer, Y. Li, Y. Dong, H. Hj, and K. Liao, "The effect of graphene oxide (GO) nanoparticles on processing of epoxy / glass fiber composites using resin infusion," pp. 1–36, 2015, doi: 10.1007/s00170-015-7427-1.The.
- [27] A. J. Kinloch and A. C. Taylor, "The mechanical properties and fracture behaviour of epoxy-inorganic micro- and nano-composites," *J. Mater. Sci.*, vol. 41, no. 11, pp. 3271–3297, 2006, doi: 10.1007/s10853-005-5472-0.
- [28] M. S. Saharudin, S. Hasbi, A. Zulkifli, and N. F. Zailani, "The Processing of Epoxy / 1 wt % -graphene Nanocomposites: Effects of Ethanol on Flexural Properties," no. November, 2019, doi: 10.35940/ijitee.A8105.119119.

- [29] R. Eqra, M. H. Moghim, and N. Eqra, "A study on the mechanical properties of graphene oxide/epoxy nanocomposites," doi: 10.1177/09673911211011150.

A Phenomenological Approach to Heavy Majorana Mass Neutrinos in Dileptonic and Trileptonic Channels at Hadron Colliders

Emrah Tıraş^{ID}*1,2, Kamuran Dilsiz^{ID}3, Ayşe Bat^{ID}1

¹Department of Physics, Faculty of Science, Erciyes University, Kayseri 38280, Türkiye

²Department of Physics and Astronomy, University of Iowa, IA 52242, USA

³Department of Physics, Faculty of Art and Science, Bingöl University, Bingöl 12000, Türkiye

(Alınış / Received: 16.05.2022, Kabul / Accepted: 08.08.2022, Online Yayınlanma / Published Online: 23.08.2022)

Keywords

Neutrinos,
Heavy Majorana Neutrinos,
Large Hadron Collider (LHC),
Alpgen,
HVYN package,
LHC experiment.

Abstract: The non-zero masses of neutrinos are the first solid evidence beyond the Standard Model of particle physics. Seesaw mechanism is one of the extensions to the Standard Model, which is generating Majorana type light neutrinos with corresponding heavy neutrino mass states. In this model, the smallness of the light neutrino mass ($\nu_\mu < 1$ eV) is explained by having heavy neutrino mass at the TeV scale that is an accessible regime at particle colliders. In this paper, we describe a phenomenological study on heavy Majorana neutrino productions in proton-proton collisions at center-of-mass energies of 8 and 13 TeV. We consider that the heavy Majorana neutrino is produced by both dileptonic and trileptonic channels as production of a charged W boson. The cross section results of the heavy Majorana neutrinos for both same-sign and opposite-sign events in the dileptonic channel show a similar trend for the higher mass region starting from 300 GeV/c² when a $p_T > 5$ GeV/c cut applied on leptons. The results also show that the production of such heavy mass neutrino particles is more likely to happen in the dileptonic channel than in the trileptonic channel.

Hadron Çarpıştırıcılarında İki-leptonik ve Üç-leptonik Kanallarda Ağır Majorana Nötrino Araştırmalarına Fenomenolojik Yaklaşım

Anahtar Kelimeler

Nötrinolar,
Ağır Majorana Nötrinoları,
Büyük Hadron Çarpıştırıcısı
(BHÇ),
Alpgen,
HVYN paketi,
BHÇ deneyleri

Özet: Nötrinoların kütlelerinin sıfırdan farklı olması, parçacık fiziğindeki Standart Modelin ötesindeki ilk somut kanıttır. Seesaw mekanizması, ağır nötrino kütle durumlarına karşılık gelen Majorana tipi hafif nötrinolar üreten Standart Modelin uzantılarından biridir. Bu modelde, hafif nötrino kütlelerinin ($\nu_\mu < 1$ eV) küçüklüğü, parçacık çarpıştırıcıları ile erişilebilir olan TeV ölçeğindeki ağır nötrino kütlesi ile açıklanmaktadır. Bu makalede, kütle merkezi enerjileri 8 ve 13 TeV olan proton-proton çarpışmalarındaki ağır Majorana nötrino üretimleri üzerine fenomenolojik bir çalışma sunulmaktadır. Ağır Majorana nötrinolarının yüklü W bosonlarının aracılığı ile üretilen hem iki-leptonik hem de üç-leptonik üretim kanalları dikkate

alınmıştır. İki-leptonik kanaldaki hem aynı işaretli hem de zıt işaretli olaylar için ağır Majorana nötrinolarının tesir kesiti sonuçları leptonlar üzerine $p_T > 5 \text{ GeV}/c$ limiti uygulandığında $300 \text{ GeV}/c^2$ 'den başlayarak daha yüksek kütleli bölgeler için benzer bir eğilim göstermektedir. Ayrıca sonuçlar bu tür ağır kütleli nötrino parçacıklarının üretiminin ikileptonik kanalda trileptonik kanala göre daha olası olduğunu göstermektedir.

*Corresponding Author, email: etiras@fnal.gov

1. Introduction

The CMS [1] and ATLAS [2][3] experiments, state-of-art particle detectors have been collecting data since the Large Hadron Collider (LHC) started to smash high energetic proton bunches in 2007. The center-of-mass energy at the LHC was 7 TeV in 2011, 8 TeV in 2012, and it reached 13 TeV in 2015. The design collision energy of the LHC is 14 TeV, and it is aimed to reach to that in the near future.

The LHC has been the source of many exotic particles since it started to run. As weakly interacting particles, Neutrinos are not interacting with the detectors much, but the interaction of daughter particles (from the neutrino interactions) with the active detector elements nuclei can be reconstructed to understand neutrino nature. The discovery of the neutrino oscillations established that neutrinos cannot be zero-mass particles as predicted by the Standard Model (SM) [4-6]. The tiny mass values of the observed neutrinos are explained with various extension models to the SM. Among those, Seesaw model type-I [7-15] is one of the most common mechanisms, which is generating light neutrinos with a corresponding heavy neutrino mass state, N . Both light and heavy neutrinos are Majorana type particles, and the lepton number conservation is violated by two units in the Majorana nature of neutrinos. In this model, the light neutrino mass is inversely related to the heavy mass neutrino state, so the smallness of the light neutrino (m_ν) is explained by the largeness of the heavy mass state N (M_N), $m_\nu \approx y_\nu^2 v^2 / M_N$, where y_ν is a Yukawa coupling and v is the Higgs vacuum expectation value in the SM. The numerator in the equation gives the Dirac type neutrino mass, $m_D^2 = y_\nu^2 v^2$. The existence of heavy mass neutrino may help us to reveal the nature of neutrino masses and may also be a possible candidate for dark matter, which can help us explain the matter-antimatter asymmetry problem [16-22].

$$V_{lN} = \begin{bmatrix} V_{eN_1} & V_{eN_2} & V_{eN_3} \\ V_{\mu N_1} & V_{\mu N_2} & V_{\mu N_3} \\ V_{\tau N_1} & V_{\tau N_2} & V_{\tau N_3} \end{bmatrix} \quad (1)$$

Majorana studies have long been studied in accelerator-based hadron colliders like at Large Electron-Positron (LEP) Collider and the LHC some limits were set on the mixing matrix, V_{lN} in Eq. 1 shows the different flavor combinations and mixing parameters between heavy mass state and lepton flavors, as shown in the Feynman diagrams, Fig. 1.

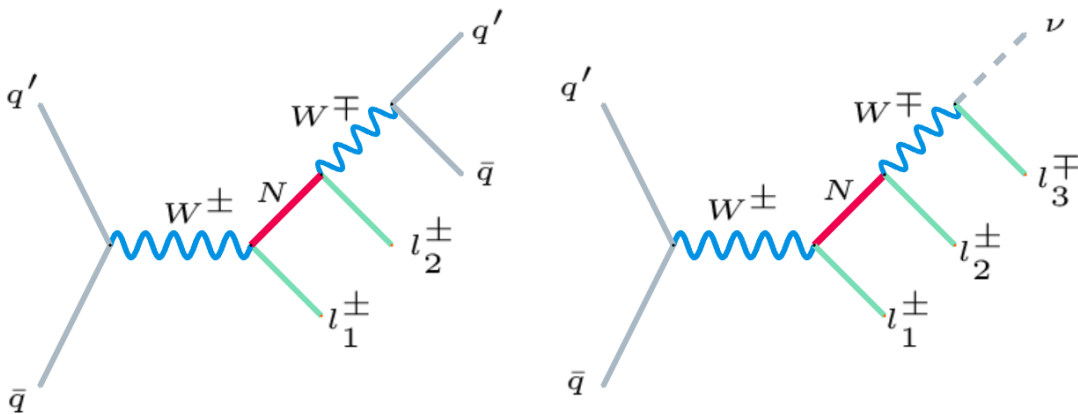


Figure 1. The Feynman diagrams of dileptonic (left) and trileptonic (right) resonant production of heavy Majorana neutrino in proton-proton collisions.

Previously, the L3 [23] and DELPHI [24] experiments at LEP searched the Majorana neutrinos for $Z \rightarrow \nu_l N$ ($l = e, \mu, \tau$) decay channel and put limits on $|V_{\nu N}|^2$ as a function of m_N . Table 1 shows the limits on $|V_{\mu N}|^2$, $|V_{eN}|^2$, and $|V_{eN} V_{\mu N}^*|^2 / |V_{eN}|^2 + |V_{\mu N}|^2$ arising from different dileptonic channels ($\mu^\pm \mu^\pm, e^\pm e^\pm, e^\pm \mu^\pm / \mu^\pm e^\pm$) for the corresponding run-periods by the CMS experiment at CERN. The ATLAS experiment also reported the results for heavy Majorana neutrinos at the center of mass energies of 8 TeV [25] and 13 TeV [26].

Table 1. CMS detector heavy Majorana search results for Dileptonic final state using 7 TeV (5.0 fb⁻¹) [27], 8 TeV (19.7 fb⁻¹) [28][29], and 13 TeV (35.9 fb⁻¹) [30].

	7 TeV (5.0 fb ⁻¹)	8 TeV (19.7 fb ⁻¹)	13 TeV (35.9 fb ⁻¹)
$ V_{\mu N} ^2$	$7.0 \times 10^{-2} M_N = 90 \text{ GeV}$ $4.3 \times 10^{-1} M_N = 203 \text{ GeV}$	$4.7 \times 10^{-3} M_N = 90 \text{ GeV}$ $1.23 \times 10^{-2} M_N = 200 \text{ GeV}$ $5.83 \times 10^{-1} M_N = 500 \text{ GeV}$	$2.31 (1.9) \times 10^{-5} M_N = 40 \text{ GeV}$ $2.7 (1.6) \times 10^{-1} M_N = 1000 \text{ GeV}$
$ V_{eN} ^2$	$2.2 \times 10^{-1} M_N = 90 \text{ GeV}$ $4.3 \times 10^{-1} M_N = 203 \text{ GeV}$	$2.0 \times 10^{-2} M_N = 90 \text{ GeV}$ $1.7 \times 10^{-2} M_N = 200 \text{ GeV}$ $7.1 \times 10^{-1} M_N = 500 \text{ GeV}$	$9.5 (8.0) \times 10^{-5} M_N = 40 \text{ GeV}$ $4.2 (3.2) \times 10^{-1} M_N = 1000 \text{ GeV}$
$\frac{ V_{eN} V_{\mu N}^* ^2}{ V_{eN} ^2 + V_{\mu N} ^2}$	Not Available	$5.0 \times 10^{-3} M_N = 90 \text{ GeV}$ $5.0 \times 10^{-3} M_N = 200 \text{ GeV}$ $2.9 \times 10^{-1} M_N = 500 \text{ GeV}$	$2.7 (2.7) \times 10^{-5} M_N = 40 \text{ GeV}$ $1.4 (1.4) \times 10^{-1} M_N = 1000 \text{ GeV}$

In this study, we have simulated heavy Majorana neutrino production and decay processes in both dileptonic (also known as s-channel, see Figure 1-left) and trileptonic (also known as t-channel, see Figure 1-right) using a custom, leading order (LO) Alpgen event generator (v2.14) [31] with LO parton distribution functions (PDFs), CTEQ6L and CTEQ6L1, and with next-to-leading order (NLO) PDF, CTEQ6M [32][33]. The interactions of Majorana neutrinos (N) with the charged lepton (l^\pm) and charged boson (W^\pm) as a mediated process are show in Equation 2, and the corresponding Feynman diagrams are shown in Figure 1.

$$\begin{aligned}
pp &\rightarrow l_1^\pm N, \quad N \rightarrow l_2^\pm W^\mp, \quad W^\mp \rightarrow jj && \text{(dileptonic)} \\
pp &\rightarrow l_1^\pm N, \quad N \rightarrow l_2^\pm W^\mp, \quad W^\mp \rightarrow l_3^\pm \nu && \text{(trileptonic)}
\end{aligned} \tag{2}$$

2. Methods and Simulation

2.1. Simulation of s-channel and t-channel heavy neutrino mass production

For physics processes of heavy Majorana neutrino production in hadron-hadron collisions, the HVYN package in the ALPGEN v2.14 framework was developed and implemented by F. del Aguila et al. [34]. The code was written in Fortran, a common compiled imperative programming language in 1950s, and we have written a bash script to enable robust computation.

The SM provides LO matrix element calculations of $d\hat{\sigma}$ based on the ALPHA algorithm with common LO (CTEQ6L, CTEQ6L1, etc.) and NLO (CTEQ6M, etc.) PDF sets. In the HVYN package, both weighted and unweighted parton level event generations are possible. Weighted event generation is sufficient to produce results at the parton level, but in this study, we generated unweighted events to produce actual events, which can provide more realistic detector simulation studies for the particle interactions. During the unweighting stage, kinematics, flavors, colors, and spins of the events are reconstructed. Therefore, the cross sections in this study were calculated based on unweighted events with all the kinematics of the particles. Also, the particle selection process was done during the parton level to select only required particles in the final state.

At 8 TeV proton-proton (pp) collision energy, 50k unweighted events were generated at each mass point of the heavy Majorana mass state were generated. However, to have more statistics at 13 TeV pp collision energy, we generated 200k events for each selected mass point of the heavy Majorana mass state in the low mass region, 40-90 MeV, 100k events in the intermediate mass region, 100-300 MeV and 50k events in the high mass region, 350-1500 MeV. Event samples at each mass point were generated for both dilepton ($ee, \mu\mu, \mu e, e\mu$) and trilepton ($eee, e\mu\mu, e\mu e, e\mu\mu, \mu\mu e, \mu\mu\mu$) final state of the heavy Majorana mass neutrino production.

In this search channel of the heavy Majorana neutrinos at pp collisions, the study is pursued in dileptonic and trileptonic final-state combinations of electrons (e) and muons (μ) except taus (τ) since the mean lifetime of tau is so short, and it's challenging to reconstruct taus in accelerator experiments. For comparison purposes, the same-sign (SS) and opposite-sign (OS) final state dilepton and trilepton events were generated. For further analysis with more statistics, the outputs of the SS and OS events as in Les Houches Event (LHE) files at each mass point were carefully combined by using a Python script.

In the pp collisions, there are three potential sources for SS dilepton event candidates; the first one is WZ production, in which two prompt SS leptons are identified, and the other two are $Z \rightarrow l^+l^-$ and $W^\pm W^\mp \rightarrow l^+\nu l^-\nu$, in which the charge of one of the lepton pairs is mismeasured. The latter source is an important background for dielectron studies, but it is negligible for other lepton pairs such as dimuon and electron-muon studies.

In this study, we calculated the estimates for heavy Majorana neutrino production at pp collisions for the two regimes: $m(N) < M_w$ and $m(N) > M_w$. The former case is an off-shell production in which W is a virtual particle, and reconstruction of the heavy Majorana mass and surpassing the background wouldn't be easy. On the other hand, the latter case is an on-shell production that reduces the background further and allows to be reconstructing the mass of heavy state.

3. Results

Figure 2 compares LO cross section predictions at 8 and 13 TeV of pp collisions as a function of the heavy Majorana neutrino mass (N). The selected mass points are the mass points used officially for 8 TeV and 13 TeV physics analyses by CMS Collaboration at CERN. The cross section prediction is at least a factor of 2 higher at 13 TeV than at 8 TeV in all mass regions except at 90 GeV/c².

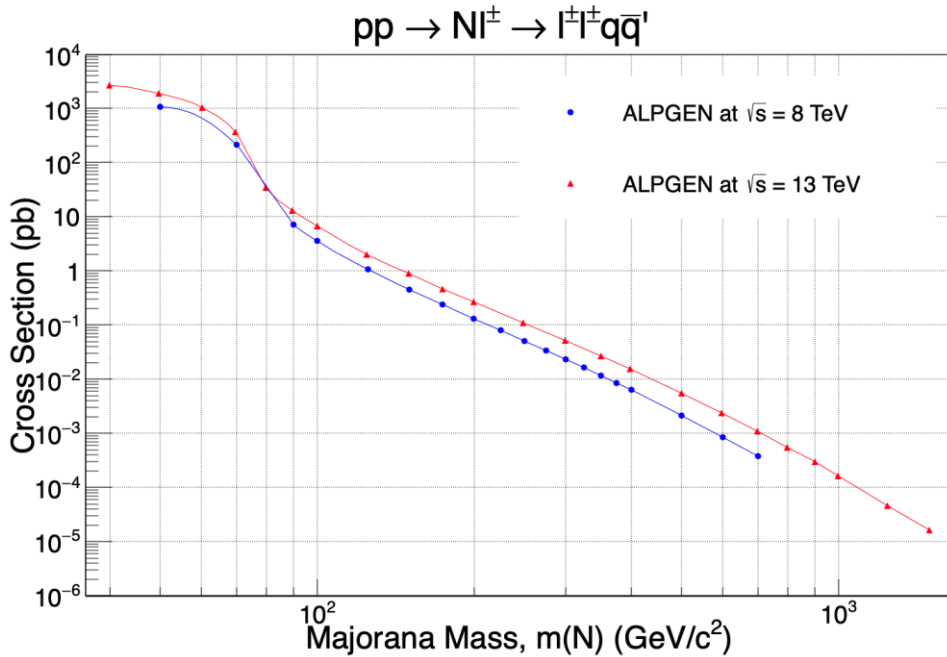


Figure 2. Leading order cross section for resonance production of a Majorana neutrino as a function of Majorana neutrino mass, N.

3.1 Dileptonic Final State

Majorana neutrino production channel, which has two leptons at the final state produced via s-channel with a different processes is shown in Equation 3. Depending on the sign of the W boson, the first lepton could be l^- or l^+ and N, the heavy Majorana, could decay l^+W^- or l^-W^+ leading to the final events containing two leptons with same-sign (SS) or opposite-sign (OS).

$$pp \rightarrow l_1^+ N, \quad N \rightarrow l_2^+ W^-, \quad W^- \rightarrow jj, \quad l = e, \mu \text{ (SS)}$$

$$pp \rightarrow l_1^- N, \quad N \rightarrow l_2^- W^+, \quad W^+ \rightarrow jj, \quad l = e, \mu \text{ (SS)}$$

$$\begin{aligned}
pp &\rightarrow l_1^+ N, \quad N \rightarrow l_2^- W^+, \quad W^+ \rightarrow jj, \quad l = e, \mu \text{ (OS)} \\
pp &\rightarrow l_1^- N, \quad N \rightarrow l_2^+ W^-, \quad W^- \rightarrow jj, \quad l = e, \mu \text{ (OS)}
\end{aligned} \tag{3}$$

The heavy Majorana neutrino production and decay processes, Figure 3, are simulated using the LO event generator described in [34] and implemented in ALPGEN v2.14 with the NLO CTEQ6M PDF at the center-of-mass energy, $\sqrt{s} = 13$ TeV as a function of Majorana neutrino mass. Figure 3 shows the cross section of heavy Majorana mass neutrinos for both SS and OS dilepton ($\mu\mu$ in this case) events. In the left plot, there is no transverse momentum (p_T) cut on leptons, and this plot shows a discrepancy at the higher Majorana mass. In the right plot, a selection cut of $p_T > 5$ GeV/c is applied to the leptons, and the plot shows that SS and OS cross section results are compatible with the optimized P_T cut on leptons.

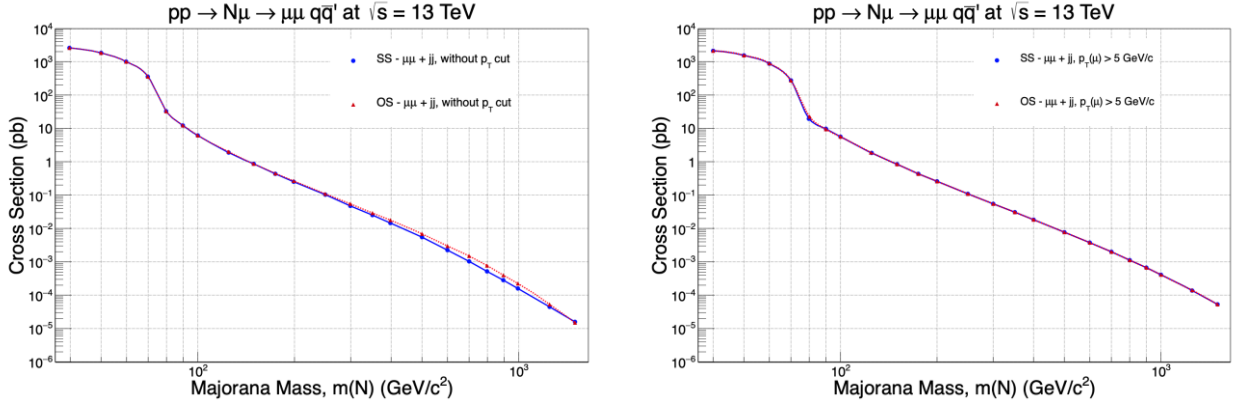


Figure 3. Cross section of Majorana neutrinos at $\sqrt{s} = 13$ TeV as a function of the mass of Majorana particles, N . The left-plot shows the cross section results of same-sign and opposite-sign final state lepton pairs without a p_T cut on the leptons, and the right-plot is with a $p_T > 5$ GeV/c cut on leptons.

Figure 4 shows the cross section results that are calculated using LO event generator with the CTEQ6M PDFs at $\sqrt{s} = 13$ TeV. The left plot shows the comparison of dilepton channels $\mu\mu$, ee , $e\mu/\mu e$, and the right plot shows the comparison of the different PDFs; CTEQ6M (NLO), CTEQ6L (LO) and CTEQ6L1 (LO) for the $\mu\mu$ final state. On the left plot, the results for $\mu\mu$ and ee dileptonic channels are similar, but they have slightly higher cross section values compared to the $e\mu/\mu e$ dileptonic channel at the higher mass region starting from 300 GeV/c². The different PDFs with LO and NLO show the indistinguishable results for dileptonic channels.

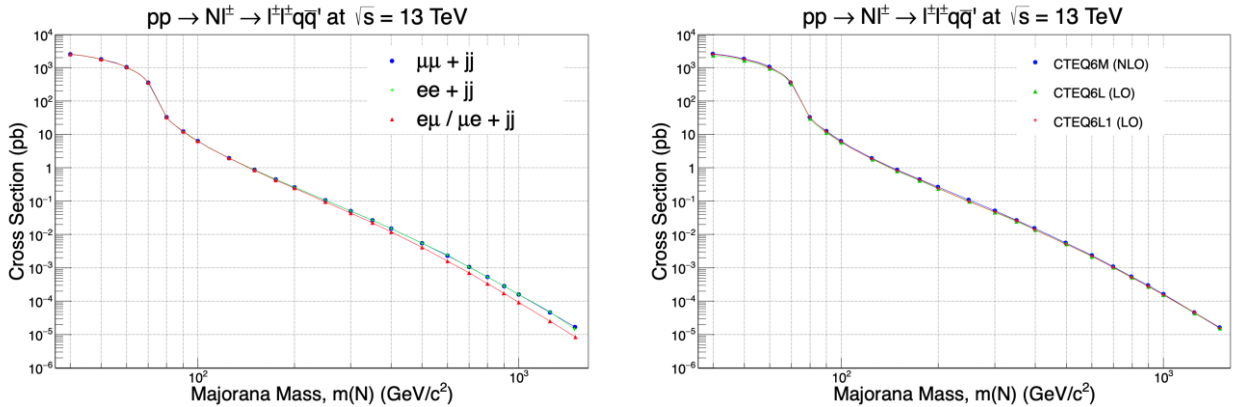


Figure 4. Cross section of Majorana neutrinos at $\sqrt{s} = 13$ TeV as a function of the mass of Majorana particles, N . The left plot shows the results for dilepton channels ($\mu\mu$, ee , $e\mu/\mu e$), and the right plot is the comparison of the different PDFs (CTEQ6M, CTEQ6L, CTEQ6L1) for the $\mu\mu$ final state.

3.2 Trileptonic Final State

$$\begin{aligned}
pp &\rightarrow l_1^+ N, \quad N \rightarrow l_2^+ W^-, \quad W^- \rightarrow l_3^- \nu, \quad l = e, \mu \text{ (SS)} \\
pp &\rightarrow l_1^- N, \quad N \rightarrow l_2^- W^+, \quad W^+ \rightarrow l_3^+ \nu, \quad l = e, \mu \text{ (SS)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
pp &\rightarrow l_1^+ N, \quad N \rightarrow l_2^- W^+, \quad W^+ \rightarrow l_3^+ \nu, \quad l = e, \mu \quad (OS) \\
pp &\rightarrow l_1^- N, \quad N \rightarrow l_2^+ W^-, \quad W^- \rightarrow l_3^- \nu, \quad l = e, \mu \quad (OS)
\end{aligned} \tag{4}$$

The trileptonic final state processes and possible interactions are listed below in Equation 4. The 3rd lepton in the trileptonic final state comes from the W boson decaying into a lepton and a neutrino in the final state instead of two jets. Like the case in the dileptonic final state, the state of being SS or OS depends on the lepton that forms N and on the state where N decays.

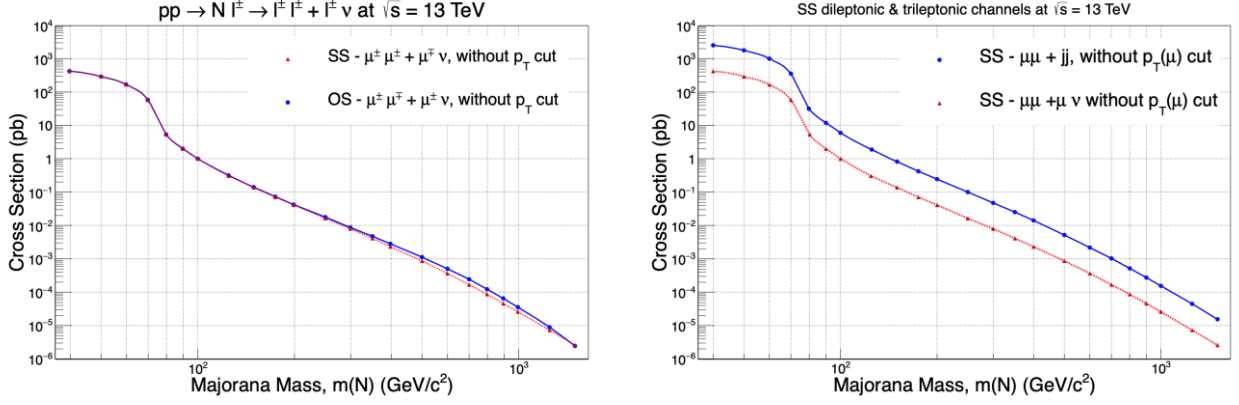


Figure 5. Cross section of Majorana neutrinos at $\sqrt{s} = 13$ TeV as a function of the mass of Majorana particles, N . The left plot shows the cross section results for same-sign and opposite-sign for trileptonic final state, and the right plot is the comparison of the dileptonic and trileptonic final state.

For the trileptonic final state, the cross section of all possible lepton flavors (eee , $\mu\mu\mu$, $e\mu\mu/e\mu e$, $e\mu\mu/\mu\mu e$) interactions are calculated by using ALPGEN v2.14 generator as described previously. Figure 5 on the left shows the SS and OS results for $\mu\mu\mu$ trileptonic final state at $\sqrt{s} = 13$ TeV without any P_T cut, and the right plot shows the comparison of the dileptonic channel for $\mu\mu + 2$ jets and the trileptonic channel produced via $\mu\mu + \mu\nu$. The cross section prediction of the dileptonic channel is almost a factor of 10 higher than the corresponding results of the trileptonic channel. This shows that dileptonic channels for heavy Majorana search at hadron colliders are more favorable than the trileptonic channels

Table 2. Cross section of Majorana neutrinos at $\sqrt{s} = 13$ TeV as a function of heavy Majorana mass, N . The table shows the comparison of the different PDFs (CTEQ6M, CTEQ6L, CTEQ6L1) for the $\mu\mu$ final state.

Mass	CTEQ6M	CTEQ6L	CTEQ6L1
40	2.654e+03	2.365e+03	2.542e+03
50	1.876e+03	1.673e+03	1.797e+03
60	1.068e+03	9.491e+02	1.023e+03
70	3.614e+02	3.327e+02	3.774e+02
80	3.331e+01	3.021e+01	3.331e+01
90	1.284e+01	1.144e+01	1.284e+01
100	6.415e+00	5.803e+00	6.143e+00
125	1.990e+00	1.804e+00	1.906e+00
150	8.735e-01	8.010e-01	8.364e-01
175	4.559e-01	4.110e-01	4.366e-01
200	2.710e-01	2.380e-01	2.485e-01
250	1.091e-01	9.721e-02	1.000e-01
300	5.219e-02	4.666e-02	4.786e-02
350	2.724e-02	2.474e-02	2.609e-02
400	1.551e-02	1.406e-02	1.422e-02
500	5.722e-03	5.222e-03	5.247e-03
600	2.404e-03	2.213e-03	2.302e-03
700	1.102e-03	1.034e-03	1.055e-03
800	5.508e-04	5.212e-04	5.274e-04
900	3.002e-04	2.786e-04	2.875e-04
1000	1.636e-04	1.569e-04	1.567e-04
1250	4.655e-05	4.463e-05	4.655e-05

1500	1.645e-05	1.550e-05	1.575e-05
------	-----------	-----------	-----------

Table 3. Cross section of Majorana neutrinos at $\sqrt{s} = 13$ TeV as a function of heavy Majorana mass, N . The table shows the cross section results for dilepton channels ($\mu\mu, ee, e\mu/\mu e$).

Mass	$\mu\mu + jj$	$ee + jj$	$e\mu/\mu e + jj$
40	2.567e+03	2.568e+03	2.569e+03
50	1.818e+03	1.817e+03	1.818e+03
60	1.031e+03	1.031e+03	1.031e+03
70	3.614e+02	3.609e+02	3.608e+02
80	3.297e+01	3.296e+01	3.300e+01
90	1.254e+01	1.253e+01	1.253e+01
100	6.374e+00	6.374e+00	6.339e+00
125	1.987e+00	1.986e+00	1.951e+00
150	8.714e-01	8.713e-01	8.450e-01
175	4.533e-01	4.530e-01	4.329e-01
200	2.623e-01	2.621e-01	2.466e-01
250	1.068e-01	1.067e-01	9.683e-02
300	5.101e-02	5.100e-02	4.446e-02
350	2.691e-02	2.691e-02	2.250e-02
400	1.520e-02	1.519e-02	1.219e-02
500	5.577e-03	5.576e-03	4.153e-03
600	2.339e-03	2.448e-03	1.631e-03
700	1.083e-03	1.085e-03	7.135e-04
800	5.432e-04	5.426e-04	3.396e-04
900	2.891e-04	2.891e-04	1.759e-04
1000	1.627e-04	1.627e-04	9.376e-05
1250	4.633e-05	4.830e-05	2.512e-05
1500	1.685e-05	1.460e-05	8.460e-06

Table 4. Cross section of Majorana neutrinos at $\sqrt{s} = 13$ TeV as a function of heavy Majorana mass, N . The table shows the cross section results of same-sign and opposite-sign trileptonic final state.

Mass	SS: $(l^\pm l^\pm) l^\mp \nu$	OS: $(l^\pm l^\mp) l^\pm \nu$
40	4.220e+02	4.222e+02
50	2.980e+02	2.984e+02
60	1.690e+02	1.696e+02
70	5.920e+01	5.905e+01
80	5.350e+00	5.340e+00
90	2.010e+00	2.015e+00
100	1.020e+00	1.022e+00
125	3.150e-01	3.192e-01
150	1.390e-01	1.420e-01
175	7.180e-02	7.425e-02
200	4.130e-02	4.328e-02
250	1.670e-02	1.802e-02
300	7.960e-03	8.870e-03
350	4.200e-03	4.849e-03
400	2.370e-03	2.845e-03
500	8.760e-04	1.128e-03
600	3.700e-04	5.052e-04
700	1.720e-04	2.444e-04
800	8.670e-05	1.246e-04
900	4.640e-05	6.611e-05
1000	2.610e-05	3.618e-05
1250	7.440e-06	8.925e-06
1500	2.590e-06	2.508e-06

Since there are extra partonic processes included into the diagram in NLO cross section, the expectation is the NLO cross section to be higher than the LO cross section. Therefore, NLO cross section provides more realistic and reliable results while compared with the data [35-37]. However, we simulated LO cross section with LO and NLO PDFs due to the lack of NLO cross section processes in ALPGEN v2.14 generator. So, we expect to have more realistic and reliable outcomes by having LO cross section results with LO and NLO PDFs. The results in Table 3 and the comparison in the right plot of Figure 2 shows that the cross section results obtained with NLO PDF is slightly higher than the cross section results obtained with LO PDF. This is because extra partonic processes are included in the diagram in NLO.

4. Discussion and Conclusion

One of the extensions to the SM to explain the neutrino's mass origin is the Seesaw type-I model. In this model, light neutrinos ($\mu_\nu < 1$ eV) are produced with very heavy neutrinos at the TeV scale. In this study, the cross section predictions of heavy Majorana neutrino mass production via dileptonic and trileptonic channels at 8 and 13 TeV, center of mass energy in proton-proton collisions are provided.

For the cross section predictions, the HVYN package in the ALPGEN framework is used with LO CTEQ6L and CTEQ6L1, and NLO CTEQ6M PDFs. As expected, the cross section values at 13 TeV is higher than the 8 TeV results in all mass regions. The cross section results of heavy Majorana mass neutrinos for both same-sign and opposite-sign dilepton channels with a $p_T > 5$ GeV/c cut on leptons show a similar trend for the higher mass region starting from 300 GeV/c². The results show that if there is such heavy mass neutrino particles, producing them in dileptonic final state has a higher possibility than producing them in the trileptonic decay mode in proton-proton collisions.

We conclude that if the main interest is in making prediction on some new processes (such as heavy Majorana neutrinos) in some new kinematic region, not included in our global fit, then the difference in using LO PDF + LO matrix element and NLO PDF + LO matrix element is at higher order in α_s which is beyond the accuracy of the calculation we are performing. If the interest is in making prediction on some new process using, e.g., Madgraph with initial state parton showering, using a consistent showering code would be ideal. If the showering is done correctly only at the LO (such as the default in PYTHIA), then one should use LO PDF, though there are some recent efforts to incorporate a LO showering with NLO PDFs (and NLO matrix element).

Acknowledgment

This work was supported by Scientific Research Projects (BAP) of Erciyes University, Turkey under the grant contract of FDS-2021-10856.

References

- [1] S Chatrchyan, G Hmayakyan, V Khachatryan, A M Sirunyan, and W Adam et al. The CMS experiment at the CERN LHC. *Journal of Instrumentation*, 3(08):S08004–S08004, 2008. doi: 10.1088/1748-0221/3/08/s08004.
- [2] G Aad, E Abat, J Abdallah, A A Abdelalim, and A Abdesselam et al. The ATLAS experiment at the CERN large hadron collider. *Journal of Instrumentation*, 3(08):S08003–S08003, 2008. doi: 10.1088/1748-0221/3/08/s08003.
- [3] G. Aad, B. Abbott, J. Abdallah, S. Abdel Khalek, A. A. Abdelalim, and et. al. Search for supersymmetry in pp collisions at $\sqrt{s} = 7$ TeV in final states with missing transverse momentum and b-jets with the atlas detector. *Phys. Rev. D*, 85:112006, Jun 2012. doi: 10.1103/PhysRevD.85.112006.
- [4] Y. Fukuda, T. Hayakawa, E. Ichihara, K. Inoue, K. Ishihara, and et. al. Evidence for oscillation of atmospheric neutrinos. *Physics Review Letter*, 81:1562–1567, Aug 1998. doi: 10.1103/PhysRevLett.81.1562.
- [5] Q. R. Ahmad, R. C. Allen, T. C. Andersen, J. D. Anglin, G. Bühler, and et. al. Measurement of the rate of $\nu_e + d \rightarrow p + p + e^-$ interactions produced by ^8B solar neutrinos at the sudbury neutrino observatory. *Physics Review Letter*, 87:071301, Jul 2001. doi: 10.1103/PhysRevLett.87.071301.
- [6] Q. R. Ahmad, R. C. Allen, T. C. Andersen, J. D. Anglin, J. C. Barton, and al. et. Direct evidence for neutrino flavor transformation from neutral-current interactions in the sudbury neutrino observatory. *Phys. Rev. Lett.*, 89:011301, Jun 2002. doi: 10.1103/PhysRevLett.89.011301.
- [7] Peter Minkowski. $\mu \rightarrow e\gamma$ at a rate of one out of 10^9 muon decays? *Physics Letter B*, 67(4):421–428, 1977. doi: 10.1016/0370-2693(77)90435-X.

- [8] P. van Nieuwenhuizen and D.Z. Freedman. Supergravity: Proceedings of the Workshop, Stony Brook, N.Y., 27-29 September, 1979. North-Holland Publishing Company, 1979.
- [9] Akio Sugamoto Osamu Sawada. Proceedings of the Workshop on "The Unified Theory and the Baryon Number in the Universe. National Laboratory for High Energy Physics, 1979.
- [10] Rabindra N. Mohapatra and Goran Senjanović. Neutrino mass and spontaneous parity nonconservation. *Physics Review Letter*, 44:912–915, Apr 1980. doi: 10.1103/PhysRevLett.44.912.
- [11] M. Magg and Ch. Wetterich. Neutrino mass problem and gauge hierarchy. *Physics Letters B*, 94(1):61–64, 1980. doi: 10.1016/0370-2693(80)90825-4.
- [12] J. Schechter and J. W. F. Valle. Neutrino decay and spontaneous violation of lepton number. *Phys. Rev. D*, 25:774–783, Feb 1982. doi: 10.1103/PhysRevD.25.774.
- [13] Robert Foot, H. Lew, X. G. He, and Girish C. Joshi. See-saw neutrino masses induced by a triplet of leptons. *Zeitschrift für Physik C Particles and Fields*, 44:441–444, 1989. doi: 10.1007/BF01415558.
- [14] J. Schechter and J. W. F. Valle. Neutrino masses in $su(2)_c \times u(1)$ theories. *Physics Review D*, 22:2227–2235, Nov 1980. doi: 10.1103/PhysRevD.22.2227.
- [15] F. del Aguila and J.A. Aguilar-Saavedra. Distinguishing seesaw models at lhc with multi-lepton signals. *Nuclear Physics B*, 813(1):22–90, 2009
- [16] Wai-Yee Keung and Goran Senjanović. Majorana neutrinos and the production of the right-handed charged gauge boson. *Phys. Rev. Lett.*, 50:1427–1430, May 1983. doi:10.1103/PhysRevLett.50.1427.
- [17] Duane A. Dicus, Debra Dzialo Karatas, and Probir Roy. Lepton nonconservation at supercollider energies. *Phys. Rev. D*, 44:2033–2037, Oct 1991. doi: 10.1103/PhysRevD.44.2033.
- [18] A. Datta, M. Guchait, and A. Pilaftsis. Probing lepton number violation via majorana neutrinos at hadron supercolliders. *Phys. Rev. D*, 50:3195–3203, Sep 1994. doi: 10.1103/PhysRevD.50.3195.
- [19] F. M. L. Almeida, Y. A. Coutinho, J. A. Martins Simões, and M. A. B. do Vale. Signature for heavy majorana neutrinos in hadronic collisions. *Phys. Rev. D*, 62:075004, Sep 2000. doi: PhysRevD.62.075004.
- [20] O. Panella, M. Cannoni, C. Carimalo, and Y. N. Srivastava. Signals of heavy majorana neutrinos at hadron colliders. *Phys. Rev. D*, 65:035005, Jan 2002. doi: 10.1103/PhysRevD.65.035005.
- [21] Tao Han and Bin Zhang. Signatures for majorana neutrinos at hadron colliders. *Phys. Rev. Lett.*, 97:171804, Oct 2006. doi: 10.1103/PhysRevLett.97.171804.
- [22] Anupama Atre, Tao Han, Silvia Pascoli, and Bin Zhang. The search for heavy majorana neutrinos. *Journal of High Energy Physics*, 2009(05):030–030, may 2009. doi: 10.1088/1126-6708/2009/05/030.
- [23] O. Adriani, M. Aguilar-Benitez, S. Ahlen, J. Alcaraz, A. Aloisio, and et. al. Search for isosinglet neutral heavy leptons in z_0 decays. *Physics Letters B*, 295(3):371–382, 1992. doi: 10.1016/0370-2693(92)91579-X
- [24] P. Abreu, W. Adam, T. Adye, I. Azhinenko, G.D. Alekseev, and et. al. Search for neutral heavy leptons produced in Z decays. *Z. Phys. C*, 74:57–71, 1997. doi: 10.1007/s002880050370.
- [25] Georges Aad, Brad Abbott, Jalal Abdallah, Samah Abdel Khalek, and et. al. Search for heavy majorana neutrinos with the atlas detector in pp collisions at $\sqrt{s} = 8$ tev. search for heavy majorana neutrinos with the atlas detector in pp collisions at $\sqrt{s} = 8$ tev. *JHEP*, 07:162. 28 p, Jun 2015. doi: 10.1007/JHEP07(2015)162.
- [26] Morad Aaboud, Georges Aad, Brad Abbott, Ovsat Abidinov, Baptiste Abeloos, and et. al. Search for heavy Majorana or Dirac neutrinos and right-handed W gauge bosons in final states with two charged leptons and two jets at $\sqrt{s} = 13$ TeV with the ATLAS detector. Search for heavy Majorana or Dirac neutrinos and right-handed W gauge bosons in final states with two charged leptons and two jets at $\sqrt{s} = 13$ TeV with the ATLAS detector. *JHEP*, 1901:016. 51 p, Sep 2018. doi: 10.1007/JHEP01(2019)016.
- [27] S. Chatrchyan, V. Khachatryan, A.M. Sirunyan, A. Tumasyan, W. Adam, and et.al. Search for heavy majorana neutrinos in $\mu^\pm\mu^\pm$ +jets and $e^\pm e^\pm$ +jets events in pp collisions at s=7 tev. *Physics Letters B*, 717(1):109–128, 2012.
- [28] V. Khachatryan, A.M. Sirunyan, A. Tumasyan, W. Adam, T. Bergauer, and al. et. Search for heavy majorana neutrinos in $\mu^\pm\mu^\pm$ + jets events in proton-proton collisions at $\sqrt{s} = 8$ tev. *Physics Letters B*, 748:144–166, 2015. doi: 10.1016/j.physletb.2015.06.070.
- [29] Vardan Khachatryan, Albert M Sirunyan, Armen Tumasyan, Wolfgang Adam, Ece Asilar, and et. al. Search for heavy Majorana neutrinos in $e^\pm e^\pm$ + jets and $e^\pm\mu^\pm$ + jets events in proton-proton collisions at $\sqrt{s} = 8$ TeV. *Journal of High Energy Physics*, 04:169, 2016. doi: 10.1007/JHEP04(2016)169.

- [30] A. M. Sirunyan, A. Tumasyan, W. Adam, F. Ambrogi, E. Asilar, and et. al. Search for heavy majorana neutrinos in same-sign dilepton channels in proton-proton collisions at $\sqrt{s} = 13$ tev. *Journal of High Energy Physics*, 2019(1), 2019. doi: 10.1007/JHEP01(2019)122.
- [31] Michelangelo L. Mangano, Mauro Moretti Fulvio Piccinini, Antonio D. Polosa, and Roberto Pittau. Alpgen, a generator for hard multiparton processes in hadronic collisions. *Journal of High Energy Physics*, 2003(7):001, July 2003. doi: 10.1088/1126-6708/2003/07/001.
- [32] Lai, HL., Huston, J., Mrenna, S. et al. Parton distributions for event generators. *J. High Energ. Phys.* 2010, 35 (2010), doi: 10.1007/JHEP04(2010)035
- [33] Jonathan Pumplin et al., New Generation of Parton Distributions with Uncertainties from Global QCD Analysis, . *J. High Energ. Phys* (2002)012, doi: 10.1088/1126-6708/2002/07/012
- [34] Francisco del Aguila, Juan Antonio Aguilar-Saavedra, and Roberto Pittau. Heavy neutrino signals at large hadron colliders. *Journal of High Energy Physics*, 2007(10):047–047, 2007. doi: 10.1088/11266708/2007/10/047.
- [35] Kamuran Dilsiz, Emrah Tiras. Inclusive W boson QCD predictions and lepton charge asymmetry in proton-proton collisions at $\sqrt{s}= 14$ TeV, *Canadian Journal of Physics* 19 March 2018, doi: 10.1139/cjp-2017-0635
- [36] Hasan Ogul, Kamuran Dilsiz, Emrah Tiras, Ping Tan, Yasar Onel, and Jane Nachtman, High Order QCD Predictions for Inclusive Production of Bosons in Collisions at TeV, *Advances in High Energy Physics* , Volume 2016, Article ID 7865689 , doi: 10.1155/2016/7865689
- [37] Hasan Ogul, Kamuran Dilsiz,. Cross Section Prediction for Inclusive Production of Boson in pp Collisions at TeV: A Study of Systematic Uncertainty due to Scale Dependence, *Advances in High Energy Physics*, vol. 2017, Article ID 8262018, 8 pages, 2017. <https://doi.org/10.1155/2017/8262018>

Cilt Kanseri Görüntü Sınıflandırması için Görüntü Ön İşlemenin Evrişimsel Sinir Ağları Performansı Üzerindeki Etkileri

Burcu BAKİR-GUNGOR^{ID*}¹, Beyhan ADANUR DEDETURK^{ID}², Kasım TAŞDEMİR^{ID}³

*^{1,2,3}Abdullah Gül Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Bilgisayar Mühendisliği, KAYSERİ

(Alınış / Received: 11.05.2022, Kabul / Accepted: 18.07.2022, Online Yayınlanma / Published Online: 23.08.2022)

Anahtar Kelimeler

Cilt Kanseri,
Sınıflandırma,
Ön İşleme,
Evrişimsel Sinir Ağları

Öz: Cilt kanseri, dünya çapında yaygın olarak karşılaşılan kanser türleri arasındadır. Günümüzde pek çok kanser vakasının yanlış ya da geç teşhisi sonucunda, hasta ölümleri de dahil olmak üzere ciddi problemler yaşanmaktadır. Bu çalışmada, evrişimli sinir ağları kullanılarak cilt kanseri sınıflandırması problemi incelenmiştir. Çalışmanın temel amacı, farklı öğrenme mimarilerini karşılaştırmak yerine, görüntüleri farklı ön işlemlere tabi tutup, bu işlemin kullanılan mimari performansına etkisini incelemektir. Bu amaç doğrultusunda, ISIC 2018 Cilt Görüntü Analizi Yarışması'na ait veri seti kullanılarak, iki farklı görüntü ön işleme yöntem dizisi ResNet50 mimarisi için uygulanmıştır. Bunlardan birincisinde sırasıyla ikili ve otsu eşikleme, CLAHE dönüşümü uygulanırken, ikincisinde morfolojik filtreleme, renk normalizasyonu ve dolgu işlemleri uygulanmıştır. F1 Puanı başta olmak üzere farklı performans metrikleri baz alındığında, cilt kanseri görüntüleri üzerinde ikinci ön işleme yöntem dizisinin performans iyileştirmesi yapabildiği gösterilmiştir.

Impact of Image Preprocessing on Skin Cancer Image Classification Using Convolutional Neural Networks

Keywords

Skin Cancer,
Classification,
Preprocessing,
Convolutional Neural
Networks

Abstract: Skin cancer is one of the most common types of cancer worldwide. Nowadays, as a result of wrong or late diagnosis of many cancer cases, serious problems including patient deaths are faced. This study deals with the skin cancer classification problem using convolutional neural networks. Instead of comparing different learning architectures, this research effort aims to preprocess the images and examine the effect of these processes on the performance of the architecture. For this purpose, using the ISIC 2018 Skin Image Analysis Competition dataset, two different sets of preprocessing methods have been applied on the ResNet50 architecture. In the first set up, binary and OTSU's thresholding and CLAHE transformation were applied, respectively. In the second set up, morphological filtering, color normalization and filling operations were applied. Based on different performance metrics including F1 Score, it has been shown that the second set of preprocessing methods can improve the performance for the skin cancer classification problem.

*İlgili Yazar, email: bakirburcu@gmail.com

1. Giriş

Cilt kanseri, dünya çapında artış gösteren en yaygın kanser türleri arasındadır. Erken teşhisi ve doğru tedavi seçimi yapıldığı takdirde, sağ kalım oranlarının yüksek olduğu görülmektedir. Geleneksel olarak, doktorlar cilt kanseri tespiti için çıplak gözlerini kullanmaktadır. Ancak bu yöntem birçok durumda doğru tespit oranını azaltmaktadır

[1]. Bu nedenle günümüzde, makine öğrenmesi ve derin öğrenme yöntemlerinin bu alandaki kullanımı önem kazanmıştır, ve hastalık görüntülerini sınıflandırma tekniklerinin kullanımı artmıştır.

Görüntü sınıflandırma yaklaşımları iki ana başlık altında incelenebilir. Birinci kategori, Karar Ağacı, Destek Vektör Makineleri, Bulanık Ölçümler vb. gibi geleneksel makine öğrenme algoritmalarını içerir. İkinci kategori ise, evrişimli sinir ağları (Convolutional Neural Networks, CNN), otomatik kodlayıcılar vb. gibi derin öğrenmeye dayalıdır. Zaman içerisinde araştırmacılar derin öğrenme yöntemlerini kullanmayı tercih etmişlerdir. Bunun başlıca nedeni, derin öğrenme yöntemlerinin 2012 öncesindeki hiçbir makine öğrenimi yönteminde görülmemiş olan yüksek doğrulukta sonuçlar elde edebilmiş olmasıdır [2].

Derin bir sinir ağı, hem iyi huylu, hem de kötü huylu olmak üzere her iki hastalık kategorisine ait binlerce görüntü üzerinde eğitilebilir. Bu eğitim sonucunda elde edilen model, doğrusal olmayan etkileşimleri öğrenerek, yeni bir görüntünün iyi huylu veya kötü huylu bir sınıfa karşılık gelip gelmediğini tahmin edebilir. Bu otomasyon, yalnızca hem yanlış pozitifleri, hem de yanlış negatifleri önlemede daha yüksek bir verimliliğe sahip olmakla kalmaz, aynı zamanda tespit için harcanan zamanı da azaltır. Derin öğrenme ve bilgisayarlı görme teknikleri kullanılarak cilt kanseri sınıflandırması alanında yayınlanmış çok sayıda çalışma bulunmaktadır. Bu çalışmalar, sınıflandırma, segmentasyon ve algılama, farklı filtre türleri kullanarak görüntü işleme vb. dahil olmak üzere birçok farklı yaklaşımları kullanmaktadır [3].

Esteva ve diğerleri [4] cilt lezyonlarını sınıflandırmak için AdaBoost sınıflandırma yöntemini kullanmıştır. Xu ve diğerleri [5] sağlam bir tanı sistemi elde edebilmek için lezyon tipi, doku, renk gibi farklı özellik setleri ve sinir ağlarını kullanmıştır. Şimdiye kadar sunulan örnekler, yalnızca geleneksel makine öğrenimi tekniklerini kullanmıştır. Ancak son zamanlarda derin öğrenmenin daha doğru sonuçlar verdiği gösterilmiştir [6]. Bunun nedeni, derin öğrenme ile özellik çıkarma işleminin eğitimle kendiliğinden ortaya çıkması ve böylece tasarımcının etkisini azaltmasıdır.

Lopez ve diğerleri [7], 129.450 klinik cilt kanseri görüntüsünü sınıflandırmak için önceden eğitilmiş bir GoogleNet Inception v3 CNN modeli kullanarak, cilt kanseri sınıflandırmasında ön plana çıkmıştır. Dorj ve diğerleri [8], malign melanomun sınıflandırılması için ISBI 2016 meydan okuma veri setinde 50'den fazla katmana sahip bir evrişimsel sinir ağı (ESA) geliştirmiştir. 2018'de Brinker ve diğerleri [9], dermoskopi görüntülerinin ikili sınıflandırma problemi için derin bir evrişimli sinir ağı kullanmıştır. Rezvantalab ve diğerleri [10], klinik cilt kanseri görüntülerinin 4 tanı kategorisinde sınıflandırılması için derin bir konvolüsyonel sinir ağı yaklaşımıyla birleştirilmiş Destek Vektör Makinelerini kullanan bir algoritma geliştirmiştir. Codella ve diğerleri [11], 12 cilt hastalığının klinik görüntülerini sınıflandırmak için derin bir evrişimsel sinir ağı kullanmıştır.

Mevcut çalışmalar incelendiğinde şu gözlemler yapılabilir:

- i) Nesne algılama ve sınıflandırma problemlerinde, evrişimsel sinir ağları yöntemi diğer yöntemlere kıyasla daha yüksek doğruluk değeri üretmesi nedeniyle çoğunlukla ilk tercih edilen yöntem olmuştur [12].
- ii) Karşılaştırma için farklı öğrenme mimarileri kullanılmaktadır.
- iii) Performansı artırmak için farklı yaklaşımları birleştirerek çalıştıran yeni algoritmalar kullanılmaktadır.
- iv) Değişik kanser türlerinin ve cilt hastalıklarının kategorik olarak sınıflandırılması aktif çalışma alanlarıdır.

Bu çalışmada, evrişimli sinir ağları kullanılarak cilt kanseri sınıflandırması sorunu ele alınmıştır. Ağı hem eğitmek, hem de test etmek için halka açık ISIC 2018 Cilt Görüntü Analizi Yarışması'na ait veri seti kullanılmıştır. Bu veri seti 7 farklı cilt hastalığına ait dermoskopik görüntüler içermektedir [13]. Bu çalışma, ikili tipte (iyi huylu-kötü huylu) olan cilt kanseri sınıflandırması problemini incelemektedir. Bu nedenle, veri seti yeniden düzenlenmiştir. Bu çalışmanın temel amacı, farklı öğrenme mimarilerini karşılaştırmak yerine, görüntüleri farklı ön işlemlere tabi tutup, bu işlemlerin kullanılan mimari performansına etkisini incelemektir. Bu amaç doğrultusunda veriler üzerinde iki farklı ön işleme dizisi uygulanmıştır. Bunlardan birincisinde sırasıyla; ikili ve otsu eşikleme, belirli oranda kırma ve CLAHE dönüşümü uygulanmıştır [14]. İkincisinde ise sırasıyla; yeniden boyutlandırma, görüntülerdeki kırımları yok etmek için morfolojik filtreleme, renk normalizasyonu, dolgu ve kırma işlemleri uygulanmıştır. Çalışmada kullanılmak üzere, ResNet50 mimarisi tercih edilmiştir. Sonuçların değerlendirilmesi için doğruluk, kesinlik, geri çağırma, F1 puanı ve ROC-AUC metrikleri kullanılmıştır. Bu çalışma ile, dermoskopi görüntüleri üzerinde eğitilmiş derin öğrenme mimarilerinin farklı ön işleme yöntemleri ile birlikte kullanıldığında

performans üzerindeki etkilerini incelemeyi, bulgularımız ile, ön işleme yöntem seçiminin de mimari tercihi kadar önemli olduğunu vurgulayabilmeyi hedeflemekteyiz. Çalışmanın temel katkıları şu şekilde özetlenebilir:

- i) Mevcut cilt kanseri sınıflandırma çalışmaları incelenmiş, en yaygın kullanılan yöntemin evrimsel sinir ağı olduğu tespit edilmiştir. Literatüre bakıldığında, hemen hemen her çalışmanın farklı CNN topluluklarını bir arada kullandığı gözlenmiştir. Bu tespitler doğrultusunda, bu çalışmada tek bir mimari seçilip veriler üzerinde iki farklı ön işleme dizisi uygulanmıştır. Böylelikle ideal bir mimarinin vazgeçilmez parçası olan ön işleme yöntemlerinin seçilen yöntemin performansı üzerindeki etkisi analiz edilmiştir.
- ii) Aynı veri setini kullanan çalışmalar, veri setinin tümünü kullanıp, kategorisel sınıflandırma yöntemini tercih etmişlerdir. Bildiğimiz kadarıyla kullanılan veri seti üzerinde ikili tipte sınıflandırma yönteminin performans analizi yapılmamıştır. Bu sebeple çalışmamızda 7 hastalık kategorisi içeren veri setinden ikili sınıflandırma yapabilmek adına 4 kategori seçilip veri dağılımlarına göre yeni bir veri topluluğu oluşturulmuştur. Bu deney sayesinde, ikili tipte sınıflandırma yönteminin, ilgili veri seti üzerindeki performansı da analiz edilmiştir.

2. Materyal ve Yöntem

2.1. Veri Kümesi

Bu çalışmada, ISIC 2018 Cilt Görüntü Analizi Yarışması'na ait veri seti kullanılmıştır. Bu veri seti, melanom, melanositik nevus, bazal hücreli karsinom, aktinik keratoz, iyi huylu keratoz, dermatofibroma ve vasküler lezyonu olmak üzere 7 farklı cilt hastalığına ait dermoskopik görüntüler içermektedir. Bu çalışmada, kategorisel olarak hastalık sınıflandırması yerine, ikili tipte (iyi huylu-kötü huylu) cilt kanseri sınıflandırması problemi ele alınmıştır. Bunun sebebi, bu veri setini kullanan çalışmaların hemen hemen hepsinin kategorisel sınıflandırma yapması, ve bizim bu çalışmada farklı olarak ikili tipte sınıflandırma yönteminin ilgili veri seti üzerindeki performansını değerlendirmek istememizdir. Bunun için veri seti yeniden düzenlenmiştir. Vasküler lezyon, aktinik keratoz ve melanositik nevus hastalık görüntülerinin bazıları iyi huylu, bazıları kötü huylu olduğu için bu görüntüler çalışmaya dahil edilmemiştir. Melanom ve bazal hücreli karsinom görüntüleri kötü huylu, dermatofibroma ve iyi huylu keratoz görüntüleri ise iyi huylu kategoriye dahil edilmiştir. Bunun sonucunda kötü huylu sınıfta 1627 görüntü, iyi huylu sınıfta ise 1216 görüntü yer almıştır. Her sınıfın verilerinin %80'i eğitim, %20'si test için kullanılmıştır ve veri seti numpy dizisi olarak işlenirken girdi boyutu 224 olarak düzenlenmiştir. Böylece görüntü boyutları 224 × 224 olarak düzenlenmiştir. Veri dağılımı Tablo 1'de özetlenmiştir.

Tablo 1. ISIC 2018 Cilt Görüntü Analizi Yarışması'na ait Veri Setinin Dağılımı

	Toplam	Eğitim (%80)	Test (%20)
İyi Huylu	1216	973	243
Kötü Huylu	1627	1302	325

2.2. Ön İşleme

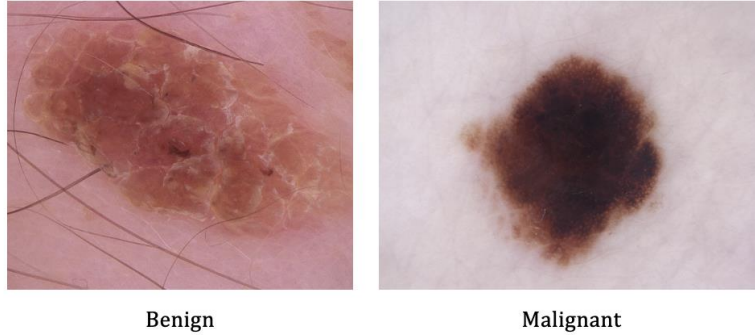
Öncelikle veri kümesi boyutunu orijinal veri kümesi boyutunun neredeyse iki katına çıkarmak için, kırpma, yakınlaştırma, çevirme ve parlaklık değişikliği gibi literatürde sıkça kullanılan [12] veri büyütme yöntemlerinden faydalanılmıştır. Bu çalışmanın temel amacı, görüntüleri farklı ön işlemlere tabi tutup, bu işlemlerin kullanılan mimari performansına etkisini incelemektir. Görüntüler incelediğinde, görüntülerin başlıca görüntü azaltılmasına, belirli oranlarda istenen nesnenin ortaya çıkarılmasına ve kontrast iyileştirilmesine ihtiyacının olduğu belirlenmiştir. Bu sebeple ve ihtiyaç duyulan gereksinimleri karşılayacağı düşüncesiyle, verilere iki farklı ön işleme dizisi uygulanmıştır. Bunlardan birincisinde sırasıyla; ikili ve otsu eşikleme, belirli oranda kırpma (ROI işlemleri için bölge sınırı +20 piksel tolerans değeri olarak belirlenmiştir. Bu sınır yardımıyla da orijinal görüntü kırpılmıştır) ve CLAHE dönüşümü uygulanmıştır [14]. CLAHE, kontrastın aşırı yükseltilmesiyle ilgilenen uyarlanabilir histogram eşitlemenin (AHE) bir çeşididir. CLAHE, görüntünün tamamı yerine, görüntüde karo adı verilen küçük bölgeler üzerinde çalışır. Komşu karolar daha sonra yapay sınırları kaldırmak için çift doğrusal enterpolasyon kullanılarak birleştirilir. İkincisinde ise sırasıyla; yeniden boyutlandırma, görüntülerdeki kılları yok etmek için morfolojik filtreleme, renk normalizasyonu, dolgu ve kırpma işlemleri uygulanmıştır.

Eşikleme, değeri belirli bir eşik üzerinde olan pikselleri tam olarak beyaza ayarlayıp, diğer pikselleri siyaha ayarlama ve gri ölçekli bir görüntüden siyah beyaz görüntü oluşturma işlemidir. Otsu yöntemi, kümeleme tabanlı

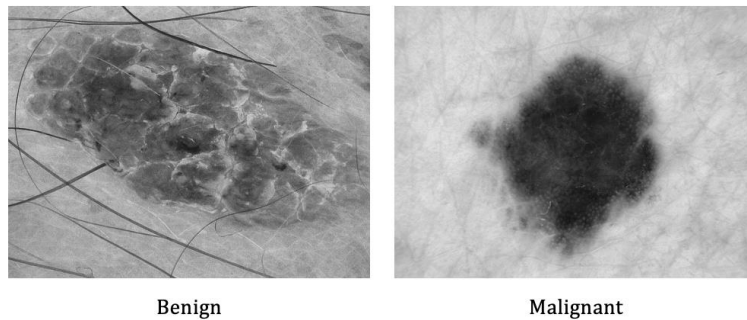
görüntü eşikleme örneğidir. Gri seviyeli bir görüntünün ikili bir görüntüye indirgenmesini otomatik olarak gerçekleştirmek için kullanılır. Algoritma, görüntünün iki modlu histogramı izleyen iki piksel sınıfı içerdiğini varsayar, daha sonra iki sınıfı ayıran optimum eşik hesaplar, böylece sınıf içi varyans minimum veya eşdeğer olurken, sınıflar arası varyanslar maksimum olur [15]. Görüntüleri yeniden boyutlandırma ve kırpma, iki temel geometri dönüşümüdür. Kırpma, görüntülerden istenmeyen dış alanların çıkarılmasıdır. İşlem genellikle, görüntülerden istenmeyen alanların çıkarılması için kullanılır. Yeniden boyutlandırma, görüntüleri küçültmeye veya büyütme olarak tanır. Genellikle dosya boyutunu ve görüntü kalitesini değiştirmek için kullanılır. Dolgu ise şekillerdeki boşlukların doldurulması için kullanılmaktadır.

Görüntünün piksel değerlerinin belli bir bölgede toplandığı ve kalitesinin düştüğü durumlarda histogram eşitleme yöntemi kullanılır. Geleneksel histogram eşitleme yöntemleri uygulandığında, görüntünün farklı bölgelerinde çok karanlık veya parlak bölgeler oluşabilir. Bu sorunu çözebilmek adına Kontrast Sınırlı Adaptif Histogram Eşitleme (CLAHE) kullanılır. CLAHE yönteminin geleneksel eşitlemeye göre farkı, görüntüyü parçalara ayırarak her bir kare içerisinde histogram eşitlemesi yapmasıdır, ayrıca kontrast limiti belirleme imkanı da tanır [16]. Bir görüntüdeki renk değerlerinin dağılımı, aydınlatma koşullarına, kameralara ve diğer faktörlere bağlı olarak değişebilir. Renk normalizasyonu, bu varyasyonları telafi etmek için piksel yoğunluğu değerlerinin aralığını değiştiren bir tekniktir. Morfolojik filtreleme iki temel işlemden türetilmiştir. Bunlar aşındırma ve genişletme işlemleridir. Aşındırma ikili bir görüntüde bulunan şeklin boyutunu, seçilen yapısal elemente bağlı olarak küçültürken, genişletme nesnenin alanını artırır. Bu işlemlerden aşındırma işlemi birbirine gürültü ile bağlanmış şekilleri birbirinden ayırmak için kullanılırken, genişletme işlemi ise şekillerin bir gürültü bölünerek ayrı iki nesne gibi görünmesini engellemek için kullanılır [17].

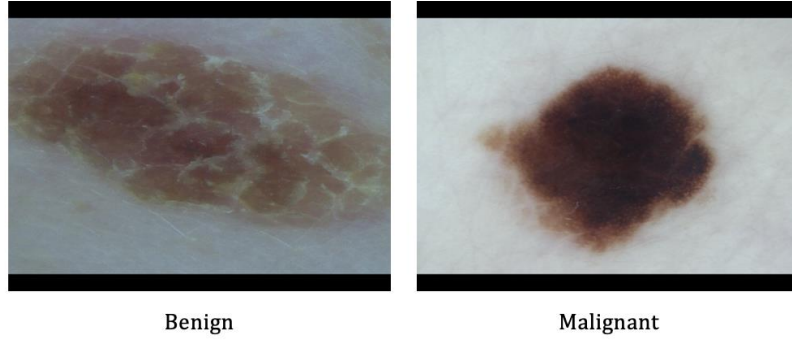
Şekil 1, Şekil 2, Şekil 3 sırasıyla; veri setinin ön işleme tabi tutulmamış haline, veri setinin birinci ön işleme dizisine tabi tutulmuş haline, ve son olarak veri setinin ikinci ön işleme dizisine tabi tutulmuş haline örnekler vermektedir. Şekil 3’de kılların görüntüden silindiği ve ayrıca yüzeydeki cilt dokusunun daha belirginleştiği görülmektedir. Makalenin Ek Kısımında, ön işleme yöntemindeki her bir adımın sonucunda oluşan resimlere örnekler sunulmuştur.



Şekil 1. Veri setinin ön işlem yöntem dizileri uygulanmamış hali, örnek resimler



Şekil 2. Veri setinin, birinci ön işlem yöntem dizisi uygulanmış hali, örnek resimler



Şekil 3. Veri setinin, ikinci ön işlem yöntem dizisi uygulanmış hali, örnek resimler

2.3. Sınıflandırma Yöntemi

Sınıflandırma için Sagar ve diğerleri [18] tarafından önerilen transfer öğrenme konsepti, çalışmamıza uygun olan parametre değişiklikleri ile kullanılmıştır. Transfer öğrenme ile, öğrenme sürecini sıfırdan başlatmak yerine, model, farklı bir problem çözülürken öğrenilen örüntülerden başlar. Görüntü sınıflandırmasında, transfer öğrenmesi genellikle önceden eğitilmiş modellerin kullanımı ile ifade edilir. Önceden eğitilmiş bir model, bizim çözmek istediğimize benzer bir sorunu çözmek için büyük bir kıyaslama veri kümesi üzerinde eğitilmiş bir modeldir [19]. Bu çalışmada karşılaştırmalarda genel geçer yöntem olarak kullanılan önceden eğitilmiş ResNet50 mimarisi tercih edilmiştir. ResNet50 mimarisi, tüm katmanlarda ince ayar yapılarak, ve üst katmanları bir ortalama havuzlama, bir tam bağlantılı ve son olarak 2 tanı kategorisini sınıflandırmaya izin veren softmax katmanı ile değiştirilerek veri kümesi üzerinde yeniden eğitilmiştir. Öğrenme oranı 0.0001 olarak ayarlanmış ve optimize edici olarak Adam kullanılmıştır.

Mimari, girdileri eşlemek için kimlik eşlemesini kullanır. Bu kimlik eşleme, herhangi bir parametreye sahip değildir ve yalnızca önceki katmandan gelen çıktıyı sonraki katmana ekler. Kimlik eşleme aşamasında, kısayol kanallarını kalanlarla eşleştirecek şekilde genişletmek için doğrusal bir izdüşüm ile çarpılır. Atlama bağlantıları (skip connections) önceki katmanlardan gelen çıktıları yığılmış katmanların çıktılarına ekler. Bu da, daha önce mümkün olandan çok daha derin ağları eğitme yeteneği ile sonuçlanır. Çalışmamızda fazla uyumu azaltmak için, arada yüzde 50 atlama (dropout) ve parça (batch) normalleştirme katmanları kullanılmıştır. Diğer mimari çalıştırma değerleri sırasıyla şu şekilde özetlenebilir. Sırasıyla 64 nöron ve 2 nöron içeren iki yoğun katman kullanılmıştır. Son katman, aktivasyon fonksiyonu olarak softmax ile sınıflandırma için kullanılmıştır. Kayıp fonksiyonu olarak ikili çapraz entropi kullanılmıştır. Model epok sayısı 10, parça boyutu (batch size) 32 olacak şekilde eğitilmiştir.

2.4. Performans Ölçütleri

Sonuçların değerlendirilmesi için doğruluk, kesinlik, geri çağırma, F1 puanı ve ROC-AUC metrikleri kullanılmıştır. Sınıflandırma performansındaki anahtar kavramlardan biri, kesin referans etiketlerine karşı model tahminlerinin tablo şeklinde görselleştirilmesi olan karışıklık matrisidir. Tablo 2’de gösterildiği üzere bu yöntemde, örnek pozitif (P) ve elde edilen sınıflandırma sonucu pozitif ise Gerçek Pozitif (TP); örnek pozitif ancak negatif (N) sınıflandırılmışsa Yanlış Negatif (FN); örnek negatif ve negatif sınıflandırılmışsa Gerçek Negatif (TN); örnek negatif ancak pozitif sınıflandırılmışsa da Yanlış Pozitif (FP) olarak gruplandırılır [20]-[21].

Tablo 2. Karışıklık Matrisi

Tahmin Edilen Değeri			
Pozitif	Negatif		
Gerçek Pozitif	Yanlış Negatif	Pozitif	Gerçek Değeri
Yanlış Pozitif	Gerçek Negatif	Negatif	

Doğruluk değeri, Denklem 1’de olduğu gibi hem olumlu hem de olumsuz kaç gözlemin doğru sınıflandırıldığını ölçerek modelin genel performansını gösterir. Kesinlik, Denklem 2’de olduğu gibi doğru tahminlerin ne kadar kesin olduğunu gösterir. Geri çağırma, Denklem 3’de olduğu gibi gerçek pozitif örneklerin oranını gösterir. F1 puanı, Denklem 4’de olduğu gibi dengesiz sınıflar için kullanılan hibrit bir metriktir. ROC (İşlem Karakteristik Eğrisi), çeşitli eşik değerleri için yanlış pozitif oranına (FPR) karşı gerçek pozitif oranı (TPR) gösteren eğridir.

Eğrinin ne kadar iyi olduğunu söyleyen bir sayı elde etmek için ise ROC Eğrisinin Altındaki Alan (AUC) veya ROC AUC puanı hesaplanır. Benzer şekilde, (AUPRC: The Area Under Precision-Recall Curve) metriği kesinlik-geri çağırma eğrisinin altındaki alanı ifade eder.

$$\text{Doğruluk} = \frac{(TN + TP)}{(TN + TP + FN + FP)} \quad (1)$$

$$\text{Kesinlik} = \frac{(TP)}{(TP + FP)} \quad (2)$$

$$\text{Geri Çağırma} = \frac{(TP)}{(TP + FN)} \quad (3)$$

$$\text{F1 Puanı} = \frac{(2TP)}{(2TP + FP + FN)} \quad (4)$$

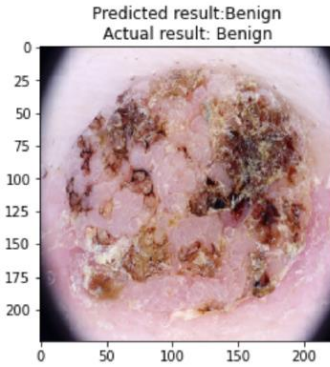
3. Testler ve Performans Analizi

Çalışmamızda dermoskopik görüntülerin sınıflandırılması amacıyla oluşturulan Resnet50 mimarisine dayanan ESA modeli; iyi huylu ve kötü huylu olmak üzere iki sınıftan oluşan ve toplamda 2841 dermoskopik görüntü içeren ISIC 2018 Cilt Görüntü Analizi Yarışması'na ait veri seti üzerinde test edilmiştir. Model epok sayısı 10, parça boyutu (batch size) 32 olacak şekilde eğitilmiştir. Çalışmanın temel amacı görüntüleri farklı ön işlemlere tabi tutup kullanılan mimari üzerindeki etkisini incelemektir. Bu sebeple iki farklı ön işlem yöntem dizisi denenmiştir. Bunlardan birincisinde sırasıyla; ikili ve otsu eşikleme, belirli oranda kırpma and CLAHE dönüşümü yapılmıştır. İkincisinde ise sırasıyla; yeniden boyutlandırma, görüntülerdeki kılları yok etmek için morfolojik filtreleme, renk normalizasyonu, dolgu ve kırpma işlemleri uygulanmıştır.

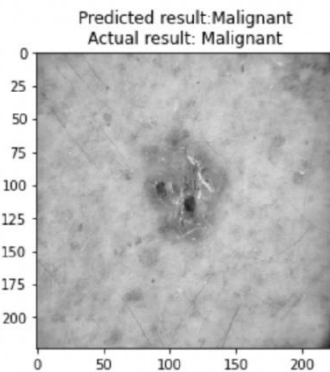
Bu amaç doğrultusunda geliştirilen model üç senaryo ile test edilmiştir. Sonuçların değerlendirilmesi için yapılan testler sırasıyla şu şekilde özetlenebilir:

- A= Ön işleme yöntemi kullanılmadan,
- B= Birinci ön işleme yöntem dizisi kullanılarak,
- C= İkinci ön işleme yöntem dizisi kullanılarak,

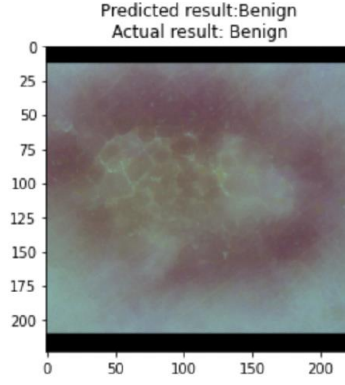
yapılan testleri temsil etmektedir. Şekil 4, Şekil 5, ve Şekil 6'da sırasıyla; A, B ve C test senaryolarının doğru sınıflandırma sonuçlarına birer örnek sunulmuştur.



Şekil 4. "A" test senaryosunun doğru sınıflandırma sonucuna bir örnek



Şekil 5. "B" test senaryosunun doğru sınıflandırma sonucuna bir örnek



Şekil 6. "C" test senaryosunun doğru sınıflandırma sonucuna bir örnek

Tüm test sonuçlarının değerlendirilmesi için Tablo 3'te gösterildiği üzere; doğruluk, kesinlik, geri çağırma, F1 puanı ve ROC-AUC metrikleri kullanılmıştır. Tablo 3'te görüldüğü üzere her bir senaryo, model üzerinde test edilmiş olup, belirtilen metriklere göre sonuçlar sunulmuştur. Sonuçlar incelendiğinde, aşağıdaki çıkarımlar elde edilmiştir:

- i) Doğruluk ve Geri Çağırma metrikleri açısından değerlendirildiğinde, B senaryosunda diğerlerinden yüksek değerli sonuç elde edilmiştir.
- ii) Kesinlik metriği açısından, A senaryosunda diğerlerinden yüksek değerli sonuç elde edilmiştir.
- iii) F1 Puanı açısından, C senaryosunda diğerlerinden yüksek değerli sonuç elde edilmiştir.
- iv) ROC-AUC metriği açısından, A ve C senaryolarında, B senaryosundan daha yüksek değerli sonuç elde edilmiştir.

Tablo 3. Senaryoların performans değerlendirmesi

Test Senaryosu	Doğruluk	Kesinlik	Geri Çağırma	F1 Puanı	ROC-AUC	AUPR
A	0.804	0.83	0.86	0.84	0.80	0.976
B	0.824	0.76	0.93	0.83	0.76	0.983
C	0.819	0.80	0.92	0.85	0.80	0.984

Testler sonucunda, ön işleme yöntemlerinin model ile beraber kullanıldığında ve Doğruluk, Geri Çağırma, F1 puanı metriklerine göre değerlendirildiğinde performansı arttırdığı; ROC-AUC değerine göre değerlendirildiğinde performans farkı oluşturmadığı; Kesinlik değeri için ise anlamlı bir performans artışı elde edilemediği gözlemlenmiştir.

Doğruluk, en sezgisel performans ölçüsüdür ve doğru tahmin edilen gözlemin toplam gözlemlere oranıdır. Doğruluk değeri yüksekse, modelin en iyisi olduğu düşünülebilir. Fakat bu durum yalnızca yanlış pozitif ve yanlış negatif değerlerinin neredeyse aynı olduğu simetrik veri kümelerinde geçerli olur. Bu nedenle, modelin performansını değerlendirmek için diğer performans metriklerine de bakmak gerekmektedir [22]. Kesinlik, doğru tahmin edilen pozitif gözlemlerin toplam tahmin edilen pozitif gözlemlere oranıdır. Bu metrik, kötü huylu olarak etiketlenen tüm resimlerin gerçekte kaç tanesinin kötü huylu olduğu sorusunun cevabıdır. Kesinlik sonuçları incelendiğinde, ön işleme yöntemlerinin kullanılmadığı durumda bu değer daha yüksek çıkmıştır. Geri Çağırma, doğru tahmin edilen pozitif gözlemlerin gerçek sınıftaki tüm gözlemlere oranıdır. Kanseri tespiti probleminde yanlış negatiflik yanlış pozitifliğe göre daha önemli bir hata olarak değerlendirilmektedir. Bunun nedeni, bir kanser çeşidinin tespitinin geciktiği veya yapılamadığı zaman verdiği zararın, yanlış kanser tespitinde verdiği zarardan daha fazla olmasıdır. Bu metrik yanlış negatifliği de ölçüme katarak, tüm kötü huylu lezyon resimlerinden kaç tanesi etiketlenmiştir sorusunu yanıtlar. Bu sebeple önemli bir metrik olarak değerlendirilir ve mümkün olduğunca yüksek olması beklenir. F1 Skoru, Kesinlik ve Geri Çağırmanın ağırlıklı ortalamasıdır. Bu nedenle, bu

puan hem yanlış pozitifleri, hem de yanlış negatifleri hesaba katar. Sezgisel olarak, doğruluk kadar anlaşılması kolay değildir, ancak F1 genellikle, özellikle eşit olmayan bir sınıf dağılımı söz konusuysa, doğruluktan daha kullanışlıdır. Doğruluk, yanlış pozitifler ve yanlış negatifler benzer maliyete sahipse en iyi sonucu verir. Yanlış pozitiflerin ve yanlış negatiflerin maliyeti çok farklıysa, hem Kesinlik hem de Geri Çağırma metriklerini değerlendirmek daha iyidir. Sonuçlara bakıldığında, F1 puanı, ön işleme yöntemlerinin uygulandığı durumlarda daha yüksektir. ROC bir olasılık eğrisidir ve altında kalan alan olan AUC ayrılabilirliğin derecesini veya ölçüsünü temsil eder. Eğrinin altında kalan alan arttıkça, sınıflar arasında ayırt etme performansı artmaktadır.

Başlıca F1 Puanı, ROC-AUC, AUPRC metrikleri baz alındığında, görüntüler üzerinde C) morfolojik filtreleme, renk normalizasyonu ve dolgu işlemlerinin, B) ikili ve otsu eşikleme, CLAHE dönüşümünden ve A) ön işleme yöntem dizisi uygulanmamış halinden daha fazla iyileştirme yaptığı sonucuna varılmaktadır. Bu bulgu sonucunda, görüntülerin başlıca gürültü azaltılmasına, belirli oranlarda istenen nesnenin ortaya çıkarılmasına ve kontrast iyileştirilmesine ihtiyacının olduğu anlaşılmaktadır.

4. Tartışma ve Sonuç

Bu çalışmada, iyi huylu ve kötü huylu cilt kanseri sınıflandırmasında, derin evrimsel sinir ağlarının ve farklı ön işleme yöntemlerinin performansa etkileri araştırılmıştır. Ağı hem eğitmek, hem de test etmek için halka açık ISIC 2018 Cilt Görüntü Analizi Yarışması'na ait veri seti kullanılmıştır. Bu çalışmanın temel amacı, farklı öğrenme mimarilerini karşılaştırmak yerine, görüntüleri farklı ön işlemlere tabi tutup, bu işlemin kullanılan mimari performansına etkisini incelemektir. Bu amaç doğrultusunda iki farklı ön işleme yöntem dizisi ResNet50 mimarisi için uygulanmıştır. Bunlardan birincisinde sırasıyla ikili ve otsu eşikleme, CLAHE dönüşümü uygulanırken, ikincisinde morfolojik filtreleme, renk normalizasyonu ve dolgu işlemleri uygulanmıştır. Sonuçların değerlendirilmesi için doğruluk, kesinlik, geri çağırma, F1 puanı ve ROC-AUC metrikleri kullanılmıştır.

Başlıca F1 Puanı ve ROC-AUC metrikleri baz alındığında, görüntüler üzerinde yapılan morfolojik filtreleme, renk normalizasyonu ve dolgu işlemler dizisinin, diğer ön işleme yöntem dizisine göre daha fazla iyileştirme yaptığı sonucuna varılmıştır. Sonuçlarımız, dermoskopi görüntüleri üzerinde eğitilmiş derin öğrenme mimarilerinin farklı ön işleme yöntemleri ile birlikte kullanıldığında, daha iyi bir sınıflandırma yapabileceğini göstermiştir. Bu kombine model daha da geliştirilerek dermatologlara yardımcı olmak için kullanılan çeşitli dermoskopi sistemlerinde kolayca uygulanabilir. Daha fazla iyileştirme oranı için çok daha fazla dermoskopi görüntüsü gerekmektedir. Ayrıca görüntüler üzerindeki farklı gereksinimler tespit edilebilirse ve bunlar doğrultusunda farklı ön işleme yöntem dizileri denenirse, performans üzerindeki etkinin daha da artacağını düşünmekteyiz.

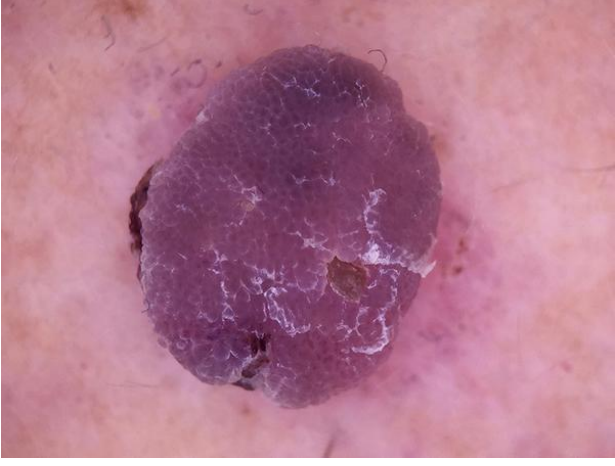

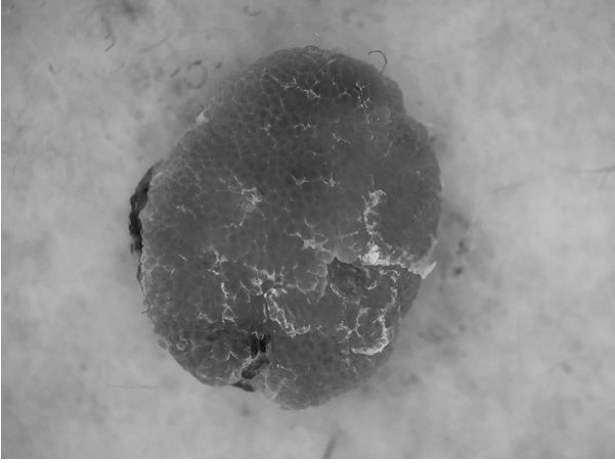
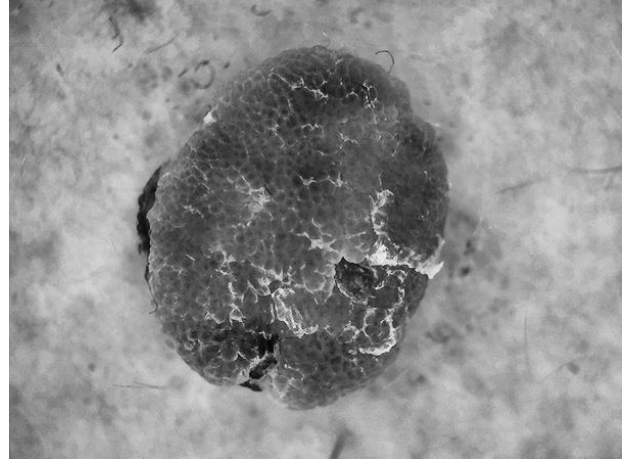
Kaynakça

- [1] Chante Karimkhani, Adele C Green, Tamar Nijsten, MA Weinstock, ` Robert P Dellavalle, Morteza Naghavi, and C Fitzmaurice. The global burden of melanoma: results from the global burden of disease study 2015. *British Journal of Dermatology*, 177(1):134–140, 2017.
- [2] Andre Esteva, Brett Kuprel, Roberto A Novoa, Justin Ko, Susan M Swetter, Helen M Blau, and Sebastian Thrun. Dermatologist-level classification of skin cancer with deep neural networks. *Nature*, 542(7639):115, 2017.
- [3] D. Gutman et al., "Skin lesion analysis toward melanoma detection: A challenge at the international symposium on biomedical imaging (ISBI) 2016, hosted by the international skin imaging collaboration (ISIC)," 2016.
- [4] A. Esteva, B. Kuprel, R. A. Novoa, J. Ko, S. M. Swetter, H. M. Blau, and S. Thrun. Dermatologistlevel classification of skin cancer with deep neural networks. *nature*, 542(7639):115–118, 2017.
- [5] L. Xu, J. S. Ren, C. Liu, and J. Jia. Deep convolutional neural network for image deconvolution. In *Advances in neural information processing systems*, pages 1790–1798, 2014.
- [6] Tran, K. A., Kondrashova, O., Bradley, A., Williams, E. D., Pearson, J. V., & Waddell, N. (2021). Deep learning in cancer diagnosis, prognosis and treatment selection. *Genome Medicine*, 13(1), 1-17.
- [7] A. R. Lopez, X. Giro-i Nieto, J. Burdick, and O. Marques. Skin lesion classification from dermoscopic images using deep learning techniques. In *2017 13th IASTED international conference on biomedical engineering (BioMed)*, pages 49–54. IEEE, 2017.

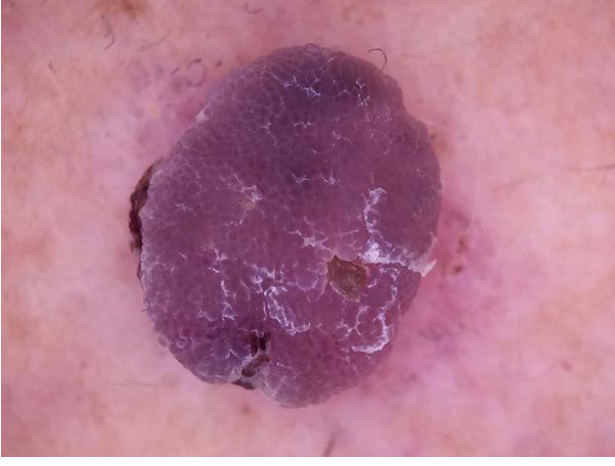
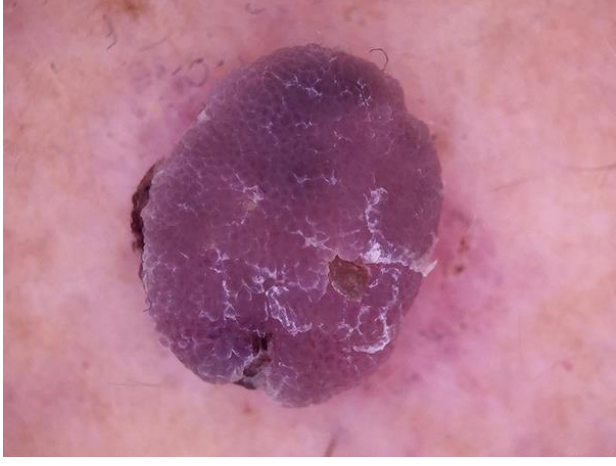
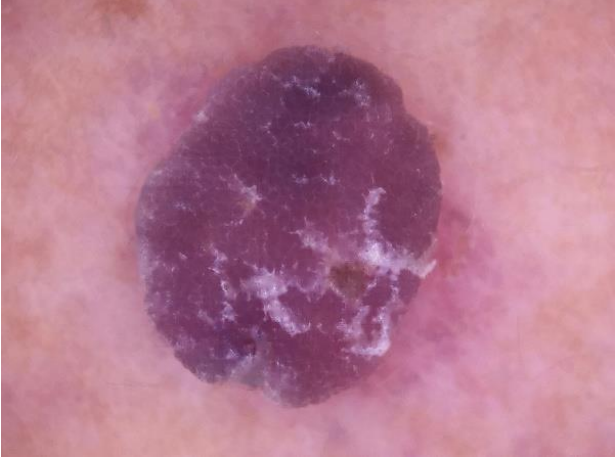
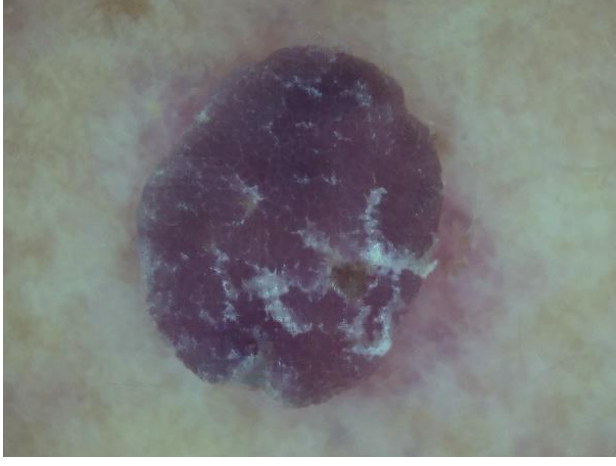
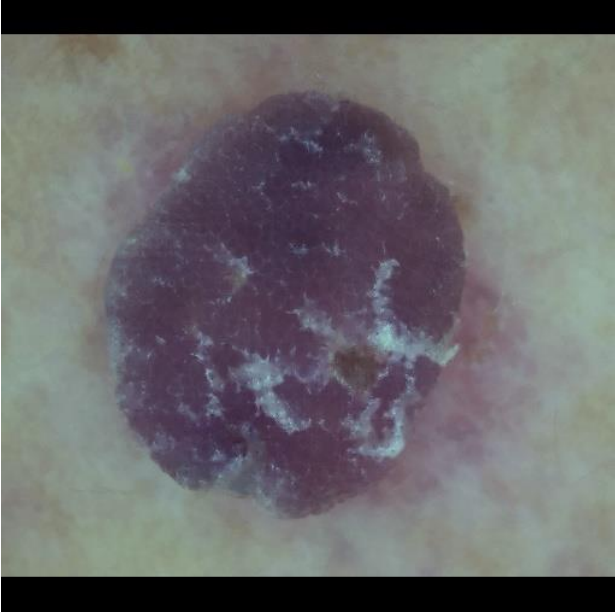
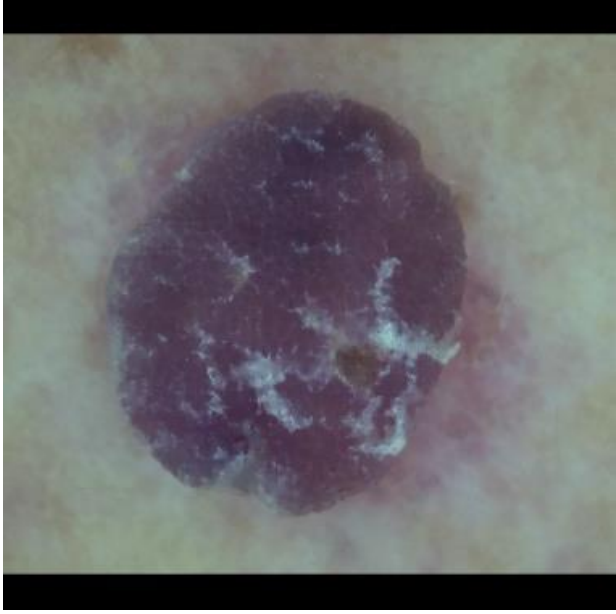
- [8] Dorj, U. O., Lee, K. K., Choi, J. Y., & Lee, M. (2018). The skin cancer classification using deep convolutional neural network. *Multimedia Tools and Applications*, 77(8), 9909-9924.
- [9] T. J. Brinker, A. Hekler, J. S. Utikal, N. Grabe, D. Schadendorf, J. Klode, C. Berking, T. Steeb, A. H. Enk, and C. von Kalle. Skin cancer classification using convolutional neural networks: systematic review. *Journal of medical Internet research*, 20(10):e11936, 2018.
- [10] A. Rezvantalab, H. Safigholi, and S. Karimijeshni. Dermatologist level dermoscopy skin cancer classification using different deep learning convolutional neural networks algorithms. *arXiv preprint arXiv:1810.10348*, 2018.
- [11] N. C. Codella, Q.-B. Nguyen, S. Pankanti, D. A. Gutman, B. Helba, A. C. Halpern, and J. R. Smith. Deep learning ensembles for melanoma recognition in dermoscopy images. *IBM Journal of Research and Development*, 61(4/5):5-1, 2017.
- [12] Hussain, M., Bird, J. J., & Faria, D. R. (2018, September). A study on cnn transfer learning for image classification. In *UK Workshop on computational Intelligence* (pp. 191-202). Springer, Cham.
- [13] Purnama IKE, Hernanda AK, Ratna AAP, Nurtanio I, Hidayati AN, Purnomo MH, Rachmadi RF. 2019. Disease classification based on dermoscopic skin images using convolutional neural network in teledermatology system. In: *Proceedings of International Conference on Computer Engineering, Network, and Intelligent Multimedia (CENIM)*, November 19 - 20, 2019, Surabaya, Cava, pp. 1-5.
- [14] R. J. Hemalatha, B. Babu, A. J. A. Dhivya, T. R. Thamizhvani, J. E. Joseph and R. Chandrasekaran, "A comparison of filtering and enhancement methods in malignant melanoma images," 2017 IEEE International Conference on Power, Control, Signals and Instrumentation Engineering (ICPCSI), 2017, pp. 2704-2710, doi: 10.1109/ICPCSI.2017.8392209.
- [15] Guruprasad, P. (2020, June). Overview of different thresholding methods in image processing. In *TEQIP Sponsored 3rd National Conference on ETACC*.
- [16] Sahu, S., Singh, A. K., Ghreera, S. P., & Elhoseny, M. (2019). An approach for de-noising and contrast enhancement of retinal fundus image using CLAHE. *Optics & Laser Technology*, 110, 87-98.
- [17] Ezhilarasan, K., Praveenkumar, S., Somasundaram, K., Kalaiselvi, T., Magesh, S., Kiruthika, S., & Jeevarekha, A. (2021). Automatic brain extraction from MRI of human head scans using Helmholtz free energy principle and morphological operations. *Biomedical Signal Processing and Control*, 64, 102270.
- [18] Sagar, A., & Dheeba, J. (2020). Convolutional neural networks for classifying melanoma images. *bioRxiv*.
- [19] Agarwal, N., Sondhi, A., Chopra, K., & Singh, G. (2021). Transfer learning: Survey and classification. In *Smart Innovations in Communication and Computational Sciences* (pp. 145-155). Springer, Singapore.
- [20] "cs-229, cheatsheet machine learning tips and tricks", Stanford University. <https://stanford.edu/~shervine/teaching/cs-229/cheatsheet-machine-learning-tips-and-tricks> .
- [21] "Understanding Confusion Matrix". Sarang Narkhede. May 9, 2018. <https://towardsdatascience.com/understanding-confusion-matrix-a9ad42dcfd62> .
- [22] Hossin, M., & Sulaiman, M. N. (2015). A review on evaluation metrics for data classification evaluations. *International journal of data mining & knowledge management process*, 5(2), 1.

Appendix

Birinci Ön İşleme Yönteminin Çıktı Örnekleri

	
1) Orjinal Görüntü	2) İkili ve OTSU Eşikleme Uygulanmış Hali
	
3) Boundary of ROI ile kırılmış hali	4) CLAHE uygulanmış hali

İkinci Ön İşleme Yönteminin Çıktı Örnekleri

	
1. Orjinal Görüntü	2. Boyut küçültme (% 55)
	
3. Renk Normalizasyonu	4. Morfolojik Uygulama sonrası
	
5. Dolgu ve Kırpma	6. Boyutu 380x380 yapma

Evolutionary Image Resizing based Accuracy Optimization for Aerial Triangulation

Hacı Mustafa PALANCIOĞLU, PhD. 

Melikgazi Municipality, 38030, Kayseri City, Turkey, hacimustafapalancioglu@gmail.com

(Alınış / Received: 31.05.2022, Kabul / Accepted: 26.07.2022, Online Yayınlanma / Published Online: 23.08.2022)

Keywords

Aerial-imaging,
Multiscale DTM,
Image Downsampling,
Spatial Accuracy,
SfM Photogrammetry

Abstract: Flight altitude and properties of the imaging-sensor influence spatial-resolution of aerial-images used for SfM photogrammetry. Most mini-UAVs developed for civilian use can provide 8-bit, 12-64 MP RGB aerial images with geotags. As the number of aerial images obtained from related UAVs increases, various computational difficulties are encountered due to practical reasons for photogrammetric aerial triangulation process. Image Resizing is a common operation in SfM Photogrammetry for downsampling the aerial images. By using Image Resizing methods, images that are downsampled to different levels can make it easier to produce data that meets the desired accuracy criteria from aerial mapping. The high-frequency data is partially suppressed by softening the relevant image before it is reduced in order to prevent an excessive loss of detail in the image created after the Image Resizing process. Details may be lost, altered, or distorted as a result of excessive high-frequency data suppression or image smoothing. Therefore, it is difficult to implement the Image Resizing operation in an ideal way. In this paper, Bilateral Filter is used to smooth the related aerial images for Image Resizing. The best values of the internal parameters of the respective Bilateral Filter were calculated using the Differential Evolution Algorithm, DE. The statistical spatial-accuracy values computed for the photogrammetric products obtained by using resized images with DE-based Bilateral Filter exposed that the related products can meet the spatial-accuracy standards for various engineering applications.

Havai Nirengi için Evrimsel Görüntü Yeniden Boyutlandırma Tabanlı Doğruluk En-İyileme

Anahtar Kelimeler

Havadan Görüntüleme,
Çok Ölçekli DTM,
Görüntü Alt-Örnekleme,
Uzamsal Doğruluk,
SfM Fotogrametrisi

Öz: Uçuş yüksekliği ve görüntüleme sensörünün özellikleri, SfM fotogrametrisi için kullanılan hava görüntülerinin uzamsal çözünürlüğünü etkiler. Sivil kullanım için geliştirilen mini İHA'ların çoğu, GNSS-tabanlı coğrafi etiketli 8 bit, 12-64 MP RGB hava görüntüleri sağlamaktadır. İlgili İHA'lardan elde edilen hava görüntülerinin sayısı arttıkça, fotogrametrik hava nirengi işlemi için pratik nedenlerden dolayı çeşitli hesaplama güçlükleri ile karşılaşılır. Görüntü Yeniden Boyutlandırma, SfM Fotogrametrisinde havadan görüntülerin alt-örneklenmesi için kullanımı gerekli olan yaygın bir işlemdir. Görüntü Yeniden Boyutlandırma yöntemleri kullanılarak, farklı düzeylerde alt-örneklenen görüntüler, havadan haritalamada istenen doğruluk kriterlerini karşılayan verilerin üretilmesini kolaylaştırabilir. Görüntü Yeniden Boyutlandırma işlemi sonunda üretilen görüntüde aşırı detay kaybına

neden olmamak için yüksek frekanslı veriler, görüntü küçültülme işleminden önce kısmen bastırılır. Görüntünün aşırı yumuşatılması veya yüksek frekanslı verilerin aşırı bastırılması, ayrıntıların değişmesine, bozulmasına veya kaybolmasına neden olabilir. Bu nedenle, Görüntü Yeniden Boyutlandırma işlemi ideal bir şekilde uygulamak zordur. Bu makalede, Görüntü Yeniden Boyutlandırma için ilgili hava görüntülerini yumuşatmak amacıyla ikili bir filtre yapısı kullanılmıştır. İlgili İkili Filtrenin dahili parametrelerinin en iyi değerleri, Diferansiyel Evrim Algoritması, DE kullanılarak hesaplanmıştır. DE tabanlı İkili Filtre, yani Bilateral Filtre, ile yeniden boyutlandırılmış görüntüler kullanılarak elde edilen fotogrametrik ürünler için hesaplanan istatistiksel mekansal doğruluk değerleri, ilgili ürünlerin çeşitli mühendislik uygulamaları için mekansal doğruluk standartlarını karşılayabileceğini ortaya koymuştur.

*Corresponding Author, email: hacimustafapalancioglu@gmail.com

1. Introduction

An estimation of three-dimensional structures from two-dimensional image sequences containing local motion data is called Structure from Motion (SfM) Photogrammetry [1-2]. Numerous image processing applications use various image resampling/resizing techniques, including SfM, video rescaling, image/video transmission, pansharpening, image fusion, and multi sensor medical imaging [3-6]. The band-width of image transmission and the run-time cost of image processing tasks dramatically grows up with increasing size of image and inherent complexities of algorithms used for image processing. To keep the efficiency of the image processing process within acceptable time and computational cost limitations, some detail-preserving image resampling / resizing methods [7-10] and parallel-image processing methods must be utilized.

In the process of applying non-recursive image processing operators to the related aerial-image, parallel-image processing methods [11-12] and hardware are frequently utilized in photogrammetry. GPUs, which offer analytical and practical advantages, are the most crucial piece of parallel image processing hardware in SfM photogrammetry-based image processing applications. The most recent photogrammetric data processing software uses C-based CUDA architectures and software development toolboxes to make practical use of GPUs. GPUs are used to solve optimization issues in image matching, ray tracing, photogrammetric resection/intersection, and various bundle block modification methods. Advanced imaging sensors enable the capture of images with a higher spatial resolution [13-15] but a larger number of pixels to process. Computational complexity, data processing capacity, and run-time are all reasonable restrictions for CPUs and GPUs. Therefore, optimizing image frequency and resolution of the aerial images have an important effect on run-time of data processing, overall-accuracy and cost of photogrammetric end-products, such as Digital Terrain Model (DTM) [16-18], Point Cloud [19] and Orthophoto [20].

A point cloud is basically a collection of data points in a three-dimensional coordinate system, typically defined by the x, y, and z coordinates of the physical entity being measured. Photogrammetry is an indirect method used to capture 3D point clouds, in contrary to Lidar technology [21-22].

The Ground Sample Distance (GSD) [23] value refers to the spatial resolution of an image and indicates the size at which a pixel's dimensions correspond in the physical scene. If the spatial accuracy [24-27] values expected from the photogrammetric result products are much larger than the average GSD value of the photogrammetric image, various image downsampling methods can be used to efficiently use the run-time, cost and computational resources of the computational platform.

The two main factors that allow choosing detail information among image primitives are the presence of high contrast situations and the level of radiometric resolution. Therefore, the Nyquist frequency (also known as the folding frequency), which is equal to half of the original picture sampling frequency, should be used to govern the image downsampling process. It is possible to partially preserve edges and other high contrast features by avoiding aliasing artifacts in the edge regions.

The image interpolation technique employed in the downsampling process has several built-in characteristics that contribute to some of the low level artificial artifacts on the downsampled image. In other words, because it has

the potential to change the technical quality of the relevant end products of photogrammetric goods, the picture resampling / interpolation method used in the downsampling process should be chosen for analytical reasons.

Artificial image blocking, random valued additive noise, speckle noise, thermal noise, gaussian noise, and dynamic local-intensity turbulence effects have all been successfully suppressed using various image filtering methods. Image enhancement filters with dominant detail retention qualities, such as the Center-Weighted Mean Filter, Nonlocal Mean Filter [28], and Bilateral Filter [29], are used to improve the efficiency of image processing procedures in photogrammetric images. Therefore, the image enhancement filter should be selected according to balance between runtime complexity and the a few factors that effects the detail preserving ability of SfM tasks used.

In general, SfM photogrammetry data sets are organised as big-data sets that have large numbers of aerial images. Therefore, using properly planned image downsampling procedures to efficiently complete SfM photogrammetry calculation processes with restricted resources is particularly valuable in SfM photogrammetry. In this paper, the aerial images have been captured by using a modified DJI Phantom 4 Pro that it has been equipped with post-process kinematic GNSS (PPK) based image geotagging hardware [30]. PPK geotagging [31] is based on the use of a GNSS PPK receiver that is also capable of time-stamp based driving the drone's camera. This solution does not require the drone and ground base station to communicate with one another. Unlike the real-time positioning (RTK) approach [32-34], the precision of the observation data recorded onto onboard PPK receiver is enhanced by processing the base station data in conjunction with the reference GNSS observation station data off-line. In comparison to PPK RTK, it is less susceptible to communication failures. Reference observations of PPK computations have been supplied from Tusaga Aktif Network and an indirect automatic aerial triangulation phase has been used in photogrammetric computations.

The following are the contributions of the results reported in this paper to 3D image processing community:

1. The generalization and information smoothing impact of aerial image size on the accuracy of photogrammetric point clouds have been thoroughly investigated.
2. A new image downsampling method able to preserve chromatic information and image-features has been presented.
3. The relative spatial accuracies of point clouds based on downsampled images has been investigated by using M3C2 metric.
4. The effects of image downsampling on run-time complexity of photogrammetric data processing tasks has been analysed.
5. Using point cloud dilution techniques, multiscale digital surface models create oversimplified representations of the observed landscape. The creation of smoothed digital models of the environment via point cloud synthesis based on picture downsampling is far too practicable. This study investigates how image downsampling affects point clouds' ability to carry spatial detail.

This paper has been organized as follows: In Section 2, Method is given. In Section 3, Image Downsampling with Detail-Preserving is presented. Experiments given in Section 4 and Section Results and Conclusions presented in Section 5.

2. Method

Because of its capacity to map the environment quickly and inexpensively, SfM photogrammetry is an active research area in *computer vision* and *3D computational perception*. SfM is the ability of humans (and other living animals) to reconstruct 3D structure from a projected 2D motion field of a moving object or scene. Due to automated procedures in recently developed SfM photogrammetric software, SfM photogrammetry has become a too practical 3D measurement technique. Thanks to characteristics of SfM, vision based 3D environment mapping has become much easier. Scattered and coloured *point clouds* are main data sources of multiscale 3D mesh forms of virtual environment maps. In recent years, automation in SfM photogrammetry tasks has been increased to facilitate the coloured *point clouds* generation procedures. Lots of SfM photogrammetry software have the ability of automatic *image matching / alignment*, *point cloud generation*, *texture synthesis* and *virtual model reconstruction* tasks. Even while commercial software is stronger in 3D modelling, some of the *freeware* and *open-source* SfM software have many features to accurately and detailly mapping the environment. Table 1 lists some frequently used SfM photogrammetry and point cloud processing tools.

Spatial resolution of an aerial image is usually given in *Ground Sample Distance* (GSD) [23]. The detail detection ability of image processing tasks becomes easier as GSD increases. The time required to compute aerial triangulation increases with pixel count. Downsampling results in a higher GSD and partially loss of image detail. The amount of time and system resources required to complete SfM computations is decreased by image downsampling, resulting in increased efficiency. To lower the *spatial frequency* or *spatial resolution* of a $[M \times N]$ pixels-sized image, one of two image downsampling method is usually employed. The first method is based on sampling in a *uniform* manner. This strategy can lead to appear *image blur*, *aliasing effects*, and *artificial-edges* on the downsampled images at different rates. Non-uniform sampling is the second method used to image downsampling. The downsampled images generated by this strategy have a relatively improved detail preservation capacity, and downsampled images are less impacted by blurring and aliasing effects.

Fig. 1 illustrates how image downsampling effects the image details for the downsampling rates employed in the Experiments.

Table 1 : Tools for SfM Photogrammetry.

#	Software name	Web Address	Functionality
1	APS Menci	https://www.mencisoftware.com/	SfM Photogrammetry
2	AutoDesk ReCap Photo	https://www.autodesk.com/products/recap	SfM Photogrammetry
3	Colmap	https://colmap.github.io/	SfM Photogrammetry
4	Correlator3D	https://www.simactive.com/	SfM Photogrammetry
5	Drone2Map	https://www.esri.com/	SfM Photogrammetry
6	DroneDeploy	https://www.dronedeploy.com/	SfM Photogrammetry
7	DroneMapper	https://dronemapper.com/	SfM Photogrammetry
8	Globalmapper	https://www.bluemarblegeo.com/global-mapper/	SfM Photogrammetry
9	Meshroom	https://github.com/alicevision/meshroom/releases	SfM Photogrammetry
10	Metashape	https://www.agisoft.com/	SfM Photogrammetry
11	MicMac	https://micmac.engsg.eu/index.php/Accueil	SfM Photogrammetry
12	Open Drone Mapping	https://www.opendronemap.org/	SfM Photogrammetry
13	Photomodeler	https://www.photomodeler.com/	SfM Photogrammetry
14	Pix4Dmapper	https://www.pix4d.com	SfM Photogrammetry
15	PrecisionMapper	https://www.precisionmidwest.com/	SfM Photogrammetry
16	Reality Capture	https://www.capturingreality.com/	SfM Photogrammetry
17	Regard3D	https://www.regard3d.org/	SfM Photogrammetry
18	VisualSFM	http://ccwu.me/vsfm/	SfM Photogrammetry
19	3DR Zephyr	https://www.3dflow.net/	SfM Photogrammetry
20	Meshlab	https://www.meshlab.net/	Data Processing, CAD
21	Autodesk Revit	https://www.autodesk.com.tr/	Data Processing, CAD
22	CloudCompare	https://www.danielgm.net/cc/	Data Processing, CAD
23	VRMesh	https://www.vrmesh.com/	Data Processing, CAD
24	PointTools	https://www.bentley.com/	Data Processing, CAD
25	VirtualSurvey	https://www.virtual-surveyor.com/	Data Processing, CAD

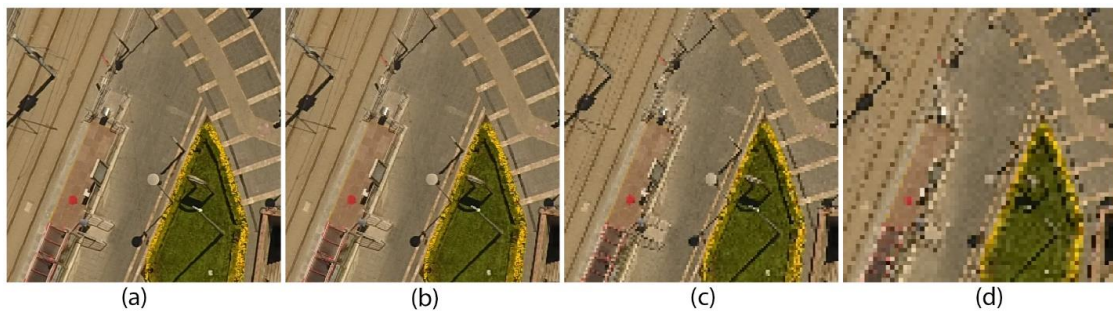


Figure 1 : The effect of downsampling on 8-bit RGB images with the size of $[512 \times 512]$ pixels : (a) Original, (b) $\frac{1}{2}$

downsampled, (c) $\frac{1}{4}$ downsampled, (d) $\frac{1}{8}$ downsampled.

Fig. 2 illustrates how SfM photogrammetry works.

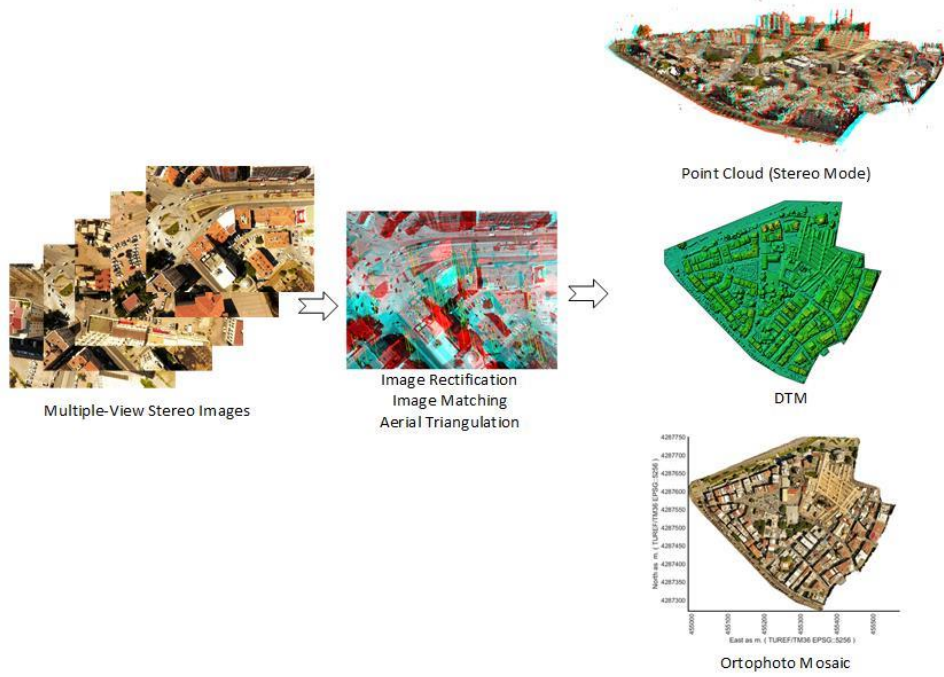


Figure 2 : Steps of SfM Photogrammetry.

Aliasing can be prevented by pre-filtering the image using a smoothing filter prior to image downsampling. Bilateral filter [29,35] is a non-linear image smoothing filter that suppresses noise. It substitutes the intensity of each pixel with a *gaussian* weighted average of surrounding pixels. The weights take into account not just pixel distance but also radiometric discrepancies. Bilateral filter has been defined in Eq. 1.

$$I_{filtered}(x) = \frac{1}{W_p} \sum_{x_i \in \Omega} I(x_i) \cdot f_r(\|I(x_i) - I(x)\|) \cdot g_s(\|x_i - x\|) \quad (1)$$

where $W_p = f_r(\|I(x_i) - I(x)\|) \cdot g_s(\|x_i - x\|)$. Here, $I_{filtered}$, I , x , Ω denotes filtered image, original image, spatial coordinates of current pixel to be filtered, and window centred at x , respectively. $x_i \in \{\Omega \setminus x\}$. f_r , g_s represent range kernel for smoothing intensity differences and spatial kernel for smoothing coordinate disparities. The spatial proximity and intensity difference are used to compute the value of W_p . To smooth image pixels, a Bilateral filter employs the *gaussian* range and *spatial kernels* defined in Eq. 2.

$$w(i, j, k, l) = e^{\left(-\frac{(i-k)^2 + (j-l)^2}{2\sigma_d^2} - \frac{\|I^2 - I(k,l)\|^2}{2\sigma_r^2} \right)} \quad (2)$$

where σ_d , σ_r are smoothing parameters of Bilateral filter. $I(i, j)$, and $I(k, l)$ denotes the pixel intensities of (i, j) , and (k, l) . The weights are normalized by using Eq. 3 ;

$$I_D(i, j) = \frac{\sum_{k,l} I(k,l) \cdot w(i,j,k,l)}{\sum_{k,l} w(i,j,k,l)} \quad (3)$$

where I_D is the denoised intensity of pixel (i, j) . With increasing range parameter σ_r , the bilateral filter approaches *gaussian* convolution more closely because the range *gaussian* expands and flattens, becoming virtually constant across the image's intensity interval. Larger features are smoothed as σ_d rises.

In this paper, the optimized values of σ_r and σ_d have been computed by using *Differential Evolution Algorithm* (DE or DE/rand/1/bin) [36]. DE is an evolutionary computing based, non-recursive optimization method. Despite its simplicity, it solves most optimization issues. DE is a library of 6 mutations and 2 crossover operators. The most commonly used DE is *DE/rand/1/bin*. In this paper, *DE/rand/1/bin* has been used to solve the equation in Eq. 4 to compute the optimal values of $(\sigma_r, \sigma_d, win)$. A DE structure based on binomial crossover was employed in this paper. The fusion of three different vectors serves as the foundation for the DE's mutation operator. By manually adding the scaled form of the direction vector that is obtained by calculating the difference between the first two vectors to the third vector, the related fusion process is completed.

The $MaxIteration=10000$, $CR=0.50$, and $F = \frac{(\lambda-0.50)}{0.50} |\lambda \sim U(0,1)$ have been used to setting of the inherent parameters of *DE/rand/1/bin* seen in Fig. 3. Readers can find more detailed information on *DE/rand/1/bin* algorithm defined in Fig. 3 at [36].

Original aerial images have been captured as *.jpeg images with [3000x4000] pixels in size with 8-bit RGB colour space. To conserve *colormatic information*, all RGB images have been transformed to CIE L*a*b colour space before applying the Bilateral filter to related images.

The objective function used to calculate the optimized values of σ_r and σ_d is defined in Eq. 4;

$$\underset{\sigma_r, \sigma_d, win}{\operatorname{argmin}} - \frac{1}{NI} \sum_{l=1}^{NI} \operatorname{ssim} \left(\operatorname{upsample} \left(I_D^{(\sigma_r, \sigma_d, win)}, I_l \right); I_l \right) \quad (4)$$

where $\operatorname{upsample} \left(I_D^{(\sigma_r, \sigma_d, win)}, I \right)$ infers upscaled image of $I_D^{(\sigma_r, \sigma_d, win)}$ to the size of original image, $I_{l=\{1:NI\}}$. Here, $I_D^{(\sigma_r, \sigma_d, win)} | I_D^{(\sigma_r, \sigma_d, win)} = \operatorname{downsample} \left(I^* \right)$ denotes downsampled image of I^* , where $I^* = \operatorname{BilateralFilter} \left(I, \sigma_r, \sigma_d, win \right)$. *win* denotes *sliding window* size used by Bilateral filter. Presented method in Eq. 4 significantly preserves the edge features and chromatic information during image downsampling process.

```

Input:  $\mathcal{F}$  : Objective function.
         (low, up) : Search Limits.
         NP : Size of Population.
         D : Dimension of Problem.
         MaxIteration : Maximum Number of Iterations.
Output:  $X_s$ : Global minimizer.
1   $i = 1, \dots, r_1, r_2, r_3, s, \dots, NP$  and  $j = 1, \dots, j^*, \dots, D$ 
   // INITIALIZATION
2   $X \sim U(\text{low}_j, \text{up}_j)$ 
3   $fitX = \mathcal{F}(X)$ 
4  for  $G=1$  to MaxIteration do
5      for  $i=1$  to NP do
6          Select  $r_1, r_2, r_3$  where  $r_1 \neq r_2 \neq r_3$ .
7           $j^* \sim U\{1, D\}$ 
8          for  $j=1$  to D do
9               $\kappa | \kappa \sim U(0, 1)$ 
10             if  $\kappa \leq CR \vee j = j^*$  then
11                  $F = (\lambda - 0.50)/0.50, \lambda \sim U(0, 1)$ 
12                  $V_{j,G}^i = X_{r_1,G} + F \cdot (X_{r_2,G} - X_{r_3,G})$ 
13             else
14                  $V_{j,G}^i = X_{j,G}$ 
15             end
16             if  $\mathcal{F}(V_{i,G}) \leq \mathcal{F}(X_{i,G})$  then
17                  $[X_{i,G+1}, fitX_i] = [V_{i,G}, \mathcal{F}(V_{i,G})]$ 
18             else
19                  $[X_{i,G+1}, fitX_i] = [X_{i,G}, \mathcal{F}(X_{i,G})]$ 
20             end
21         end
22     end
23      $X_s \leftarrow \min(fitX)$ 
24 end
    
```

Figure 3 : DE (DE/rand/1/bin) algorithm [36].

The $\operatorname{ssim}(img, refimg)$ function used in Eq. 4 denotes *Structural Similarity Index* [37] defined by using Eq. 5 as;

$$\operatorname{ssim}(img; refimg) = \frac{(2\mu_{img}\mu_{refimg} + c_1)(2\sigma_{img;refimg} + c_2)}{(\mu_{img}^2 + \mu_{refimg}^2 + c_1)(\sigma_{img}^2 + \sigma_{refimg}^2 + c_2)} \quad (5)$$

where μ_x, μ_y denotes average of *img*, and *refimg*, respectively. $\sigma_{img}^2, \sigma_{refimg}^2$, and $\sigma_{img;refimg}$ denotes variance of *img*, *refimg* and covariance of *img* and *refimg*.

Fig. 4 illustrates the computation procedure of Eq. 4.

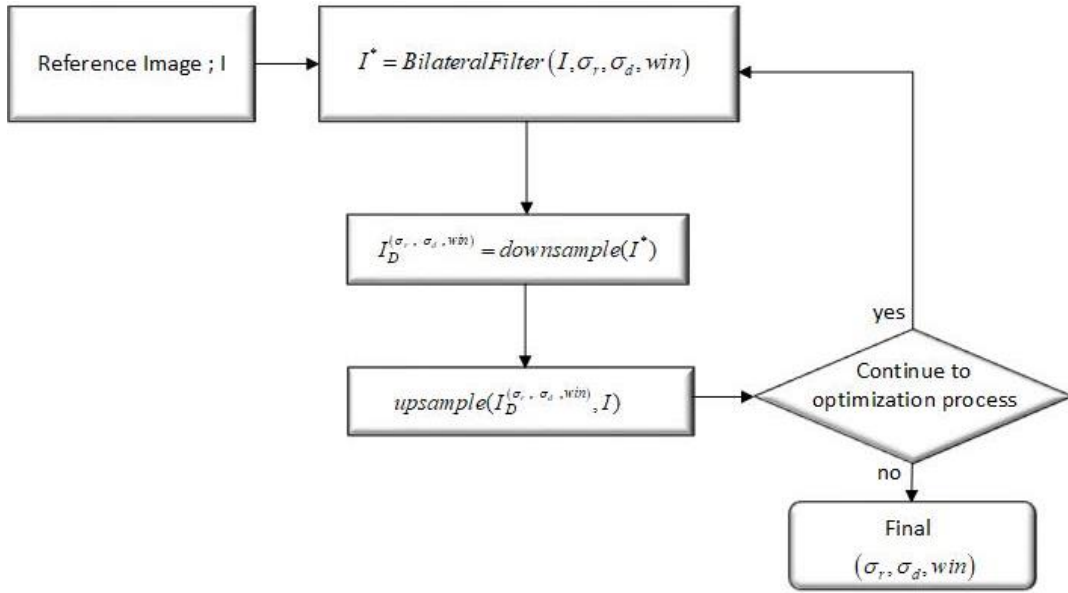


Figure 4 : The flowchart of computation steps of objective function, Eq. 4, used for image downsampling.

All of the aerial images have been downsampled together by using the procedure defined in Eq. 4. The optimized values of the parameters of the Bilateral filter are listed in Table 2 for the each downsampling rate.

The *search space* limits of σ_r and σ_d have been set to $[low; up]_{\sigma_r \text{ and } \sigma_d} = [0; 100]$ and the *search space* limits of win has been set to $[low; up]_{win} = \{3; 11\}$, where $win \in \{3, 5, 7, 9, 11\}$ for *DE/rand/1/bin* based raw-genetic optimization phase (see Fig. 3, line 2 for $[low; up]$).

Table 2 : The optimized values of the parameters of the Bilateral filter by using DE for related downsampling rates.

Downsampling Rate	Numeric value of Eq. 2	Parameters of the Bilateral filter (see Eq 2 for σ_r and σ_d)		
		σ_r	σ_d	win
1/2	0.96986	0.5647	48.2994	3
1/4	0.92904	0.0176	83.1680	3
1/8	0.89079	1.0696	71.0628	3

The Bilinear Interpolation method [38] has been used for image resizing [39-45] operations related with Eq 4, due to its high *colormatic information preserving* capacity [46] of resized image [47,48].

4. Experiments

The aerial images utilized in the experiments were obtained using a small-scale photogrammetric flight mission conducted with a drone. To geotag images, a modified DJI Phantom Pro 4 drone with post-process kinematic (PPK) positioning capability has been utilized. Image were captured as 8-bit, 12MP RGB images with 3000x4000 pixels in size. The photogrammetric flying mission was planned and executed using DroneDeploy autopilot software on an iOS device [49].



Figure 5 : The modified PPK based UAV platform used to acquire photogrammetric aerial-images used in the Experiments.

The photogrammetric *Front* and *Side Overlap* values [50, 51] have been set to 80%, and 75%, respectively. *Mapping Flight Speed* value has been set to 8m/s, which is enough to avoid *motion blur* in captured images. The *Flight Altitude*=120 m., *Focal Length*= 8.6 mm, *Imaging Sensor Width*=12.8333 mm, and *GSD*=4.48 cm/pixels values have been used to apply photogrammetric flying mission. The GSD of acquired images are [179.20 x 134.40] m. in [width x high] of related images.

The *Test Field* has been centred at *Latitude* = $38^{\circ}.719736$, *Longitude* = $35^{\circ}.485746$ in Kayseri City, Turkish Republic. The area of the *Test Field* is 162471.35 m^2 or 40.147 acres. The point clouds generated by using the downsampled aerial images have been labelled as *Data#1*, *Data#2*, *Data#3*, and *Data#4*, respectively. The point clouds of *Data#1*, *Data#2*, *Data#3*, and *Data#4* have been generated by using the image data sets with the size of pixels 3000×4000 (i.e., original images), 1500×2000 (i.e., $\frac{1}{2}$ downsampled-images), 750×1000 (i.e., $\frac{1}{4}$ downsampled-images), and 375×500 (i.e., $\frac{1}{8}$ downsampled-images), respectively.

Each of the image data sets were processed separately by using the freeware SfM software, *Meshroom* [52], and the generated dense point cloud has been exported as point cloud file. The related point cloud files have been used in piecewise point cloud comparison analysis by using the *Multiscale Model-to-Model Cloud Comparison*, M3C2 [53], function of freeware point cloud processing software, *CloudCompare* [54].

M3C2 was created to facilitate the comparison of point clouds on complex surfaces. The first phase of M3C2 is to compute the local-point *normal directions* of each point in the reference point cloud using neighbours that are closer to the relevant point than the D distance. The second step calculates the M3C2 value for the Euclidean distance (i.e., l_2 norm) between the lower and upper surfaces of an artificial cylinder of height L and diameter d centred on the local normal direction determined in the first step. The reference and comparison point clouds are used to construct the *best-fit* planes representing the bottom and upper surfaces of the appropriate artificial cylinder. Fig. 6 illustrates the analytical concept behind M3C2 distance.

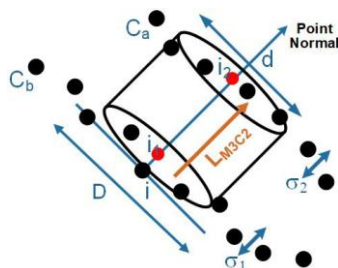


Figure 6 : Illustration of the analytical concept behind M3C2 distance.

The $d_{(1;2)}$, $d_{(1;3)}$, $d_{(1;4)}$, $d_{(2;3)}$, $d_{(2;4)}$ and $d_{(3;4)}$ denotes the computed $M3C2$ values between the point clouds of ($Data\#1; Data\#2$), ($Data\#1; Data\#3$), ($Data\#1; Data\#4$), ($Data\#2; Data\#3$), ($Data\#2; Data\#4$), and ($Data\#3; Data\#4$), respectively.

All of the computations realized by using a HP Z820 PC that have an intel(R) Xeon(R) CPU E5-2640 0 @ 2.50GHz 2.50, Win 10 Pro 64 bit OS, 64 Ram, and two GPU (i.e., Quadro K5000, Tesla K20c).

Some of the basic statistics of the empirical results of the numerical analysis have been tabulated at Table 3.

Table 3 : Basic statistics of the Experiments.

Features	Data#1	Data#2	Data#3	Data#4
Rate of image downsampling	1/1	1/2	1/4	1/8
Numbers of aerial images	105	105	105	105
Flying altitude (m)	120	120	120	120
Size of image orientation points (Tie-Points) (points)	369 824	368 840	333 377	98 046
Size of dense cloud (points)	294 781 104	74 406 689	18 006 229	4 535 837
Tie point density (points/m ²)	2.28	2.27	2.05	0.60
Point cloud density (points/m ²)	4 398.93	457.97	110.83	27.92
Image size (pixels)	3000x4000	1500x2000	750x1000	375x500
Ground Sample Distance (GSD) (cm)	3.27	6.54	13.08	26.16

Table 3 shows that the most significant effect of reducing *image resolution* is on GSD. GSD increases as image resolution decreases, as does the smallest identifiable object size limit value. This is significant since the *detail-mapping* capacity is too sensitive to image resolution. Similarly, when image resolution declines, topographic details expressed by DTM [55] are smoothed or dismissed. As a result, by removing some topographic characteristics, low-resolution aerial image-based mapping enables us to create multiscale DTM models. Data processing is facilitated by multiscale DTMs in return for the partial erasure of detail data. Therefore, multiscale DTM models are essential and too beneficial in several applications, including multimedia GIS, augmented and virtual reality, applications for narrow-band topographic data transmission, and augmented and virtual reality.

The generated orthophoto (i.e., map-like-image) of the *Test Area* for the *Data#1* has been illustrated in Fig. 7.

There are 20 ground control points [56] homogeneously distributed over the *Test Area* have been used in the aerial triangulation. One GNSS receiver, Ashtech Promark 500, has been used both to measure spatial coordinates of the ground control points and to capture reference point observations for post-process kinematic, PPK, positioning. PPK computations have been achieved by using a modified version of the freeware PPK software, RTKLib [57]. The GNSS sensor of NEO/LEA-M8T from U-BLOX [58] has been used to trigger the drone camera and related sensor captured high resolution time steps of image acquisition times with GNSS observation flows for PPK computations.

The *Test Area*, as depicted in the orthophoto that follows, is made up of a number of urban fields, each with its own geometrical characteristics, such as vegetation regions and flat or curved surfaces. By carefully interpreting the computed $M3C2$ values, researchers may be able to choose the spatial resolution of aerial images needed for a workable small-scale aerial mapping of urban areas.

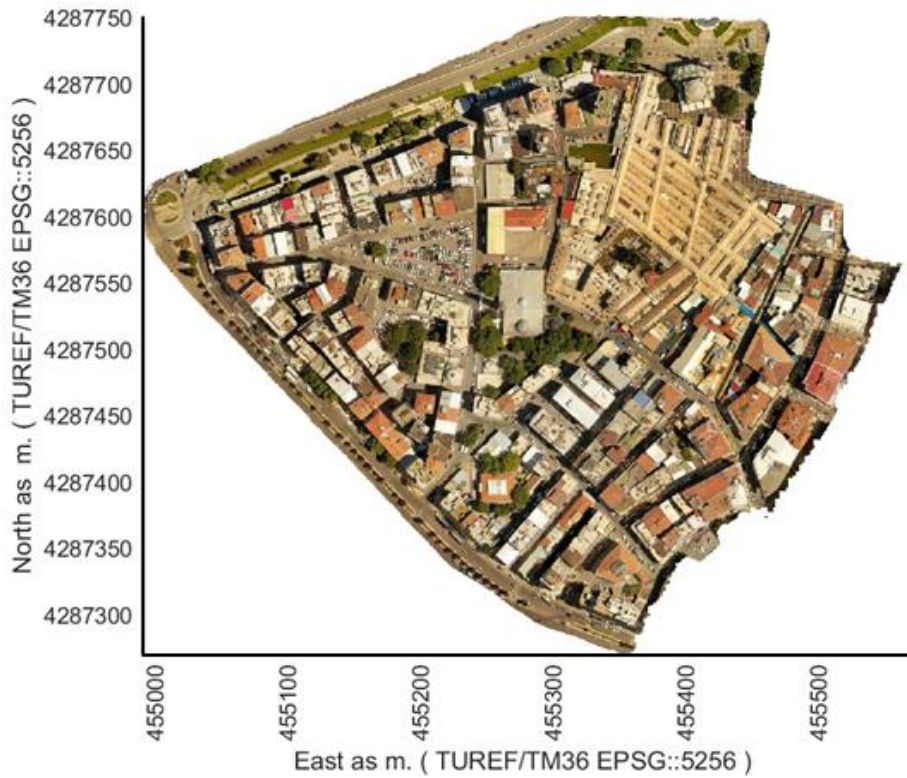


Figure 7 : Orthophoto of the *Test Area* (Grid-size 0.25x0.25m has been used for illustration).

The statistics of point cloud -to- point cloud comparison tests based on $M3C2$ values have been tabulated in Table 4. The Sample# denote number of 3D points remained within the related interval. The Sample%, denote the percentage ratio of related Sample# to summation of Sample# at same raw. The Csum denote cumulative summation value of Sample% values at same raw.

Table 4 : The statistics of point cloud -to- point cloud comparison tests based on $M3C2$ values.

$M3C2$	Statistics	Lower-Upper Limits of Binning Intervals for $M3C2$					
		0.00-0.20 m.	0.20-0.40 m.	0.40-0.60 m.	0.60-0.80 m.	0.80-1.00 m.	1.00+ m.
$d_{1,2}$	Sample#	1 472 419	877 462	322 869	92 632	50 653	304 568
	Sample%	47.18	28.12	10.35	2.97	1.62	9.76
	Csum	47.18	75.3	85.65	88.62	90.24	100
$d_{1,3}$	Sample#	799 381	564 517	761 879	290 540	110 477	593 809
	Sample%	25.62	18.09	24.41	9.31	3.54	19.03
	Csum	25.62	43.71	68.12	77.43	80.97	100
$d_{1,4}$	Sample#	342 006	222 941	231 160	244 975	282 118	1 797 403
	Sample%	10.96	7.14	7.41	7.85	9.04	57.6
	Csum	10.96	18.1	25.51	33.36	42.4	100
$d_{2,3}$	Sample#	1 095 963	514 505	114 984	39 752	24 489	187 105
	Sample%	55.44	26.03	5.82	2.01	1.24	9.47
	Csum	55.44	81.47	87.29	89.3	90.54	100.00
$d_{2,4}$	Sample#	338 194	249 095	223 361	214 864	223 679	727 605
	Sample%	17.11	12.6	11.3	10.87	11.32	36.81
	Csum	17.11	29.71	41.01	51.88	63.2	100.00
$d_{3,4}$	Sample#	42 619	37 311	35 793	24 919	9 495	26 605
	Sample%	24.11	21.11	20.25	14.1	5.37	15.05
	Csum	24.11	45.22	65.47	79.57	84.94	100.00

The results obtained from the analysis of the d_{1_2} values shown in Table 4 are given below;

- ✓ 47.18% of Sample# values are less than 0.20 m. Relevant data are mostly observed in relatively horizontal areas such as flat building roofs, road sections with very low slopes.
- ✓ 28.12% of Sample# values are less than 0.40 m. Relevant data are mainly observed in areas where the local variation of the slope is relatively fast. In relatively flat areas, 73.30% of M3C2 values are less than 0.40 m.
- ✓ 10.35% of Sample# values are less than 0.60 m. Relevant data were observed mainly in green areas.
- ✓ 2.97% of Sample# values are less than 0.80 m. Relevant data have been observed intensively on vertical surfaces such as building exteriors.
- ✓ 1.62% of Sample# values are less than 1.00 m. Relevant data were observed in densely wooded areas.
- ✓ 9.76% of Sample# values are greater than 1.00 m. Relevant data were observed in densely wooded areas.

The results obtained from the analysis of the d_{1_3} values shown in Table 4 are given below;

- (a) 25.62% of Sample# values are less than 0.20 m. Relevant data are mostly found in flat regions like roofs and road sections with very low slopes.
- (b) 18.09% of Sample# values are less than 0.40 m. Relevant d_{1_3} values were generally observed on building roofs. Only 43.71% of M3C2 values are less than 0.40 m. for the d_{1_3} . This statistic demonstrates that when the image resolution lowers, the amplitude of the M3C2 values between the relevant point clouds increases. The primary reason for this is that point clouds generated from low quality photos have far less detail.
- (c) 24.41% of Sample# values are less than 0.60 m. Relevant Sample# values are generally observed in flat areas.
- (d) 9.31% of Sample# values are less than 0.80 m. Relevant Sample# values are generally observed in flat areas.
- (e) 3.54% of Sample# values are less than 1.00 m. Relevant data were observed in densely wooded areas.
- (f) 19.03% of Sample# values are greater than 1.00 m. Relevant data were observed in densely wooded areas and at a neglectable border section of test field.

The results obtained from the analysis of the d_{1_4} values shown in Table 3 are given below.

- (a) 10.96% of Sample# values are less than 0.20 m. Relevant data are mostly found in flat regions like roofs and road sections with very low slopes.
- (b) 7.14% of Sample# values are less than 0.40 m. Relevant d_{1_4} values were generally observed on building roofs. Only the 18.10% of M3C2 values of d_{1_4} are less than 0.40 m.
- (c) 7.41% of Sample# values are less than 0.60 m. Relevant Sample# values are rarely observed in flat areas.
- (d) 7.85% of Sample# values are less than 0.80 m. Relevant Sample# values are rarely observed in flat areas.
- (e) 9.04% of Sample# values are less than 1.00 m. Relevant data were observed in densely all field types.
- (f) 57.60% of Sample# values are greater than 1.00 m. Relevant data were observed in densely all field types. Due to the fact that *Data#4* is an overgeneralized point cloud, the majority of the d_{1_4} values have been piled in this range. *Data#4* enables for a more generic topographic structure to be defined, which may be used in multimedia applications, as well as a reduction in bandwidth for spatial data transfer.

The results obtained from the analysis of the d_{2_3} values shown in Table 4 are given below.

- (a) 55.44% of Sample# values are less than 0.20 m. In and around buildings relatively far from the drone flight plane, this sort of data has been observed intensively.
- (b) 26.03% of Sample# values are less than 0.40 m. This type of data has been noticed extensively in and around buildings that are somewhat close to the drone flight plane. The 81.47% of M3C2 values of d_{2_3} are less than 0.40 m.
- (c) 5.82% of Sample# values are less than 0.60 m. Relevant Sample# values are rarely observed in flat areas.
- (d) 2.01% of Sample# values are less than 0.80 m. Relevant Sample# values are rarely observed in flat areas.
- (e) 1.24% of Sample# values are less than 1.00 m. Relevant data were observed in densely all field types.

- (f) 9.47% of Sample# values are greater than 1.00 m. Relevant Sample# values are rarely observed in flat areas.

The results obtained from the analysis of the $d_{2,4}$ values shown in Table 4 are given below.

- (a) 17.11% of Sample# values are less than 0.20 m. This sort of data has been observed on surfaces that are somewhat distant from the flight plane.
- (b) 12.60% of Sample# values are less than 0.40 m. This sort of data has been observed on surfaces that partially flat or are somewhat distant from the flight plane. The 81.47% of M3C2 values of $d_{2,3}$ are less than 0.40 m.
- (c) 11.30% of Sample# values are less than 0.60 m. Relevant Sample# values are rarely observed in flat areas.
- (d) 10.87% of Sample# values are less than 0.80 m. Relevant Sample# values are rarely observed in flat areas.
- (e) 11.32% of Sample# values are less than 1.00 m. Relevant data were observed in densely all field types.
- (f) 36.81% of Sample# values are greater than 1.00 m. Relevant Sample# values are rarely observed in flat areas.

As image spatial resolution grows, the geographical distribution of M3C2 values becomes more uniform, however as image spatial resolution drops, the M3C2 values exhibit speckle / impulsive noise characteristics and become relatively visible across the *Test Area*. The primary reason for this is because the ability of point clouds to generalize related surfaces increases with the image downsampling rate. With increasing downsampling rate, details are eroded, the point cloud becomes more susceptible to the generalization effect, and the M3C2 amplitudes grow. However, because they include fewer samples, point clouds generated from subsampled images are more suited for constructing low resolution DTMs for usage in multimedia platforms.

The results obtained from the analysis of the $d_{3,4}$ values shown in Table 4 are given below.

- (a) 24.11% of Sample# values are less than 0.20 m. This sort of data has been observed on surfaces that are somewhat distant from the flight plane.
- (b) 21.11% of Sample# values are less than 0.40 m. Relevant Sample# values are rarely observed in flat areas. Only the 45.22% of M3C2 values of $d_{3,4}$ are less than 0.40 m.
- (c) 20.25% of Sample# values are less than 0.60 m. Relevant Sample# values are intensively observed in flat areas.
- (d) 14.10% of Sample# values are less than 0.80 m. Relevant Sample# values are intensively observed in flat areas.
- (e) 5.37% of Sample# values are less than 1.00 m. Relevant data were observed in densely all shadowed zones.
- (f) 15.05% of Sample# values are greater than 1.00 m. Relevant Sample# values are observed as impulse noise all over the Test Field.

The spatial distribution of the absolute values of Sample# have been illustrated in Figs 8-13.

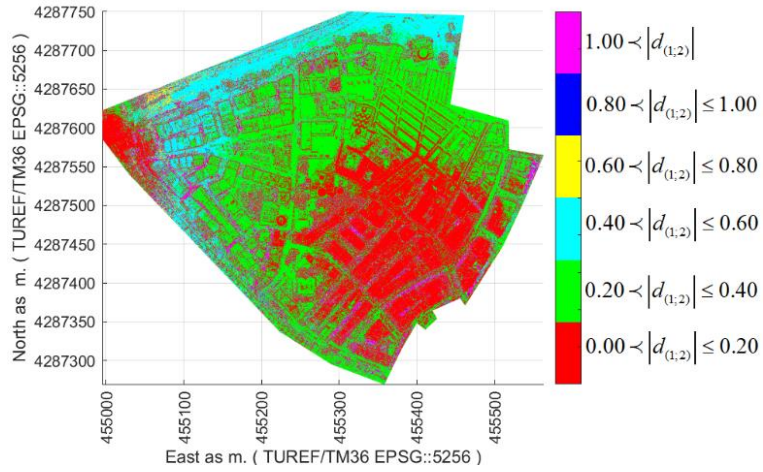


Figure 8 : Spatial distribution of $|d_{(1;2)}|$ values.

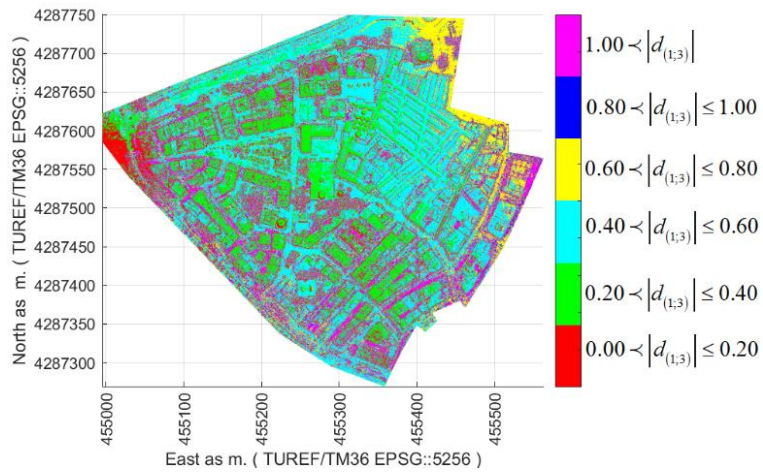


Figure 9 : Spatial distribution of $|d_{(1;3)}|$ values.

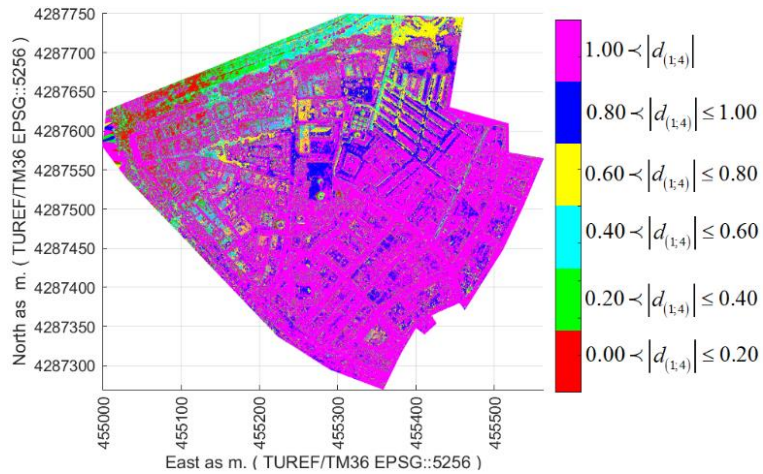


Figure 10 : Spatial distribution of $|d_{(1;4)}|$ values.

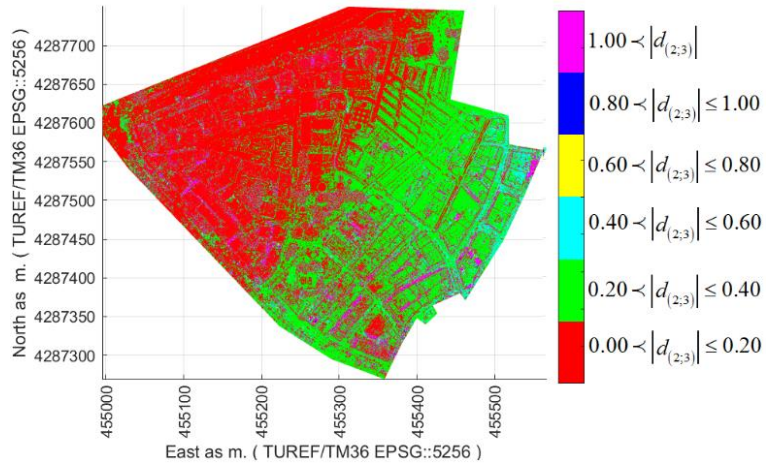


Figure 11 : Spatial distribution of $|d_{(2,3)}|$ values.

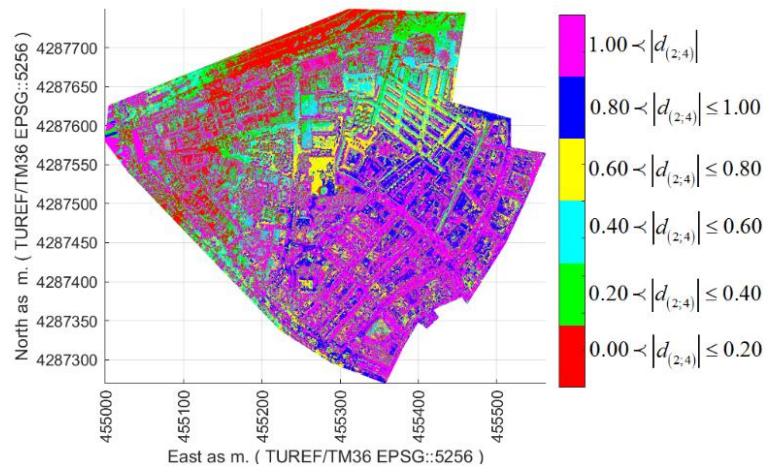


Figure 12 : Spatial distribution of $|d_{(2,4)}|$ values.

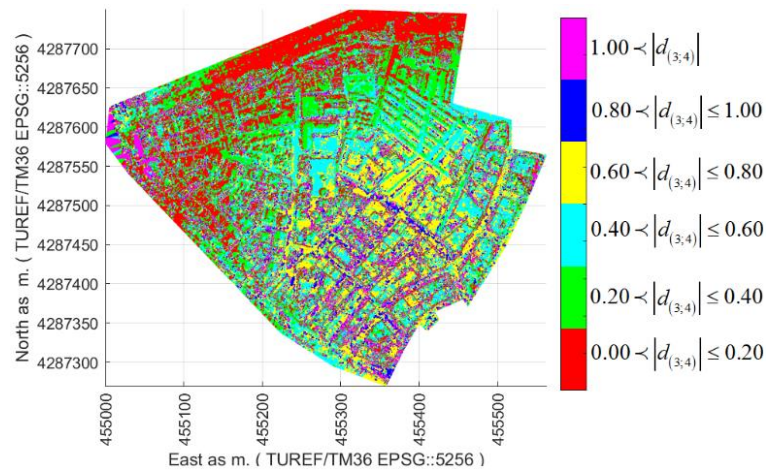


Figure 13 : Spatial distribution of $|d_{(3,4)}|$ values.

Computational *run-times* of the *Data#1*, *Data#2*, *Data#3*, and *Data#4* are captured as 20990.30, 6475.39, 2147.44 and 655.94 in seconds. Run-time complexity varied according to size of processed images in pixels. Therefore, image downsampling reduces data processing time directly.

5. Results and Conclusions

The relationship between image resolution and the level of detail information communicated by a point cloud created through photogrammetry has been carefully examined in this paper. High resolution images can be used to reduce the amount of information lost in the resulting point cloud and orthophoto in applications that call for high resolution spatial data. Low-resolution images make it easier to create surfaces with the right spatial resolution for multimedia applications like augmented reality and virtual reality for mobile platforms and virtual geo-guides. Smoothing high frequency data is necessary to eliminate artifacts caused by artificial noise while downsampling images. This paper introduces a novel method to preserving detail throughout the image downsampling process. The technique described in this paper is relatively simple to implement, fast and quite accurate for practical needs in *3D computational vision* applications.

The following are the findings obtained after interpreting the outcomes of the Experiments described in this study.

1. For SfM-based mapping of areas with dense curving surfaces, areas with very significant changes in local slope, and dense and tall trees, relatively high resolution photos should be employed.
2. Using a low image quality is a quick and efficient technique to create a multiscale DTM. The associated downsampling ratio can be used to regulate the spatial data generalization capacity of the produced multiscale DTMs.
3. As the image resolution declines, the generalization of the surface indicated by the point cloud grows and the detail diminishes.
4. Computations for 3D Mesh generation are performed more quickly on low-dense point clouds. Therefore, low-dense point clouds can be generated by using over downsampled images in SfM photogrammetry.
5. Low-density point clouds enable computations for 3D mesh generation to be completed more quickly. As a result, in SfM photogrammetry, low-dense point clouds can be produced by layering over downsampled images.
6. There is a trade-off between image resolution and smooth rate of 3D mesh surface. Therefore, user must select the image downsampling rate according to accuracy needs of application on the hand.

References

- [1] Westoby, M.J., Brasington, J., Glasser, N.F., Reynolds, J.M. 2012. 'Structure-from-Motion' photogrammetry: A low-cost, effective tool for geoscience applications. *Geomorphology*, 179: 300-314.
- [2] Mancini, F., Dubbini, M., Gattelli, M., et al. 2013. Using Unmanned Aerial Vehicles (UAV) for High-Resolution Reconstruction of Topography: The Structure from Motion Approach on Coastal Environments. *Remote Sensing*, 5, 12, 6880-6898.
- [3] Nam, S., H, Ahn, W., et al. 2019. Content-Aware Image Resizing Detection Using Deep Neural Network. 26th IEEE International Conference on Image Processing (ICIP). 106-110.
- [4] Liu, C.Y., Chang, C.C., et al. 2019. Image resizing using fuzzy inferences. *IET Image Processing*, 13, 12, 2058-2066.
- [5] Lau, C.P., Yung, C.P., Lui, L.M. 2018. Image Retargeting via Beltrami Representation. *IEEE Transactions On Image Processing*, 27, 5787-5801.
- [6] Xu, H.F., Yu, S.Y., Wang, C. 2017. An adaptive image resizing algorithm in DCT domain. *IEICE Transactions On Information And Systems*. E90D(8), 1308-1311.
- [7] Park, Y.S., Lee, Y.L., Park, H.W. 2004. Image downsampling for interlaced-to-progressive transcoding in discrete cosine transform domain. *Optical Engineering*. 43, 9, 2100-2104.
- [8] Trentacoste, M., Mantiuk, R., Heidrich, W. 2011. Blur-Aware Image Downsampling. *Computer Graphics Forum*. 30, 2, 573-582.
- [9] Wang, Y.F., Wang, L.J., et al. 2018. Information-Compensated Downsampling for Image Super-Resolution. *IEEE Signal Processing Letters*, 25, 5, 685-689.
- [10] Fang, L., Au, O.C., et al. 2012. Antialiasing Filter Design for Subpixel Downsampling via Frequency-Domain Analysis. *IEEE Transactions on Image Processing*, 21, 3, 1391-1405.
- [11] Huang, F., Yang, H., Tao, J., et al. 2021. Preliminary study on the automatic parallelism optimization model for image enhancement algorithms based on Intel's (R) Xeon Phi. *Concurr Comput Pract Exper*. 33, 16, e6260. doi:10.1002/cpe.6260.

- [12] Huang, F. 202. Research on the parallelization implementation of multi scale retinex image-enhancement algorithm based a MIC platform. *Concurr Comput Pract Exper.* 32, 22, e5832. doi:10.1002/cpe.5832.
- [13] Lee, J., Sung, S. 2016. Evaluating spatial resolution for quality assurance of UAV images. *Spatial Information Research.* 24, 2, 141-154.
- [14] Park, S., Lee, H., Chon, J. 2019. Sustainable monitoring coverage of unmanned aerial vehicle photogrammetry according to wing type and image resolution. *Environmental Pollution.* 247, 340-348.
- [15] Lee, J., Sung, S. 2016. Evaluating spatial resolution for quality assurance of UAV images. *Spatial Information Research.* 24, 2, 141-154.
- [16] Ajibola, I.I., Mansor, S., Pradhan, B., et al. 2019. Fusion of UAV-based DEMs for vertical component accuracy improvement. *Measurement.* 147, 106795.
- [17] Nesbit, P.R., Hugenholtz, C.H. 2019. Enhancing UAV-SfM 3D Model Accuracy in High-Relief Landscapes by Incorporating Oblique Images. *Remote Sensing.* 11, 3, 239. DOI:10.3390/rs11030239.
- [18] Akar, A. 2017. Evaluation Of Accuracy of Dems Obtained From UAV-Point Clouds For Different Topographical Areas. *International Journal of Engineering and Geosciences.* 2, 3, 110-117.
- [19] Tomastik, J., Mokros, M. 2017. Accuracy of Photogrammetric UAV-Based Point Clouds under Conditions of Partially-Open Forest Canopy. *Forests.* 8, 5, 151. DOI:10.3390/f8050151.
- [20] Hlotov, V., Hunina, A., Siejka, Z. 2017. Accuracy Investigation Of Creating Orthophotomaps Based On Images Obtained By Applying Trimble-Ux5 Uav. *Reports On Geodesy And Geoinformatics.* 103, 1, 106-118.
- [21] Kucharczyk, M., Hugenholtz, C.H., Zou, X.Y. 2018. UAV-LiDAR accuracy in vegetated terrain. *Journal Of Unmanned Vehicle Systems.* 6, 4, 212-234.
- [22] Cawood, A.J., Bond, C.E., et al. 2017. LiDAR, UAV or compass-clinometer? Accuracy, coverage and the effects on structural models. *Journal Of Structural Geology.* 98 : 67-82.
- [23] Martinez-Carricondo, P., Aguera-Vega, F., et al. 2018. Assessment of UAV-photogrammetric mapping accuracy based on variation of ground control points. *International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation.* 72 : 1-10.
- [24] Jeong, E., Park, J.Y., Hwang, C.S. 2018. Assessment of UAV Photogrammetric Mapping Accuracy in the Beach Environment. *Journal Of Coastal Research.* 85, 176-180. Doi:10.2112/SI85-036.1.
- [25] Uysal, M., Toprak, A.S., Polat, N. 2015. DEM generation with UAV Photogrammetry and accuracy analysis in Sahitler hill. *Measurement.* 73 :539-543.
- [26] Wiseman, DJ and van der Sluijs, J. 2015. Alternative Methods for Developing and Assessing the Accuracy of UAV-Derived DEMs. *International Journal Of Applied Geospatial Research.* 6, 3, 58-77.
- [27] Cesnulevicius, A., Bautrenas, A., et al. 2019. Comparison of Accuracy of UAV Aerials and Ground Measurements in the Curonian Spit Dunes. *Baltic Journal Of Modern Computing.* 7, 4, 571-585.
- [28] Huang, F., Lan, B., Tao, J., et al. 2017. A parallel nonlocal means algorithm for remote sensing image denoising on an Intel Xeon Phi platform. *IEEE Access.* 5, 8559-8567.
- [29] Zhang, X.L., Dai, L.Q. 2019. Fast bilateral filtering. *Electronics Letters.* 55, 5, 258-259.
- [30] Tomastik, J., Mokros, M., et al. 2019. UAV RTK/PPK Method An Optimal Solution for Mapping Inaccessible Forested Areas?. *Remote Sensing.* 11, 6, 721. DOI10.3390/rs11060721.
- [31] Turner, D., Lucieer, A., Wallace, L. 2014. Direct Georeferencing of Ultrahigh-Resolution UAV Imagery. *IEEE Transactions On Geoscience And Remote Sensing.* 52, 5, 2738-2745.
- [32] Ekaso, D., Nex, F., Kerle, N. 2020. Accuracy assessment of real-time kinematics (RTK) measurements on unmanned aerial vehicles (UAV) for direct geo-referencing. *Geo-Spatial Information Science.* 23, 2, 165-181.
- [33] Stroner, M., Urban, R., Seidl, J., et al. 2021. Photogrammetry Using UAV-Mounted GNSS RTK: Georeferencing Strategies without GCPs. *Remote Sensing.* 13, 7, 1336. DOI10.3390/rs13071336.
- [34] Forlani, G., Dall'Asta, E., et al. 2018. Quality Assessment of DSMs Produced from UAV Flights Georeferenced with On-Board RTK Positioning. *Remote Sensing.* 10, 2, 311. DOI10.3390/rs10020311.
- [35] Chen, B.H., Tseng, Y.S., Yin, J.L. 2020. Gaussian - Adaptive Bilateral Filter. *IEEE Signal Processing Letters.* 27, 1670 -1674.
- [36] Das, S., Mullick, S.S., Suganthan, P.N. 2016. Recent advances in differential evolution - An updated survey. *Swarm And Evolutionary Computation.* 27 : 1-30.
- [37] Yeo, C.H., Tan, H.L., Tan, Y.H. 2013. On Rate Distortion Optimization Using SSIM. *IEEE Transactions on Circuits And Systems For Video Technology.* 23, 7, 1170-1181.
- [38] Rukundo, O., Schmidt, S.E. 2018. Effects of rescaling bilinear interpolant on image interpolation quality. *Optoelectronic Imaging And Multimedia Technology V. Proceedings of SPIE.* 10817. UNSP 1081715. DOI:10.1117/12.2501549.
- [39] Jini, P., Kumar, K.R. 2021. Image Inpainting Using Image Interpolation - An Analysis. *Revista Geintec-Gestao Inovacao E Tecnologias.* 11, 2, 1906-1920.
- [40] Zhang, L.Z., Zhang, W., et al. 2021. Feature-level interpolation-based GAN for image super-resolution. *Personal And Ubiquitous Computing.* Early Access. DOI:10.1007/s00779-020-01488-y.

- [41] Jin, J.G. 2020. An Adaptive Image Scaling Algorithm Based On Continuous Fraction Interpolation And Multi-Resolution Hierarchy Processing. *Fractals-Complex Geometry Patterns And Scaling In Nature And Society*. 28, 8, 2040016, DOI:10.1142/S0218348X20400162.
- [42] Wang, P., Yao, H.Y., Zhang, G. 2021. A novel interpolation-based subpixel mapping for hyperspectral image by using pansharpening. *Journal Of Infrared And Millimeter Waves*. 40, 1, 56-63.
- [43] Won, C.S., Jung, S.W. 2017. Near-reversible efficient image resizing for devices supporting different spatial resolutions. *Journal Of Supercomputing*. 73, 7, 3021-3037.
- [44] Arar, M., Danon, D., Cohen-Or, D., Shamir, A. 2021. Image resizing by reconstruction from deep features. *Computational Visual Media*. 7, 4, 453-466.
- [45] Yan, B., Tan, W.M., et al. 2017. Codebook Guided Feature-Preserving for Recognition-Oriented Image Retargeting. *IEEE Transactions on Image Processing*. 26, 5, 2454-2465.
- [46] Khan, M.U., Baig, M.A., Moinuddin, A.A. 2017. Full Reference Quality Assessment of Downsized Images. *International Conference on Multimedia, Signal Processing and Communication Technologies (Impact)*. 271-274.
- [47] Wang, Q., Yuan, Y. 2014. High quality image resizing. *Neurocomputing*. 131: 348-356.
- [48] Danon, D., Arar, M., et al. 2021. Image resizing by reconstruction from deep features. *Computational Visual Media*. 7, 4, 453-466.
- [49] Trajkovski, K.K., Grigillo, D., Petrovic, D. 2020. Optimization of UAV Flight Missions in Steep Terrain. *Remote Sensing*. 12, 8, Article Number 1293 .
- [50] Sadeq H. A. 2019. Accuracy assessment using different UAV image overlaps. *Journal Of Unmanned Vehicle Systems*. 7, 3, 175-193.
- [51] Torres-Sanchez, J., Lopez-Granados, F., et al. 2018. Assessing UAV-collected image overlap influence on computation time and digital surface model accuracy in olive orchards. *Precision Agriculture*. 19, 1, 115-133.
- [52] Meshroom Software . <https://github.com/alicevision/meshroom> (last access 30.11.2021)
- [53] DiFrancesco, P.M., Bonneau, D., Hutchinson, D.J. 2020. The Implications of M3C2 Projection Diameter on 3D Semi-Automated Rockfall Extraction from Sequential Terrestrial Laser Scanning Point Clouds. *Remote Sensing*. 12, 11 , Article Number 1885.
- [54] CloudCompare Software . <https://www.danielgm.net/cc/> (last access 30.11.2021)
- [55] Jimenez-Jimenez, S.I., Ojeda-Bustamante, W., et al. 2021. Digital Terrain Models Generated with Low-Cost UAV Photogrammetry: Methodology and Accuracy. *ISPRS International Journal Of Geo-Information*. 10, 5, 285, DOI: 10.3390/ijgi10050285.
- [56] Ferrer-Gonzalez, E., Aguera-Vega, F., et al. 2020. UAV Photogrammetry Accuracy Assessment for Corridor Mapping Based on the Number and Distribution of Ground Control Points. *Remote Sensing*. 12 , 15 , 2447.DOI10.3390/rs12152447.
- [57] RTKLIB Software. <http://www.rtklib.com/> (last access 30.11.2021)
- [58] UBLOX GNSS Sensors. <https://www.u-blox.com/en> (last access 30.11.2021)

Design of Neural Network Predictor for A Finite Element Analysis of Thermal and Mechanical Stresses Caused in the Jawbone of Implantology

Buket TURGUT ¹, Ashı DURMUŞOĞLU ², Çağlar SEVİM ³, Necdet ALTUNTOP ⁴

^{1,4}Erciyes Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Makine Mühendisliği, KAYSERİ

²Hakkari Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Makine Mühendisliği, HAKKARİ

³Niğde Ömer Halisdemir Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Makine Mühendisliği, NİĞDE

(Alınış / Received: 18.04.2022, Kabul / Accepted: 31.05.2022, Online Yayınlanma / Published Online: 23.08.2022)

Keywords

Implantology,
Thermal stress,
Mechanical stress,
Finite element analysis,
Neural predictor

Abstract: As implant cavity preparation and healthy bone are essential for primary healing, prevention of mechanical and thermal damage, which occurs at bone, is crucial importance. So heat generation must be kept under control while preparing implant cavity. In this study, thermal and mechanical stresses were aimed to predict with computer software while drilling implant cavities. Thermal and mechanical stress analysis that arises around the jawbone while drilling implant cavities by using plot drills of four types of drills with a standard method was conducted by using Finite Elements Method (FEM). The real time estimation was made using data obtained from numerical analysis. The estimation analysis was performed with Adaptive-Network Based Fuzzy Inference Systems (ANFIS) approach that have a robust and adaptive structure. The results from the ANFIS simulation, the ability to show the same action as the results obtained with the Finite Element Method demonstrates that neural predictor can be used to estimate the system's thermal and Von- Mises stresses parameters. This presentation shows the estimation of thermal and mechanical stresses changes during implant surgery with artificial intelligence.

İmplantolojinin Çene kemiğinde Neden Olduğu Termal ve Mekanik Gerilmelerin Sonlu Elemanlar Analizi için Yapay Sinir Ağı Tasarımı

Anahtar Kelimeler

İmplantoloji,
Termal gerilme,
Mekanik gerilme,
Sonlu elemanlar metodu,
Yapay sinir ağı tahminicisi

Öz: Primer iyileşme için implant yuvasının hazırlanması ve sağlıklı kemik gerekli olduğundan, kemikte oluşan mekanik ve ısı hasarın önlenmesi kritik önem taşır. Bu nedenle implant yuvası hazırlanırken ısı oluşumu kontrol altında tutulması gerekmektedir. Bu çalışmada, implant kavileri hazırlanırken oluşan termal ve mekanik gerilmelerin bilgisayar yazılımı ile tahmin edilmesi amaçlanmıştır. standart yöntemle dört çeşit plot delici uç kullanılarak implant yuvası açılması esnasında çene kemiği çevresinde oluşan termal ve mekanik gerilme analizi Sonlu Elemanlar Metodu (FEM) kullanılarak yapılmıştır. Sayısal analizden elde edilen veriler kullanılarak gerçek zamanlı tahmin yapılmıştır. Tahmin analizi, sağlam ve uyarlanabilir bir yapıya sahip olan Uyarlamalı Ağ Tabanlı Bulanık Çıkarım Sistemleri (ANFIS) yaklaşımı ile yapılmıştır. ANFIS simülasyonundan elde edilen sonuçlar, Sonlu Elemanlar Metodu ile elde edilen sonuçlarla aynı davranışı gösterebilme yeteneği, sinirsel tahmincinin sistemin termal ve Von-Mises gerilme parametrelerini tahmin etmek için kullanılabileceğini göstermektedir. Bu çalışma, implant cerrahisi esnasındaki mekanik ve termal gerilme değişimlerinin yapay sinir ağları ile tahminini göstermektedir.

*Corresponding Author, email: bcinar@erciyes.edu.tr

1. Introduction

Dental implants applied for aesthetic and retrieving of lost functions in case of one or more missing teeth are quite popular at the present time. The term of osseointegration, which is necessary for a successful implant treatment, was first defined by Branemark et al. [1] The use of dental implants for restoration of lost teeth has significantly increased after the concept of the osseointegration. Achievement of osseointegration depends on many factors. The most important factor is the primary healing of the implant location. For this, thermal damage to the bone must be minimized [2]. Drilling tips used in preparing implant cavity can damage to the bone tissue due to the high temperature. It can also cause causing mechanical damage. As the heat transmission of bone is low, heat generation in the location where implant cavity is drilled cannot be distributed quickly [3]. While preparing the implant hole, heat generates in the bone due to the friction of the drills against the bone. As a result of this heat generation, necrosis, fibrosis and osteolytic degeneration may occur in the bone. These degenerations may cause implants may to be lost in the necrotic area. Studies have shown that if the temperature during preparation exceeds 47 °C in 1 minute, degeneration of fat cells and resorption of the bone that will come comes into direct contact with the implant increase. Eriksson and Alberktsson [4] investigated the susceptibility of lamellar bone pending heat generation on live rabbit bone. In their microscopic investigation, they showed that sub-bone resorption and fat cell degeneration started at temperatures above 47 °C [5]. The heat generated in the bone can be minimized by using a sharp drill bit, adjusting the speed, and by adequate external or internal cooling [6]. Shraway et al. [7] investigated the effects of thermal energy released during drilling implant cavity on bone healing and maximum temperature values that bone can bear without occurrence of necrosis. Sener et al. [8] reported in their study that thermal energy released during drilling has major influence on liveliness of cells and implant osseointegration. For this purpose, they created 12x6 cm rectangular cross-section pieces through lower jawbones of frozen toothless toothless cattle. They placed thermo resistors with depth of 3.7 and 12 mm into these pieces. A total of seven drilling tip groups with different surface properties were investigated in the study. Consequently, the lowest temperature increase was observed in boron nitride group. Nieri et al. [9] investigated the factors affecting the clinical approach to the affected maxillary canines by Bayesian network analysis in their study. Data were collected by comparing before and after treatment .Patient-related quantitative variables, metric variables, and nominal variables were collected, and the causal relationships between the variables were found through this analysis. This study supports that Artificial Intelligence (AI) could be used to assist dentists in decision making and that the possibility of substitution is quite high. Miladinovic et al. [10] applied data mining to analyze the indirect reason for the extraction based on large volumes of electronic medical records. According to the result of data mining of the electronic medical records of the selected subjects with a specific Artificial Intelligence (AI) algorithm, it was confirmed that the closeness of the extraction experience and the number of teeth extracted were statistically affected by gender, age, and occupation. Sukegawa et al. [11] used panoramic X-ray images to classify and clarify the correctness of different dental implant brands via deep convolutional neural networks (CNNs) with transfer-learning strategies. Turgut [12], Turgut et al. [13] investigated thermal stress and mechanical stress analysis that occurs around the jawbone during implant surgery by using drills of four different componies with a classical method without cooling was conducted in ANSYS programme by using FEM. The study shows that the heat measured while preparing implant cavity is about 65°C with the first model 58°C with the second model, 62°C with the third model, 64°C with the fourth model for 600 rpm. For 800 rpm; the temperature occurred was about 68°C for the first model, about 59°C for the second model, about 64°C for the third model, about 66°C for the forth model. Stress analysis is difficult to investigate in living tissue. Therefore, stress analysis studies are performed on a specific model with various methods. One of these methods is the FEM which is the most preferred method because of its advantages. Some of these advantages are as follows: complex geometries can be modeled, realistic model can be created with realistic material acceptances, stress distribution and strain can be obtained sensitively. Analysis can be performed effortlessly by changing boundary conditions, material properties and geometry [14]. Therefore, the FEM is used in many areas from vibration to impact. In this context Kosedag ve Ekici [15] numerically investigated free vibration analyzes of aluminum-foam sandwich structures. They performed the analyzes using the ABAQUS/Standard finite element package program. Ekici ve Kosedag [16] investigated the reinforcement effect of particle-reinforced metal matrix composites on the low-velocity impact behaviors. They used FEM to model and perform the low velocity impact analyzes of SiC and pumice particle reinforced aluminum 6061 matrix composites.

The novelty of this paper is to assist physicians in pre-diagnosis in implant surgery by using the stable and adaptive structure of the ANFIS approach. The purpose of this study is to investigate thermal and mechanical stresses caused by the heat generated during the drilling process. Numerical methods were used in the studies. The real time estimation of these stress parameters was analyzed with ANFIS approach. Thus, before the implant surgery is performed, necessary precaution can be taken by predicting the thermal stresses that may occur in the jawbone.

2. Materials and Methods

2.1. Finite Elements Model

Four different specially produced drilling tips, which are frequently used in implant surgery and therefore differ in geometries and materials and jawbone were modelled in the 3D solid model program. Jawbone was modelled in a cylindrical shape in order to ensure its mesh structure to be regular. The jawbone; in accordance with human anatomy; was modelled in two-stages consisting of 3 mm- thick cylindrical structured cortical bone layer and 12 mm- thick trabecular bone layer. The connection type between these two bone tissues was applied as bonded. In the jawbone, one of the elasto-plastic material models -piecewise-linear-plasticity- MAT24 material model was used and a rigid MAT20 material model was used for the drills. During the analyzes, movement of the jawbone in all axes is limited. The drill was movable in the z-axis direction. Both displacement and rotation of the drill in the x-y axis are limited. In this study, the eroding surface to surface contact algorithm was used. Solid models of drills, jawbone model and mesh structures have been given in the Figure 1. The geometric properties of drills have been given in Table 1.

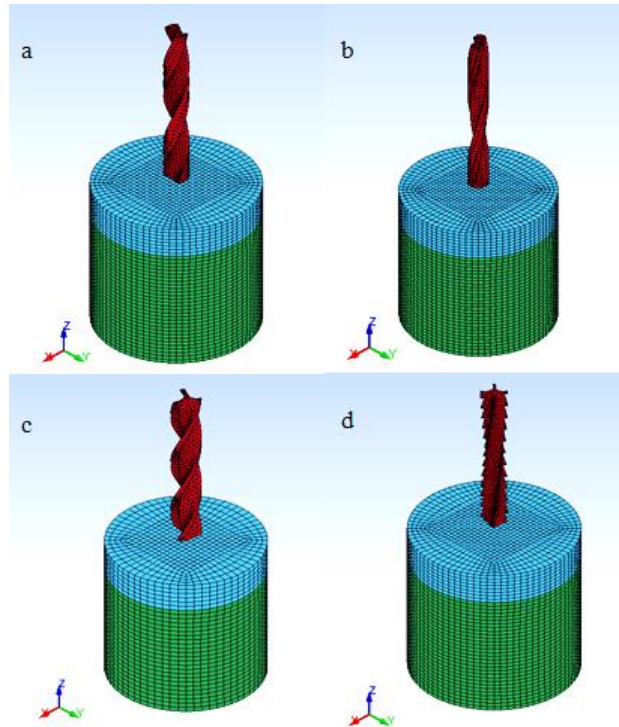


Figure 1. Mesh structures of jaw bone and drills a) First model, b) Second model, c) Third model, d) Fourth model

Table 1. The geometric properties of drills

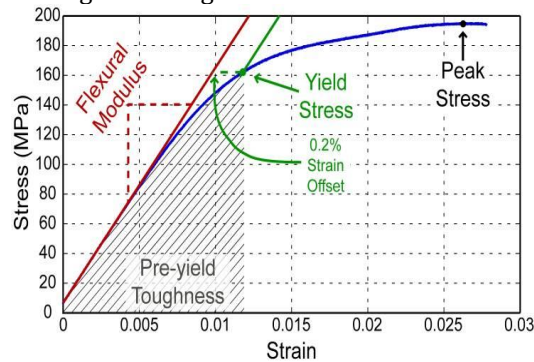
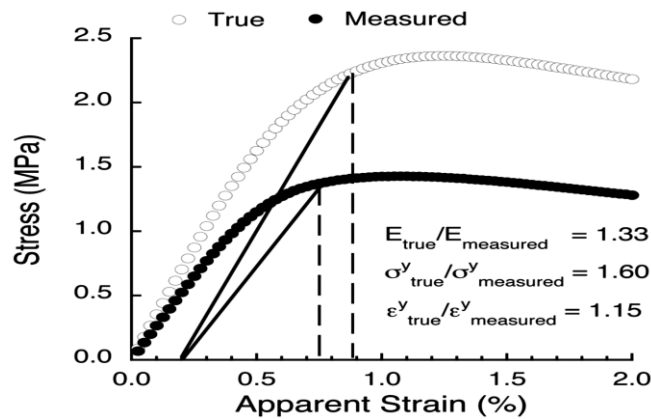
	Materials	Diameter (mm)	Height (mm)	Angle (°)
First Model	Stainless Steell	2.2	17	60
Second Model	Tungsten Carbide Coating	2	18	60
Third Model	Titanium Nitride Coating	2	16.5	60
Forth Model	Titanium Nitride Coating	2.3	15	60

Mesh structures of drilling tips' solid models were formed using ANSYS - Mechanical APDL software. Hardware unit specifications used for analysis; It has 1.6 Ghz Intel i7 processor, 16 GB ram and 2 GB graphics card. Solid 186 element type is used in this study, the size of the element was determined as 0.50 mm. There are approximately 1.8 million elements in numerical models. Materials and tissues used in this study exhibit different mechanical and physical properties. The characteristics of the materials used in the study have been given in Table 2.

Table 2. The characteristics of the materials

Materials	Young's Modulus E (MPa)	Fail Parameter	Poison Ratio ν	Density ρ (kg/m ³)	Friction Coefficient f_s	Thermal Conductivity k (W/m ² K)	Ultimate Strenght σ_u (MPa)	Yield Stress σ_y (MPa)	Specific heat °C (J/kg ² K)
Cortical Bone	13700 [17]	2,23 [17]	0,3 [17]	1100 [18]	0,35 [19]	0,56 [20]	250 [24]	122 [17]	1700 [18]
Trabecular Bone	1370 [17]	0,62 [17]	0,3 [17]	1800 [22]	0,3 [19]	0,3 [22]	194,6 [25]	162,5 [23]	1695 [21]
First Model	193000 [26]	-	0,29 [26]	7900 [26]	0,15 [26]	16,2 [26]	505 [26]	215 [26]	500 [28]
Second Model	420000 [27]	-	0,28 [27]	14800 [27]	0,95 [27]	163,3 [27]	620 [27]	550 [24]	134 [24]
Third Model	600000 [24]	-	0,25 [24]	5220 [24]	0,65 [24]	19 [24]	220 [24]	140 [75]	522 [28]
Forth Model	600000 [27]	-	0,25 [27]	5220 [27]	0,65 [27]	19 [27]	220 [27]	140 [27]	522 [27]

In order to demonstrate the post-yield behavior of the material, stress-strain data for both the cortical bone and the trabecular bone were taken from the literature. Stress strain diagram for cortical bone in Figure 2 and stress strain diagram for trabecular bone in Figure 3 are given.


Figure 2. Stress and Strain diagram for cortical bone [30]

Figure 3. Stress and Strain diagram for trabecular bone [31]

2.2. Adaptive-Network Based Fuzzy Inference Systems (ANFIS) Model

ANFIS integrates the neural network with the Fuzzy Interface System (FIS). In Figure 4 the process flow sheet of learning and predicting stage of simulation study was given below. The method of ANFIS composes of 3 elements: a rule base, a database and a reasoning mechanism. A schematic representation of an ANFIS is outlined in Figure 5 [29].

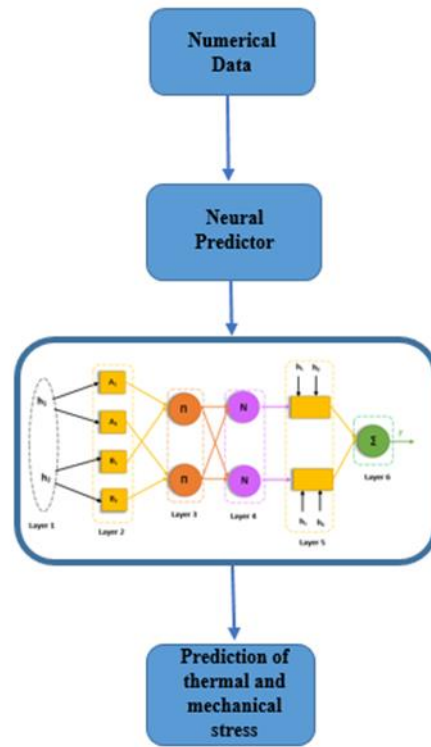


Figure 4. The flow chart of methodology used in the study

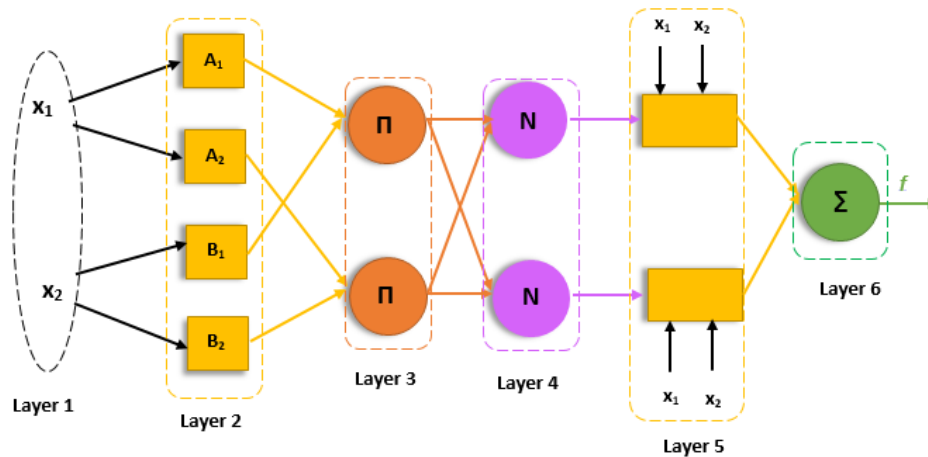


Figure 5. ANFIS Structure

Two different models were created in this study to define the fuzzy inference system. It is used two inputs as h_1 and h_2 (depth) for each model. Output values for two models are temperature (T) and stress (σ) respectively. The rule base contains two fuzzy if-then rules and they can be depicted such as:

Rule 1: if h_1 is A_1 and h_2 is B_2 then $T_1 = a_1h_1 + b_1h_2 + s_1$

Rule 2: if h_1 is A_2 and h_2 is B_1 then $T_2 = a_2h_1 + b_2h_2 + s_2$

where A_i and B_i are fuzzy membership sets, a_i, b_i and s_i are the design parameters which are defined during the train process the number of membership equations [29]. The ANFIS structure consist of six layers:

Layer 1: This is the input layer that determines actual data and desired data.

Layer 2: Every node in this layer is an adaptive node with a fuzzy membership equation. Node outputs for two inputs:

$$L_i^1 = \alpha\theta_i(h) \quad i = 1,2 \quad (1)$$

$$L_i^1 = \alpha\beta_i(h) \quad i = 1,2 \quad (2)$$

where $\alpha\theta_i$ and $\alpha\beta_i$ are membership functions.

$$\alpha\theta_i(h) = \frac{1}{1 + \left[\left(\frac{h-p}{r_i} \right)^2 \right]} \quad (3)$$

where $\{p_i, r_i, t_i\}$ is the coefficient group.

Layer 3: Each node in the third layer is a circle node called “ η ” which amplifies all the signals and sends out the product.

$$\omega_i = \alpha\theta_i(h) \cdot \alpha\beta_i(h) \quad (i = 1,2 \dots) \quad (4)$$

Layer 4: Each nodal in the fourth layer is a circle nodal called “N”.

$$\bar{\omega}_i = \frac{\omega_i}{\omega_1 + \omega_2} \quad (5)$$

Layer 5: In this layer, each nodal i has the following function:

$$L_i^5 = \bar{\omega}_i \cdot f_i = \bar{\omega}_i(a_i h_1 + b_i h_2 + s_i) \quad (6)$$

Layer 6: The single nodal in the sixth layer is a circle nodal called “ Σ ”.

$$L_i^6 = \sum \bar{\omega}_i f_i = \frac{\sum \omega_i f_i}{\sum \omega_i} \quad (7)$$

The data obtained from numerical analysis, they are divided into training data (80%) and testing data (20%). ANFIS is used for prediction the data in training data and testing data. Nonlinear parameters (a, b) and linear parameters (p, r, t) of ANFIS are optimized. The used ANFIS parameters are as follows:

Maximum epoch : 30

The number of membership function : 2 (input 1), 2 (input 2)

The number of rules : 2

The number of linear parameter: 12

The number of nonlinear parameter: 8

Maximum iteration : 500.

3. Simulation Results

3.1. Findings for Finite Elements Analysis

Initially, 20 Nm torque and 600 rpm rotational speed were applied to the drilling tip during drilling. 30 Nm torque and 800 rpm rotational speed were applied in the second case. The temperature of the jawbone was considered 36.5 ° C of body temperature. The cortical bone layer and trabecular bone layer were immobilized assuming jawbone to be motionless.

3.1.1. For $\omega=600$ rpm The Occurring Temperature and Stress Changes

As it is seen in Figure 6 and 7 maximum temperature change which occurred in the jawbone was observed in the model with small bevel angle and titanium nitride coating. This is because its pitch structure has a small angle and heat transmission coefficient of the coating material is less. The reason why minimum temperature increase

was observed in the model with saw tip-shaped pitch structure is that it has mainly a pitch structure and heat transmission coefficient of its tungsten carbide coating was higher as compared to other drilling tips.

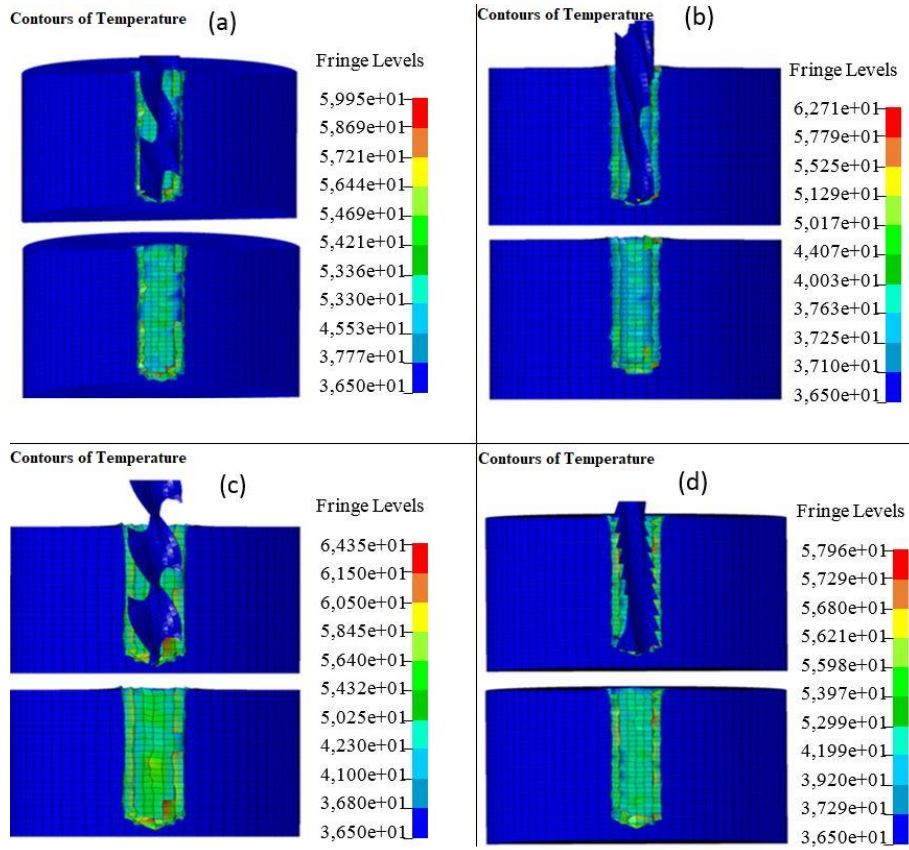


Figure 6. Temperature distributions in trabecular bone for; a) First model, b) Second model, c) Third model, d) Fourth model

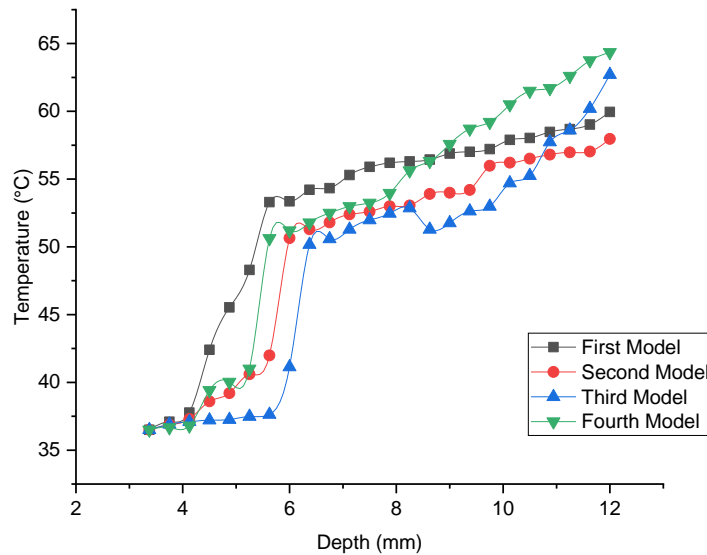


Figure 7. Temperature changes diagram in trabecular bone for $\omega=600$ rpm

Stress distributions in trabecular bone for four drill tips have been represented in Figure 8 and variation diagram of stresses by depth, occurred by four different models on trabecular bone has been given in Figure 9. The similar stress distributions were observed at the same speed. Despite this, stress distributions occurred on trabecular bone yielded lower during drilling with first model drilling tip.

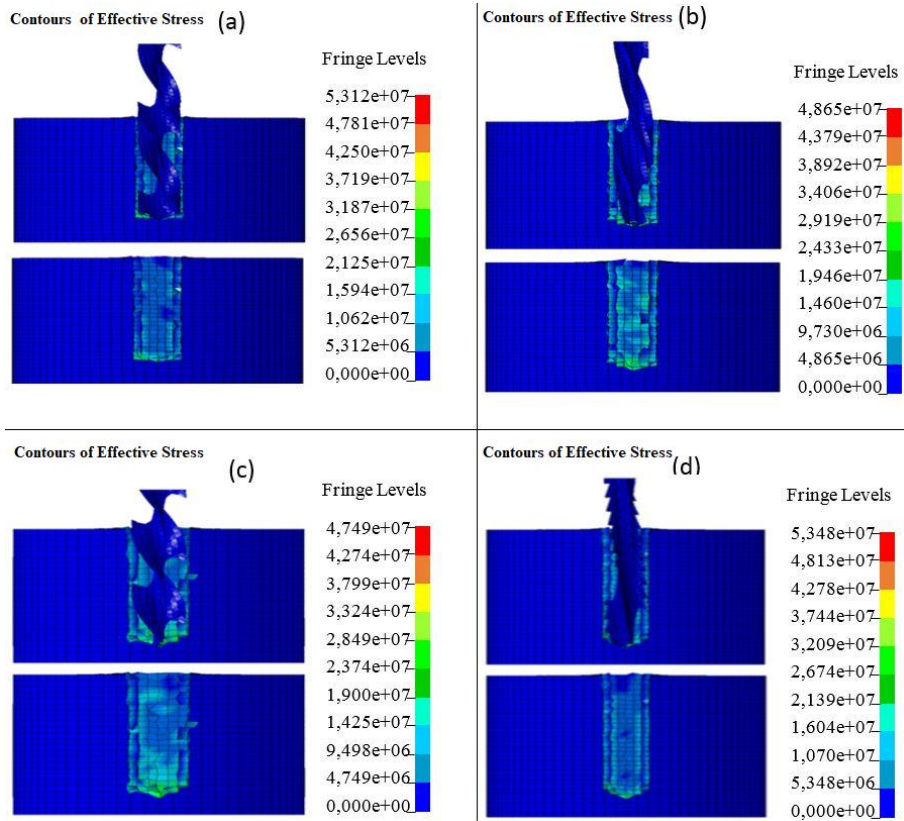


Figure 8. Stress distributions in trabecular bone for; a) First model, b) Second model, c) Third model, d) Fourth model

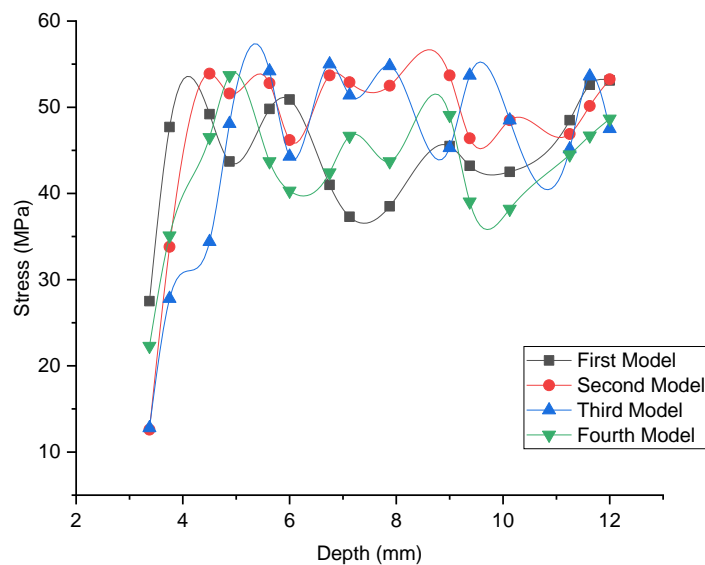


Figure 9. Stress changes diagram in trabecular bone for $\omega=600$ rpm

3.1.2. For $\omega=800$ rpm The Occurring Temperature and Stress Changes

As it seen Figure 10 and 11; the heat generated when drilling of implant cavity on jawbone depends on geometrical structure and material properties of drilling tip. Since the more drilling tip has screwed- structured geometrically, the more cavity will occur during drilling; less heat generates. Similarly, the more heat transmission coefficients of the coatings of drilling tips made of stainless steel is higher, the more effect of heat generated on jawbone will decrease.

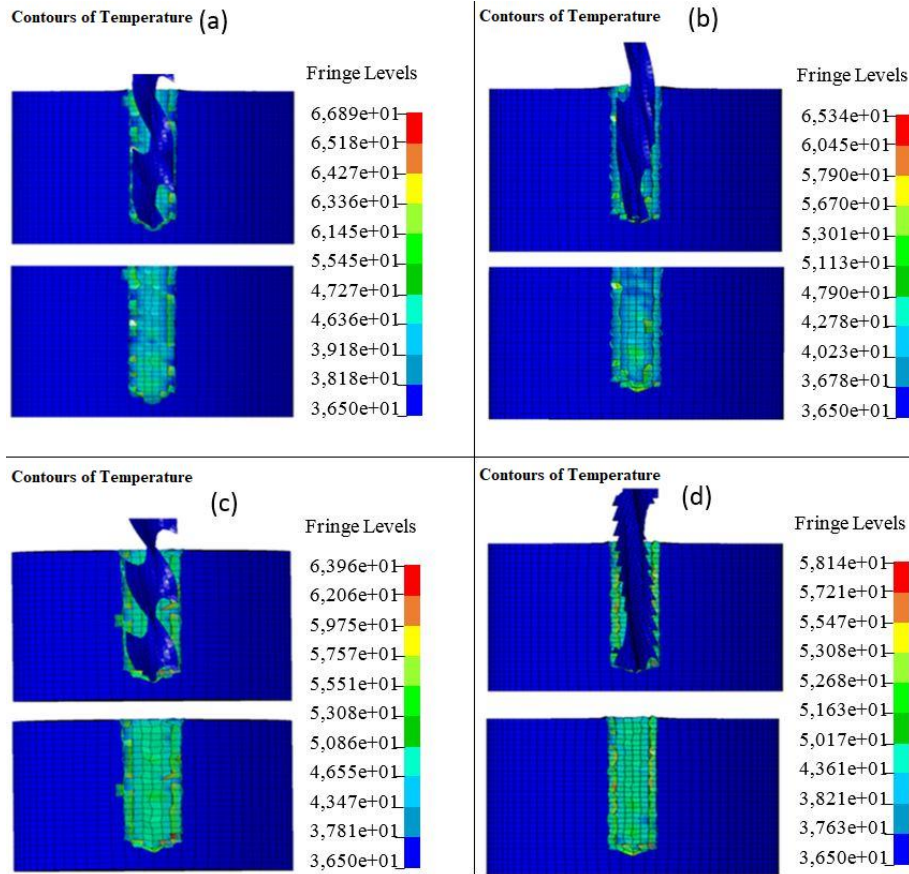


Figure 10. Temperature distributions in trabecular bone for; a) First model, b) Second model, c) Third model, d) Fourth model

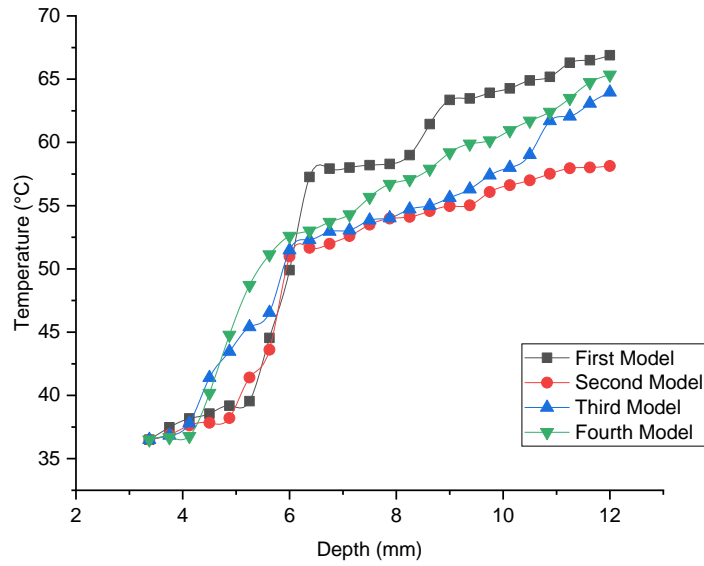


Figure 11. Temperature changes diagram in trabecular bone for $\omega=800$ rpm

Stress distributions and variation diagram of stresses by depth occurred by four different models on trabecular bone have been given in Figure 12 and 13. The similar stress distributions were observed at the same speed. Despite this, stress distributions occurred on trabecular bone yielded lower during drilling with first model drilling tip.

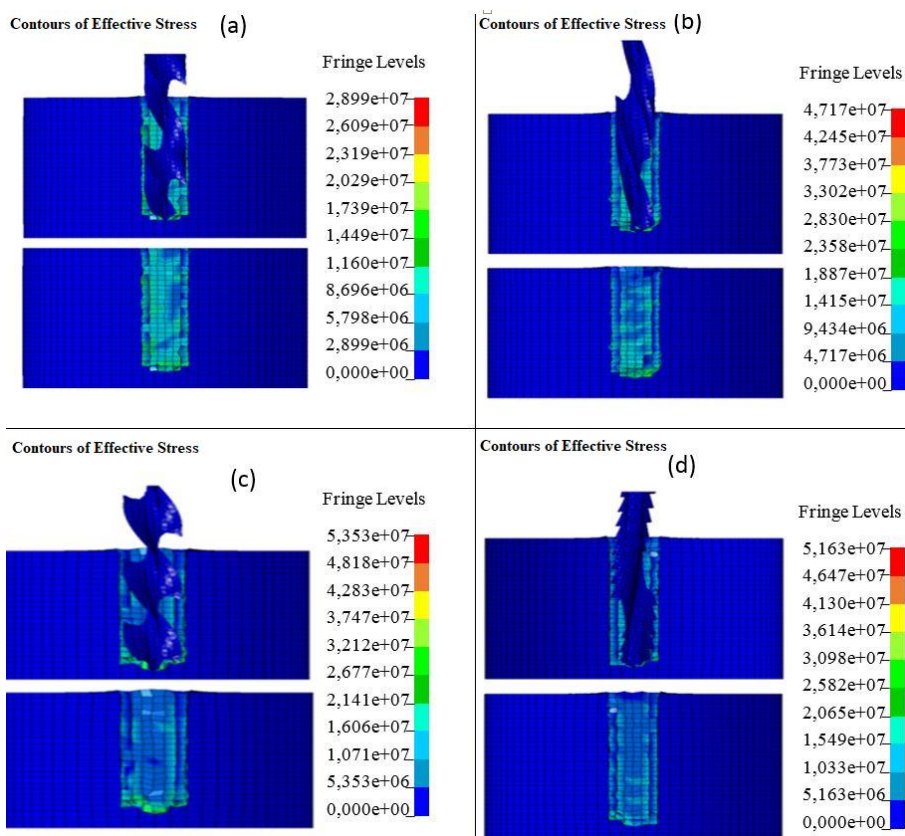


Figure 12. Stress distributions in trabecular bone for; a) First model, b) Second model, c) Third model, d) Fourth model

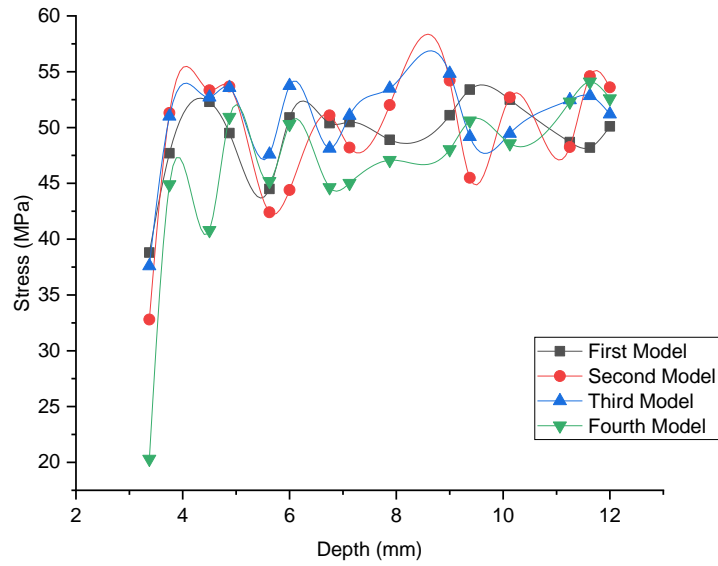


Figure 13. Stress changes diagram in trabecular bone for $\omega=800$ rpm

3.2. Findings for Neural Predictor (ANFIS)

3.2.1. Prediction of Temperature Variation and Mechanical Stress for $\omega=600$ rpm

Figure 14 and 15 render the prediction results of the thermal and mechanical stress values using the ANFIS approach. The simulation was realised for different type of the drills. As seen in the figures the prediction results of the jawbone parameters are quite good. Simulation results demonstrated that the root mean-squared error (RMSE) for any prediction was found to be 0.0003 which is completely low.

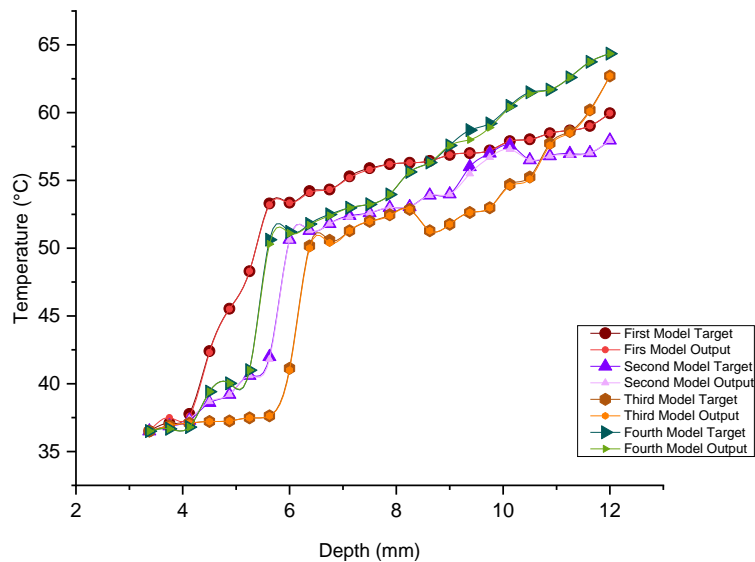


Figure 14. Prediction results of temperature variation for $\omega=600$ rpm using ANFIS

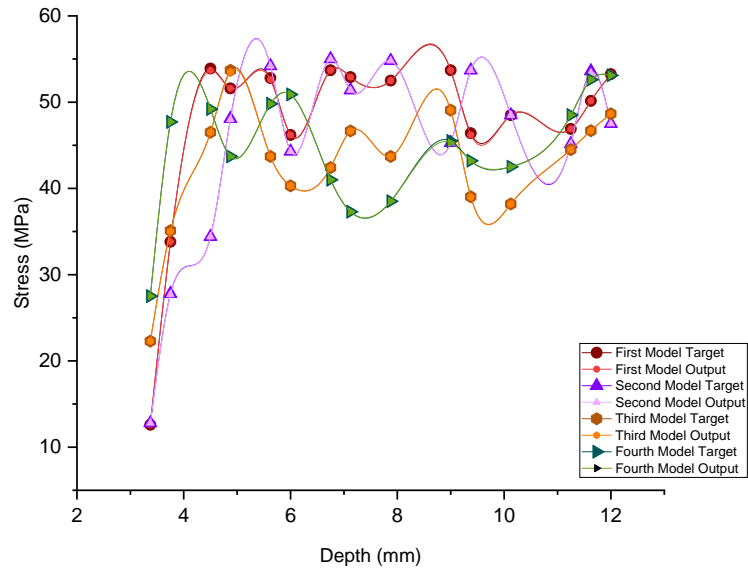


Figure 15. Prediction results of mechanical stress for $\omega=600$ rpm using ANFIS

3.2.2. Prediction of Temperature Variation and Mechanical Stress for $\omega=800$ rpm

Estimation results of the thermal and mechanical stress values for $\omega=800$ rpm with ANFIS approach was given in Figure 16 and 17 for the different type of drills. As seen from the figures ANFIS structure is appropriate in prediction of the related thermal and mechanical parameters. And also RMSE error which is the model performance criteria was considered to be 0.0002.

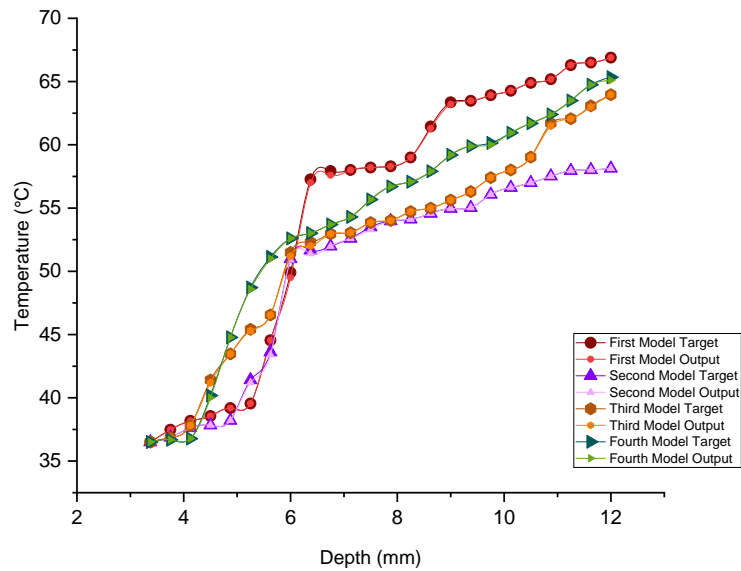


Figure 16. Prediction results of temperature variation for $\omega=800$ rpm using ANFIS

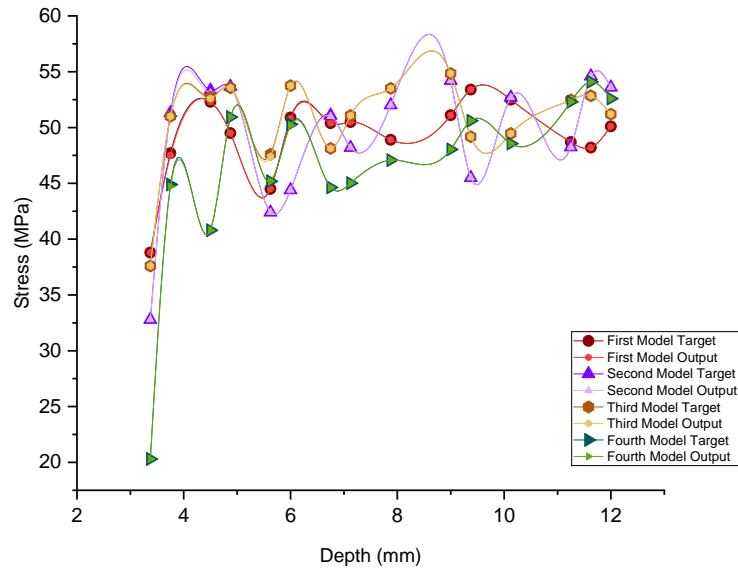


Figure 17. Prediction results of mechanical stress for $\omega=800$ rpm using ANFIS

4. Conclusions and Discussions

The thermal and mechanical stresses occurring in the jawbone during the drilling process are of great importance in implant surgery. Therefore, critical parameters can be determined in advance with FEM and necessary measures can be taken.

The simulation results show that reveal how pitches structure of drilling tips affect temperature increase that occurs during drilling. During drilling with saw-tipped pitch structured drilling tip; maximum temperature occurred in rotational speed of 600 rpm at 38.8 °C and in rotational speed of 800 rpm at 39.8 °C. Maximum temperature increases occurred in rotational speed of 600 rpm at 57.96 °C and in rotational speed of 800 rpm at 58.14 °C on the trabecular bone. The temperature change increased with increasing of depth. It was determined that heat increase which occurred during drilling, with saw-tipped pitch structured drilling tip which has higher heat transfer coefficient, yielded less as compared with other groups.

In this study, similar mechanical stress distributions were observed at the same speed. For 600 rpm; maximum mechanical stress was about 3 Mpa in cortical bone, was about 52 MPa in trabecular bone. For 800 rpm; maximum mechanical stress was about 4 Mpa in cortical bone, was about 55 MPa in trabecular bone. This study has indicated that the maximum stress and maximum temperature increase with increasing speed.

Since cooling wasn't applied in the system, temperature due to increased heat generation is fairly above the critical temperature. When models were compared according to heat generation increases; because of that fourth model is less pitch structured as well as heat transmission coefficient of its coating material is lower, heat generation increase occurred more in this model. Since second model has saw-tipped pitch structure geometrically and also heat transmission coefficient of the coating material of the its drilling tip which is made of tungsten carbide was high, minimum temperature variation occurred. Since heat transfer will occur in case cooling liquid is added into the system, heat generation will increase less.

The findings of this study indicate that the unwanted thermal and mechanical stresses have arisen in the jawbone during the implant surgery. Accordingly, by predicting these stress values, necessary precautions can be taken before the surgical procedure. As the prediction of thermal and mechanical stresses, ANFIS approach has been used. Consequently, the proposed ANFIS predictor had a superior performance in showing the same behavior with numerical analysis outputs and shows that this approach can be used in real-time estimation of thermal and mechanical stresses changes in the during drilling bone.

References

- [1] Branemark, P.I.; Hansson, B.O.; Adell, R.; et al. Osseointegrated implants in the treatment of the edentulous jaw. Experience from a 10-year period. *Scand J Plast Reconstr Surg Suppl* **1977**; *16*: 1-132.
- [2] Albrektsson, T.; Eriksson, A. Thermally induced bone necrosis in rabbits: relation to implant failure in humans. *Clinical Orthopaedics and Related Research* **1985**, *195*, 311-312.
- [3] Lundskog, J. Heat and Bone Tissue. An Experimental Investigation of the Thermal Properties of Bone and Threshold Levels for Thermal Injury. *Journal of Plastic and Reconstructive Surgery* **1972**; *9*, 1-80.
- [4] Eriksson, R.A.; Adell, R. Temperatures during for the placement of implants using the osseointegration technique. *Journal of Oral & Maxillofacial Surgery* **1986**; *44*(1), 4-7.
- [5] Eriksson, R.A.; Albrektsson, T. Temperature threshold levels for heat- induced bone tissue injury: a vital-microscopic study in the rabbit. *The Journal of Prosthetic Dentistry* **1983**; Goteborg, *50*(1), 101-107.
- [6] Bachus, K.N.; Rondina, M.T.; Hutchinson, D.T. The effects of drilling force on cortical temperatures and their duration: an in vitro study. *Medical Engineering & Physics* **2000**; *22*: 685-69. [https://doi.org/10.1016/S1350-4533\(01\)00016-9](https://doi.org/10.1016/S1350-4533(01)00016-9).
- [7] Sharawy, M.; Misch, C.E.; Weller, N.; et al. Heat generation during implant drilling: the significance of motor speed. *Journal of Oral & Maxillofacial Surgery* **2002**; *60*(10), 1160-1169. <https://doi.org/10.1053/joms.2002.34992>.
- [8] Şener, B.C.; Dergin, G.; Gürsoy, B.; et al. effects of irrigation temperature on heat control in vitro at different drilling depths. *Clinical Oral Implants Research* **2009**; *20*, 294-298. <https://doi.org/10.1111/j.1600-0501.2008.01643.x>.
- [9] Nieri, M.; Crescini, A.; Rotundo, R.; et al. Factors affecting the clinical approach to impacted maxillary canines: a bayesian network analysis. *Am Orthod Dentofac Orthop* **2010**; *137*:755-62. <https://doi.org/10.1016/j.ajodo.2008.08.028>.
- [10] Miladinović, M.; Mihailović, B.; Janković, A.; et al.. Reasons for extraction obtained by artificial intelligence. *Acta Fac Med Naissensis* **2010**; *27*:143-58.
- [11] Sukegawa, S.; Kazumasa, Y.; Takeshi, H.; et al. Deep Neural Networks for Dental Implant System Classification. *Biomolecules* **2020**; *10*(7):984. doi: 10.3390/biom10070984.
- [12] Turgut, B. Examination of mechanical and thermal changes caused by implant application in the jawbone, Msc, Erciyes University, 2016.
- [13] Turgut, B., Erdemir, D., Altuntop, N. Examination of mechanical and thermal variations caused by the implantology in the jawbone. *International Conference on Advances in Mechanical Engineering* **2016**; 788-795.
- [14] Eskitaşcıoğlu G. Investigation of functional stress in different centric contact types in natural and prosthetic restored teeth with structural analysis program, Phd, Ankara University, 1991.
- [15] Kosedağ, E., Ekici, R., Free Vibration Analysis of Foam- Core Sandwich Structures, *Journal of Polytechnic*, **2021**; *24*(1):69-74. <https://doi.org/10.2339/politeknik.571396>
- [16] Ekici, R., Kosedağ, E., Comparison Of The Low-Velocity Impact Behaviors Of Sic And Pumice Particle-Reinforced Metal Matrix Composites, *International Journal of Mechanical And Production Engineering*, **2017**, *5*(10)
- [17] İmroğlu, H.İ.; Tosun, Z.; Kaymaz, İ.; et al. A New TMJ Implant Design. *Süleyman Demirel University Journal of Engineering Sciences and Design* **2014**; *2*(3), 199-210.
- [18] Huiskes, J. Some Fundamental Aspects Of Human Joint Replacement. *Acta Orthopaedica* **1980**, *185*, 44-108.
- [19] Alam, K.; Mitrofanov, A.V.; Silberschmidt, V.V. Thermal analysis of orthogonal cutting of cortical bone using finite element simulations. *International Journal of Experimental and Computational Biomechanics* **2010**; *1*(3). <https://doi.org/10.1504/IJECB.2010.035259> .
- [20] Davidson, S.R.H.; James, D.F. Measurement of thermal conductivity of bovine cortical bone. *Medical Engineering and Physics* **2000**; *22*, 741-747. [https://doi.org/10.1016/S1350-4533\(01\)00003-0](https://doi.org/10.1016/S1350-4533(01)00003-0).
- [21] Clattenburg, R.; Cohen, J. Thermal properties of cancellous bone, *Journal of Biomedical Materials Research* **1975**; *9*, 169-182.
- [22] <http://silver.neep.wisc.edu/~lakes/BoneTrab.html> .(Accessed on 20 June 2021).
- [23] Kopperdah, D.L.; Keaveny, T.M. Yield strain behavior of trabecular bone. *Journal of Biomechanics* **1998**; *31*: 601-608. [https://doi.org/10.1016/S0021-9290\(98\)00057-8](https://doi.org/10.1016/S0021-9290(98)00057-8).
- [24] Tüfekçi, K.; Kayacan, R.; Kurbanoglu, C. Investigation of the mechanical behavior of cortical bone sterilized by gamma radiation under dynamic load. *Süleyman Demirel University Journal of Engineering Sciences and Design* **2014**; *2*(3), 299-302.

- [25] Bevill, G.; Easley, S.K.; Keaveny, T.M. Side-artifact errors in yield strength and elastic modulus for human trabecular bone and their dependence on bone volume fraction and anatomic site. *Journal of Biomechanics* **2007**; 40(15). <https://doi.org/10.1016/j.jbiomech.2007.05.008>.
- [26] <http://www.asm.matweb.com>. (Accessed on 20 June 2021).
- [27] <http://www.matweb.com>. (Accessed on 20 June 2021).
- [28] <http://www.tasarimveimalat.com>. (Accessed on 20 June 2021).
- [29] Bachir, O.; Zoubir, A.F. Adaptive neuro-fuzzy inference system based control of puma 600 robot manipulator. *Int J Electr Comput Eng* **2012**; 2, 90–97.
- [30] Bevill, G., Easley, S.K., Keaveny, T.M., 2008. Side-Artifact Errors In Yield Strength And Elastic Modulus For Human Trabecular Bone And Their Dependence On Bone Volume Fraction And Anatomic Site. NIH Public Access, University of California, Berkeley, CA, USA.15s
- [31] Tunalı, B., 2000. Multi-Disipliner Bir Yaklaşımla Oral İmplantoloji. 2. baskı Nobel Tıp Kitabevleri Ltd. Şti İstanbul.

RF ve Mikrodalga Devre Tasarımında Dielektrik Taban Kayıp Çarpanının Mikroşerit Hat Güç Kayıplarına Etkisinin Araştırılması

Oğuzhan Kızılbey^{D*}

*1 TÜBİTAK Ulusal Metroloji Enstitüsü, KOCAELİ

(Alınış / Received: 06.05.2022, Kabul / Accepted: 20.07.2022, Online Yayınlanma / Published Online: 23.08.2022)

Anahtar Kelimeler

Dielektrik taban,
Mikroşerit hat,
Dielektrik kaybı,
İletken kaybı

Öz: Bu makalede, radyo frekansı (RF) ve mikrodalga devre uygulamalarında kullanılan farklı dielektrik tabanların kayıp çarpanlarının, mikroşerit hatlar üzerindeki güç kayıplarına olan etkileri araştırılacaktır. Araştırmanın frekans alt sınırı 1 GHz, üst sınırı ise 30 GHz olarak belirlenmiştir. Dielektrik tabanın iletkeni 35µm kalınlığında elektroçöktürme bakır olarak seçilmiştir. Test amaçlı tasarlanan mikroşerit hat her frekans için 50Ω karakteristik empedansa sahip olacaktır. Araştırmaya konu edilen dielektrik tabanlar FR4, RO3003, RO3010, RO4003C, RO4350B, RT/Duroid 5880, RT/Duroid 6002, ve RT/Duroid 6006 olmakla beraber, dielektrik taban kalınlığı standart ölçülerden biri olan 0.508 mm seçilmiştir. Araştırmanın sonucunda tüm frekanslarda en düşük güç kaybının RT/Duroid 5880 tabanda, en yüksek güç kaybının ise FR4 tabanda olduğu görülmüştür. Ayrıca frekans arttıkça bütün dielektrik tabanlarda güç kayıplarının arttığı görülmüştür.

Investigation of the Effect of Loss Factor of the Dielectric Substrates on Microstrip Line Power Losses in RF and Microwave Circuit Design

Keywords

Dielectric substrate,
Microstrip Line,
Dielectric loss,
Conductor loss

Abstract: In this article, the effects of the use of different dielectric base materials used in radio frequency (RF) and microwave circuit design on power losses on microstrip lines will be investigated. The lower frequency limit of the study was determined as 1 GHz and the upper limit as 30 GHz. Conductor of the substrate was chosen as electrodeposited copper with 35µm thickness. The microstrip line used for testing is designed as 50Ω for each frequency. The dielectric materials included in the research were RO4003C, RO4350B, RT/Duroid 5880, RT/Duroid 6002, RT/Duroid 6006, RO3003, RO3010 and FR4, but the dielectric base thickness was selected as 0.508 mm. As a result of the research, it was seen that the lowest loss at all frequencies was at RT/Duroid 5880 base and the highest loss was at FR4 base. In addition, it was observed that as the frequency increases, losses increase in all dielectric bases.

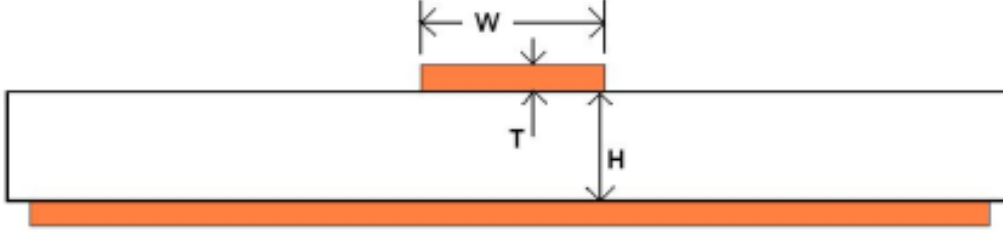
*İlgili Yazar, email: oguzhan.kizilbey@tubitak.gov.tr

1. Giriş

Elektronik devreler, çoğunlukla düzlemsel bir kart üzerine elektronik elemanların çeşitli tasarım ilkelerine uyularak dizilmesi ve birbirleri ile bağlanması ile bir bütün haline gelir. RF, mikrodalga ve hatta günümüzde milimetre dalga frekanslarında kablolu/kablosuz haberleşme ürünleri, otonom sürüş radarları, askeri radarlar, sinyal karıştırıcılar gibi birçok sivil ve askeri uygulama elektronik devre kartları içermektedir. Bu kartların bir kısmı sayısal ve düşük frekans devrelerini üzerinde taşıırken, bazıları yüksek frekans devreleri barındırmaktadır [1].

Güç kuvvetlendiricisi, düşük gürültülü alıcı, karıştırıcı, osilatör, güç bölücü, hibrit kuplör ve anten gibi aktif ve pasif yüksek frekans devrelerinin dielektrik taban üzerine kondansatör, endüktör, direnç gibi toplu devre elemanlar ve bipolar jonsiyonlu transistör, alan etkili transistör gibi aktif elemanlar kullanılarak gerçekleştirilmesi

oldukça yaygın bir uygulamadır. Toplu devre elemanlarının kalite faktörlerinin sınırlı olması ve her eleman değerinin üretilmemiş olması/elde edilememesi gibi kısıtlar nedeniyle çok yüksek kalite faktörü ve sınırsız değer belirleyebilme imkanı ile toplu devre elemanlarının yerine mikroşerit hatlar tercih edilmektedir [2]. Şekil 1'de dielektrik taban üzerinde gerçekleştirilmiş bir mikroşerit hattın kesiti verilmiştir. Şekilde H dielektrik malzemenin kalınlığını, T dielektrik malzeme üzerindeki iletkenin kalınlığını, W ise mikroşerit hattın genişliğini temsil etmektedir.



Şekil 1. Mikroşerit hat kesiti

Dielektrik taban üzerinde bir mikroşerit hattın tasarlanabilmesi için tabanın bazı özelliklerinin iyi tahlil edilmesi gereklidir. Dielektrik tabanın önemli parametreleri olarak dielektrik sabiti, kayıp çarpanı, dielektrik sabitinin ısıl katsayısı, ısıl iletkenlik ve cam geçiş sıcaklığı verilebilir.

Dielektrik sabiti, tabanın enerjiyi depolama özelliğini belirleyen en önemli parametredir. 2 ile 12 arasında değerlerde bağlı dielektrik sabitine sahip tabanlar elektronik devre tasarımı için temin edilebilmektedir. Dielektrik sabiti arttıkça devrenin boyutlarının küçüleceği göz önüne alınmalı ve üretim imkanına göre dielektrik taban seçimi yapılmalıdır.

Dielektrik sabitinin ısıl katsayısı, sıcaklık değişimi ile dielektrik sabitinin değişimini modellemektedir. Yüksek sıcaklık değişimine maruz kalan elektronik devre kartlarında bu parametrenin düşük olması tercih edilmelidir. Dielektrik sabiti değiştiğinde tüm tasarlanan elemanların karakteristiklerinin değişebileceği unutulmamalıdır.

Isıl iletkenlik, dielektrik tabanın üzerinde taşıdığı gücün oluşturduğu ısının ne ölçüde kartın monte edildiği yüzeye yayıldığına bir göstergesidir. Yüksek güç uygulamalarında kart üzerinde kalan ısının soğutucu bloklara etkin biçimde dağıtılabilmesi için, dielektrik taban malzemesinin ısıl iletkenliğinin yüksek olmasına dikkat edilmelidir.

Cam geçiş sıcaklığı, dielektrik malzemenin kırılman ve katı olan cam formundan, plastik formuna geçiş sıcaklığıdır. Bu sıcaklık derecesi bir manada tabanın güvenilirliği yüksek olarak kullanılabilmesi için en yüksek sıcaklık derecesini belirtmektedir. Yüksek-güç kuvvetlendiricisi uygulamalarında taban seçimi yapılırken özellikle bu parametreye dikkat edilmelidir.

Kayıp çarpanı, dielektrik tabanın dielektrik kaybını modelleyen parametredir. Kayıp çarpanının 0.015'ten yüksek olduğu tabanlar yüksek kayıplı, 0.004 ile 0.015 arası olanlar orta kayıplı, 0.004 ile 0.002 arası olanlar düşük kayıplı ve 0.002'den daha düşük değerlere sahip olanlar ise çok düşük kayıplı olarak sınıflandırılabilir. Dielektrik tabanın üzerinde geliştirilen mikroşerit hatlar 4 tür güç kaybı ile karşılaşmaktadır. Bunlar iletken kayıpları, dielektrik kayıpları, ışınma kayıpları ve yüzey dalgası yayılımı kayıplarıdır. Bu kayıplar arasında iletken ve dielektrik kayıpları güç kaybına neden olan ana etkenlerdir. Dielektrik kaybı, dielektrik taban malzemesinin kayıp çarpanı ile ilişkilendirilebilecek kayıp türüdür. İletken kayıpları ise dielektrik malzeme üzerindeki iletken kaplamasının türüne bağlı olarak değişmektedir. Dielektrik kaybı ile iletken kaybı toplandığında yaklaşık olarak toplam güç kaybı elde edilebilmektedir [3].

Değişen frekans ve değişen hat empedansları dielektrik sabitinin etkin değerini belirlemektedir. Dielektrik malzemenin katalog bilgilerinde belirtilen dielektrik sabiti, efektif dielektrik sabitinin hesaplanması için kullanılmaktadır. Dielektrik malzemenin, efektif dielektrik sabiti (1) bağıntısı ile hesaplanabilir. Bu bağıntıda u, W/H oranını belirten bir sayıdır. Malzemenin katalog bilgilerinde ifade edilen dielektrik sabiti ise ϵ_r olarak ifade edilmiştir. (1) bağıntısında geçen a ve b değişkenleri ise sırasıyla (2) ve (3) bağıntılarında verilmiştir [4].

$$\epsilon_{re} = \frac{\epsilon_r + 1}{2} + \frac{\epsilon_r - 1}{2} \left(1 + \frac{10}{u} \right)^{-ab} \quad (1)$$

$$a = 1 + \frac{1}{49} \ln \left(\frac{u^4 + \left(\frac{u}{52}\right)^2}{u^4 + 0.432} \right) + \frac{1}{18.7} \ln \left[1 + \left(\frac{u}{18.1}\right)^3 \right] \quad (2)$$

$$b = 0.564 \left(\frac{\varepsilon_r - 0.9}{\varepsilon_r + 3} \right)^{0.053} \quad (3)$$

Dielektrik taban üzerinde tasarlanan mikroşerit hatların temel olarak 2 adet güç kaybı ile karşı karşıya kaldığı belirtilmişti. Bunlardan ilki iletken kaybıdır ve (4) bağıntısı ile hesaplanabilir [4].

$$\alpha_c = 0.072 \frac{\sqrt{f}}{WZ_c} \cdot \frac{c}{f\sqrt{\varepsilon_{re}}} \left(1 + \frac{2}{\pi} \tan^{-1} \left[1.4 \left(\frac{\Delta}{\delta_s} \right)^2 \right] \right) \quad (4)$$

Bu bağıntıda f frekansı, W hat genişliğini, Z_c hattın karakteristik empedansını, Δ yüzey pürüzlülüğünü, δ_s yüzey derinliğini ifade etmektedir. Bu ifadedeki karakteristik empedansın hesaplanması (5) ve (6) bağıntıları ile mümkündür [4].

$$Z_c = \frac{120\pi}{2\pi\sqrt{\varepsilon_{re}}} \ln \left[\frac{F}{u} + \sqrt{1 + \left(\frac{2}{u}\right)^2} \right] \quad (5)$$

$$F = 6 + \left(2\pi - 6 \right) \exp \left[- \left(\frac{30.666}{u} \right)^{0.7528} \right] \quad (6)$$

Bir diğer güç kaybı ise dielektrik kaybı olarak belirtilmişti ve (7) bağıntısı ile hesaplanabilir. Bu bağıntıda f frekansı, c ışık hızını, $\tan \delta$ kayıp çarpanını, ε_r tabanın bağıl dielektrik sabitini, ε_{re} tabanın etkin bağıl dielektrik sabitini belirtmektedir [4].

$$\alpha_D = 27.3 \frac{f \varepsilon_r (\varepsilon_{re} - 1) \tan \delta}{\sqrt{\varepsilon_{re}} (\varepsilon_r - 1) c} \quad (7)$$

2. Dielektrik Tabanlar ve Özellikleri

Günümüzde dielektrik tabanlar epoksi-camyünü (FR4) tabanlar ve teflon-seramik-hidrokarbon tabanlar olarak 2 genel başlıkta değerlendirilebilir. Bu kısımda FR4 ve teflon-seramik katkılı tabanlar, başlıklar halinde incelenecektir. Bunlar FR4, R03003, R03010, R04003C, R04350B, RT/Duroid 5880, RT/Duroid 6002, RT/Duroid 6006 tabanlarıdır.

2.1. FR4

FR4 kısaltması, İngilizce “fire retardent level-4” yani “alev geciktirici seviye-4” manasına gelen bir sınıflandırmadan gelen bir terimdir. Cam yünü ve epoksi reçine karışımından oluşan FR4 tabanlar, elektronik devre kartı üretimi için taban malzemesi olarak çok yaygın biçimde kullanılmaktadır. Bu malzemenin en yüksek çalışma sıcaklığı üretim aşamalarına göre değişebilmektedir. Üreticiler arasında ve modeller arasında değişmekle beraber 130°C’den 180°C’ye kadar cam geçiş sıcaklıklarına sahip olabilir. Bu sıcaklığın yüksek olması, taban malzemesinin daha yüksek sıcaklığa sahip ortamlarda bütünlüğünü koruyabilmesi için gereklidir.

FR4 malzemenin bağıl dielektrik sabiti, tüm frekanslar için sabit olmamakla beraber 4.4 olarak verilmektedir. Bu dielektrik malzemenin kayıp çarpanı 0.02'dir. FR4 malzemenin özellikleri Tablo 1'de verilmiştir.

Tablo 1. FR4 Özellikleri

Özellik	Değer	Birim
Dielektrik Sabiti (ϵ_r)	4.4	-
Kayıp Çarpanı ($\tan \delta$)	0.02	-
Dielektrik Sabitinin Isıl Katsayısı	-	ppm/°C
Isıl iletkenlik	-	W/m/K
Cam Geçiş Sıcaklığı	130	°C

2.2. RO3003

RO3003 yüksek frekanslı dielektrik taban malzemeleri, ticari mikrodalga ve RF uygulamalarında kullanılmak üzere tasarlanmış seramik dolgulu politetraetilflore (PTFE) kompozitlerdir. Bu dielektrik taban, rekabetçi fiyatlarla olağanüstü elektrik ve mekanik kararlılık sunmak için tasarlanmıştır. RO3003 tabanlar, seçilen dielektrik sabitinden bağımsız olarak tutarlı mekanik özelliklere sahip seramik dolgulu PTFE bazlı devre malzemeleridir. Bu, tasarımcının, çarpılma veya güvenilirlik sorunlarıyla karşılaşmadan, ayrı katmanlar için farklı dielektrik sabit malzemeler kullanan çok katmanlı devre tasarımları geliştirmesine de olanak tanır. RO3003 tabanın dielektrik sabiti 3, kayıp tanjantı 0.0010, dielektrik sabitinin sıcaklığa göre değişimi ise -3 ppm/°C olarak verilmiştir. Isıl iletkenliği 0.50 W/m/K olan malzemenin 500°C sıcaklığa kadar formunu koruyarak çalışabilmesi mümkündür. RO3003 malzemenin bazı özellikleri Tablo 2'de verilmiştir [5].

Tablo 2. RO3003 Özellikleri

Özellik	Değer	Birim
Dielektrik Sabiti (ϵ_r)	3	-
Kayıp Çarpanı ($\tan \delta$)	0.0010	-
Dielektrik Sabitinin Isıl Katsayısı	-3	ppm/°C
Isıl iletkenlik	0.50	W/m/K
Cam Geçiş Sıcaklığı	500	°C

2.3. RO3010

RO3000 ailesinin bir parçası olan RO3010 dielektrik taban, daha yüksek dielektrik sabiti gereksinimlerinde sıklıkla kullanılan yüksek başarılı bir malzemedir. RO3003 gibi seramik dolgulu PTFE malzemeden oluşan yapısı ile yüksek frekans devre tasarımlarında kullanılmak üzere geliştirilmiştir. Dielektrik sabitinin 11.20 olması, tasarımcıya, fiziki boyutları daha küçük devreler tasarlama imkanı sunmaktadır. Bu durum seri üretim için maliyet açısından fayda sağlayabilir. RO3010 malzemenin bağıl dielektrik sabiti 11.20, kayıp çarpanı 0.0022, dielektrik sabitinin sıcaklığa göre değişimi ise -395 ppm/°C olarak verilmiştir. Isıl iletkenliği 0.95 W/m/K olan tabanın 500°C sıcaklığa kadar formunu koruyarak çalışabilmesi mümkündür. Bu ısıl iletkenlik değeri, birçok seramik dolgu içermeyen PTFE taban malzemelerinden yüksektir ve bu durum yüksek güç uygulamalarında ısının dağıtılması açısından üstünlük sağlayabilecektir. RO3010 dielektrik taban yüksek ısıl iletkenlik değerini seramik dolguya borçludur. RO3010 malzemenin bazı özellikleri Tablo 3'te verilmiştir [6].

Tablo 3. RO3010 Özellikleri

Özellik	Değer	Birim
Dielektrik Sabiti (ϵ_r)	11.20	-
Kayıp Çarpanı ($\tan \delta$)	0.0022	-
Dielektrik Sabitinin Isıl Katsayısı	-395	ppm/°C
Isıl iletkenlik	0.95	W/m/K
Cam Geçiş Sıcaklığı	500	°C

2.4. RO4003C

RO4003C dielektrik taban hidrokarbon-seramik malzemeden geliştirilmiş yüksek başarılı ve düşük maliyetli bir malzemedir. PTFE içeren tabanların aksine elektronik devre kartı olarak işlenmesi tipik FR4 taban ile kart üretimi sürecine benzerlikler gösterir ve daha basittir. Bağıl dielektrik sabiti 3.55 ve kayıp çarpanı 0.0027'dir. RO4003C malzemenin dielektrik sabitinin sıcaklığa göre değişimi ise +40 ppm/°C olarak verilmiştir. Isıl iletkenliği 0.71 W/m/K olan tabanın 425°C sıcaklığa kadar formunu koruyarak çalışabilmesi mümkündür. Bu ısıl iletkenlik değeri, birçok seramik dolgu içermeyen PTFE taban malzemelerinden yüksektir ve bu durum yüksek

güç uygulamalarında ısının dağıtılması açısından üstünlük sağlayabilecektir. R04003C malzemenin bazı özellikleri Tablo 4'te verilmiştir [7].

Tablo 4. R04003C Özellikleri

Özellik	Değer	Birim
Dielektrik Sabiti (ϵ_r)	3.55	-
Kayıp Çarpanı ($\tan \delta$)	0.0027	-
Dielektrik Sabitinin Isıl Katsayısı	+40	ppm/°C
Isıl iletkenlik	0.71	W/m/K
Cam Geçiş Sıcaklığı	425	°C

2.5. R04350B

R04350B dielektrik taban hidrokarbon-seramik malzemeden geliştirilmiş yüksek başarılı ve düşük maliyetli bir malzemedir. PTFE içeren tabanların aksine elektronik devre kartı olarak işlenmesi tipik FR4 tabanın işlenmesi ile benzerlikler gösterir ve daha basittir. Aynı aileden gelen R04003 ile farkı FR4 gibi yanmaya karşı gösterdiği yüksek dirençtir. Bağlı dielektrik sabiti 3.66 ve kayıp çarpanı 0.0037'dir. R04350B malzemenin dielektrik sabitinin sıcaklığa göre değişimi ise +50 ppm/°C olarak verilmiştir. Isıl iletkenliği 0.69 W/m/K olan tabanın 390°C sıcaklığa kadar formunu koruyarak çalışabilmesi mümkündür. Bu ısıl iletkenlik değeri, birçok seramik dolgu içermeyen PTFE taban malzemelerinden yüksektir ve bu durum yüksek güç uygulamalarında ısının dağıtılması açısından üstünlük sağlayabilecektir. R04350B malzemenin bazı özellikleri Tablo 5'te verilmiştir [8].

Tablo 5. R04350B Özellikleri

Özellik	Değer	Birim
Dielektrik Sabiti (ϵ_r)	3.66	-
Kayıp Çarpanı ($\tan \delta$)	0.0037	-
Dielektrik Sabitinin Isıl Katsayısı	+50	ppm/°C
Isıl iletkenlik	0.69	W/m/K
Cam Geçiş Sıcaklığı	390	°C

2.6. RT/Duroid 5880

RT/Duroid 5880 cam-mikrofiber takviyeli PTFE tabanlar, yüksek frekans mikroşerit devrelerini geliştirmek için tasarlanmıştır. Rastgele yönlendirilmiş mikroelyaflar, çok yüksek doğrulukla dielektrik sabit bütünlüğü sağlar. RT/Duroid 5880 tabanların dielektrik sabiti üretilen her panelde aynıdır ve geniş bir frekans aralığında sabittir. Düşük kayıp çarpanı RT/Duroid 5880 laminatların kullanılabilirliğini Ku-bandına ve üstüne kadar genişletir.

RT/Duroid 5880 tabanlar kolayca kesilir ve şekillendirilmek üzere işlenebilir. Normal veya baskılı devrelerde veya kaplama kenarlarında ve deliklerinde kullanılan sıcak veya soğuk tüm solventlere ve reaktiflere karşı dayanıklıdır. Normalde 8 ile 70µm kalınlıklı elektroçöktürme bakır veya haddelenmiş bakır folyo ile kaplanabilir. Alüminyum, bakır veya pirinç levha ile kaplama da tercih edilebilir. RT/Duroid 5880 taban siparişi verirken, kalınlık, tolerans, haddelenmiş, elektroçöktürme veya ters işlenmiş bakır folyo ve gerekli bakır folyo ağırlığını belirtmek önemlidir.

RT/Duroid 5880'in güç kaybı 0.0009'dur ve bu değer, diğer benzer dielektrik tabanlar arasında en düşük değerdir. Dielektrik sabitinin ısıl katsayısı -125 ppm/°C olarak verilmiştir. Isıl iletkenlik olarak seramik dolgu içermediğinden dolayı 0.20 W/m/K değerine sahiptir ve 500°C cam geçiş sıcaklığına sahiptir. RT/Duroid 5880 tabanın bazı özellikleri Tablo 6'da verilmiştir [9].

Tablo 6. RT/Duroid 5880 Özellikleri

Özellik	Değer	Birim
Dielektrik Sabiti (ϵ_r)	2.2	-
Kayıp Çarpanı ($\tan \delta$)	0.0009	-
Dielektrik Sabitinin Isıl Katsayısı	-125	ppm/°C
Isıl iletkenlik	0.20	W/m/K
Cam Geçiş Sıcaklığı	500	°C

2.7. RT/Duroid 6002

RT/Duroid 6002 dielektrik taban, karmaşık mikrodalga yapılarının tasarımında gerekli üstün elektriksel ve mekanik özellikler sunan 2.94 dielektrik sabiti ile ilk düşük kayıp ve düşük dielektrik sabitine sahip tabandır. Dielektrik sabitinin ısı katsayısı -55°C ile $+150^{\circ}\text{C}$ arasında $+12$ ppm/ $^{\circ}\text{C}$ ile son derece düşüktür, bu da kuvvetlendirici, filtre, osilatör ve gecikme hatlarının tasarımcılarına günümüzün zorlu uygulamalarında ihtiyaç duyulan elektriksel kararlılığı sağlar. Kayıp çarpanı 0.0012 olan RT/Duroid 6002, çok düşük kayıplı tabanlar arasında yer alır ve 0.60 W/m/K ısı iletkenliği ile zor çevre şartlarında kullanım için tercih edilebilir. RT/Duroid 6002 tabanın bazı özellikleri Tablo 7'de verilmiştir [10].

Tablo 7. RT/Duroid 6002 Özellikleri

Özellik	Değer	Birim
Dielektrik Sabiti (ϵ_r)	2.94	-
Kayıp Çarpanı ($\tan \delta$)	0.0012	-
Dielektrik Sabitinin Isıl Katsayısı	+12	ppm/ $^{\circ}\text{C}$
Isıl iletkenlik	0.60	W/m/K
Cam Geçiş Sıcaklığı	500	$^{\circ}\text{C}$

2.8. RT/Duroid 6006

RT/Duroid 6006 dielektrik tabanlar, yüksek dielektrik sabiti gerektiren RF ve mikrodalga devre uygulamaları için tasarlanmış seramik-PTFE karışımı malzemelerdir. RT/Duroid 6006 taban 6.15 dielektrik sabiti değerine sahiptir ve bu tabanlar imalat kolaylığı ve kullanım kararlılığına sahiptir. Yüksek dielektrik sabitinden faydalanarak devre boyutlarını küçültmekle beraber 0.0027 gibi nispeten düşük kayıp çarpanı ile dikkat çekmektedir. Dielektrik sabitinin ısı katsayısı -410 ppm/ $^{\circ}\text{C}$ olmakla beraber ısı iletkenliği 0.49 W/m/K'dir. Dielektrik sabiti, yüksek sıcaklık değişimine maruz kalan uygulamalarda yüksek değişim gösterebilir. RT/Duroid 6006 tabanın bazı özellikleri Tablo 8'de verilmiştir [11].

Tablo 8. RT/Duroid 6006 Özellikleri

Özellik	Değer	Birim
Dielektrik Sabiti (ϵ_r)	6.45	-
Kayıp Çarpanı ($\tan \delta$)	0.0027	-
Dielektrik Sabitinin Isıl Katsayısı	-410	ppm/ $^{\circ}\text{C}$
Isıl iletkenlik	0.49	W/m/K
Cam Geçiş Sıcaklığı	500	$^{\circ}\text{C}$

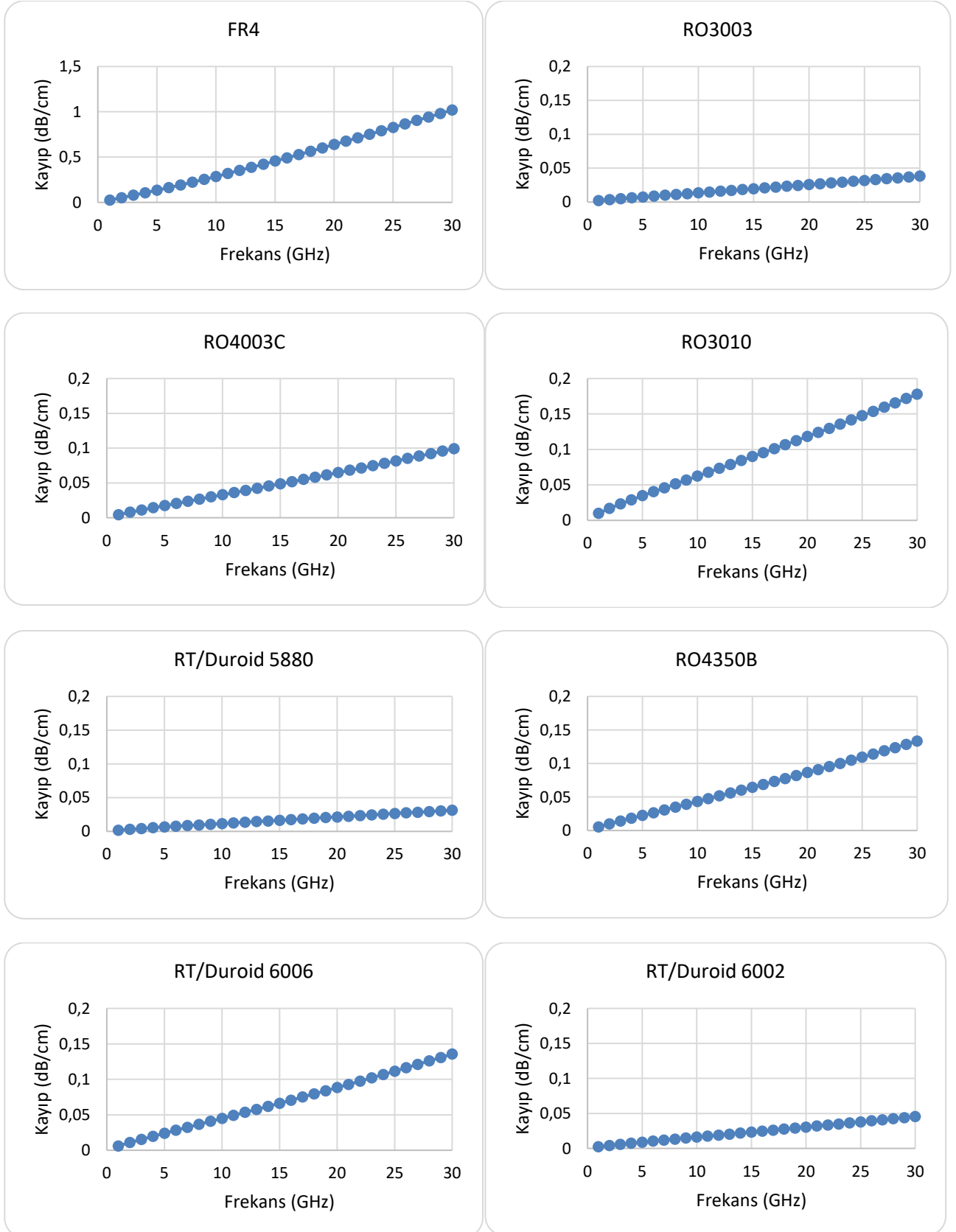
3. Mikroşerit Hat Kayıplarının Hesaplanması ve Karşılaştırma

8 farklı dielektrik taban kullanılarak (1)-(7) denklemleri ile 50Ω karakteristik empedansa sahip mikroşerit hat tasarımları yapılmıştır. Her tabanın dielektrik sabiti farklı olduğundan aynı empedansa sahip hatların genişlikleri farklı olmuştur. Hesaplamalarda dielektrik taban iletken kalınlığı 35 μm elektroçöktürme bakır kaplama olarak seçilmiştir. Denklem (4) ile iletken güç kaybı, denklem (7) ile dielektrik güç kaybı hesaplanmıştır. Bu 2 parametrenin toplamı, toplam güç kaybını vermektedir. Her taban ve frekans için etkin dielektrik sabiti hesabı ayrı ayrı yapılmıştır. Bağlı dielektrik sabitinin 1-30 GHz frekans bandında sabit olduğu kabul edilmiştir ve bu kabul ile etkin dielektrik sabiti hesaplanmıştır. Tüm tabanların kalınlığı 0.508 mm olarak seçilmiştir. Bu kalınlık sıklıkla kullanılan standart bir kalınlıktır.

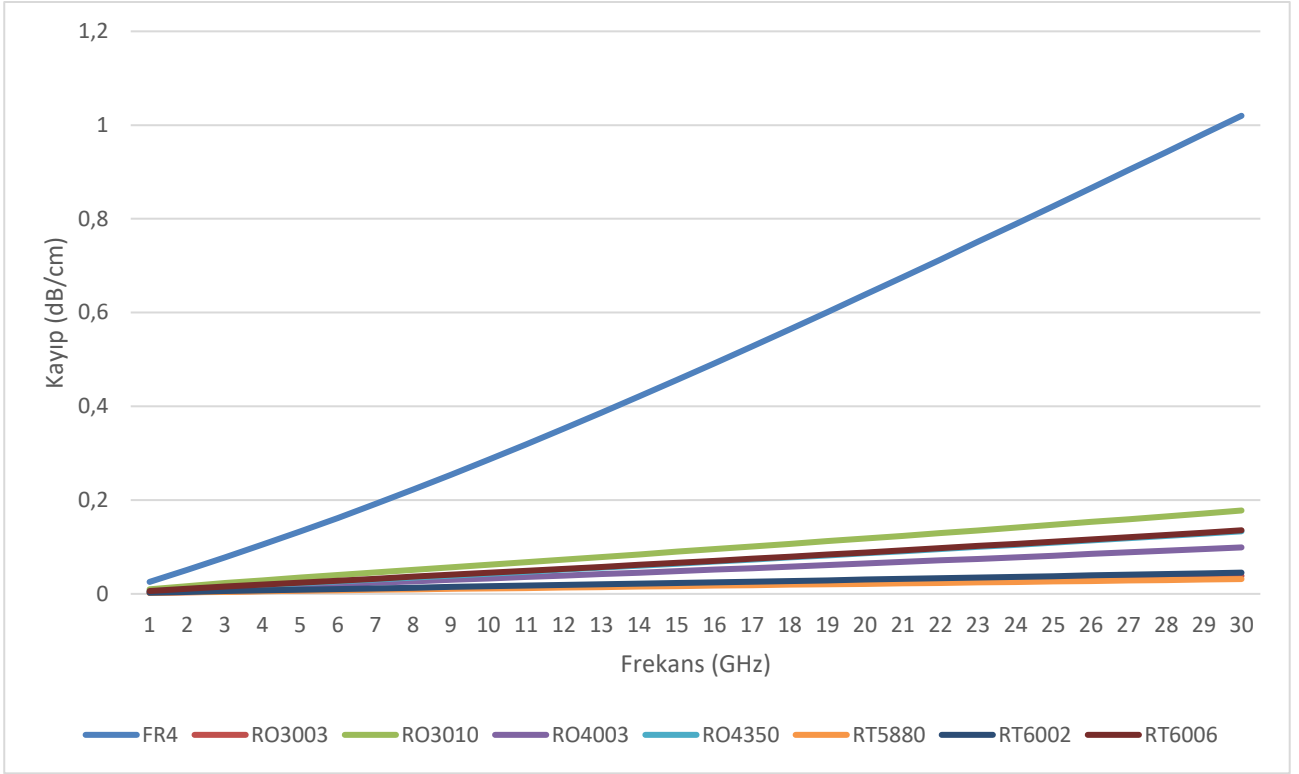
Şekil-2'de ayrı grafikler halinde tüm dielektrik tabanların kayıpları cm başına dB birimi ile 1-30 GHz frekans bandı boyunca verilmiştir. Hesaplamalara göre FR4 dielektrik taban, diğer seramik-teflon-hidrokarbon katkılı dielektrik tabanlara göre oldukça yüksek güç kaybına sahip olduğu görülmüştür. RO3003, RO3010, RO4003C, RO4350B, RT/Duroid 5880, RT/Duroid 6002 ve RT/Duroid 6006 tabanların kayıpları birbirlerine daha yakındır ve cm başına 0.005 ile 0.2 dB arasında değişmektedir.

Bu makale kapsamında incelenen dielektrik tabanların tamamının 1-30 GHz frekans bandındaki toplam güç kayıpları aynı grafikte karşılaştırma amaçlı olarak Şekil-3'te verilmiştir. Grafik incelendiğinde FR4 dielektrik tabanın toplam güç kaybının seramik-teflon-hidrokarbon katkılı diğer tabanlardan ayrıştığı gözlenmektedir.

30 GHz frekansında FR4 dielektrik tabanın kullanımı, cm başına 1 dB güç kaybı getireceği çarpıcı bir sonuçtur. Keza 5 GHz'de yaklaşık 0.1 dB/cm, 10 GHz'de yaklaşık 0.3 dB/cm, 20 GHz'de 0.6 dB/cm kayıpların olacağı hesaplanmıştır. En düşük kayıplı taban olan RT/Duroid 5880 ise 5 GHz'de yaklaşık 0.01 dB/cm, 10 GHz'de yaklaşık 0.02 dB/cm, 20 GHz'de 0.03 dB/cm ve 30 GHz'de 0.04 dB/cm olarak hesaplanmıştır.

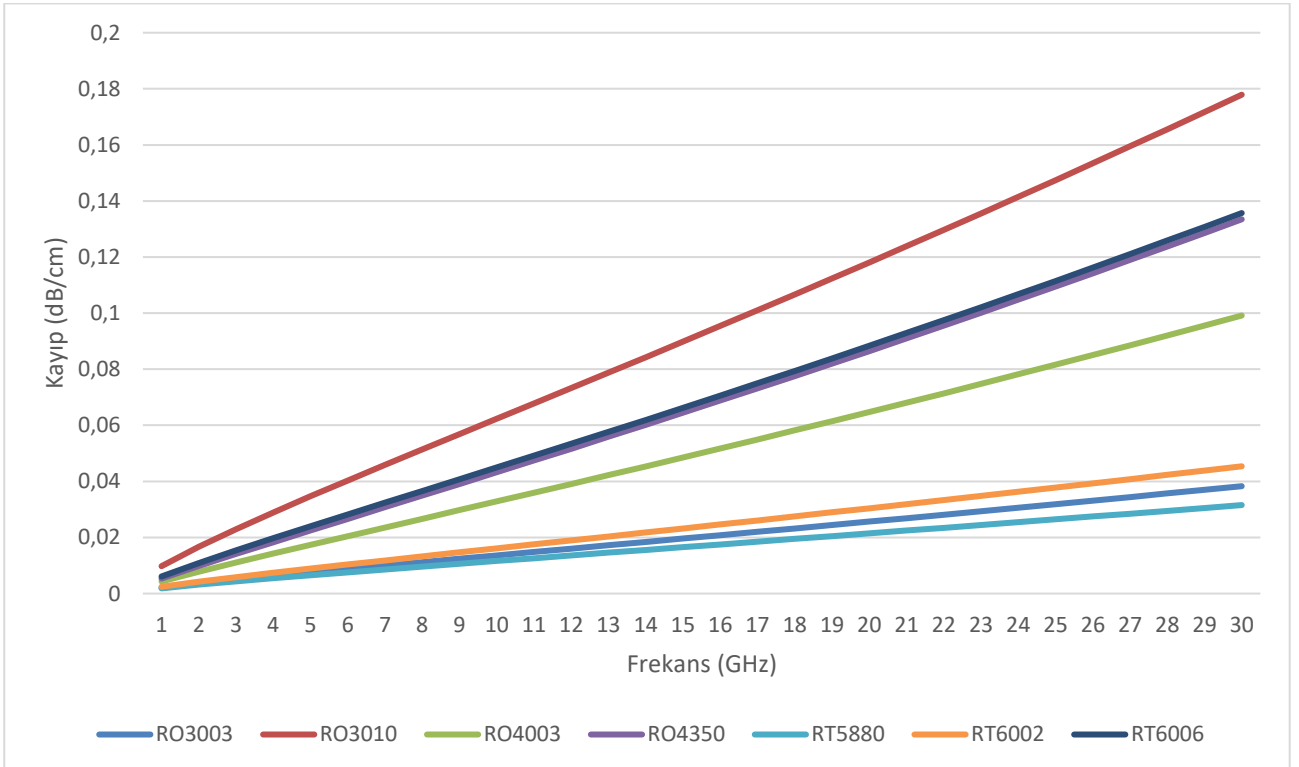


Şekil 2. Çeşitli dielektrik tabanlarda tasarlanan 50Ω mikroserit hatların 1-30 GHz frekans bandında güç kayıpları



Şekil 3. FR4 ve diğer dielektrik tabanların kayıplarının frekansla değişimi

FR4 dielektrik tabana göre çok daha az güç kaybına sahip diğer seramik ve PTFE katkıli tabanların kendi aralarında güç kayıpları Şekil 4'te verilmiştir. Bütün frekanslarda en düşükten en yükseğe güç kaybı RT/Duroid 5880, RO3003, RT/Duroid 6002, RO4003, RO4350, RT/Duroid 6006, RO3010 şeklinde olmuştur. Güç kaybını artıran temel faktörün kayıp çarpanı olmasıyla birlikte dielektrik sabitinin artmasının da toplam güç kaybını artırdığı dikkat çekmiştir.



Şekil 4. RO ve RT serisi dielektrik tabanların güç kayıplarının frekansla değişimi**4. Tartışma ve Sonuç**

Bu araştırma makalesinde 1-30 GHz frekans bandında, 0.508 mm kalınlığında RT/Duroid 5880, RO4003C, RO4350B, RO3003, RO3006, RO3010, RT/Duroid 6002, RT/Duroid 6006 ve FR4 dielektrik tabanları kullanılarak tasarlanan 50Ω karakteristik empedansa sahip mikroşerit hattın güç kaybı hesaplamaları yapılmış ve dielektrik tabanların karşılaştırmaları verilmiştir. Araştırmanın sonunda şu sonuçlara ulaşılmıştır.

- Dielektrik taban malzemesinin kayıp çarpanı, frekans yükseldikçe artırarak mikroşerit hat üzerindeki işaretin maruz kaldığı dielektrik kaybının yükselmesine neden olmaktadır.
- 1-30 GHz frekans bandında en düşük kayıp, RT/Duroid 5880 dielektrik taban tarafından gösterilmiştir. Aynı zamanda en düşük kayıp çarpanına sahip olan dielektrik taban da RT/Duroid 5880'dir. Bu yönüyle güç kaybı toleransı olmayan RF ve mikrodalga devre tasarımlarında ilk sırada tercih edilebilir.
- En yüksek güç kaybı tüm frekans bandı boyunca FR4 taban tarafından sergilenmiştir. Özellikle birkaç GHz üzeri frekanslarda FR4 tabanın neden olduğu kaybın çok yüksek olması sebebiyle, bu taban malzemesi ile yüksek frekans devre tasarımı gerçekleştirmenin tercih edilmesi durumunda karşılaşılabilecek yüksek güç kaybı hesaba katılmalıdır.
- Dielektrik sabiti daha yüksek olan tabanlarda, özellikle dielektrik kaybı artacaktır ve bu da topla güç kaybını artıran bir faktör olacaktır. Bununla beraber dielektrik sabitinin artırılması sonucunda devrenin boyutlarının küçülmesi sağlanacağından, oluşan güç kaybının bir miktar tolere edilmesi sağlanabilir. Dielektrik taban seçimi yapılırken bu durum göz önüne alınmalıdır.
- Dielektrik sabitinin etkin değeri, frekans yükseldikçe katalog verisine yaklaşmaktadır.
- Mikroşerit hat üzerinden ilerleyen dalganın iletken ve dielektrik kaybı toplamı yaklaşık olarak toplam güç kaybını vermektedir.
- RT/Duroid 5880 en düşük güç kaybını sağlayan dielektrik taban olmakla beraber, ısıl iletkenlik ihtiyacı ön plana alınacak ise, RO3003 benzer dielektrik sabiti ve güç kaybı ile RF ve mikrodalga uygulamalarında iyi bir alternatif olabilir.

Kaynakça

- [1] Pozar, D. M. 2011. Microwave Engineering. 4th, edition. Wiley. Boston, 732s.
- [2] Hong, J. S. 2011. Microstrip Filters for RF and Microwave Applications. 2nd, edition. Wiley. New Jersey, 635s.
- [3] Edwards, T. C ve Steer M. B. 2008. Foundations for Microstrip Circuit Design. 4th, edition. Wiley. United Kingdom, 659s.
- [4] Garg, R., Bahl I. ve Bozzi M. 2013. Microstrip Lines and Slotlines. 3rd, edition. Artech House. United States of America, 589s.
- [5] Anonim, 2020. RO3003 Series Laminates. <https://rogerscorp.com/advanced-connectivity-solutions/ro3000-series-laminates/ro3003-laminates> (Erişim Tarihi: 06.05.2020).
- [6] Anonim, 2020. RO3010 Series Laminates. <https://rogerscorp.com/advanced-connectivity-solutions/ro3000-series-laminates/ro3010-laminates> (Erişim Tarihi: 06.05.2020).
- [7] Anonim, 2020. RO4003 Series Laminates. <https://rogerscorp.com/advanced-connectivity-solutions/ro4000-series-laminates/ro4003c-laminates> (Erişim Tarihi: 06.05.2020).
- [8] Anonim, 2020. RO4350 Series Laminates. <https://rogerscorp.com/advanced-connectivity-solutions/ro4000-series-laminates/ro4350b-laminates> (Erişim Tarihi: 06.05.2020).
- [9] Anonim, 2020. RT/Duroid 5880 Series Laminates. <https://rogerscorp.com/advanced-connectivity-solutions/rt-duroid-laminates/rt-duroid-5880-laminates> (Erişim Tarihi: 06.05.2020).
- [10] Anonim, 2020. RT/Duroid 6002 Series Laminates. <https://rogerscorp.com/advanced-connectivity-solutions/rt-duroid-laminates/rt-duroid-6002-laminates> (Erişim Tarihi: 06.05.2020).
- [11] Anonim, 2020. RT/Duroid 6006 and 6010.2LM Series Laminates. <https://rogerscorp.com/advanced-connectivity-solutions/rt-duroid-laminates/rt-duroid-6006-and-6010-2lm-laminates> (Erişim Tarihi: 06.05.2020).

Elektromanyetik Alan Etkili Fitzhugh-Nagumo Nöron Modeline Rotasyon Kontrol İşleminin Uygulanması

Nimet KORKMAZ^{ID*1}, Bekir ŞIVGA^{ID*2}

*^{1,2}Kayseri Üniversitesi Mühendislik Mimarlık ve Tasarım Fakültesi
Elektrik ve Elektronik Mühendisliği KAYSERİ

(Alınış / Received: 20.04.2022, Kabul / Accepted: 01.08.2022, Online Yayınlanma/ Published Online: 23.08.2022)

Anahtar Kelimeler

Elektromanyetik Alan,
Biyolojik Nöron Modeli,
Fitzhugh-Nagumo,
Rotasyon Kontrol,
Dallanma Diyagramı,
Lyapunov Üsteli

Öz: Biyolojik nöron modellerinin kararlılık analizlerinin yapılması ve dinamik davranışlarının kontrolü üzerine literatürde pek çok çalışma mevcuttur. Son zamanlarda biyolojik sistemler, lazer sistemleri, kaotik sistemler ve nöral sistemler gibi doğrusal olmayan tanımlamalara sahip yapılarda, rotasyonel dinamikler gözlemlenmektedir. Bu rotasyonel dinamiklerin modellenmesi üzerine çalışmalar yapılmaktadır. Burada da elektromanyetik alan etkili Fitzhugh-Nagumo nöron modelinin hücre zarı potansiyeli ve transmembrane akımlarının oluşturduğu çekerlerin rotasyon kontrolünün Euler Rotasyon Teoremi kullanılarak yapılması amaçlanmaktadır. Bu çalışmada ele alınan ilgili model, elektromanyetik alan tanımlamasının Fitzhugh- Nagumo Nöron Modeline ilave bir durum değişkeni olarak eklenmesi ile tanımlanmakta ve bu yönüyle diğer modellerden farklılaşmaktadır. Modeldeki harici uyaran bir sinüzoidal kaynak şeklinde seçilerek, kaynağın genliğinin nöron modeli dinamiklerine etkisi; dallanma diyagramından, zaman domeni gösterimlerinden ve Lyapunov üstellerinden yararlanılarak gözlemlenecektir. Rotasyon kontrol işleminin başarımları, modeldeki harici akım kaynağının farklı genlik değerleri için kaydedilen nümerik simülasyon sonuçları ile paylaşılacaktır.

The Application of the Rotation Control Process to the Electromagnetic Field-Effect Fitzhugh-Nagumo Neuron Model

Keywords

Electromagnetic Field,
Biological Neuron Model,
Fitzhugh-Nagumo,
Rotation Control,
Bifurcation Diagram,
Lyapunov Exponent

Abstract: There are many studies about the stability analysis of the biological neuron models and the control of their dynamic behavior in the literature. Recently, the rotational dynamics have been observed in structures, which have nonlinear definitions, such as biological systems, laser systems, chaotic systems and neural systems. Several studies are carried out about the modeling of these rotational dynamics. Here, it is aimed to control the rotation of the attractors, which are formed by the membrane potential and the transmembrane currents of the electromagnetic field-effect Fitzhugh-Nagumo neuron model and it is used the Euler Rotation Theorem. The electromagnetic field-effect Fitzhugh-Nagumo neuron model differs from other models with its following aspect. This model has an additional state variable that describes the electromagnetic field effect. The effects of the amplitude of the external stimulus on the dynamics of this neuron model are observed by utilizing the bifurcation diagram, time domain representations and Lyapunov exponents and this external stimulus is selected as a sinusoidal source. The performance results of the rotation control process are shared with the numerical simulation results that are recorded for the different amplitude values of the external current source in this model.

*İlgili Yazar, email: nimetkorkmaz@kayseri.edu.tr

1. Giriş

Bir nöron hücresi; bünyesinde sodyum, potasyum, kalsiyum ve benzeri iyon yükleri barındırmaktadır. Bu iyonların bir kısmı hücre içine difüzyon yolu ile iletilirken, bir kısmı sadece hücre zarı üzerinde bulunan voltaj-kapılı iyon kanallarından geçerek hücre zarı yüzeyinde harici akımlar oluşturmaktadır. Hücre zarı yükler düzgün dağılım sağladığı yüklü bir yüzey ya da plaka olarak kabul edilebilir. Bahsedilen iyonların yüklü bir plaka gibi düşünülen zar yüzeyinden geçişlerinde, hücre zarı potansiyelinde dalgalanmalar meydana getirmektedir. Zamana bağlı değişen bir voltaj varsa zamanla değişen bir akım karakteristiğinden, dolayısı ile bir akı değişiminden de bahsetmek mümkündür. Bu bakış açısı ile literatürdeki çalışmaların bir kısmında, hücre zarı yüzeyinde oluşan iyon akışlarının yüklü bir plaka gibi düşünülen hücre zarında elektrik alan indükleyebileceği görüşü üzerine araştırmalar yapılmaktadır.

Bu çalışmalarda nöronun elektrofizyolojik nöral aktivitelerinin zamanla değişen bir elektromanyetik alan dağılımı indükleyebileceğini önerilmektedir. Yapılan çalışmaların bir kısmında nöronlar üzerinde indüklenebileceği düşünülen manyetik akı ifadesi; kayıp devre elemanı olarak 1970'lerde Leon Chua tarafından tanımlan ve iyon yükü ile manyetik akı ifadelerini kullanarak tanımlanan memristör elemanı ile ilişkilendirilmiştir [1]. Böylece, memristör elemanı ile nöron modeli tanımlamaları birleştirilerek oluşturulan alternatif modellerin ele alındığı çalışmalar kaydedilmiştir [2-4]. Bu modellerde Hodgkin-Huxley, FitzHugh-Nagumo ve Hindmarsh-Rose gibi biyolojik nöron modelleri kullanılmıştır [5-7]. Örneğin yoğun elektromanyetik radyasyon ile ani kalp rahatsızlıkları ilişkilendirilerek nöral dinamikler gözlemlenmiş ve bu modellemede elektromanyetik radyasyon FitzHugh-Nagumo modelinin harici bir uyararı olarak ele alınmıştır [8]. Bir kardiyak modelinde elektromanyetik alana maruz bırakılan sistemdeki nöronların elektromanyetik radyasyon nedeni ile sükûnet durumuna geçtiği tespit edilmiştir [9]. Ayrıca bu sistemler çeşitli donanımlarla taklit edilerek biyolojiden esinlenilmiş gerçekleştirilmeye de ilham kaynağı olmuştur [10-13].

Öte yandan, manyetik akı ifadesini memristör elemanı ile ilişkilendirmeksizin; nöron modeline elektromanyetik alanı temsil eden bir durum değişkenini daha ekleyerek, elektromanyetik alanın etkisinin gözlemlenebileceğini öneren çalışmalar da literatürde mevcuttur [14]. Bu çalışmalarda modele eklenen değişkenin etkisinin gözlemlenebilmesi için özdeğer ve Lyapunov üsteli hesaplama ya da dallanma diyagramlarının çizdirilmesi gibi çeşitli kararlılık analizleri yapılmaktadır [15, 16]. Bu sistemlere uygulanan çeşitli kontrol yöntemleri ile ilgili sistemlerin dinamik davranışları da kontrol edilebilmektedir [17-19]. Son zamanlarda; biyolojik sistemlerde, kaotik sistemlerde, akışkanlar dinamiğinde, lazer sistemlerinde ve nöral sistemlerde rotasyonlu çeker yapıları ile karşılaşmaktadır [20-22]. Elektromanyetik alan gibi vektörel bir tanımlamanın dâhil edildiği bir biyolojik nöron modelinin çeker yapısının rotasyon kontrolünün yapılması da sistem dinamiklerinin kontrol edilebildiği çalışmalara önemli katkılar sağlayacaktır.

Bu çalışmada, elektromanyetik alan ifadesinin ilave bir durum değişkeni olarak tanımlandığı ve bu tanımlamanın FitzHugh-Nagumo nöron modeline adapte edildiği, literatürde mevcut bir biyolojik nöron modeli üzerinde durulmaktadır. Elektromanyetik alan tanımlı FitzHugh-Nagumo nöron modelinin Euler Rotasyon Teoremi kullanılarak çeker faz açısının kontrolünün yapılması amaçlanmaktadır. İlgili modelin çeker yapısı; hücre zarı potansiyelini ve transmembrane akımını temsil eden durum değişkenlerinin faz portresi çizdirilerek gözlemlenmektedir. Nörona tatbik edilen harici uyarının karakteristiği bir sinüzoidal dalga şeklinde seçilir. Harici kaynağın genlik değeri değişiminin nöron dinamiklerine etkisinin gözlemlenmesi için dallanma diyagramından ve Lyapunov üstellerinden yararlanılmaktadır. Ayrıca farklı genlik değerleri için çizdirilen faz portresi gösterimleri ile hem dallanma diyagramı ve Lyapunov Üsteli hesaplamaları doğrulanmaktadır hem de rotasyon kontrollünün başarımları sonuçları gösterilmektedir.

Bu kapsamda, Bölüm 2'de elektromanyetik alan tanımlı FitzHugh-Nagumo nöron modelinin tanıtılmasının ardından, Bölüm 3'te Euler Rotasyon Teoremi'nin ilgili modele uygulanarak çeker faz açısının rotasyon kontrolünün yapılması ile ilgili detaylar ele alınmaktadır. Son bölümde ise elde edilen sonuçlar tartışılmaktadır.

2. Elektromanyetik Alan Tanımlı Fitzhugh-Nagumo Nöron Modeli

Bir nöronun hücre zarı yüzeyinde gerçekleşen elektriksel iletim, zarda meydana gelen hücre içi ve hücre dışı arasındaki iyonik yük geçişlerinden kaynaklanmaktadır. Difüzyon yolu ile iletilen iyonik yüklerin haricinde, belirli bir eşik gerilimi seviyesini aşarak voltaj kapılı iyon kanallarından geçen iyonik yükler; hücre zarı yüzeyinde akım akışına sebep olmaktadır. Bu akım akışı ile voltaj kapılı kanalların iletkenlik özellikleri ilişkilendirilerek hücre zarı yüzeyinde meydana gelen potansiyel farkı, Hodgkin-Huxley tarafından detaylı bir şekilde modellenmiş ve ilerleyen dönemlerde pek çok çalışmaya öncü olmuştur. Son zamanlarda, hücre zarında

meydana gelen bu iyonik akışın bir elektromanyetik alan indükleyebileceği ve bu alanın modellere dâhil edilebileceği üzerine çalışmalar yapılmaktadır. Bu çalışmaların bir kısmında memristör elemanının karakteristiğinden yararlanırken, bir kısmında ise elektromanyetik alan harici bir durum değişkeni olarak kabul edilerek modellenmiştir. Bu çalışmalarda elektromanyetik alan dağılımını tanımlamak için hücre zarı yüzeyi, yük yoğunluğu ' σ ' olan yüklü bir plaka gibi düşünülmüştür. Hücre zarı yüzey alanı ' S ' ve elektriksel yükü ' q ' olan hücre zarı yüzeyi yük yoğunluğu ' $\sigma = q/S$ ' ifadesi ile hesaplanır. Dielektrik sabiti ' ϵ ' olan bir ortamda indüklenen elektromanyetik alan, ' r ' yarıçaplı ve küre biçimli bir nöron tasviri için ' $E = (q/2S\epsilon)$ ' ya da ' $E = (\sigma/2\epsilon)$ ' şeklinde verilir. Yüklü plakalar arasındaki voltaj farkı ise ' $V = rE \cong E\sqrt{S}$ ' şeklinde tanımlanmaktadır. Hodgkin-Huxley tarafından yapılan çalışmada hücre zarında bulunan yağ lipitlerinin iletken iki plaka olarak aradaki boşluğun ise yalıtkan bir malzeme olarak düşünülüp, hücre zarının bir kapasitör elemanı ile ilişkilendirilerek modellenmiştir. Benzer şekilde son zamanlardaki çalışmalarda elektromanyetik alan dağılımı da ortam parametreleri ' p ' ve indüktansla ' L ' ilişkilendirilerek, aşağıdaki genel ifadelerle temsil edilmiştir [14]:

$$C \frac{dV}{dt} = f(V, i, p)$$

$$L \frac{di}{dt} = g(V, i) + rE \quad (1)$$

$$\frac{dE}{dt} = \frac{1}{2\epsilon S} \frac{dq}{dt} = \frac{1}{2\epsilon S} i = ki$$

Burada ' f ' ve ' g ' fonksiyonları hücre zarı potansiyeli ve transmembrane akımlarını temsil eden ve lineer olmayan fonksiyonlardır. Bu tanımlamaların Fitzhugh-Nagumo nöron modeline adapte edilmesi ile elde edilen elektromanyetik alan etkili Fitzhugh-Nagumo nöron modelinin tanımlaması ise Denklem 2'de verilmektedir:

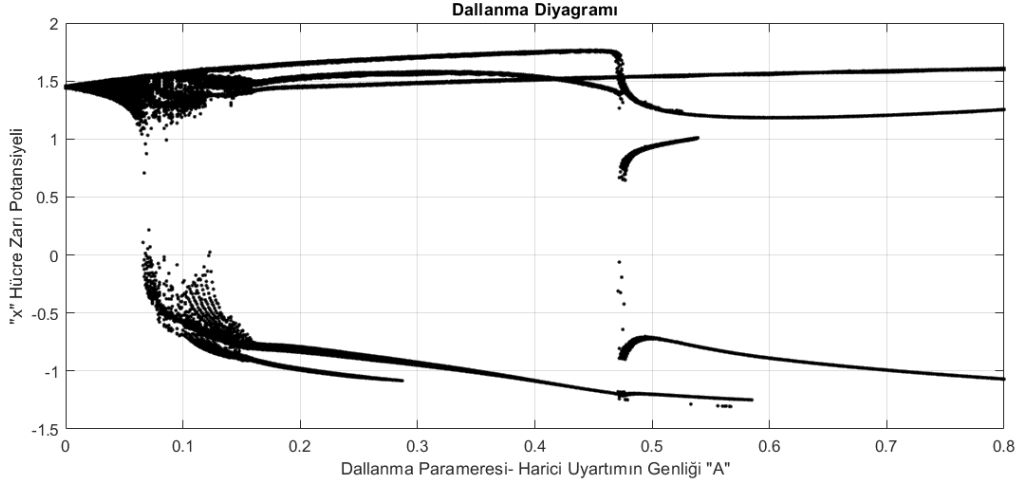
$$\tau \frac{dx}{dt} = x - \frac{x^3}{3} - y + I_{ext}$$

$$\frac{dy}{dt} = ax + by + d + rE \quad (2)$$

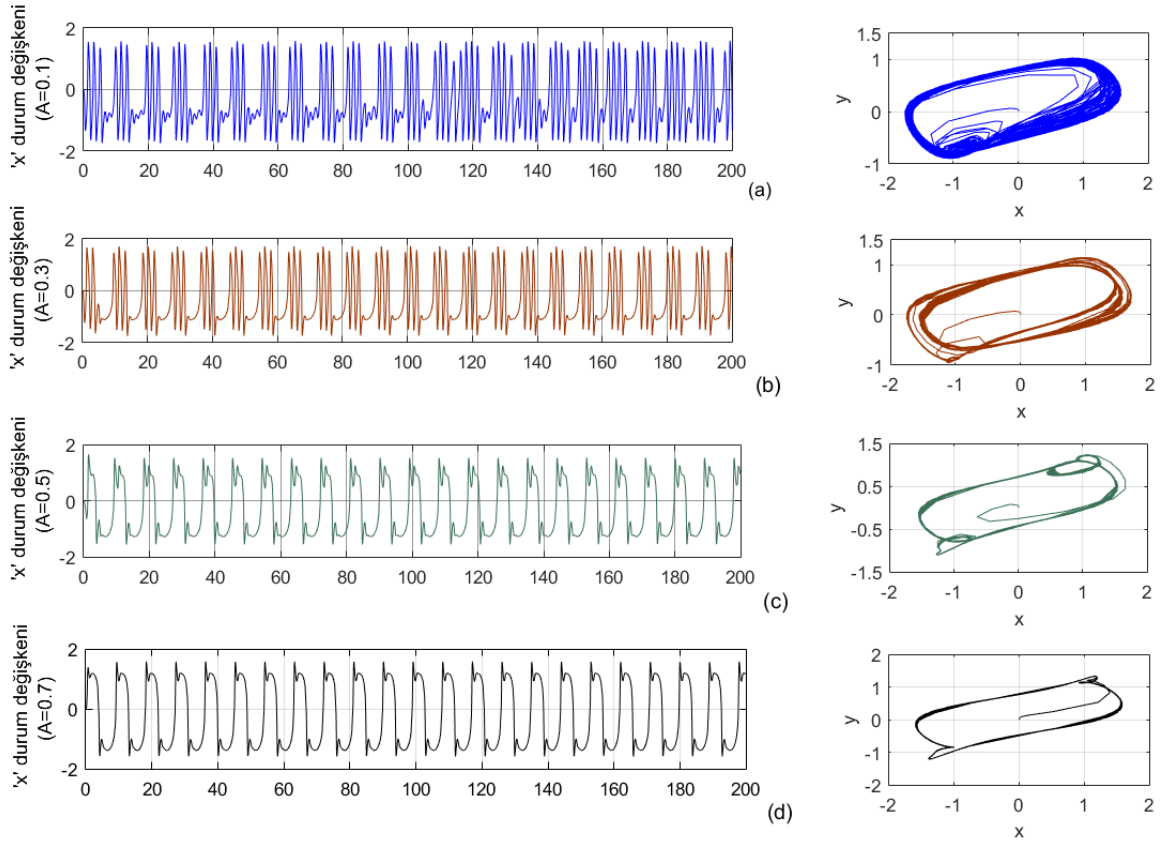
$$\frac{dE}{dt} = ky$$

Denklem 2'de ' x ' durum değişkeni hücre zarı potansiyelini, ' y ' durum değişkeni transmembrane akımını ve ' E ' durum değişkeni elektromanyetik alan dağılımını temsil etmektedir. ' a ', ' b ', ' d ' ve ' τ ' model parametreleri, ' I_{ext} ' ise nörona haricen tatbik edilen uyartımı temsil etmektedir. Elektromanyetik alanın etkisinin gözlemlendiği bu sistemde harici uyartımın karakteristiği sinüzoidal bir kaynak ' $I_{ext} = A \sin(\omega t)$ ' olarak belirlenmiştir. Bu harici uyartımın genliği de fazı da nöron modelinin dinamiklerini etkiler. Harici kaynağın genlik değişiminin elektromanyetik alan etkili Fitzhugh-Nagumo nöron modeli üzerindeki etkisini gösteren dallanma diyagramı sonucu Şekil 1'de verilmektedir. Bu diyagram açısız frekans değeri 0,7 rad/s'de sabit tutularak iki yüz zaman örneği için çizdirilmiştir.

Dallanma diyagramına göre, elektromanyetik alan etkili Fitzhugh-Nagumo nöron modelinin dinamikleri yaklaşık $0 < A < 0,2$ aralığında karmaşık bir desen davranışı sergilemektedir. Yaklaşık $0,2 < A < 0,6$ aralığında kısmen daha az karmaşık, yaklaşık $0,6 < A < 0,8$ aralığında ise belirli sayıda tepe değerine sahip nöral dinamikler sergilemektedir. Buna göre, $A = 0,1$, $A = 0,3$, $A = 0,5$ ve $A = 0,7$ değerleri için yapılan nümerik simülasyon sonuçları sırasıyla Şekil 2a-2d'de verilmektedir. Bahsedilen nöral desenler Şekil 2a-2d'de de gözlemlenmektedir. Aynı değerler için hücre zarı potansiyeline karşılık transmembrane akımının çizdirilmesi ile elde edilen faz portresi görüntüleri de sırasıyla Şekil 2a-2d'de verilmektedir.

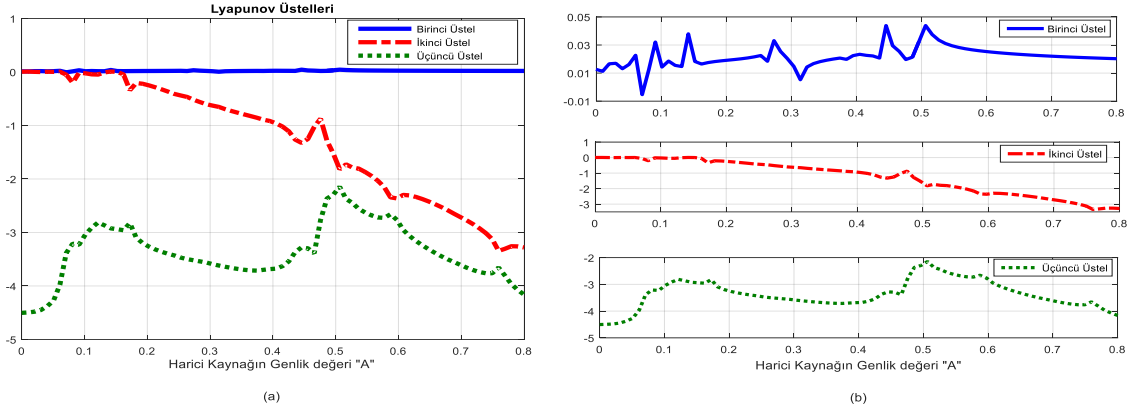


Şekil 1. Harici kaynağın genlik değişiminin elektromanyetik alan etkili Fitzhugh-Nagumo nöron modeli üzerindeki etkisini gösteren dallanma diyagramı sonucu.



Şekil 2. Elektromanyetik alan etkili Fitzhugh-Nagumo nöron modeline harici kaynağın farklı genlik değerleri uygulandığında [a) $A = 0,1$, b) $A = 0,3$, c) $A = 0,5$ ve d) $A = 0,7$] elde edilen ve zaman domeni ile faz portresi gösterimlerini içeren nümerik simülasyon sonuçları.

Bu analizlere ilaveten, Denklem 2 ile verilen elektromanyetik alan etkili Fitzhugh-Nagumo nöron modelinin Lyapunov üstelleri hesaplandığında, dallanma diyagramında karmaşık desenlerin yoğun olduğu kısımlarda üstellerden en az birinin pozitif değerde olması beklenir. Bu sonucu gözlemlmek için yapılan Lyapunov üsteli hesaplamaları ile elde edilen sonuçlar Şekil 3a'da görülmektedir. Elde edilen grafikte birinci üstel pozitifken, ikinci ve üçüncü üsteller negatiftir. Birinci üstelin pozitif değerinin daha etkin gözlemlenmesi için Şekil 3b'de üstellerin ayrı ayrı verildiği bir gösterim bulunmaktadır.



Şekil 3.Harici kaynağın genlik değişiminin elektromanyetik alan etkili Fitzhugh-Nagumo nöron modeli üzerindeki etkisini gösteren Lyapunov üsteli hesaplama sonuçları.

2. Elektromanyetik Alan Tanımlı Fitzhugh-Nagumo Nöron Modeline Rotasyon Kontrollünün Uygulanması

Biyolojik nöron modellerinin kararlılık analizlerinin yapılması ve dinamik davranışlarının kontrolü üzerine literatürde pek çok çalışma mevcuttur. Son zamanlarda biyolojik sistemler, lazer sistemleri, kaotik sistemler ve nöral sistemler gibi doğrusal olmayan tanımlamalara sahip yapılarda rotasyon değişimli dinamikler gözlemlenmekte ve bu dinamiklerin modellenmesi üzerine çalışmalar yapılmaktadır. Burada da elektromanyetik alan etkili Fitzhugh-Nagumo nöron modelinin hücre zarı potansiyeli ve transmembrane akımlarının oluşturduğu faz çekerinin rotasyon kontrolü uygulanmaktadır.

(x, y, z) Kartezyen Koordinat Sistemi'nde üç durum değişkeni ile tanımlanan bir sistemin noktaları olsun. Rotasyon dönüşüm işlemi sonrasında (x', y', z') olmak üzere alternatif bir küme tanımlanabilir. Bahsi geçen iki kümenin orijinde çakışık, doğrultularının ise farklı olduğu kabulü yapılır. Ortogonalite şartına göre, vektörler ekseninde döndürülseler bile uzunlukları sabittir. Buna göre üç durum değişkeni ile tanımlanan bir vektörün rotasyon dönüşümü ile elde edilen alternatif kümesi şu şekilde tanımlanır [23]:

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} \quad (3)$$

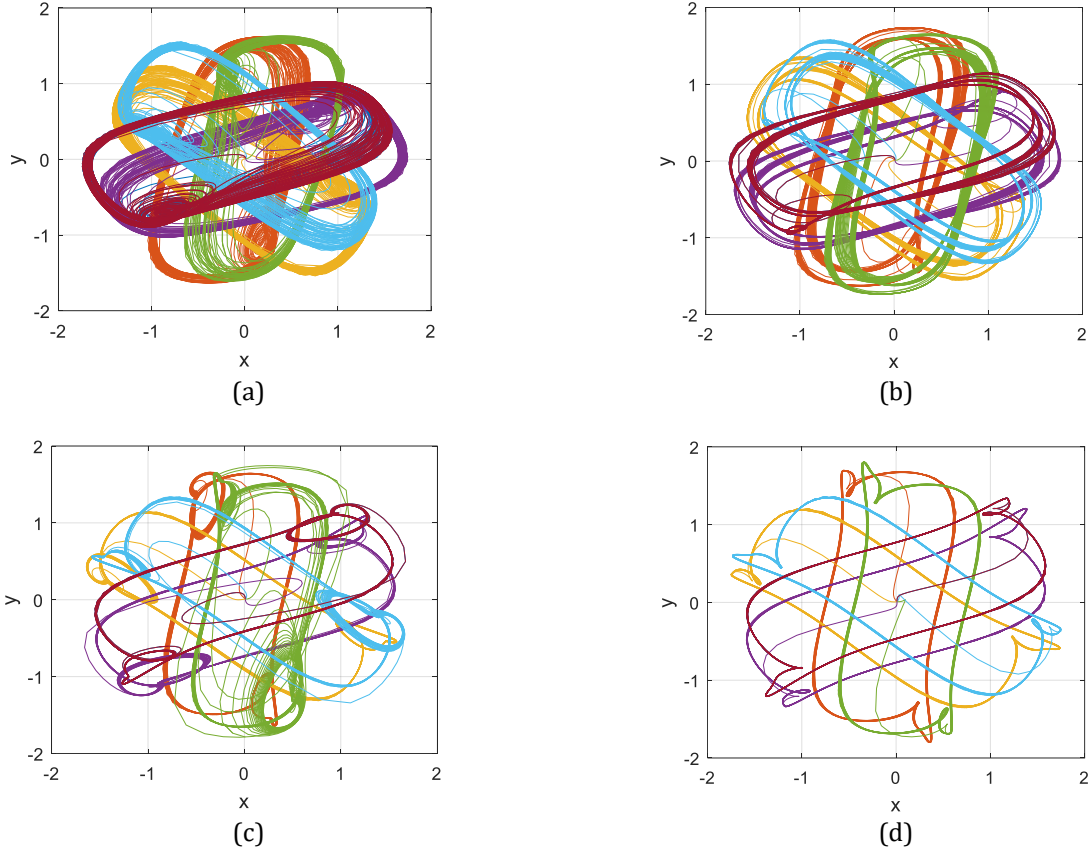
Burada 3×3 formunda tanımlanan matris rotasyon matrisidir. Denklem 2'deki elektromanyetik alan etkili Fitzhugh-Nagumo nöron modelinin hücre zarı potansiyelini temsil eden durum değişkeni x' , transmembrane akımı y' ve elektromanyetik alan tanımlaması z' parametreleri gibi düşünülecek Denklem 3'e dâhil edilirse, Denklem 4'teki tanımlama elde edilir:

$$\begin{aligned} \frac{dx'}{dt} &= \cos \theta \left[\left(x - \frac{x^3}{3} - y + I_{ext} \right) / \tau \right] + \sin \theta [ax + by + d + rE] \\ \frac{dy'}{dt} &= -\sin \theta \left[\left(x - \frac{x^3}{3} - y + I_{ext} \right) / \tau \right] + \cos \theta [ax + by + d + rE] \\ \frac{dE'}{dt} &= ky \end{aligned} \quad (4)$$

Euler Rotasyon Teoremine göre, Denklem 4'teki rotasyon matrisinin tersi alınarak $[T_1 = x = x' \cos \theta + y' \sin \theta]$ ve $[T_2 = y = -x' \sin \theta + y' \cos \theta]$ şeklinde bir düzenleme yapılırsa Denklem 5'teki ifade elde edilmektedir:

$$\begin{aligned} \frac{dx'}{dt} &= \cos \theta \left[\left(T_1 - \frac{T_1^3}{3} - T_2 + I_{ext} \right) / \tau \right] - \sin \theta [aT_1 + bT_2 + d + rE] \\ \frac{dy'}{dt} &= \sin \theta \left[\left(T_1 - \frac{T_1^3}{3} - T_2 + I_{ext} \right) / \tau \right] + \cos \theta [aT_1 + bT_2 + d + rE] \\ \frac{dE'}{dt} &= kT_2 \end{aligned} \quad (5)$$

Denklem 5'teki tanımlamada $\theta = [0, 60, 120, 180, 240, 300, 360]$ derecedeki açı değerleri için elektromanyetik alan etkili Fitzhugh-Nagumo nöron modelinin ' x ' ve ' y ' durum değişkenleri ile oluşturulan faz portresi gösterimlerinin birbiri üzerine çizdirilerek elde edilen nümerik simülasyon sonuçları Şekil 4a-4d'de görülmektedir. Burada Şekil 4a, harici kaynağın genlik değerinin $A = 0,1$ değerine ayarlanması ile; Şekil 4b, harici kaynağın genlik değerinin $A = 0,3$ değerine ayarlanması ile; Şekil 4c, harici kaynağın genlik değerinin $A = 0,5$ değerine ayarlanması ile ve son olarak Şekil 4d, harici kaynağın genlik değerinin $A = 0,7$ değerine ayarlanması ile elde edilen nümerik simülasyon sonuçlarıdır.



Şekil 4. Rotasyon kontrol açısı $\theta = [0, 60, 120, 180, 240, 300, 360]$ derece değerlerine ayarlanarak elektromanyetik alan etkili Fitzhugh-Nagumo nöron modeline harici kaynağın farklı genlik değerleri uygulandığında [a) $A = 0,1$, b) $A = 0,3$, c) $A = 0,5$ ve d) $A = 0,7$] elde edilen faz portresi gösterimleri.

3. Sonuç

Bu çalışmada nöronların hücre zarı yüzeylerinde meydana gelen iyonik değişimden kaynaklı akım akışının bir elektromanyetik alan indükleyebileceği düşüncesi ile geliştirilen literatürde mevcut bir nöral sistem ele alınmıştır. Elektromanyetik alan etkili Fitzhugh-Nagumo nöron modelinde; elektromanyetik alan etkisi diğer modellerden farklı olarak sisteme ilave bir durum değişkeni olarak adapte edilmiştir. Burada elektromanyetik alan etkili Fitzhugh-Nagumo nöron modelinin hücre zarı potansiyeli ve transmembrane akımının oluşturduğu dinamik çeker yapısının Euler Rotasyon Teoremi kullanılarak kontrolü sağlanmıştır. Bu kapsamda; ilgili nöral sistemin tanıtılmasının ardından, modelde tanımlı harici akım kaynağının genlik değerinin sistemin çeker yapısına olan etkisi; dallanma diyagramının çizdirilmesi, zaman domeninde nümerik simülasyonlarının yapılması ve Lyapunov üstellerin hesaplanması ile gözlemlenmiştir. Sonrasında rotasyon kontrol işlemi elektromanyetik alan etkili Fitzhugh-Nagumo nöron modeline adapte edilmiştir. Modeldeki harici akım kaynağının farklı genlik değerleri için kaydedilen nümerik simülasyon sonuçları ile rotasyon kontrol işleminin başarılı bir şekilde uygulandığı gösterilmiştir. Böylece, elektromanyetik alan gibi vektörel tanımlamaya sahip bir değişkenin adapte edildiği nöron modellerinde de rotasyon kontrol işleminin yapılabileceği sonucu çıkarılmıştır.

Kaynakça

- [1] Chua, L. 1971. Memristor-the missing circuit element. *IEEE Transactions on Circuit Theory*, 18 (5), 507-519.
- [2] Lv, M., Wang, C., Ren, G., Ma, J., Song, X. 2016. Model of electrical activity in a neuron under magnetic flow effect. *Nonlinear Dynamics*, 85(3), 1479-1490.
- [3] Lv, M., Ma, J. 2016. Multiple modes of electrical activities in a new neuron model under electromagnetic radiation. *Neurocomputing*, 205, 375-381.
- [4] Xu, Q., Song, Z., Bao, H., Chen, M., Bao, B. 2018. Two-neuron-based non-autonomous memristive Hopfield neural network: Numerical analyses and hardware experiments. *AEU-International Journal of Electronics and Communications*, 96, 66-74.
- [5] Hodgkin, A.L., Andrew F.H. 1952. A quantitative description of membrane current and its application to conduction and excitation in nerve. *The Journal of physiology*, 117(4), 500.
- [6] FitzHugh, R. 1961. Impulses and physiological states in theoretical models of nerve membrane. *Biophysical journal*, 1(6), 445-466.
- [7] Hindmarsh, J. L., Rose, R. M. 1984. A model of neuronal bursting using three coupled first order differential equations. *Proceedings of the Royal society of London. Series B. Biological sciences*, 221(1222), 87-102.
- [8] Wu, F., Wang, C., Xu, Y., Ma, J. 2016. Model of electrical activity in cardiac tissue under electromagnetic induction. *Scientific reports*, 6(1), 1-12.
- [9] Ma, J., Wu, F., Hayat, T., Zhou, P., Tang, J. 2017. Electromagnetic induction and radiation-induced abnormality of wave propagation in excitable media. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 486, 508-516.
- [10] Bao, B., Hu, A., Bao, H., Xu, Q., Chen, M., Wu, H. 2018. Three-dimensional memristive Hindmarsh-Rose neuron model with hidden coexisting asymmetric behaviors. *Complexity*, 2018.
- [11] Bao, H., Hu, A., Liu, W., Bao, B. 2019. Hidden bursting firings and bifurcation mechanisms in memristive neuron model with threshold electromagnetic induction. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, 31(2), 502-511.
- [12] Lin, H., Wang, C., Sun, Y., Yao, W. 2020. Firing multistability in a locally active memristive neuron model. *Nonlinear Dynamics*, 100(4), 3667-3683.
- [13] Bao, B., Zhu, Y., Ma, J., Bao, H., Wu, H., Chen, M. 2021. Memristive neuron model with an adapting synapse and its hardware experiments. *Science China Technological Sciences*, 64(5), 1107-1117.
- [14] Ma, J., Zhang, G., Hayat, T., Ren, G. 2019. Model electrical activity of neuron under electric field. *Nonlinear dynamics*, 95(2), 1585-1598.
- [15] Kim, Y. 2010. Identification of dynamical states in stimulated Izhikevich neuron models by using a 0-1 test. *Journal of the Korean Physical Society*, 57(6), 1363-1368.
- [16] Bizzarri, F., Brambilla, A., Storti Gajani, G. 2013. Lyapunov exponents computation for hybrid neurons. *Journal of computational neuroscience*, 35(2), 201-212.
- [17] Çimen, Z., Korkmaz, N., Altuncu, Y., Kılıç, R. 2020. Evaluating the effectiveness of several synchronization control methods applying to the electrically and the chemically coupled hindmarsh-rose neurons. *Biosystems*, 198, 104284.
- [18] Thottil, S. K., Ignatius, R. P. 2017. Nonlinear feedback coupling in Hindmarsh-Rose neurons. *Nonlinear Dynamics*, 87(3), 1879-1899.
- [19] Karaca, Z., Korkmaz, N., Altuncu, Y., Kılıç, R. 2021. An extensive FPGA-based realization study about the Izhikevich neurons and their bio-inspired applications. *Nonlinear Dynamics*, 105(4), 3529-3549.

- [20] Kim, M. Y., Roy, R., Aron, J. L., Carr, T. W., Schwartz, I. B. 2005. Scaling behavior of laser population dynamics with time-delayed coupling: theory and experiment. *Physical review letters*, 94(8), 088101.
- [21] Prasad, A., Dana, S. K., Karnatak, R., Kurths, J., Blasius, B., & Ramaswamy, R. 2008. Universal occurrence of the phase-flip bifurcation in time-delay coupled systems. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 18(2), 023111.
- [22] Korkmaz, N. 2021. A Phase Control Method for the Dynamical Attractor of the HR Neuron Model: The Rotation-Transition Process and Its Experimental Realization. *Neural Processing Letters*, 53(6), 3877-3892.
- [23] Arfken G.B., Weber H.J. 1999. *Mathematical methods for physicists*, 6th edn. Elsevier Academic Press, Cambridge, 1205s. ISBN 0-12-088584-0

Farklı Kristal Yönelimine Sahip Cu Nano Tellerine Uygulanan Mekanik Çevrimin Moleküler Dinamik Benzetimi ile İncelenmesi

Sefa Kazanç *₁,

*₁Fırat Üniversitesi Eğitim Fakültesi Matematik ve Fen Bilimleri Eğitimi Bölümü, ELAZIĞ

(Alınış / Received: 26.01.2022, Kabul / Accepted: 31.05.2022, Online Yayınlanma / Published Online: 23.08.2022)

Anahtar Kelimeler

Nano tel,
kristal yönelimi,
mekanik çevrim,
moleküler dinamik.

Öz: Bu çalışmada Cu atomlarının farklı kristalografik doğrultulara yerleştirilmesiyle oluşturulan nano tellere tek eksen boyunca uygulanan çekme yüklemesi-yükün kaldırılması çevrimlerinin model sistemin mekanik özellikleri üzerindeki etkisi Moleküler Dinamik (MD) benzetim yöntemi ile incelendi. Çok cisim etkileşmelerini içeren Gömülmüş Atom Metodu (GAM) potansiyel fonksiyonunun türevinden atomlar üzerine etki eden kuvvetler belirlendi. $1 \times 10^{10} \text{s}^{-1}$ zorlanma değeri için 10 K ve 300 K sıcaklıklarında nano tellere üç çekme yüklemesi-yükün kaldırılması deformasyonu uygulanarak zor-zorlanma eğrileri, elastiklik modülü (E), akma zoru değerleri incelendi. Uygulanan çevrim işlemleri sonucu elde edilen atomik görüntüler ve ortak komşu analiz metodu (Common Neighbor Analysis-CNA) kullanılarak nano tellerde meydana gelen plastik deformasyonun, bütün yönelimler için dislokasyonların aktif hale geçmesi, yığılım kusurları ve ikizlenmeler sonucu meydana geldiği tespit edildi. Bununla birlikte yüklemenin kaldırılması durumunda bütün yönelimler için nano telin ilk şekline tamamen dönmediği belirlendi. Ayrıca $\langle 110 \rangle$ Cu nano teli için üçüncü çevrimde kopma meydana geldiği görüldü. Uygulanan çevrim işleminin nano telin farklı kristal yönelimleri için mekanik özellikler üzerinde önemli bir etkiye sahip olduğu tespit edildi.

Investigation by Molecular Dynamic Simulation of Mechanical Cycle Applied to Cu Nanowires with Different Crystal Orientations

Keywords

Nanowire,
crystal orientations,
mechanical cycle, molecular
dynamics

Abstract: In this study, the effect of uniaxial tensile loading-unloading cycles applied to nanowires formed by placing Cu atoms in different crystallographic directions on the mechanical properties of the model system was investigated by Molecular Dynamics (MD) simulation method. The forces affecting on atoms were determined from the derivative of the Embedded Atom Method (EAM) potential function, which includes many-body interactions. For the $1 \times 10^{10} \text{s}^{-1}$ strain value, the stress-strain curves, modulus of elasticity (E), yield stress values were examined by applying three tensile loading-unloading deformations to the nanowires at temperatures of 10 K and 300 K. By using the atomic images obtained as a result of the applied cycle processes and the common neighbor analysis method (CNA), it was determined that the plastic deformation in the nanowires occurred as a result of activation of dislocations, stacking defects and twinning for all orientations. However, it was determined that the nanowire did not fully return to its original shape for all orientations when the loading was removed. In addition, it was observed that break up occurred in the third cycle for $\langle 110 \rangle$ Cu nanowire. It was found that the applied cycling process had a significant effect on the mechanical properties for different crystal orientations of the nanowires.

*İlgili Yazar, email: skazanc@firat.edu.tr

1. Giriş

Nano teknolojinin temel yapı taşlarından olan nano teller üstün özelliklerinden dolayı teknolojiye oldukça ilgi çekmektedir. Son yıllarda araştırmacıların nano teknoloji ve bilimiyle daha çok ilgilendikleri ve bu alanlarda yapılan çalışmaların sayısının arttığı görülmektedir. Nano metre ve mikro metre ölçeğinde yapılar kullanılarak elektronik cihazlar ve nano/mikro elektromekanik sistemler geliştirilmeye başlanmıştır. Nano ölçekteki elektriksel, optik, manyetik ve mekanik sistemler için birçok deneysel çalışma yapılmıştır [1-3]. Bununla birlikte nano materyallerin mekanik özelliklerinin anlaşılması sadece bilimsel olarak ilgi çekmelerinden değil aynı zamanda tasarım ve üretim süreçleri gibi mühendislik kullanışlılığı açısından da önemlidir. Birçok faktör nanotellerin nano boyutlarından dolayı onların deformasyon mekanizmasını etkileyebilir. Nano teller büyük yüzey-hacim oranına sahip olduğundan dolayı serbest yüzeylerin enerjisi ve sonuç olarak yüzey zoru önemli olur. Buda nano tellerde hem yüzey-zor etkili faz dönüşümüne [4-6] hem de suni-elastik ve şekil hatırlama etkilerine yol açabilir [7-10].

Nano tellerin farklı kristalografik yönelimlere sahip olması onların esneklik modülü, akma zoru, akma zorlanması plastik deformasyon mekanizması gibi mekanik özelliklerini önemli ölçüde etkiler. Diano ve arkadaşları [11] MD benzetim yöntemini kullanarak yüzey etkili iç zorlardan dolayı [100] ve [110] yönelimleri için Au nano telinde simetrik olmayan bir akma zorlanması ve gerilme-sıkıştırma esnasında farklı kayma sistemleri gözlemlediler. Park ve arkadaşları [12, 13] farklı kristalografik yönelimli fcc nano telleri için gerilme deformasyonun etkilerini inceledi. Wu ve arkadaşları [14, 15] farklı sıcaklık, boyut ve zorlanma oranları için Cu nano telinin mekanik özelliklerini belirledi. Komandori ve arkadaşları [16, 17] bcc ve fcc yapıdaki nano telleri modellemek için Morse potansiyelini kullandılar. Yaptıkları çalışmada iki cisim potansiyeli kullanılarak modellenen bcc nano tellerinin gerilme davranışlarının doğru sonuçlar vermediğini belirlediler.

Cu elementi, kristal yönelimine bağlı olarak anizotropik özellik sergiler ve akma zoru ve elastiklik modülü gibi mekanik özellikler önemli derecede değişiklik gösterir [18, 19].

Suni elastiklik veya süper elastiklik, şekil hatırlamalı materyallerin önemli bir özelliğidir [20-23]. Genel olarak suni elastiklikten sorumlu mekanizma yüklemeye-yükün kaldırılması süreci esnasında zor etkili ileri ve geri yönlü martensitik dönüşümdür. Tek kristal fcc ve bcc metalik nano tellerde suni elastiklik ve şekil hatırlama etkisi son yıllarda dikkat çeken çalışmalar arasındadır [24-26]. Özellikle $\langle 110 \rangle / \{111\}$ fcc nano tellerinde ilk olarak MD benzetim yöntemiyle belirlenen suni elastik davranış daha sonra nano mekanik deneylerle de doğrulanmıştır. [27].

Son yıllarda bilgisayar benzetim teknikleri nano ölçekteki materyallerin mekanik özellikleri incelemek için kullanılmaktadır. Bilgisayar teknolojisinin ve sayısal hesaplama yöntemlerinin hızlı gelişimi, bununla birlikte gerçekçi atomlararası potansiyellerin varlığı, MD benzetim yöntemini nano materyallerin mekanik davranışlarını incelemek için etkili bir araç haline getirmiştir. MD benzetim yöntemi zor altında nano materyallerin elastik ve plastik deformasyonu, kopma, dislokasyonların temel mekanizmasının belirlenmesi gibi bazı süreçlerin açıklanmasında oldukça etkilidir. Nano tellerin mekanik davranışlarının belirlenmesi amacıyla MD benzetimi ve yoğunluk fonksiyonu teorisi üzerine kurulu ilk prensip (first-principles) metodu gibi farklı yaklaşımlarla birçok teorik çalışma yapılmıştır [28-30]. Farklı potansiyel fonksiyonları farklı sistemlerin modellenmesi için geliştirilmiştir [31-33]. Basit yapısı ve gerçeğe yakın sonuçlar üretmesi açısından çok cisim etkileşmelerini içeren GAM fonksiyonu benzetim çalışmalarında en çok kullanılan fonksiyonlardandır.

Bu çalışmada farklı kristalografik yönelimlere sahip Cu nano tellerine 10K ve 300K sıcaklık değerlerinde uygulanan çekme yüklemesi-yükün kaldırılması (tensile loading-unloading) çevrim süreçlerinde oluşan yapısal ve mekanik özellikler MD benzetim metodu ile incelendi. Bu sıcaklık değerlerinin seçilmesinin sebebi model nano tel sistemine uygulanan mekanik işlemlerin etkisinin sadece düşük sıcaklık ve oda sıcaklığında belirlenmesi olarak ifade edilebilir. Çalışmada büyük ölçekli atomik/moleküler kitlesel paralel simülasyon (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator-LAMMPS) açık kaynak kodlu MD benzetim programı kullanıldı [34]. Uygulanan çevrimler sonucu meydana gelen plastik deformasyon mekanizmasının incelenmesi için OVITO [35] programından CNA analiz yöntemi ile belirlenen atomik konumlar kullanıldı.

2. Materyal ve Metot

Klasik MD benzetim yönteminde bir sistemin hareket denklemleri Lagrange fonksiyonundan

$$L_{PR}(\mathbf{r}^N, \dot{\mathbf{r}}^N, \mathbf{h}, \dot{\mathbf{h}}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i (\dot{\mathbf{s}}_i^t G \dot{\mathbf{s}}_i) - \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \phi(|\mathbf{h}_{s_{ij}}|) + \frac{1}{2} M \text{Tr}(\dot{\mathbf{h}}^t \dot{\mathbf{h}}) - P_{ext} V \quad (1)$$

şeklinde elde edilir. s_i , \mathbf{h} , \mathbf{G} ve P_{ext} parametreleri sırasıyla skalalandırılmış koordinat, hesaplama hücrenin eksenleri, metrik tensör ve dış basıncı tanımlamaktadır.

Deformasyona maruz bırakılan bir sistem için zor, denklem (2) de verildiği gibi mikroskobik zor tensörü tarafından hesaplanmaktadır [36, 37].

$$\boldsymbol{\pi} = V^{-1} \left[\sum_{i=1}^N m_i \vartheta_i \vartheta_i - \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{F_{ij}}{r_{ij}} \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_j \right] \quad (2)$$

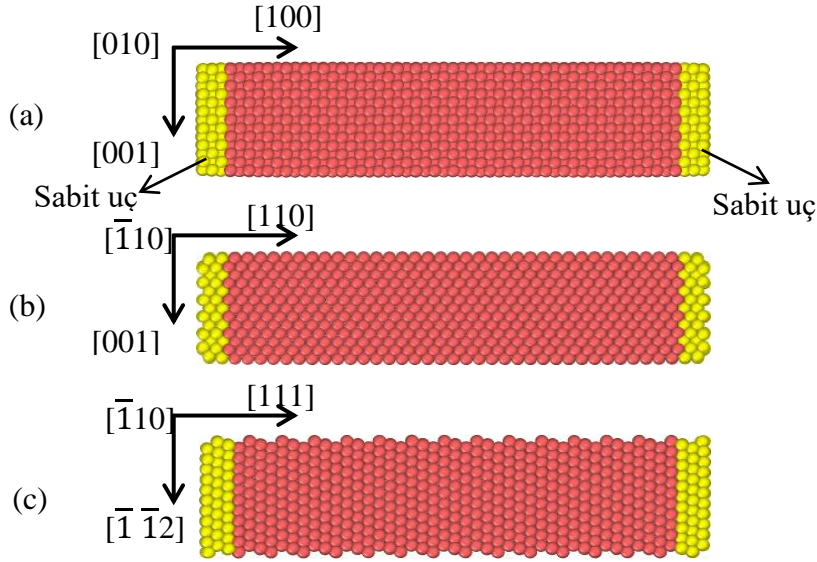
Bu çalışmada başlangıç konumları olarak fcc yapıdaki model nano tel sistemine Cu atomları yüksek simetrikli $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ ve $\langle 111 \rangle$ örgü yönelimlerinde yerleştirildi. Periyodik sınır şartları sadece x doğrultusu boyunca uygulandı. y ve z doğrultuları boyunca herhangi bir sınır şartı uygulanmadı. Parçacık sayısının, hacmin ve sıcaklığın sabit olarak alındığı NVT kanonik topluluğu kullanıldı. Verlet algoritmasının hız formu ile hareket denklemlerinin sayısal çözümü gerçekleştirildi. Nano telin kararlı yapıda olabilmesi için tüm kristalografik yönelimler için çevrim işlemi uygulanmadan önce sistem 5×10^4 MD adımı dengeletildi. Zorlanma oranı yapılan çalışmada $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ olarak seçildi. Bir integrasyon adımı 5 fs olarak seçildi. Ayrıca model hesaplama hücresinde Cu atomları arasındaki etkileşimleri hesaplamak için GAM potansiyel fonksiyonu kullanıldı. Potansiyel ile ilgili detaylar literatürden bulunabilir [38].

$\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ ve $\langle 111 \rangle$ yönelimlerine sahip Cu nano teller sırasıyla 4647, 4857 ve 4903 atomdan meydana gelmektedir. Nano telin x yönündeki uzunluğu 10,8 nm, y ve z yönlerinde 2,17 nm dir. Bütün çalışmalarda farklı yönelimli Cu nano teline çekme deformasyonu ve bu deformasyonun kaldırılması işlemi (bu işlem bir çevrim olarak ifade edilecektir) sadece x eksenini boyunca uygulandı. Model nano tel sisteminin x-doğrultusu boyunca iki uç bölgesindeki birkaç atomik tabaka sabitlendi. Ara bölgede kalan atomların dinamik davranışına izin verildi. Sabit uç olarak ifade edilen bölgedeki atomlar birbirleriyle ve ara bölgede kalan atomlarla etkileşmemektedir. Deneysel çekme yöntemine uygun olması açısından sabit uçlardan biri hareketsiz tutulurken çekme işlemi diğer uca uygulandı.

MD çalışmalarında model sisteme uygulanan termal veya mekanik işlemler sonucu oluşan fcc, hcp, bcc gibi mikro yapıların tespit edilmesi ve gelişimlerinin belirlenmesi oldukça önemlidir. Birçok sayısal analiz yöntemi bu yapıların belirlenmesi amacıyla geliştirilmiştir. Her bir parçacığa bir yapısal tür atamak bu yöntemlerin temel hedefidir. Ayrıca bu yöntemler yerel bir yapıyı idealleştirilmiş bir yapıyla eşleştirerek, ne kadar yakın olduklarını belirlemeye çalışır. MD benzetim çalışmalarında yapı tahlili için genel olarak merkez simetri parametre analizi (centrosymmetry parametre analizi), genel yakın komşu analizi (common neighbor analysis), bağ-yönelim analizi (bond-order analysis), bağ açısı analizi (bond-angle analysis), Honeycutt-Andersen, Voronoi analizi oldukça sık kullanılmaktadır [39, 40].

3. Bulgular

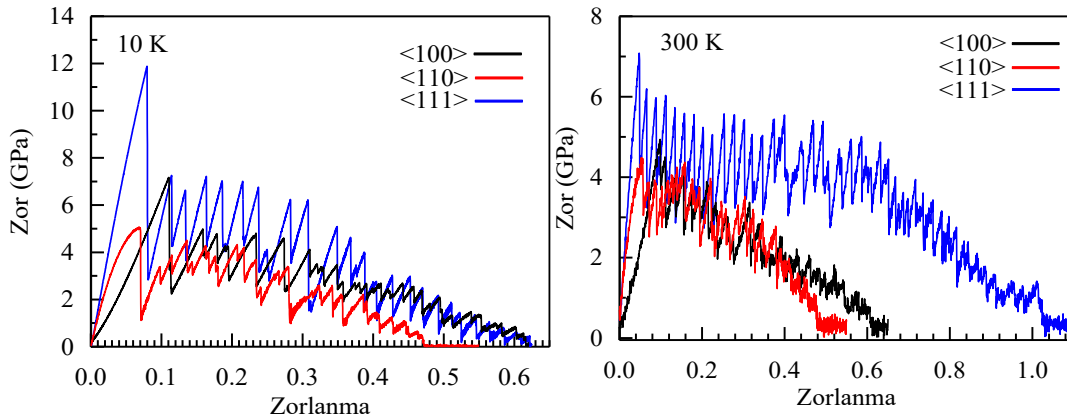
Bu çalışmada Cu atomlarının fcc örgü noktalarına $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ ve $\langle 111 \rangle$ yüksek simetri doğrultuları boyunca yerleştirildiği nano tellere x eksenini boyunca arka arkaya 3 çekme yüklemesi-yükün kaldırılması (tension loading-unloading) çevrim işlemleri uygulanarak model sistemin mekanik özellikleri incelendi. Şekil 1'de bu üç farklı kristal yönelimine sahip Cu nano tellerin başlangıç yapıları verilmiştir. Çekme yüklemesi-yükün kaldırılması mekanik işlem süreci, nano telin soldaki sabit ucu hareketsiz tutularak, sağdaki sabit uç $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ zorlanma oranı ile çekilerek ve aynı zorlanma oranı ile çekme zorlanmasının kaldırılması şeklinde uygulandı. Nano telin her iki sabit ucu da üç atomik tabakadan oluşmaktadır.



Şekil 1. (a) $\langle 100 \rangle$, (b) $\langle 110 \rangle$ ve (c) $\langle 111 \rangle$ Cu nano tellerinin başlangıç atomik yapıları. Sarı renkli küreler sabit uç olarak tanımlanan atomları, kırmızı renkli küreler dinamik atomları göstermektedir.

Şekil 2’de $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ ve $\langle 111 \rangle$ Cu nano tellerine 10K ve 300 K sıcaklık değerleri için kopma noktasına kadar uygulanan eksensel zorlanmaya karşı zorun değişim eğrileri verilmiştir. Cu nano telleri kristal yöneliminin bir fonksiyonu olarak elastik anizotropi göstermektedir. Kristal yöneliminin zor-zorlanma eğrileri üzerinde oldukça önemli bir etkiye sahip olduğu dikkat çekmektedir. Zorlanmanın uygulanmaya başlamasıyla zor değerindeki hemen hemen doğrusal değişim elastik şekil değişimin meydana geldiği bölge olarak bilinmektedir. Zorlanmanın arttırılmaya devam ettirilmesiyle zor değerinin bir maksimuma ulaştıktan sonra ani bir düşüş gösterdiği nokta plastik şekil değişimin başladığı akma zoru olarak bilinmektedir. Zor değerindeki bu ani düşüşün nano tel sistemi içerisinde dislokasyonların çekirdeklenmeye başlamasından kaynaklandığı bilinmektedir [41]. Zorlanma değerinin arttırılmaya devam etmesiyle zor-zorlanma eğrisinin testere dişi gibi bir değişim sergilediği görülmektedir. Bu değişim sebebinin çekirdeklenen dislokasyonların büyümesi ve yayılmasından dolayı olduğu söylenebilir [42]. Zor-zorlanma eğrisinden görüldüğü gibi her iki sıcaklık değeri için de elastiklik modülü, akma zoru, akma zorlanması kristal yönelimine kuvvetli bir şekilde bağlılık sergilemektedir. 10 K sıcaklığında $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ ve $\langle 111 \rangle$ Cu nano tellerinde kopmanın meydana geldiği zorlanma değerleri sırasıyla 0.617, 0.471 ve 0.622 olarak belirlenmiştir. 300 K sıcaklık değeri için ise aynı yönelime sahip nano teller için kopma zorlanmaları sırasıyla 0.607, 0.477 ve 1.26 dır.

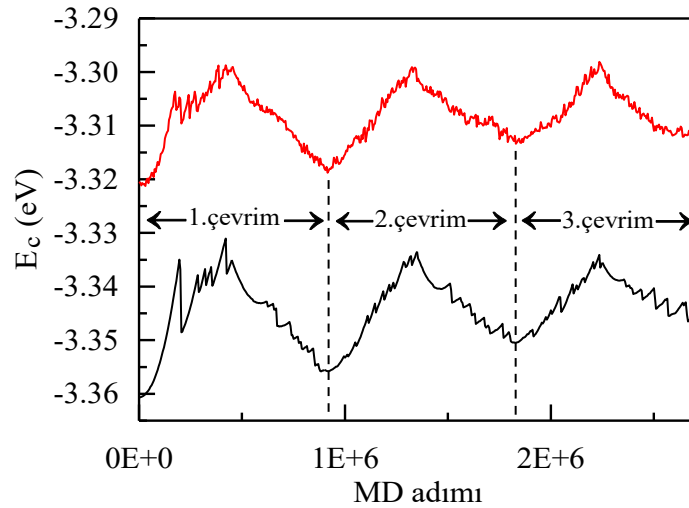
Yapılan çalışmada mekanik çevrimler, bütün kristalografik yönelimler için çekme yüklemesi 0.25 zorlanma değerine kadar nano tel sistemine uygulanmış, bu değerden sonra sistem üzerinden kaldırılmıştır. Bu işlem model sistem üzerine yapılan bir çevrim sürecini ifade etmektedir. 0.25 zorlanma değeri bütün yönelimler için elastik bölgenin aşılp nano tellerde plastik şekil değişimin meydana geldiği gölgeye karşılık gelmektedir. Bu çevrim işlemi bütün yönelimler için nano tel sistemine 3 kez uygulanarak zor-zorlanma eğrisindeki değişimler incelenmeye çalışılmıştır.



Şekil 2. 10 K ve 300 K sıcaklık değerlerinde farklı kristal yönelimine sahip nano teller için elde edilen zor-zorlanma eğrileri.

Şekil 3'te 10 K ve 300 K sıcaklık değerleri için sadece <100> Cu nano teline uygulanan 3 çevrim boyunca potansiyel enerjinin MD adımı ile değişimi verilmiştir. Kinetik enerji sistemin momentum ve termal uyarılmasını yönetirken, potansiyel enerji materyalin mekanik özelliklerini yansıtmaktadır. Bir çevrim boyunca potansiyel enerji değişim eğrisinin, nano tele uygulanan zorlanmanın artırılmasıyla artarak bir maksimum değere ulaştığı ve sonrasında bu zorlanmanın kaldırılmasıyla hemen hemen ilk değerine geri döndüğü görülmektedir. Bir çevrim boyunca potansiyel enerji değişim eğrisi maksimum değere ulaşana kadar iki aşamadan geçmektedir. İlki potansiyel enerji eğrisinin hemen hemen doğrusal bir artış sergilediği elastik bölgedir. İkinci aşama zorlanmanın artmaya devam etmesiyle ilk dislokasyonların oluşmaya başlaması ve enerji eğrisinin ani bir azalış göstermesi ve çekme işleminin son bulduğu 0.25 zorlama değerine kadar enerjinin artmasıdır. Model sisteme uygulanan çekme işlemi tamamlanıp yüklemenin kaldırılmaya başlamasıyla nano teldeki atomlar arası mesafe azalacak ve potansiyel enerji artacaktır. Bununla birlikte sıcaklık artışıyla nano tel sisteminin potansiyel enerjisi azalmış ve plastik şekil değişimi daha düşük MD adımında başlamıştır. 10 K'da dengeleştirilmiş <100> nano teli için mekanik çevrim işlemi başlamadan önce model sistemin denge durumundaki enerji değeri $E_{ilk} = -3.36$ eV tur. Bu değer birinci çevrimin sonunda $E_1 = -3.355$ eV, ikinci çevrimin sonunda $E_2 = -3.349$ eV ve üçüncü çevrimin sonunda $E_3 = -3.348$ eV olarak belirlenmiştir. Denge durumuna göre üçüncü çevrimin sonunda 0.012 eV değerinde bir enerji farkı oluşmuştur. <110> nano telinin çevrim süreci başlamadan önce denge durumundaki enerjisi $E_{ilk} = -3.359$ eV tur. Birinci çevrim sonunda $E_1 = -3.354$ eV ve ikinci çevrim sonunda $E_2 = -3.345$ eV tur. Nano tel sisteminde üçüncü çevrimin çekme işlemi sürecinde kopmanın meydana geldiği gözlenmiştir. İkinci çevrimin sonunda denge durumuna göre oluşan enerji farkı 0.014 eV olarak bulunmuştur. <111> nano telinde ise denge durumunda enerji $E_{ilk} = -3.361$ eV olarak tespit edilmiş ve birinci çevrim sonunda $E_1 = -3.356$ eV, ikinci çevrim sonunda $E_2 = -3.351$ eV ve üçüncü çevrim sonunda $E_3 = -3.348$ eV olarak belirlenmiştir. <111> nano teli için enerji farkı ise 0.013 eV değerindedir.

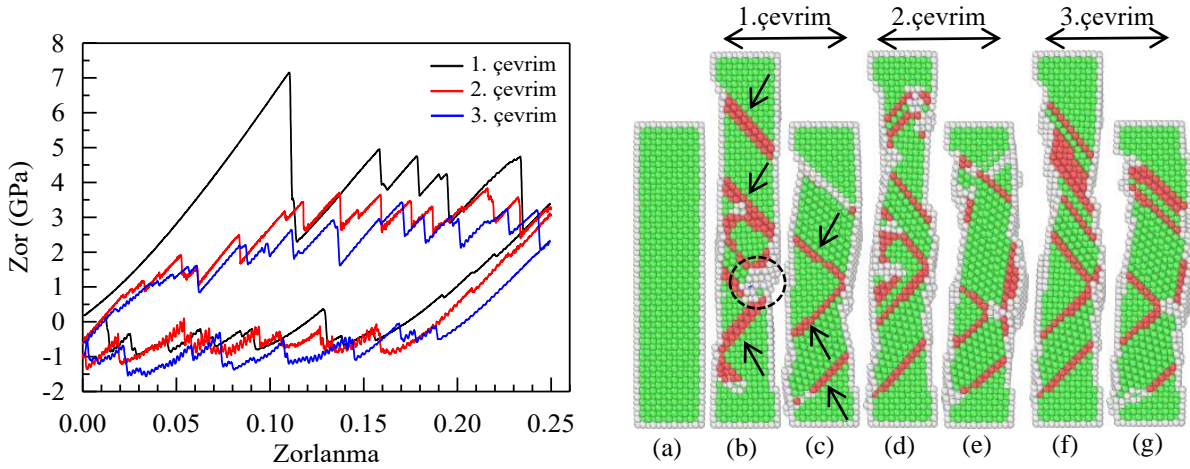
300 K sıcaklık değeri için enerji değerleri denge durumundaki <100> nano telinde $E_{ilk} = -3.32$ eV, birinci çevrimde $E_1 = -3.318$ eV, ikinci çevrimde $E_2 = -3.311$ eV ve üçüncü çevrimde $E_3 = -3.31$ eV, <110> nano telinde $E_{ilk} = -3.321$ eV, $E_1 = -3.315$ eV, $E_2 = -3.312$ eV, $E_3 = -3.308$ eV, <111> nano telinde $E_{ilk} = -3.317$ eV, $E_1 = -3.315$ eV, $E_2 = -3.313$ eV ve $E_3 = -3.312$ eV olarak belirlenmiştir. <100>, <110> ve <111> nano telleri için denge durumuna göre son çevrimde oluşan enerji farkları sırasıyla 0.01 eV, 0.013 eV ve 0.005 eV değerindedir. Hem 10 K hem de 300 K sıcaklık değerlerinde her üç kristalografik yönelim içinde çevrim sonlarında enerji değerlerinin çevrim işlemi başlamadan önceki denge durumunda nano tel sisteminin sahip olduğu enerji değerlerine göre arttığı görülmektedir. Çevrim işlemleri sonucu nano tel sisteminde kalıcı şekil değişimini oluşturan dislokasyonların, düzlem kaymalarının, ikiz yapılarının bu enerji farklarının oluşumuna sebep olduğu düşünülmektedir.



Şekil 3. 10 K (siyah eğri) ve 300 K (kırmızı eğri) sıcaklık değerlerinde <100> nano teline uygulanan 3 çevrim boyunca elde edilen MD adımı ile kohesif enerji değişimi.

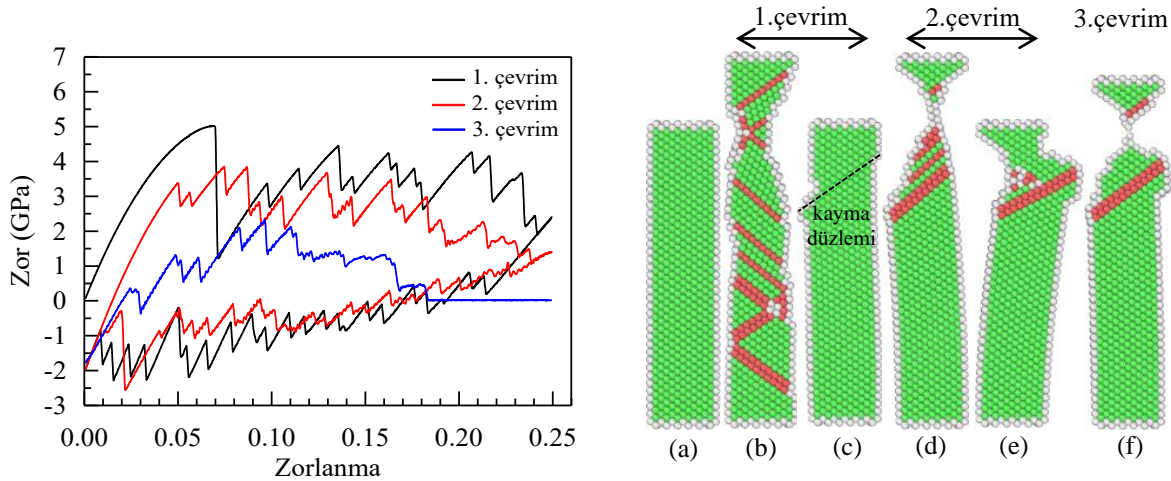
Şekil 4'te 10 K sıcaklık değeri için <100> Cu nano teline uygulanan çekme yüklemesi-yükün kaldırılması çevrimleri sonucu elde edilen zor-zorlanma eğrileri ve [010] doğrultu kesitinden elde edilen atomik konumlar verilmiştir. İlk çevrimde nano tele uygulanan çekme yüklemesi işleminde, zor-zorlanma eğrisinin zorlanmanın 0.11 değerine kadar hemen hemen doğrusal bir değişim sergilediği elastik bölge görülmektedir. Zorun en büyük değerine ulaşmasından sonra zorlanmanın artırılmaya devam etmesiyle yapı içerisinde dislokasyonlar çekirdeklenmeye başlamakta ve eğride ani bir düşüş meydana gelmektedir. Akma zoru olarak adlandırılan zorun

bu en büyük değerinden sonra nano tel kalıcı olarak şekil değişimine maruz kalmaktadır. Yükleme işleminin son bulunduğu 0.25 zorlanma değerine kadar eğrinin testere dişleri gibi girintili çıkıntılı bir yapıda değişim sergilediği görülmektedir. Bu değişimin sebebinin model nano tel sistemi içerisinde çekirdeklenen dislokasyonların büyümesi ve yayılmasından dolayı olduğu söylenebilir [42]. Bu değişim diğer çevrim işlemlerinde de meydana gelmektedir. İlk çevrim işlemi başlamadan önce denge durumundaki nano tel sisteminin fcc birim hücreli yapısı ve yükleme işlemi tamamlandıktan sonra oluşan yapısal değişim, atomik görüntülerin verildiği Şekil 4'te (a) ve (b) de görülmektedir. CNA analizine göre yeşil renkli atomlar fcc birim hücreli yapıları ve kırmızı renkli atomlar hcp birim hücreli yapıları göstermektedir. Beyaz renkli atomlar ise yüzey atomlarını ve CNA analizinde herhangi bir şekilde tanımlanmamış atomik yapıları ifade edilmektedir. Çekme işleminin son bulunduğu 0.25 zorlanma değerine ulaşıldığında, yapı içerisinde fcc kristalindeki atomların dizilim hatası olarak bilinen hcp atomlarından oluşan düzlemlerin (ok işaretleri ile gösterilen) nano telin bir ucundan diğer ucuna yayıldığı belirlenmiştir. hcp atomlarından oluşan bu düzlemler yapı içerisinde Shockley kısmi dislokasyonlarının aktif hale geçmesi sonucu oluşan yığılma kusurlarının bir göstergesi olarak ifade edilmektedir [42, 44]. Zorlanmanın arttırılmaya devam etmesi durumunda tüm nano tel boyunca başka Shockley kısmi dislokasyonları çekirdeklenerek yapı içerisine yayılacak ve yığılma kusurlarının artmasına yol açacaktır [19]. Bununla birlikte nano tel sisteminde plastik şekil değişimine kayma düzlemlerinin de katkıda bulunduğu görülmektedir. Ayrıca noktali kapalı eğrisel yüzeyle gösterilen, (b), bölgede CNA analizinde "diğer" olarak adlandırılan, beyaz renkli atomlarla ifade edilen yapıların oluşumu belirlenmiştir. Bu tanımsız atomların bir araya geldiği bölge, zorlanmanın arttırılmaya devam etmesi durumunda yeni dislokasyonların çekirdeklenecikleri bölge olarak gösterilebilir. Çekme yüklemesinin kaldırıldığı ve zorlanmanın sıfır değerine ulaşıldığı birinci çevrimin sonunda zor, yaklaşık olarak -0.5 GPa değerindedir. Diğer çevrimlerin tamamlanmasında da zor hemen hemen bu değerdedir. Zorun negatif değerde olması nano telin sıkıştırılmış durumda olduğunu göstermektedir. Yüklemenin kaldırılmasıyla dislokasyon yoğunluğu azalacaktır. Birinci çevrimin sonunda elde edilen model sistemin atomik görüntüsüne, (c), bakıldığında nano tel yapısının ilk haline tamamen geri dönmediği hcp birim hücreli yığılma kusurlarının azaldığı fakat yapı içerisinde bulunmaya devam ettiği görülmektedir. Aynı zamanda yapı içerisinde yükleme durumundakinden daha fazla kayma düzlemlerinin varlığı ve bununla birlikte ikizlenmelerin oluşumu da tespit edilmiştir. Kırmızı renkli atomlarla temsil edilen yığılma kusurları ikiz sınırlarını oluşturmaktadır. Nano tel sistemine uygulanan ikinci ve üçüncü çevrimlerde zor-zorlanma eğrisi ilk çevrimdekine benzemekle birlikte, akma zorlanma değerinin azalmasıyla oluşan histeresizler daralmıştır. İkinci çevrimde yükleme ve yüklemenin kaldırıldığı durumlarda elde edilen atomik görüntülere (d-e) bakıldığında yükleme durumunda dislokasyonlar artmakta ve yüklemenin kaldırılmasıyla dislokasyonlar azalmaktadır. Bununla birlikte çekme yüklemesi durumunda nano telin incelendiği görülmektedir. İkinci çevrimin sonunda yükleme tamamen kaldırılmasına rağmen yapı içerisinde hcp birim hücreli yığılma kusurlarının varlığı birinci çevrime göre bir miktar daha fazla görülmektedir. Son çevrim işleminde de ikinci çevrimde olduğu gibi deformasyon mekanizmasının yığılma kusurları, kayma düzlemleri ve ikizlenmelerden meydana geldiği belirlenmiştir. Bütün çevrimlerde nano telin yüzeyinin girintili-çıkıntılı bir yapıda olduğu dikkat çekmektedir. Bunun sebebinin dislokasyon kaymaları olduğu söylenebilir. Çekme işlemi esnasında ikizlenme deformasyonu $\langle 100 \rangle$ nano telinin plastik deformasyonunda önemli bir rol oynamaktadır [18]. İlk çevrimde esneklik modülü 57.8 GPa, ikinci çevrimde 62.51 GPa ve üçüncü çevrimde 62.97 GPa olarak belirlenmiştir. Malzemenin elastik şekil değişiminin bir göstergesi olan elastiklik modülünün düşük değerleri o maddenin elastik özelliğinin arttığını göstermektedir. Uygulanan çevrim işlemlerinde elastiklik modülünün artması her çevrimde nano tel yapısının esneklik özelliğinin azaldığını ifade etmektedir.



Şekil 4. $\langle 100 \rangle$ nano teli için 10 K sıcaklık değerinde gerçekleştirilen çevrim sürecindeki zor-zorlanma eğrileri ve CNA analizi sonucu elde edilen $[010]$ doğrultusundaki atomik görüntüler. Ok işaretleri yığılma kusurlarını ve ikiz sınırlarını göstermektedir.

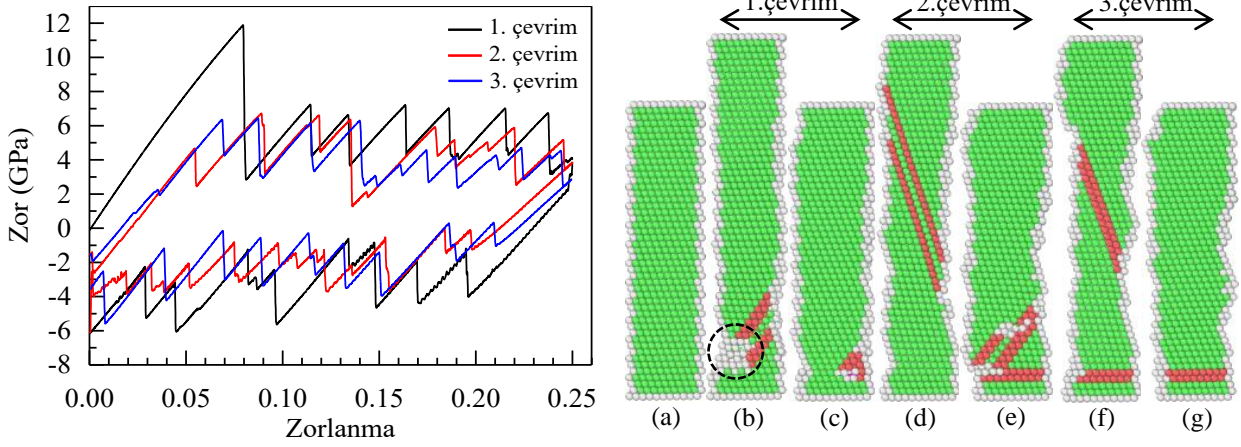
Şekil 5'te 10 K sıcaklık değerinde $\langle 110 \rangle$ Cu nano teline uygulanan çekme yüklemesi-yükün kaldırılması çevrimleri sonucu belirlenen zor-zorlanma eğrileri ve $[010]$ doğrultu kesitinden elde edilen atomik konumlar verilmiştir. İlk çevrimde zorlanmanın 0.04 değerine kadar zor-zorlanma eğrisinde hemen hemen doğrusal bir değişim meydana geldiği elastik bölge görülmektedir. Zor değeri, yapı içerisinde dislokasyonların çekirdeklenmeye başlamasıyla ani bir düşüş göstermekte ve sonrasında zor-zorlanma eğrisi $\langle 100 \rangle$ nano telinde olduğu gibi zikzak şeklinde bir değişim sergilemektedir. Çekme yüklemesinin kaldırdığı ve zorlanmanın sıfır değerine ulaştığı çevrim sonlarında zorun negatif değerinde olduğu görülmektedir. Nano tel sisteminin fcc birim hücreli denge durumu ve ilk çevrimde yükleme işleminin tamamlandığı 0.25 zorlanma değerinde elde edilen yapısal değişimin atomik görüntüleri Şekil 5'te (a) ve (b) de verilmiştir. Model sistemi içerisinde hcp birim hücreli yığılım kusur düzlemlerinin bir uçtan diğer uca yayıldığı (kırmızı renkli atomlar), bununla birlikte nano telin üst bölgesindeki uç kısmında bir boyun oluşumu görülmektedir. Ayrıca nano tel içerisinde ikizlenmeler de oluşmuştur. Yüklemenin nano tel üzerinden tamamen kaldırıldığı ilk çevrim sonunda, (c), yapı fcc birim hücreli ilk durumuna dönmüştür. Hiçbir yığılım kusuru ve dislokasyon görülmemektedir. Bununla birlikte atomik tabakaların birbiri üzerinden hareket ederek şekil değişiminin meydana geldiği bir kayma düzlemi belirlenmiştir. İkinci çevrim sürecinde yüklemenin tamamlandığı durumda, (d), nano telin uç kısmında boyun bölgesinin daha belirgin bir şekilde oluştuğu ve yapı içerisinde yığılım kusur düzlemlerinin sadece bu bölgede meydana geldiği, yükün kaldırılması sonucu, (e), bu yığılım kusur düzlemlerinin azalarak yine boyun bölgesinde yoğunlaştığı görülmektedir. Bununla birlikte ikinci çevrimin sonunda yüklemenin tamamen kaldırılması durumunda boyun bölgesinin durumunu koruduğu belirgin bir şekilde görülmektedir. Son çevrimde çekme yüklemesi sürecinde zorlanma 0.18 değerine ulaştığında, (f), nano tel sistemi boyun bölgesinden kopmuştur. İlk çevrimde esneklik modülü 116.5 GPa, ikinci çevrimde 126.1 GPa ve üçüncü çevrimde 92.5 GPa olarak belirlenmiştir. Üçüncü çevrimde belirlenen esneklik modülünün diğer çevrimlerde belirlenen değerlerden düşük çıkması, nano telin üçüncü çevrimde esneklik özelliğinin artmasını ve böylece kopma olayının meydana gelmesi olarak ifade edilebilir. Uygulanan çevrim süreci boyunca ilk çevrim hariç nano tel sisteminde herhangi bir ikizlenme yapısı gözlemlenmemiştir.



Şekil 5. $\langle 110 \rangle$ nano teli için 10 K sıcaklık değerinde gerçekleştirilen çevrim sürecindeki zor-zorlanma eğrileri ve CNA analizi sonucu elde edilen $[010]$ doğrultusundaki atomik görüntüler.

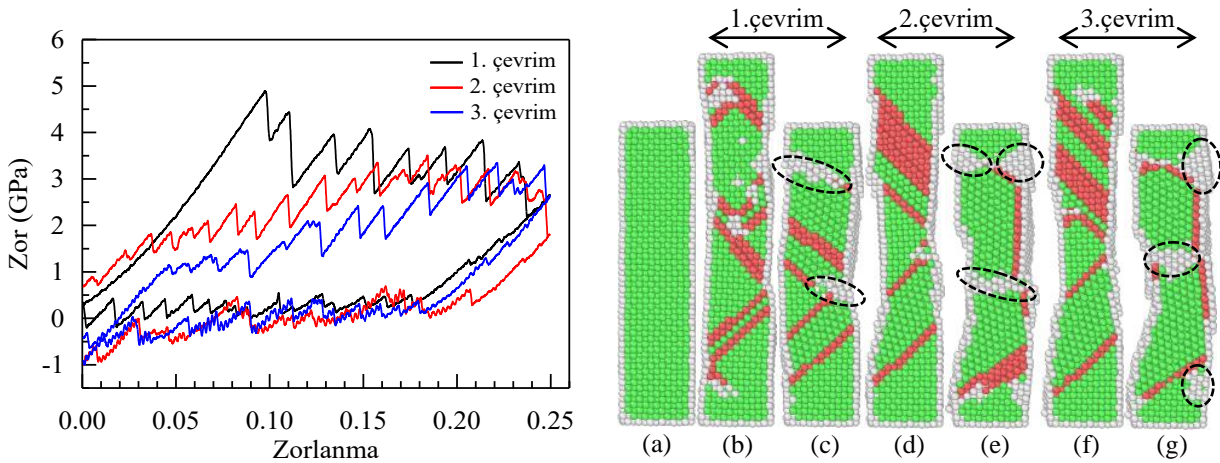
Şekil 6'da 10 K sıcaklık değerinde $\langle 111 \rangle$ kristalografik yönelimine sahip Cu nano teline uygulanan çekme yüklemesi-yükün kaldırılması çevrimleri sonucu elde edilen zor-zorlanma eğrileri ve $[010]$ doğrultu kesitinden elde edilen atomik konumlar verilmiştir. İlk çevrimde zorlanmanın yaklaşık 0.08 değerine kadar elastik şekil değişiminin meydana geldiği doğrusal bölge görülmektedir. Bu değerden sonra akma meydana gelmiş ve zorlanmanın artırılmasıyla diğer kristalografik yönelimlere sahip nano tellerde olduğu gibi zor-zorlanma eğrisi zikzak şeklinde bir değişim sergilemiştir. Uygulanan çevrimler esnasında zorlanmanın sıfır değerine karşı zorun negatif değerinde olduğu bu yönelime sahip nano tel sisteminde de görülmektedir. Yükleme uygulanmadan ve ilk çevrimde çekme yüklemesinin tamamlandığı 0.25 zorlanma değerinde elde edilen atomik görüntüleri (a) ve (b) şeklinde verilmiştir. Çekme yüklemesi tamamlandığında nano telin alt ucunda hcp birim hücreli yığılım kusur düzlemleriyle birlikte, zorlanmanın arttırılmaya devam etmesi durumunda yeni yığılım kusurları için çekirdek vazifesi görece "diğer" olarak adlandırılan ve noktalı kapalı eğri ile işaretlenen tanımsız atomların bir araya geldiği bölge görülmektedir. Yükleme tamamen kaldırılıp ilk çevrim tamamlandığında, (c), nano yapı hemen hemen ilk haline dönmüştür. Bununla birlikte az miktarda da olsa hcp atomlarının bir arada olduğu bir bölge bulunmaktadır. İkinci çevrim için elde edilen (d) ve (e) şekillerinde sırasıyla yüklemenin son değerine ulaşıldığında hcp atomlarından oluşan yığılım düzlemlerinin nano telin orta kısmında yer aldığı ve yüklemenin kaldırılması durumunda bu düzlemlerin nano telin alt bölgesinde yoğunlaştığı görülmektedir. Uygulanan son

çevrimde, (f-g), nano telde çekme yüklemesi sonucu hcp yığılım düzlemlerinin varlığı ve yüklemenin kaldırılmasıyla yapı içerisinde az miktarda bu yığılım kusurlarının kalmasıyla yapının hemen hemen başlangıç yapısına dönüştüğü tespit edilmiştir. Uygulanan çevrimler esnasında herhangi bir ikizlenme yapısı gözlenmemiştir. Zor-zorlanma eğrilerinden bu kristalografik yönelime sahip nano tel sistemi için elastik modülü ilk çevrim için 159.8 GPa, ikinci çevrim için 140.6 GPa ve üçüncü çevrim için 116.1 GPa olarak belirlenmiştir.



Şekil 6. <111> nano teli için 10 K sıcaklık değerinde gerçekleştirilen çevrim sürecindeki zor-zorlanma eğrileri ve CNA analizi sonucu elde edilen [010] doğrultusundaki atomik görüntüler.

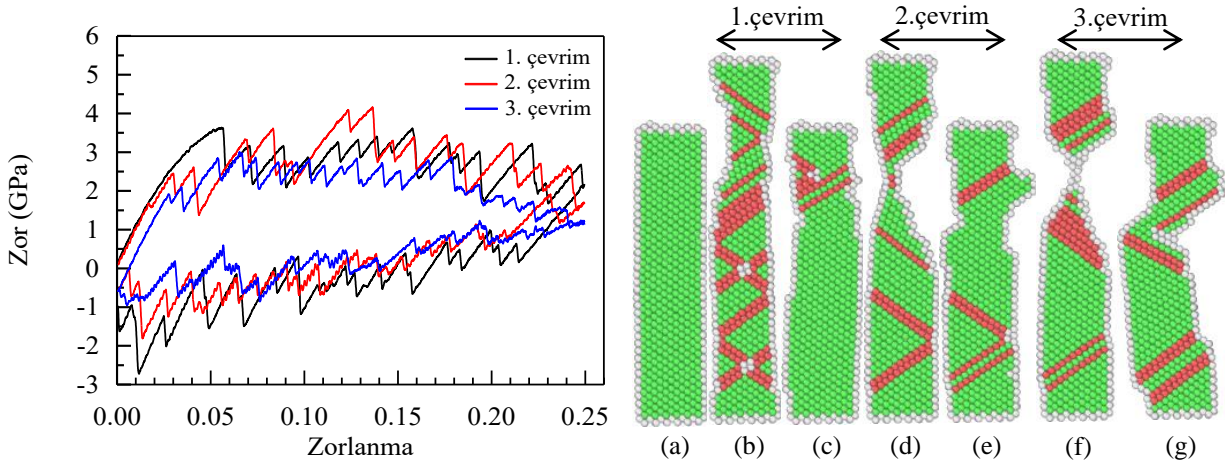
Üç farklı kristalografik yönelime sahip Cu nano tel sistemine çekme yüklemesi-yükün kaldırılması çevrim süreci 300 K sıcaklık değeri için de uygulandı. <100> nano teli için gerçekleştirilen çevrim süreçlerinde elde edilen zor-zorlanma eğrileri ve yüklemenin maksimum olduğu ve yükün tamamen kaldırıldığı durumlardaki atomik görüntüler Şekil 7'de verilmiştir. Çevrim sürecinde elde edilen zor-zorlanma eğrileri ve meydana gelen plastik deformasyonlar, 10 K sıcaklık değerindeki nano telden elde edilen sonuçlarla hemen hemen benzer özellikler göstermektedir. Bununla birlikte zorun artırılmaya devam etmesi durumunda dislokasyonların çekirdeklenecekleri ve CNA analizinde "diğer" olarak adlandırılan ve noktalı kapalı eğriler ile gösterilen beyaz renkli atomların bir arada olduğu bölgelerin yoğunluğu dikkat çekmektedir. Özellikle nano tel sisteminin üzerinden yüklemenin kaldırıldığı durumlarda, (c-e-g) bu bölgelerin arttığı ve tekrar çekme yüklemesiyle birlikte yapı içerisinde Shockley kısmi dislokasyonlarının aktif hale geçmesi sonucu yığılma kusurlarının (kırmızı renkli atomlar) meydana gelmesine sebep olduğu görülmektedir. Ayrıca uygulanan çevrim işlemlerinde nano tel yapısı içerisinde ikizlenmelerin meydana geldiği belirlenmiştir. İlk çevrimde esneklik modülü 38.75 GPa, ikinci çevrimde 46.7 GPa ve üçüncü çevrimde 47.8 GPa olarak belirlenmiştir.



Şekil 7. <100> nano teli için 300 K sıcaklık değerinde gerçekleştirilen çevrim sürecindeki zor-zorlanma eğrileri ve CNA analizi sonucu elde edilen [010] doğrultusundaki atomik görüntüler.

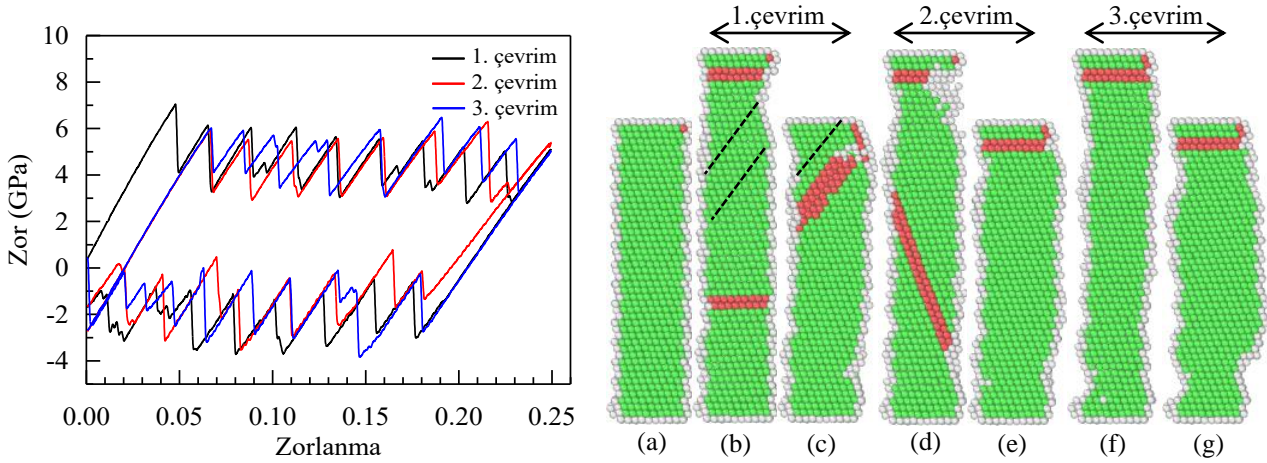
300 K sıcaklık değerinde <110> nano teli için gerçekleştirilen çevrim süreçlerinde elde edilen zor-zorlanma eğrileri ve atomik görüntüler Şekil 8'de verilmiştir. 10 K sıcaklık değerindeki nano tel sistemiyle karşılaştırıldığında hcp birim hücreli yığılım kusurlu düzlemlerin fazlalığı göze çarpmaktadır. Bunun sebebi olarak sıcaklık artışının nano teldeki atomların sahip olduğu kinetik enerji değerini artırması ve bunun da çok

sayıda Shockley kısmi dislokasyonlarının aktif hale geçmesini sağlayarak yığılma kusurlarının fazlaşmasına sebep olduğu şeklinde ifade edilebilir. Üçüncü çevrim yüklemesinde, (f), nano telin boyun bölgesi oldukça inceleyerek sünek bir yapı göstermiş ama nano tel kopmamıştır. Bu çevrimler esnasında nano telde meydana gelen plastik şekil değişimine kayma düzlemleri ve ikizlenmeler de katkıda bulunmuştur. İlk çevrimde esneklik modülü 100.5 GPa, ikinci çevrimde 97.5 GPa ve üçüncü çevrimde 95.9 GPa olarak belirlenmiştir.



Şekil 8. <110> nano teli için 300 K sıcaklık değerinde gerçekleştirilen çevrim sürecindeki zor-zorlanma eğrileri ve CNA analizi sonucu elde edilen [010] doğrultusundaki atomik görüntüler.

Son olarak <111> nano teli için 300 K sıcaklık değerinde gerçekleştirilen çevrim süreçlerinde elde edilen zor-zorlanma eğrileri ve atomik görüntüler Şekil 9'da görülmektedir. 10 K sıcaklık değerinde elde edilen sonuçlarla karşılaştırıldığında 300 K sıcaklık değerinde de kalıcı şekil değişiminin yapı içerisinde bulunan az sayıda hcp birim hücreli yığılma kusurları ve kayma düzlemleri tarafından (noktalı çizgiler) meydana getirildiği tespit edilmiştir. Herhangi bir ikiz yapının var olmadığı belirlenmiştir. İlk çevrimde esneklik modülü 143.9 GPa, ikinci çevrimde 133.6 GPa ve üçüncü çevrimde 133.4 GPa olarak tespit edilmiştir.



Şekil 9. <111> nano teli için 300 K sıcaklık değerinde gerçekleştirilen çevrim sürecindeki zor-zorlanma eğrileri ve CNA analizi sonucu elde edilen [010] doğrultusundaki atomik görüntüler.

4. Tartışma ve Sonuç

Cu atomlarının farklı kristal yönelimleriyle yerleştirildikleri nano tellere tek eksen doğrultusu boyunca uygulanan çekme yüklemesi-yükün kaldırılması çevrimlerinin, model sistemin mekanik özelliklerinde meydana getirdiği değişimler MD yöntemiyle incelendi. 10 K ve 300 K sıcaklık değerlerinde, $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ zorlanma oranıyla gerçekleştirilen çalışmada atomlar arasındaki etkileşimler GAM potansiyel fonksiyonu ile belirlendi. Uygulanan çevrim işlemlerinde sadece 10 K sıcaklık değerinde <110> nano telinin ilk çevriminin sonunda, 10 K ve 300 K sıcaklık değerinde <111> nano telinin tüm çevrimlerinde kısmen nano telin ilk şekline geri dönüşüm sergileyerek süper esneklik özelliği gösterebileceği belirlendi. Bununla birlikte <110> nano telinin üçüncü çevrim esnasında boyun bölgesinden koptuğu gözlemlendi. Nano tellerde plastik şekil değişimini oluşturan deformasyon mekanizmasının dislokasyonların hareketi sonucu kaymalar, yığılma kusurları ve ikizlenmelerle

meydana geldiği tespit edildi. Rezaei ve Deng yaptıkları çalışmada [27] Ag ve Au nano tellerinin uygulanan çekme yüklemesinin kaldırılması sonucu örgü yeniden yönelimiyle herhangi bir yapısal kusur kalmadan ilk yapılarına geri döndükleri Cu ve Ni nano tellerinde bu durumun oluşmadığını belirlediler. Ag ve Au nano telleri uygulanan çekme yüklemesinin kaldırılmasıyla tamamen geri kazanılabilen suni esneklik davranış sergilemişlerdir. Nano tel sistemine uygulanan çevrimler esnasında yüklemenin tamamen kaldırıldığı, zorlanmanın sıfır değerine karşı zorun negatif değere sahip olması model sistem içerisinde yapı kusurlarının görülmesinin bir sonucu olduğu söylenebilir.

Kaynakça

- [1] Pasquier, A., Unalan, H. E., Kanwal, A., Miller, S., Chhowalla, M. 2005. Conducting and transparent single-wall carbon nanotube electrodes for polymer-fullerene solar cells. *Appl. Phys. Lett.*, 87(2005), 203511.
- [2] Lee, K., Wu, Z., Chen, Z., Ren, F., Pearton, S. J., Rinzler, A. G. 2004. Single wall carbon nanotubes for p-type ohmic contacts to GaN light-emitting diode. *Nano Letters*, 4(2004), 911-914.
- [3] Li, J., Hu, L., Wang, L., Zhou, Y., Gruner, G., Marks, T. J. 2006. Organic light-emitting diodes having carbon nanotube anodes. *Nano Lett.*, 6(2006), 2472-2477.
- [4] Diao, J., Gall, K., Dunn, M.L. 2003. Surface-stress-induced phase transformation in metal nanowires. *Nature Materials*, 2(2003), 656-660.
- [5] Lao, J., Moldovan, D. 2008. Surface stress induced structural transformations and pseudoelastic effects in palladium nanowires. *Appl. Phys. Lett.*, 93(2008), 093108.
- [6] Zheng, H., Cao, A., Weinberger, C.R., Huang J.Y., Du, K., Wang, J., Ma, Y., Xia, Y., Mao., S.X. 2010. Discrete plasticity in sub-10-nm-sized gold crystals *Nature. Communications*, 1(2010), 144.
- [7] Liang, W., Zhou, M. 2005. Shape Memory Effect in Cu Nanowires. *Nano Letters*, 5(2005), 2039-2043.
- [8] Liang, W., Zhou, M. 2006. Atomistic simulations reveal shape memory of fcc metal nanowires. *Physical Review B*, 73(2006), 115409.
- [9] Park, H.S., Gall, K., Zimmerman, J.A. 2005. Shape Memory and Pseudoelasticity in Metal Nanowires. *Physical Review Letters*, 95(2005), 255504.
- [10] Park, H.S., Ji, C. 2006. On the thermomechanical deformation of silver shape memory nanowires. *Acta Materialia*, 54(2006), 2645-2654.
- [11] Diao, J., Gall, K., Dunn, M.L. 2004. Yield Strength Asymmetry in Metal Nanowires. *Nano Letters*, 4(2004), 1863-1867.
- [12] Park, H.S., Zimmerman, J.A. 2005. Modeling inelasticity and failure in gold nanowires, *Physical Review B*, 72(2005), 054106.
- [13] Park, H.S., Gall, K., Zimmerman, J.A. 2006. Deformation of FCC nanowires by twinning and slip. *J. Mech. Phys. Solids*, 54, 1862-1881.
- [14] Wu, H.A. 2006. Molecular dynamics study of the mechanics of metal nanowires at finite temperature. *Euro. J. Mech. A Solids*, 25(2006), 370-377.
- [15] Wu, H.A. 2006. Molecular dynamics study on mechanics of metal nanowire. *Mech. Res. Commun.*, 33(2006), 9-16.
- [16] Komandori, R., Chadrsekaran, N., Raff, L.M. 2003. Molecular Dynamics Simulations of Uniaxial Tension at Nanoscale of Semiconductor Materials for MEMS Applications. *Mater. Sci. Eng. A*, 340(2003), 58-67.
- [17] Komandori, R., Chadrsekaran, N., Raff, L.M. 2001. Molecular Dynamics (MD) Simulations of Uniaxial Tension of Some Single Crystal Cubic Metals at Nanolevel. *Int. J. Mech. Sci.* 43(2001), 2237-2260.
- [18] Gao, Y., Wang, H., Zhao, J., Sun, C., Wang, F. 2011. Anisotropic and temperature effects on mechanical properties of copper nanowires under tensile loading. *Computational Materials Science*, 50(2011), 3032-3037.
- [19] Sainath, G., Choudhary, B.K. 2016. Orientation dependent deformation behaviour of bcc iron nanowires. *Computational Materials Science*, 111(2016), 406-415.
- [20] Jani, J.M., Leary, M., Subic, A., Gibson, M.A. 2014. A review of shape memory alloy research, applications and opportunities. *Materials Design*, 56(2014), 1078-1113.

- [21] Lobo, P.S., Almeida, J., Guerreiro, L. 2015. Shape memory alloys behaviour: a review. *Procedia Eng.*, 114(2015), 776-783.
- [22] Sun, L., Huang, W.M., Ding, Z., Zhao, Y., Wang, C.C., Purnawali, H., Tang, C. 2012. Stimulus responsive shape memory materials: a review. *Materials Design*, 33(2012), 577-640.
- [23] Pathak, A., Chatterjee, R., Prakash, C. 2010. Improvement in shape memory in magnesium niobate modified PZST. *Ceram. Int.*, 36(2010), 2263-2267.
- [24] Deng, C., Sansoz, F. 2016. A new form of pseudo-elasticity in small-scale nanotwinned gold. *Extreme Mech. Lett.*, 8(2016), 201-207.
- [25] Seo, J.H., Park, H.S., Yoo, Y., Seong, T.Y., Li, J., Ahn, J.P., Kim, B., Choi, I.S. 2013. Origin of size dependency in coherent-twin-propagation-mediated tensile deformation of noble metal nanowires. *Nano Letters*, 13(2013), 5112-5116.
- [26] Cao, A. 2010. Shape memory effects and pseudoelasticity in BCC metallic nanowires. *J. Appl. Phys.*, 108(2010), 113531.
- [27] Rezaei, R., Deng, C. 2017. Pseudoelasticity and shape memory effects in cylindrical fcc metal nanowires. *Acta Materialia*, 132(2017), 49-56.
- [28] Jing, Y., Meng, Q., Zhao, W. 2009. Molecular Dynamics simulations of the tensile and melting behaviours of silicon nanowires. *Physica E*, 41(2009), 685-689.
- [29] Katakam, K. C., Yedla, N. 2021. Influence of orientation and temperature on the mechanical properties and deformation behavior of nickel nanowire under bending: A large scale molecular dynamics simulation. *Materials Today: Proceedings*, 39(2021), 1727-1732.
- [30] Jelinek, P., Perez, R., Ortega, J., Flores, F. 2003. First-principles simulations of the stretching and final breaking of Al nanowires: Mechanical properties and electrical conductance. *Phys.Rev. B.*, 68(2003), 085403.
- [31] Cai, J., Ye, Y.Y. 1996. Simple analytical embedded-atom-potential model including a long-range force for fcc metals and their alloys. *Phys. Rev. B*, 54(1996), 8398.
- [32] Tolpin, K.A., Bachurin, V.I., Yurasova, V.E. 2012. Features of energy dependence of NiPd sputtering for various ion irradiation angles. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B*, 273(2012), 76-79.
- [33] Hong, Z.H., Fang, T.H., Hwang, S.F. 2011. Phase transformation of stress-induced zinc oxide nanobelts using molecular dynamics. *Computational Materials Science*, 50(2011), 1944-1950.
- [34] <http://lammps.sandia.gov/>. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator (Erişim Tarihi:02.04.2021).
- [35] Stukowski, A. 2010. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18(1), 015012.
- [36] Kazanc, S. 2013. The effects on the lattice dynamical properties of the temperature and pressure in random NiPd alloy. *Can. J. Phys.*, 91(10), 833-838.
- [37] Kazanc, S., Ozgen, S., Adiguzel, O. 2003. Pressure effects on martensitic transformation under quenching process in a molecular dynamics model of NiAl alloy. *Physica B*, 334(3-4), 375-381.
- [38] Foiles, S.M., Baskes, M.I., Daw, M.S. 1986, Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys. *Phys. Rev. B*, 33(1986), 7983.
- [39] Malins, A., Williams, S.R., Eggers, J., Royall, C.P. 2013. Identification of structure in condensed matter with the topological cluster classification. *The Journal of Chemical Physics*, 139(2013), 234506.
- [40] Stukowski, A. 2012. Structure identification methods for atomistic simulations of crystalline materials. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 20(2012), 045021.
- [41] Setoodeh, A.R., Attariani, H., Khosrownejad, M. 2008. Nickel nanowires under uniaxial loads: A molecular dynamics simulation study. *Computational Materials Science*, 44(2008), 378-384.
- [42] Wu, H.A. 2006, Molecular dynamics study of the mechanism of metal nanowires at finite temperature. *European Journal of Mechanics A/Solids*, 25(2006), 370-377.
- [43] Guder, V., Sengul, S. 2020. Tensile strength and failure mechanism of hcp zirconium nanowires: Effect of diameter, temperature and strain rate. *Computational Materials Science*, 177(2020), 109551.
- [44] Wen, Y.H., Zhang, Y., Wang, Q., Zheng J.C., Zhu, Z.Z. 2010. Orientation-dependent mechanical properties of Au nanowires. *Computational Materials Science*, 48(2010), 513-519.

Predicting Liver Disease Using Decision Tree Ensemble Methods

Fırat ORHAN BULUCU^{1,2}, İrem ACER², Fatma LATİFOĞLU^{2,*}, Semra İÇER²

1 Inonu University, Department of Biomedical Engineering, Malatya, Turkey

*2 Erciyes University, Department of Biomedical Engineering, Kayseri, Turkey

(Alınış / Received: 28.01.2021, Kabul / Accepted: 31.05.2022, Online Yayınlanma / Published Online: 23.08.2022)

Keywords

Liver Disease,
Classification,
Ensemble learning,
Decision Trees,
SMOTE

Abstract: Damages that may occur in the liver, which has an important task for the human body, can cause fatal consequences. For this reason, early diagnosis of liver disease is important. In this study, liver disease was tried to be predicted using Ensemble learning methods based on various clinical values obtained from liver patients and healthy blood donors. The clinical values used in the study were obtained from the University of California, Irvine (UCI), which is shared as open access. Since the data used in the study showed an uneven distribution, the data were balanced by using the Synthetic Minority Sampling method (SMOTE) before the classification stage. The stabilized data were classified using the bagging and boosting models Random Forest (RF), J48, AdaBoost, Gradient Boosting Classifiers (GBC), and Light Gradient Boosting Machine (Light GBM) algorithms. As a result of the algorithms used, the Light GBM algorithm gave the most successful classification results using 10-fold cross-validation. Classification results were obtained as 98.8% accuracy, 98.1% precision, 99.4% recall and 0.98% kappa statistics rate.

Karar Ağacı Topluluğu Yöntemleri Kullanılarak Karaciğer Hastalığının Tahmin Edilmesi

Anahtar Kelimeler

Karaciğer Hastalığı,
Sınıflandırma,
Topluluk öğrenme,
Karar ağaçları,
SMOTE

Öz: İnsan vücudu için önemli bir görevi olan karaciğerde meydana gelebilecek hasarlar ölümcül sonuçlara neden olabilir. Bu nedenle karaciğer hastalığının erken teşhisi önemlidir. Bu çalışmada, karaciğer hastalarından ve sağlıklı kan bağışçılarından elde edilen çeşitli klinik değerlere bağlı olarak topluluk öğrenme yöntemleri kullanılarak karaciğer hastalığı tahmin edilmeye çalışılmıştır. Çalışmada kullanılan klinik değerler açık erişim olarak paylaşılan University of California, Irvine (UCI)'den elde edilmiştir. Yapılan çalışmada kullanılan veriler dengesiz dağılım gösterdiği için sınıflandırma aşamasından önce Sentetik Azınlık Örneklem Arttırma yöntemi (SMOTE) kullanılarak veriler dengeli hale getirilmiştir. Dengeli hale getirilen veriler torbalama ve artırma modellerinden Random Forest (RF), J48, AdaBoost, Gradient Boosting Classifiers (GBC) ve Light Gradient Boosting Machine (Light GBM) algoritmaları kullanılarak sınıflandırılmıştır. Kullanılan algoritmalar sonucunda en başarılı sınıflandırma sonuçlarını 10 kat çapraz doğrulama kullanılarak Light GBM algoritması vermiştir. Sınıflandırma sonuçları, %98,8 doğruluk, %98,1 kesinlik, %99,4 geri çağırma ve %0,98 kappa istatistik oranı olarak elde edilmiştir.

*Corresponding Author, email: flatifoglu@erciyes.edu.tr

1. Introduction

The liver is an organ that has an important role in the human body. Liver diseases are one of the most common diseases in the world. According to the World Health Organization (WHO) data, more than 70 million people in the world suffer from liver-related diseases such as hepatitis C, fibrosis, and cirrhosis, and deaths occur due to these diseases [1]. Hepatitis C virus (HCV) is a disease that is carried to the human body through blood, can lead to serious conditions over time, and is accepted as the main health problem in society [2]. Fibrosis is a serious liver injury that occurs as a result of the progression of HCV, which occurs due to the accumulation of more than normal

fat in the liver [3, 4]. Cirrhosis, on the other hand, is a fatal disease that occurs as a result of deterioration of liver tissue, which is the last stage of fibrosis and is also known as liver failure [4]. As a result of a few laboratory tests to be taken from the human body, liver disease can be diagnosed early and its progression can be controlled. It has been stated in studies that clinical values such as Albumin (ALB), Alkaline phosphatase (ALP), Alanine amino-transferase (ALT), Aspartate amino-transferase (AST) are widely used in the diagnosis of liver disease and in research [5, 6].

In the field of health, the diagnosis of diseases can be made in traditional ways. However, it has been stated that with the clinical values obtained, machine learning methods have been used in recent studies for the purposes of disease prevention, and diagnosis. [7, 8]. With these methods, diseases can be diagnosed faster and can support physicians. There are a number of studies in the literature on predicting liver disease using machine learning methods. Oladimeji et al. predicted HCV with a success rate of 98.97% with RF [8]. In their study, Orooji and Kermani tried to detect HCV by using Multi-layer perceptron, Bayesian network, Decision tree algorithms and they obtained the most successful result in the RF algorithm with 99.9% [9]. Mostafa and Hasan tried to predict liver disease using many machine learning methods in their study and compared the results they obtained in the methods they used. The most successful result was obtained in the Support Vector Machine (SVM) algorithm with 98.23% [10]. In another study for HCV prediction, Stacked Ensemble models were used and a success rate of 99.8% was achieved [11].

In this study, it was aimed to predicted liver disease from machine learning using Bagging Ensemble and Boosting Ensemble methods using clinical data obtained from liver patients and control group. Since the data set used in the study showed an uneven distribution, it was turned into a balanced distribution by preprocessing. Accuracy, precision, recall, kappa statistic metric values were obtained with the classifiers preferred in the study from the data showing a balanced distribution, and the algorithms were compared. This study, it was aimed to contribute to the literature for the diagnosis of liver disease by determining the ensemble model that gave the most successful result. In the second part of the study, information about the data and methods used is given, while in the third part, the results of the research are given. In the last part, the results obtained in the study with similar studies in the literature are compared and discussed.

2. Material and Method

2.1 Dataset

The data set used in the study was shared by Hoffmann et al. [12] as open access in the University of California, Irvine (UCI) [13] data repository in 2020. The data set used consisted of a total of 615 people and was divided into two classes, 75 of whom were liver patients (HCV, fibrosis, and cirrhosis), and 540 people were healthy blood donors. The data show an uneven distribution between these two classes (Figure 1). Information on the clinical values obtained from these individuals and used in the study are given in Table 1, and more detailed information is given in [12].

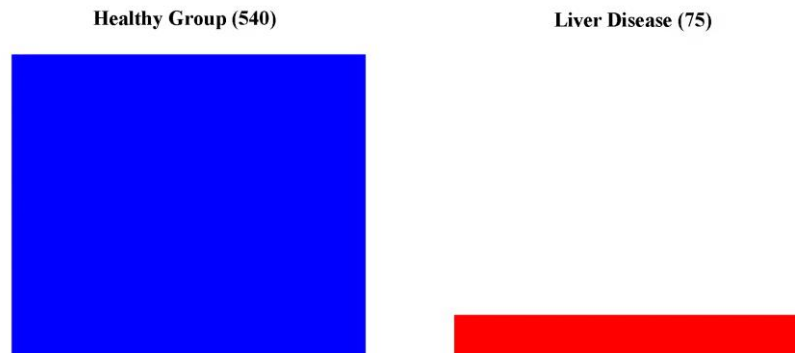


Figure 1. Distribution of data before balancing method

Table 1. Information on clinical values used in the study

Features used in this study
ALB
ALP
ALT
AST
Bilirubin
Choline esterase

Choline
Creatinine
γ -glutamyl-transferase
Total protein
Category: Healthy group (Negative)- Liver Disease (Positive)

2.2 Data pre-processing

The data set consists of 540 healthy groups and 75 liver patients, showing an uneven distribution. To avoid this imbalance, the SMOTE proposed by Chawla et al. [14] was applied as a preprocessing step. Since it is stated in the literature that in case of uneven distribution of the data, the classification results cannot be interpreted properly and there may be a loss in success rates [8], the SMOTE method, which is frequently preferred in the literature, was preferred to balance the data before the classification stage. It has been observed that the SMOTE method improves the performance in predictive models [8] and therefore SMOTE was preferred in the study. With this method, the data in the minority class are randomly multiplied according to their nearest neighbors, making them close to or equal to the data in the majority class [15]. With this method, the data, which were divided into two groups as the healthy group and the liver patient, were stabilized as 540 individuals without any data loss (Figure 2). Balancing was performed using the Waikato Environment for Knowledge Analysis (WEKA) Version 3.8.3 program [16].

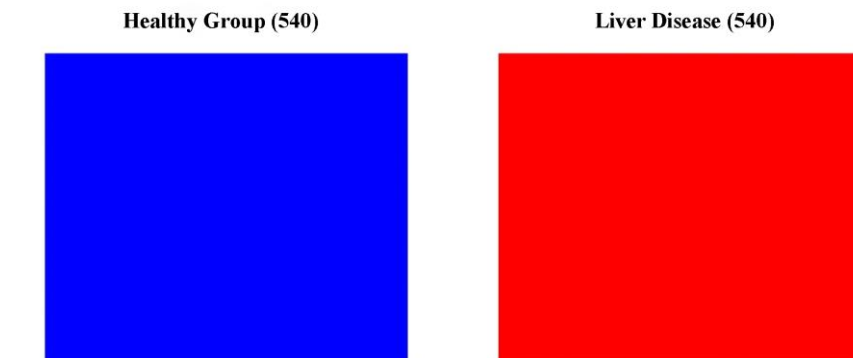


Figure 2. Distribution of data after balancing method

2.3.1 Ensemble learning methods

Ensemble learning is a machine learning method that can make some predictions using multiple similar or different classifier models. It is used to prevent prediction errors and negativities that may occur in machine learning by using different basic models [11, 17]. In studies using ensemble learning, bagging and boosting models are widely used. In this study, a comparison was made using bagging and boosting models.

A. Bagging method

In the bagging method, communities in multiple subsets are created by applying predictions to Bootstrap samples obtained from the original data set. A model is created in each subset and the models run independently and randomly. In the final stage, the predictions from all models are combined and the results are obtained [11, 17, 19]. In the bagging method, it is also known as Bootstrap Aggregating because the training data is divided into many sub-samples [11]. In this study, RF and J48 algorithms were used by using the bagging model approach. The RF algorithm is a typical bagging ensemble learning method in which multiple decision trees are applied to subsets of data and each decision tree produces results [18]. The J48 algorithm was developed by J. Ross Quinlan, and it is a C4.5 decision tree that is widely used in classification studies [20].

B. Boosting method

Boosting method, developed by Freund and Schapire [21], is a technique that combines weak classifications to achieve more successful performance. Unlike the bagging method, each tree structure created in the boosting method is connected with the previous tree structure. That is the models (training datasets and classifiers) created in each subset work sequentially with each other [21, 22]. In this study, Light GBM, AdaBoost, and GBC were preferred as boosting methods. The Light GBM algorithm, developed by Ke et al. [23] in 2017, is a gradient-based

decision tree technique that can be used in studies such as regression and classification. In the AdaBoost algorithm, the training set is trained with a weak learner. After the training, the wrongly estimated data is strengthened and retrained. In this way, it can produce strong classifiers from weak classifiers [18, 24]. GBC, proposed by Friedman [25], is a powerful machine learning method that can predict complex data quickly and accurately. The model created by this method can be combined with the previous model, thereby minimizing the estimation error. For more detailed information about the GBC algorithm, see [11, 25].

2.4 Evaluation of classifiers

The performances of the classification algorithms used in the study were examined in terms of accuracy, recall, precision, and kappa statistics. Accuracy, recall, precision rates were calculated using true positive (tp), true negative (tn), false positive (fp), and false negative (fn) values according to the confusion matrix given in Table 2. The accuracy rate is the rate of correctly predicted data. The recall value is also known as sensitivity and represents correctly classified positive rates. The precision value indicates how many of the samples classified as positive are actually positive. Kappa statistical value is a statistical criterion used to test the reliability of algorithms. The formulas for the calculated values are given in equations 1-4, respectively [26]. In the classification processes, cross-validation (CV) was set as 5-10 and the results were compared. Modeling processes of machine learning methods were carried out in the Google Colaboratory environment using the Python programming language

$$Accuracy = \frac{tp+tn}{fp+fn+fn+fp} \tag{1}$$

$$Recall = \frac{tp}{tp+fn} \times 100 \tag{2}$$

$$Precision = \frac{tp}{tp+fp} \times 100 \tag{3}$$

$$Kappa\ Statistic = \frac{p_0 - p_e}{1 - p_e} \tag{4}$$

Table 2. Confusion matrix

		Predicted Class	
		Negative (Healthy)	Positive (Liver Disease)
Actual Class	Negative	TN	FP
	Positive	FN	TP

3. Results

In this study, the clinical values obtained from liver patients with symptoms such as hepatitis C, fibrosis, cirrhosis, and healthy individuals were evaluated by bagging and boosting methods from ensemble models. Since the data set was initially unevenly distributed, balancing was applied to the data of liver patients and healthy individuals before proceeding to the classification stage. As a balancing method, the SMOTE method, which is widely used in studies, was preferred. While RF and J48 algorithms were preferred as bagging methods in the classification stage after the balancing process, Light GBM, AdaBoost, and GBC algorithms were used as boosting methods. In the classification process, 5-10 fold cross-validation technique was used and the performances of the algorithms were compared by obtaining the accuracy, precision, recall, kappa statistic metric values. Detailed information about the results obtained in this study is given in Table 3. Looking at Table 3, the most successful results were obtained with the Light GBM algorithm in terms of both 5-fold cross-validation and 10-fold cross-validation.

Table 3. Comparison of the performance of classification methods

Classifiers	Cross Validation	Accuracy (%)	Precision (%)	Recall (%)	Kappa Statistic
RF	5	98.2	97.4	99.1	0.96
	10	98.3	97.5	99.3	0.96
J48	5	96.9	95.8	98.1	0.94
	10	97.6	96.4	98.9	0.95
GBC	5	98.4	97.9	98.9	0.96
	10	98.5	98.1	98.8	0.97
Light GBM	5	98.7	97.9	99.5	0.97
	10	98.8	98.1	99.4	0.98
AdaBoost	5	98.1	97.5	98.6	0.96
	10	98.3	97.6	98.9	0.97

4. Discussion and Conclusion

In this study, liver disease was tried to be determined from clinical data by using bagging and boosting classification algorithms. Accuracy, precision, recall, kappa statistic values were obtained and the classifiers used were compared in terms of 5-10 fold cross-validation. Oversampling was applied as a pre-processing and the data set was balanced so that the classification could give a healthier result. As a result of the examination, the most successful performances were obtained with the Light GBM algorithm. The results of this study, which was carried out by examining the success rates obtained in studies on the predicted of similar data sets and liver disease, are compared in Table 4.

Table 4. Comparison of this study with similar literature studies.

Study	Dataset	Classifier model	Accuracy (%)
Oladimeji et al. [8]	HCV	RF	98.97
Orooji and Kermani [9]	HCV	RF	99.9
Mostafa and Hasan [10]	Liver Disease	SVM	98.23
Gupta and Gupta [11]	HCV	Stacked Ensemble	99.8
Suwardika [27]	HCV	SVM/ Regresi Logistik	80/79.4
Chicco and Jurman [28]	Liver Disease	RF	97.1
Hashem et al. [29]	Liver Disease	Alternating Decision Tree (ADTree)	95.6
This Study	Liver Disease	Light GBM	98.8

Looking at Table 4, it is seen that liver disease or HCV are predicted with high accuracy using different algorithms such as RF, decision trees, and SVM. In this study, unlike the literature, liver disease was predicted with an accuracy rate of 98.8% by using Light GBM, one of the boosting methods. The performance criteria obtained by using RF and J48 algorithms as bagging methods and Light GBM, one of the boosting methods, as well as GBC and AdaBoost algorithms, which support the literature, were compared. As a result of the comparison, the most successful performance measures were obtained with the Light GBM algorithm (Figure 3).

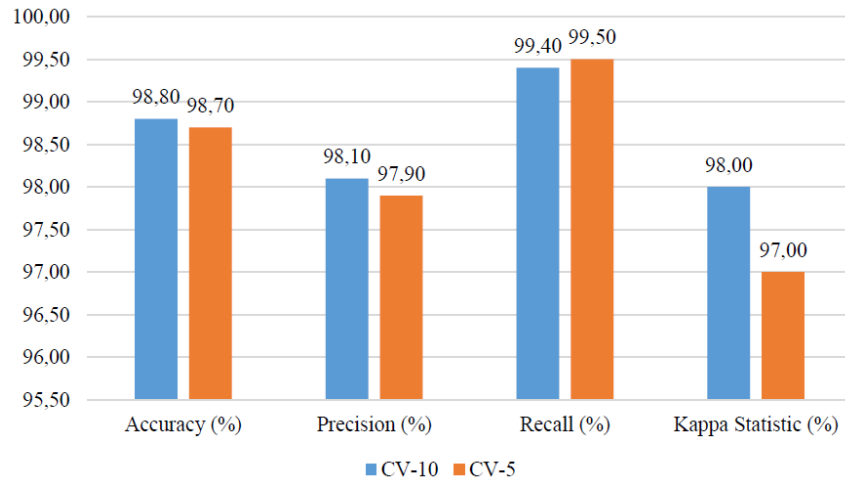


Figure 3. Light GBM Algorithm Performance Metrics

There are studies in the literature on predicting liver disease using clinical data using different algorithms [8-11, 27-29]. The results obtained in the study show that liver disease can be predicted using bagging and boosting algorithms using clinical data.

References

- [1] World Health Organization (WHO), 2020. Hepatitis C Key Facts. <https://www.who.int/newsroom/fact-sheets/detail/hepatitis-c> (Accessed: September. 10, 2021).
- [2] Hauri, A. M., Armstrong, G. L., & Hutin, Y. J. 2004. The global burden of disease attributable to contaminated injections given in health care settings. *International journal of STD & AIDS*, 15(1), pp.7-16.
- [3] Khatun, M., & Ray, R. B. (2019). Mechanisms underlying hepatitis C virus-associated hepatic fibrosis. *Cells*, 8(10), 1249.
- [4] Suk, K. T., & Kim, D. J. 2015. Staging of liver fibrosis or cirrhosis: The role of hepatic venous pressure gradient measurement. *World journal of hepatology*, 7(3), 607.
- [5] Akkaya, O., Kiyici, M., Yilmaz, Y., Ulukaya, E., & Yerci, O. 2007. Clinical significance of activity of ALT enzyme in patients with hepatitis C virus. *World journal of gastroenterology: WJG*, 13(41), 5481.
- [6] Pradat, P., Alberti, A., Poynard, T., Esteban, J. I., Weiland, O. et al. 2002. Predictive value of ALT levels for histologic findings in chronic hepatitis C: a European collaborative study. *Hepatology*, 36(4), pp.973-977.
- [7] Awan, S. E., Bennamoun, M., Sohel, F., Sanfilippo, F. M., & Dwivedi, G. 2019. Machine learning-based prediction of heart failure readmission or death: implications of choosing the right model and the right metrics. *ESC heart failure*, 6(2), pp.428-435..
- [8] Oladimeji, O. O., Oladimeji, A., Olayanju, O. 2021. Machine Learning Models for Diagnostic Classification of Hepatitis C Tests. *Frontiers in Health Informatics*, 10(1), 70.
- [9] Orooji, A., Kermani, F. 2021. Machine learning based methods for handling imbalanced data in hepatitis diagnosis. *Frontiers in Health Informatics*, 10(1), 57.
- [10] Mostafa, F. B., Hasan, E. 2021. Machine Learning Approaches for Binary Classification to Discover Liver Diseases using Clinical Data. *medRxiv*.
- [11] Gupta, S., Gupta, M. K. 2021. A comprehensive data-level investigation of cancer diagnosis on imbalanced data. *Computational Intelligence*.
- [12] Hoffmann, G., Bietenbeck, A., Lichtinghagen, R., Klawonn, F. 2018. Using machine learning techniques to generate laboratory diagnostic pathways—a case study. *J Lab Precis Med*, 3, 58.

- [13] Dua, D., Graff, C. 2019. UCI Machine Learning Repository Irvine, CA: University of California, School of Information and Computer Science. <http://archive.ics.uci.edu/ml>. (Accessed: April, 26, 2021).
- [14] Chawla, N. V., Bowyer, K. W., Hall, L. O., Kegelmeyer, W. P. 2002. SMOTE: synthetic minority over-sampling technique. *Journal of artificial intelligence research*, 16, pp.321-357.
- [15] Yildirim, P. 2016. Pattern classification with imbalanced and multiclass data for the prediction of albendazole adverse event outcomes. *Procedia Computer Science*, 83, pp.1013-1018.
- [16] Hall, M., Frank, E., Holmes, G., Pfahringer, B., Reutemann, P., & Witten, I. H. 2009. The WEKA data mining software: an update. *ACM SIGKDD explorations newsletter*, 11(1), pp.10-18.
- [17] Types of Ensemble methods in Machine learning. Accessed: September. 11, 2021. [Online]. Available: <https://towardsdatascience.com/types-of-ensemble-methods-in-machine-learning-4ddaf73879db>. (Accessed: September. 11, 2021).
- [18] Pal, M. 2005. Random forest classifier for remote sensing classification. *International journal of remote sensing*, 26(1), pp.217-222.
- [19] Breiman, L. 1996. Bagging predictors. *Machine learning*, 24(2), pp.123-140.
- [20] Quinlan, J. R. 2014. C4. 5: programs for machine learning. Elsevier.
- [21] Freund, Y., Schapire, R. E. 1996. Experiments with a new boosting algorithm. In *icml Vol. 96*, pp. 148-156.
- [22] Skurichina, M., Duin, R. P. 2002. Bagging, boosting and the random subspace method for linear classifiers. *Pattern Analysis & Applications*, 5(2), pp.121-135.
- [23] Ke, G., Meng, Q., Finley, T., Wang, T., Chen, W., et al. (2017). Lightgbm: A highly efficient gradient boosting decision tree. *Advances in neural information processing systems*, 30, pp.3146-3154.
- [24] An, T. K., Kim, M. H. 2010. A new diverse AdaBoost classifier. In *2010 International conference on artificial intelligence and computational intelligence*. IEEE, (Vol. 1, pp. 359-363).
- [25] Friedman, J. H. 2001. Greedy function approximation: a gradient boosting machine. *Annals of statistics*, pp.1189-1232.
- [26] Hossin, M., Sulaiman, M. N. 2015. A review on evaluation metrics for data classification evaluations. *International journal of data mining & knowledge management process*, 5(2), 1.
- [27] Suwardika, G. 2017. Pengelompokan Dan Klasifikasi Pada Data Hepatitis Dengan Menggunakan Support Vector Machine (SVM), Classification And Regression Tree (Cart) Dan Regresi Logistik Biner. *Journal of Education Research and Evaluation*, 1(3), pp.183-191.
- [28] Chicco, D., Jurman, G. 2021. An ensemble learning approach for enhanced classification of patients with hepatitis and cirrhosis. *IEEE Access*, 9, pp.24485-24498.
- [29] Hashem, S., ElHefnawi, M., Habashy, S., El-Adawy, M., Esmat, G., et al. 2020. Machine Learning Prediction Models for Diagnosing Hepatocellular Carcinoma with HCV-related Chronic Liver Disease. *Computer methods and programs in biomedicine*, 196, 105551.

Küresel Bulanık TOPSIS Yöntemi ile 3. Part Tersine Lojistik Hizmet Sağlayıcı Seçimi

Fulya Zaralı *

*₁ Kayseri Üniversitesi Develi Hüseyin Şahin MYO, KAYSERİ

(Alınış / Received: 30.03.2022, Kabul / Accepted: 31.05.2022, Online Yayınlanma / Published Online: 23.08.2022)

Anahtar Kelimeler

Küresel Bulanık TOPSIS 1,
3. Part Tersine Lojistik
Hizmet Sağlayıcı 2,
ÇKKV 3

Öz: Çevresel nedenlerle ihtiyaç duyulan ve işletmeler tarafından rekabet avantajı olarak görülen kullanılmış malların geri dönüştürülmesi sonucunda tersine lojistiğin önemi her geçen gün artmaktadır. Tersine lojistik sistemlerinde yapılan değişiklikler sonucunda işletmelerin karlılıkları artmakta ve tüketiciler nezdindeki imajları iyileşmektedir. Tersine lojistik hizmetleri genellikle işletmeler tarafından 3PRLP'ye dış kaynaklı olarak verilir. Bir firma için uygun olmayan bir 3PRLP seçmek, kaynak verimliliğini azaltacak, operasyonel tehlikeleri artıracak ve şirketin uzun vadeli büyümesine potansiyel olarak zarar verecektir. Sonuç olarak, uygun 3PRLP değerlendirmesi ve seçimi, çeşitli kriterler, grup karar verme ve çeşitli belirsizlik seviyeleri gerektirebilir. Bu nedenle, bu çalışmada tersine lojistik faaliyeti gösteren işletmelerin belirsizliği dikkate alan ve 3PRLP seçiminde ve değerlendirmesinde yardımcı olabilecek SFS dayalı TOPSIS modeli önerilmiştir. Önerilen model Alüminyum sektöründeki bir işletme için uygulanmış ve sonuçları paylaşılmıştır.

Third Part Reverse Logistics Service Provider Selection Using the Spherical Fuzzy TOPSIS Method

Keywords

Spherical Fuzzy TOPSIS 1,
Third Part Reverse Logistics
Service Provider 2,
MCDM 3

Abstract: The relevance of reverse logistics is increasing day by day as a result of the recycling of used goods, which is required for environmental reasons and seen as a competitive advantage by enterprises. The profitability of enterprises increases and their image in the eyes of consumers improves as a result of changes achieved in reverse logistics systems. Reverse logistics services are typically outsourced to 3PRLP by businesses. Choosing an inappropriate 3PRLP for a firm will diminish resource efficiency, increase operational hazards, and potentially harm the company's long-term growth. As a result, the SFS-based TOPSIS model has been suggested in this study, which takes uncertainty into consideration and can aid in the selection and evaluation of 3PRLP. The proposed model is applied on a company in the aluminum industry, and the findings are presented.

*Corresponding Author, email: fzarali@gmail.com

1. Introduction

Reverse Logistics (RL) is the process of planning, implementing, and controlling the efficient, cost-effective flow of raw materials, in-process inventory, finished items, and related data from the point of consumption to the point of origin [1]. The backward movement of materials from the customer to the supplier is known as logistics, and it aims to maximize the value generated from the returned product while lowering the total cost of RL [2]. While RL efforts help businesses save money, they also boost their reputation. RL is a method for businesses to become more ecologically friendly. Many firms throughout the world have recognized the value of RL in terms of both cost and environmental impact, and have implemented it into their business missions. A strong RL technique gives a

company a competitive advantage by lowering the cost of raw materials and material acquisition, lowering the customer's purchasing risk, shortening response time, satisfying social duty, and increasing the company's image as a "green" company [3]. RL is becoming increasingly important as a result of these developments. As a result, some organizations that require an efficient RL network build their own, while others outsource their RL activities. As a result of this situation, third-party logistics companies that specialize in RL are becoming more important [4].

For enterprises to effectively adopt RL, an appropriate RL network for reverse processes such as collection, separation, inspection, storage, disassembly, compaction, and delivery must be established. RL can be done using an existing network or through specialized RL companies. Many organizations, even successful forward logistics operators, are unable to handle the reverse flow properly and effectively. The majority of logistics systems are unprepared to handle product movement in the reverse channel [5]. RL system operations and management is a difficult process that necessitates a lot of infrastructure, technology, expertise, and experience [6]. Many businesses opt to outsource their logistics to specialist third-party logistics service providers in order to gain a competitive advantage, cut expenses, and increase the quality of second-hand product recovery [7]. As a result, it's critical for businesses to choose the best third-party reverse logistics provider (3PRLP) based on the desired selection criteria [8]. This condition poses a difficult area in terms of how businesses will select and evaluate 3PRLP [4]. The 3PRLP selection procedure is frequently carried out in a complicated and unpredictable environment, making it difficult for decision-makers to make definite decisions. When developing a decision model, all of these factors should be taken into account [1]. This study's goal is to develop a selection and assessment model that can aid in the selection and evaluation of organizations that operate in RL while taking uncertainty into consideration, as well as to deploy an application. As a result, for the selection and evaluation of 3PRLP, the TOPSIS method based on Spherical Fuzzy (SF) clusters is proposed in the study, which takes into account a wider preference area and degree of indecision that companies can easily use in their daily work, and the proposed method is applied to the Aluminum industry. New fuzzy sets, known as spherical fuzzy sets (SFS), give DM more options, and they can describe the degree of indecision about an alternative based on a criterion, regardless of membership or non-membership degrees. The theoretical foundation of SFS is built on Pythagorean fuzzy sets' wider field approach and the premise that neutrosophic sets define instability independently. SFS combine these two approaches in a single theory [9]. SFS allow experts to assign more degrees of membership, non-membership, and hesitation. SFS outperform Pythagorean, intuitionistic fuzzy, and neutrosophic sets in this regard. Because of the fuzziness, judgments are stated more fully in SFS. Degrees of non-membership and hesitation are used to define membership in fuzzy sets. The degree of hesitation is assigned independently of the other two parameters in SFS theory [10]. In the selection of 3PRLP, SFS have not yet been used. This article is unique in that it is the first to use SFS in the 3PRLP selection.

The TOPSIS method based on SFS will be used to give a solution to the 3PRLP selection problem that takes into account more than one expert, multiple criteria, and alternatives. This research aids aluminum manufacturers in the evaluation and selection of 3PRLP partners, while also improving RL efficiency and effectiveness. The research will contribute to the literature in this subject by helping to develop the 3PRLP evaluation criteria, prioritizing and selecting the best alternative among the options in the SFS.

The following is how the rest of the article is structured. In Chapter 2, a review of the literature on 3PRLP is provided. The proposed approach and SFS are discussed in Chapter 3. The application for the Aluminum sector is presented in Chapter 4. Chapter 5 contains the debate and conclusion.

2. Literature Review

The 3PRLP selection is considered a multi-criteria decision-making problem due to the existence of many relevant criteria. When we look at the literature, we discover that many multi-criteria decision-making procedures are utilized to choose 3PRLP. A summary of these studies may be seen below.

Meade and Sarkis [11] used the ANP method to select 3PRLP based on product life cycle stages, organizational performance, RL process functions, and the organization's role in reverse logistics. For 3PRLP selection, Efendigil et al. [12] suggested a two-stage model based on artificial neural networks and fuzzy AHP. On-time delivery rate, approved occupancy rate, service quality level, unit operating cost, capacity utilization rate, total order cycle time, system flexibility index, level index, rise in market share, and R&D ratio are among the criteria are utilized in their research. Kannan et al. [2] used the ISM (Interpretive Structural Model) and fuzzy TOPSIS methods to select 3PRLP for the battery recycling industry, based on the criteria of quality, delivery, inability to meet future requirements, willingness, attitude, RL cost, rejection rate. For 3PRLP selection, Saen [13] employed data envelopment analysis with factors including total cost of shipments, reputation of 3PRLP, and number of flawless invoices received from 3PRLP provider. Cheng and Lee [14] used the ANP (Analytical Network Process) method to select 3PRLP for

advanced technology manufacturing companies, based on warehouse management, transportation management, information technology management, and value-added services criteria. Using the ANP technique, Govindan et al. [15] chose 3PRLP based on qualifications, operational performance, organizational role, technical advancements, risk management, financial performance, user satisfaction, geographical dispersion, and network size. Senthil et al. [16] used the AHP and TOPSIS method in a fuzzy environment to select 3PRLP for a plastics recycling factory based on organizational performance criteria, RL process functions, organizational role of reverse logistics, resource capacity, corporate alliance, location experience, and communication systems. For business performance, resource capacity, delivery service RL operations, communication and information technology system, geographic location, and experience criteria, Prakash and Barua [17] presented a combined model for 3PRLP selection utilizing Fuzzy AHP and VIKOR techniques. Zarbakhshnia et al. [6] suggested a combined model for 3PRLP selection based on economic, environmental, social, and risk criteria, using fuzzy SWARA-fuzzy COPRAS methodologies. Bai and Sarkis [5] proposed the rough set-based TOPSIS and VIKOR method for 3PRLP selection using cost, time, quality, flexibility, innovation criteria. Pamucar et al. [18] developed a novel technique for 3PRLP selection employing service, logistics cost information system, intangible, and geolocation criteria, which includes BWM-WASPAS-MABAC methods. By merging the Combined Compromise Solution (CoCoSo) and CRITIC methodologies with Single Value Neutrophic Clusters (SVNSs) and employing economic, environmental, social, and risk criteria, Mishra et al. [19] developed a new integrated methodology to selection 3PRLP. Using the criteria of basic capabilities, RL activities, RL functions, technology and communication competences, environmental factors, quality, cost, and experience, Arsu and Aycin [20] proposed the fuzzy SWARA technique for 3PRLP selection.

When looking at research that employed the SF- TOPSIS method, Kocakaya et al. [21] used the SF-AHP-TOPSIS method for Regional Aircraft Type Selection in Turkey. Mathew et al. [22] used the the SF- AHP-TOPSIS approach for the production system selection problem. Gündoğdu and Kahraman [23] used the SF-TOPSIS approach for the ideal placement selection of the electric car charging station. Jaller and Otay [24] evaluated sustainable vehicle solutions for freight transport using the SF-AHP -TOPSIS technique. Onar et al. [25] used the SF-TOPSIS method for selection of learning analytics methods. For the Automated Storage and Retrieval Systems technology selection problem, Bolturk [26] used the SF- TOPSIS technique.

When we look at the literature, we see multi-criteria decision-making strategies for 3PRLP selection that incorporate typical fuzzy sets. In the selection of 3PRLP, there are multiple DM, and DM often have insufficient information and cannot master all criteria's aspects. DM make decisions in an environment that is both complex and uncertain [27]. In uncertain situations, SFS are effective decision-making tools. Because of the uncertainty, DM judgments are expressed more comprehensively in SFS. In this study, the TOPSIS method combined with the SFS is proposed for 3PRLP selection. The proposed methods are intended to contribute to the literature on 3PRLP selection by dealing with uncertainty more effectively and to assist managers in making decisions.

3. Material and Method

3.1. Spherical Fuzzy Sets

Kutlu Gündoğdu and Kahraman introduced SFS as an extension of IFS. The idea behind SFS is to let DM to generalize other extensions of fuzzy sets by defining a membership function on a spherical surface and independently assign the parameters of that membership function with a larger domain. A SFS must satisfy the following condition [9,27]:

$$0 \leq \mu_A^2(u) + \mu_A^2(u) + \mu_A^2(u) \leq 1 \quad \forall u \in U$$

3.1.1. Operations on the Spherical Fuzzy Sets

Addition: The operation of adding two SFS X_S and Y_S is stated as follows.

$$X_S \oplus Y_S = \{(\mu_{X_S}^2 + \mu_{Y_S}^2 - \mu_{X_S}^2 \cdot \mu_{Y_S}^2)^{1/2}, \vartheta_{X_S} \vartheta_{Y_S}, ((1 - \mu_{Y_S}^2) \pi_{X_S}^2 + (1 - \mu_{X_S}^2) \pi_{Y_S}^2 - \pi_{X_S}^2 \cdot \pi_{Y_S}^2)^{1/2}\} \quad (1)$$

Product: The following is an expression for multiplying two SFS, X_S and Y_S . In decision-making method applications, this step is critical for constructing weighted decision matrices.

$$X_S \otimes Y_S = \{\mu_{X_S} \mu_{Y_S}, (\vartheta_{X_S}^2 + \vartheta_{Y_S}^2 - \vartheta_{X_S}^2 \cdot \vartheta_{Y_S}^2)^{1/2}, ((1 - \vartheta_{Y_S}^2) \pi_{X_S}^2 + (1 - \vartheta_{X_S}^2) \pi_{Y_S}^2 - \pi_{X_S}^2 \cdot \pi_{Y_S}^2)^{1/2}\} \quad (2)$$

Multiplying with a Scalar: The procedure for multiplying a scalar number by $\lambda > 0$ is as follows.

$$\lambda \cdot X_S = (1 - (1 - \mu_{X_S}^2)^\lambda)^{1/2}, \vartheta_{X_S}^\lambda, ((1 - \mu_{X_S}^2)^\lambda - (1 - \mu_{X_S}^2 - \pi_{X_S}^2)^\lambda)^{1/2} \quad (3)$$

In addition to the basic operations $X_S = (\mu_{X_S}, \vartheta_{X_S}, \pi_{X_S})$ ve $Y_S = (\mu_{Y_S}, \vartheta_{Y_S}, \pi_{Y_S})$ including $\lambda, \lambda_1, \lambda_2 > 0$ the following conditions are satisfied for SFS.

- ✓ $X_S \oplus Y_S = Y_S \oplus X_S$
- ✓ $X_S \otimes Y_S = Y_S \otimes X_S$
- ✓ $\lambda \cdot (X_S \oplus Y_S) = \lambda \cdot X_S \oplus \lambda \cdot Y_S$
- ✓ $\lambda_1 \cdot X_S \oplus \lambda_2 \cdot X_S = (\lambda_1 + \lambda_2) X_S$
- ✓ $(X_S \otimes Y_S)^\lambda = X_S^\lambda \otimes Y_S^\lambda$
- ✓ $X_S^{\lambda_1} \otimes X_S^{\lambda_2} = (X_S)^{\lambda_1 + \lambda_2}$

Union: The joining operation between two SFS X_S and Y_S can be described in the following way.

$$X_S \cup Y_S = \left\{ \max\{\mu_{X_S}, \mu_{Y_S}\}, \min\{\vartheta_{X_S}, \vartheta_{Y_S}\}, \max\left\{1 - ((\max\{\mu_{X_S}, \mu_{Y_S}\})^2 + (\min\{\mu_{X_S}, \mu_{Y_S}\})^2), \max\{\mu_{X_S}, \mu_{Y_S}\}\right\} \right\} \quad (5)$$

Intersection: It is possible to express the intersection operation between two SFS X_S and Y_S as follows:

$$X_S \cap Y_S = \left\{ \min\{\mu_{X_S}, \mu_{Y_S}\}, \max\{\vartheta_{X_S}, \vartheta_{Y_S}\}, \min\left\{1 - ((\min\{\mu_{X_S}, \mu_{Y_S}\})^2 + (\max\{\mu_{X_S}, \mu_{Y_S}\})^2), \min\{\mu_{X_S}, \mu_{Y_S}\}\right\} \right\} \quad (6)$$

Score and Accuracy Functions: Score and accuracy are two functions that can be used to evaluate options. An accurate number is obtained from a fuzzy number using this method.

$$Score(X_S) = (\mu_{X_S} - \pi_{X_S})^2 - (\vartheta_{X_S} - \pi_{X_S})^2 \quad (7)$$

$$Accuracy(X_S) = \mu_{X_S}^2 + \vartheta_{X_S}^2 + \pi_{X_S}^2 \quad (8)$$

3.2. Spherical Fuzzy - TOPSIS

A MCDM problem can be expressed as a decision matrix whose elements indicate the values of all alternatives with respect to each criterion under interval-valued SF environment. Let $X = \{x_1, x_2 \dots x_m\}$ ($m \geq 2$) be a discrete set of m feasible alternatives and $C = \{c_1, c_2 \dots c_m\}$ be a finite set of criteria, and $W = \{w_1, w_2 \dots w_n\}$ be the weight vector of all criteria which satisfies $0 \leq w_j \leq 1$ and $\sum_{j=1}^n w_j = 1$.

Step 1: A list of DM' evaluations based on linguistic phrases is created. The scale in Table 1 can be used for this.

Table 1. Linguistic terms and SF Numbers [9]

Linguistic terms	SF Numbers
Absolutely more Importance (AMI)	0,9-0,1-0,1
Very High Importance (VHI)	0,8-0,2-0,2
High Importance (HI)	0,7-0,3-0,3
Slightly More Importance (SMI)	0,6-0,4-0,4
Equally Importance (EI)	0,5-0,5-0,5
Slightly Low Importance (SLI)	0,4-0,6-0,4
Low Importance (LI)	0,3-0,7-0,3
Very Low Importance (VLI)	0,2-0,8-0,2
Absolutely Low Importance (ALI)	0,1-0,9-0,1

Step 2: Because not all criteria are equally important, the weighted average (SWAM) operator is used to combine each DM's assessment of the criteria's value.

$$SWAM_w(X_{S_1}, \dots, X_{S_n}) = w_1 X_{S_1} + w_2 X_{S_2} + \dots + w_n X_{S_n} \\ = \left\{ \left[1 - \prod_{i=1}^n (1 - \mu_{X_{Si}}^2)^{w_i} \right]^{1/2}, \prod_{i=1}^n \vartheta_{X_{Si}}^{w_i}, \left[\prod_{i=1}^n (1 - \mu_{X_{Si}}^2)^{w_i} - \prod_{i=1}^n (1 - \mu_{X_{Si}}^2 - \pi_{X_{Si}}^2)^{w_i} \right]^{1/2} \right\} \quad (9)$$

The opinions of DM's are used to create a SF decision matrix. C_j . in terms of criteria, the $C_j \cdot X_i = (\mu_{ij}, \vartheta_{ij}, \pi_{ij})$ values formed according to the evaluation of the X_i alternative are placed in the matrix and the following D-DECISION MATRIX is created.

$$D = (C_j.(X_i))_{m \times n} = \begin{pmatrix} \mu_{11}, \vartheta_{11}, \pi_{11} & \cdots & \mu_{1n}, \vartheta_{1n}, \pi_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mu_{m1}, \vartheta_{m1}, \pi_{m1} & \cdots & \mu_{mn}, \vartheta_{mn}, \pi_{mn} \end{pmatrix} \quad (10)$$

Step 3: Starting with the matrix formed in the previous step, the weighted SF matrix is created as follows, after calculating the weight of each criterion and the degree of alternatives.

$$D = (C_j.(X_{iw}))_{m \times n} = \begin{pmatrix} \mu_{11w}, \vartheta_{11w}, \pi_{11w} & \cdots & \mu_{1nw}, \vartheta_{1nw}, \pi_{1nw} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mu_{m1w}, \vartheta_{m1w}, \pi_{m1w} & \cdots & \mu_{mnw}, \vartheta_{mnw}, \pi_{mnw} \end{pmatrix} \quad (11)$$

Step 4: For each alternative-criteria pair, the weighted SF matrix is clarified, and the score functions are written. The derived score values are used to convert fuzzy values to exact values, yielding ideal solutions.

$$Score(C_j.(X_{iw})) = (\mu_{ijw} - \pi_{ijw})^2 - (\vartheta_{ijw} - \pi_{ijw})^2 \quad (12)$$

Step 5: The SF positive ideal solution (SF-PIS) and the SF negative ideal solution (SF-NIS) are calculated using the score values.

For the SF-PIS, the highest score for each criterion has value. Then, for the criterion with the greatest score value, the weighted SF value is written.

$$X^* = \{C_j, \max_i \langle Score(C_j.(X_{iw})) \rangle \mid J = 1, 2 \dots n\}$$

$$X^* = \{\langle C_1, \mu_1^*, \vartheta_1^*, \pi_1^* \rangle, \langle C_2, \mu_2^*, \vartheta_2^*, \pi_2^* \rangle \dots \langle C_n, \mu_n^*, \vartheta_n^*, \pi_n^* \rangle\} \quad (13)$$

The lowest score value of each criterion is found for the SF-NIS. Then, for the criterion with the lowest score value, the weighted SF value is written.

$$X^- = \{C_j, \min_i \langle Score(C_j.(X_{iw})) \rangle \mid J = 1, 2 \dots n\}$$

$$X^- = \{\langle C_1, \mu_1^-, \vartheta_1^-, \pi_1^- \rangle, \langle C_2, \mu_2^-, \vartheta_2^-, \pi_2^- \rangle \dots \langle C_n, \mu_n^-, \vartheta_n^-, \pi_n^- \rangle\} \quad (14)$$

Step 6: The distances from SF-PIS and SF-NIS are determined for each (X_i) option. In the calculations, the Euclidean distance formula is utilized. The SF-NIS is calculated using the equation below. As a result, the distance between each criterion and the negative ideal solution is calculated. The greater the distance, the more likely it is that a selection will be made.

$$D(X_i, X^*) = \sqrt{\frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n ((\mu_{xi} - \mu_{x^*})^2 + (\vartheta_{xi} - \vartheta_{x^*})^2 + (\pi_{xi} - \pi_{x^*})^2)} \quad (15)$$

The SF-PIS is calculated using the equation below. As a result, the distance between each criterion and the positive ideal solution is calculated. The closer this distance is, the more likely it is that a selection will be made.

$$D(X_i, X^*) = \sqrt{\frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n ((\mu_{xi} - \mu_{x^*})^2 + (\vartheta_{xi} - \vartheta_{x^*})^2 + (\pi_{xi} - \pi_{x^*})^2)} \quad (16)$$

Step 7: The minimum of the distance to the SF-PIS and the maximum of the distance to the SF-NIS are selected.

$$D_{max}(X_i, X^-) = \max_{1 \leq i \leq m} D(X_i, X^-) \quad (17)$$

$$D_{min}(X_i, X^*) = \max_{1 \leq i \leq m} D(X_i, X^*) \quad (18)$$

Step 8: The modified proximity ratio is calculated using the values determined in step 7.

$$\xi((X_i)) = \frac{D(X_i, X^-)}{D_{max}(X_i, X^-)} - \frac{D(X_i, X^*)}{D_{min}(X_i, X^*)} \quad (19)$$

Step 9: Alternatives are rated according to their availability, and the best option is chosen based on this ranking. The option with the highest value is chosen as the most appropriate.

4. Results

3PRLP is selected for an aluminum producer business. First, an expert team of three DM (e1, e2, e3) is constituted, consisting of a senior manager, a functional manager, and a process owner. First, the criteria listed in the literature section are studied, and four main criteria and eleven sub-criteria that are applicable and understandable are identified. The criteria are shown in Figure 1.

Criteria	Sub-Criteria	Index value
Reverse Logistics Operations	Collection	Co
	Storage	St
	Transportation	Tr
	Repair	Rp
	Recycle	Rc
	Remanufacture	Rm
Cost	Reverse Logistics cost	Rlc
Experience	Corporate image	Ci
	Industry experience	Ie
Quality	Service Quality	Sq
	Customer Satisfaction	Cs

Figure 1. Criteria

For selection, the organization has identified four RL service providers (R1,R2,R3,R4). In accordance with the established criteria and alternatives, a decision model is developed. Figure 2 shows the decision model structure that is constructed. Below are the steps of the SF-TOPSIS.

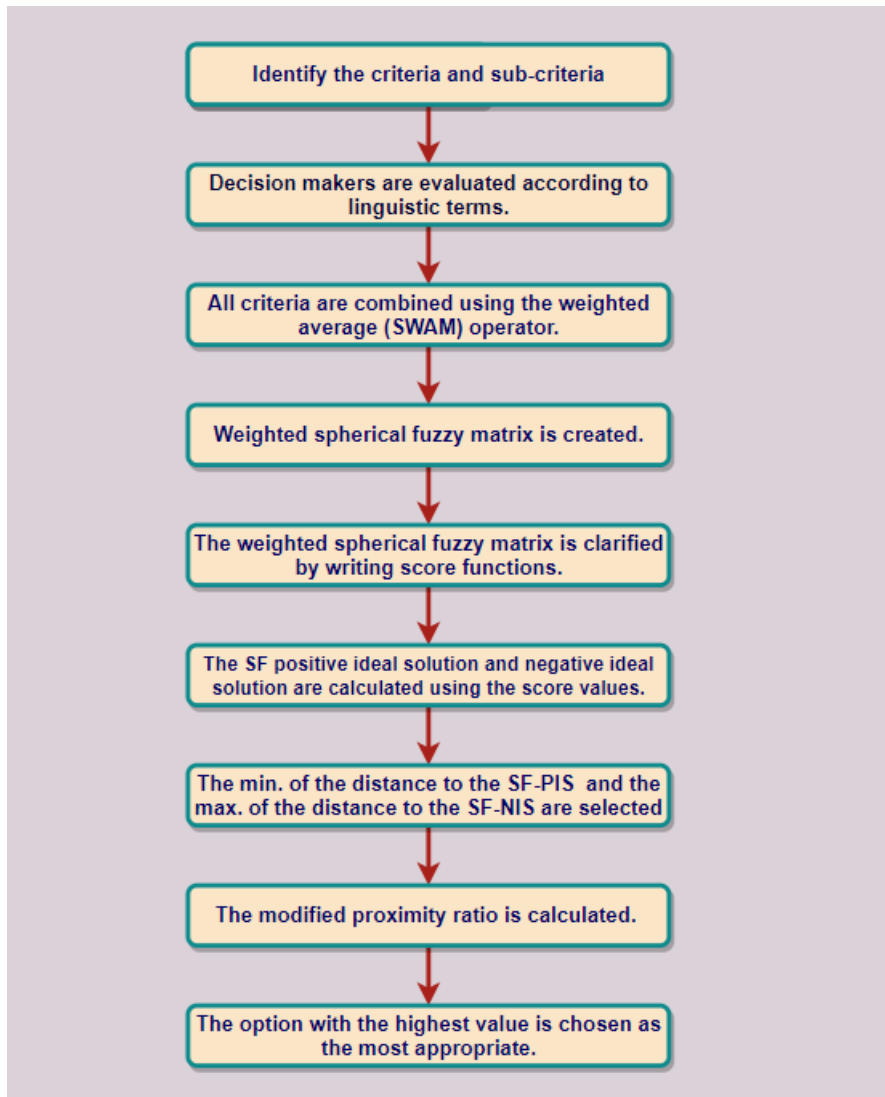


Figure 2. Decision model structure

First, the experts' evaluations are based on the linguistic terms in Table 1 and a table of linguistic variables is generated for each expert. Tables 2, 3, and 4 show the tables that are created for each expert.

Table 2. First expert opinion

	R1	R2	R3	R4
Co	HI	VHI	VHI	HI
St	SMI	VHI	VHI	HI
Tr	HI	HI	SMI	HI
Rp	HI	VHI	EI	EI
Rc	EI	HI	EI	HI
Rm	EI	HI	VHI	HI
Rlc	HI	EI	SMI	VHI
Ci	HI	SMI	EI	VHI
Ie	VHI	SMI	SMI	HI
Sq	HI	HI	EI	HI
Cs	VHI	HI	EI	EI

Table 3. Second expert opinion

	R1	R2	R3	R4
--	----	----	----	----

Co	HI	SMI	EI	VHI
St	HI	SMI	EI	VHI
Tr	EI	HI	HI	SMI
Rp	SMI	HI	SMI	HI
Rc	VHI	VHI	SMI	HI
Rm	VHI	VHI	VHI	EI
Rlc	VHI	HI	VHI	VHI
Ci	HI	SMI	HI	HI
Ie	EI	HI	SMI	EI
Sq	HI	HI	EI	HI
Cs	EI	HI	EI	EI

Table 4.Third expert opinion

	R1	R2	R3	R4
Co	VHI	SMI	VHI	EI
St	HI	EI	SMI	VHI
Tr	EI	HI	SMI	HI
Rp	EI	SMI	VHI	HI
Rc	HI	VHI	SMI	EI
Rm	HI	SMI	VHI	VHI
Rlc	VHI	HI	HI	EI
Ci	HI	VHI	VHI	EI
Ie	EI	EI	EI	HI
Sq	EI	VHI	HI	EI
Cs	HI	VHI	HI	HI

Each expert is asked to assess the criteria using the linguistic expressions listed in Table 1. Table 5 presents expert opinions on the criteria.

Table 5. Expert opinions for criteria

	e1	e2	e3
Co	AMI	VHI	VHI
St	HI	VHI	HI
Tr	EI	SMI	HI
Rp	EI	SMI	VHI
Rc	HI	VHI	AMI
Rm	EI	SLI	HI
Rlc	VHI	AMI	AMI
Ci	VHI	EI	HI
Ie	AMI	SMI	HI
Sq	HI	SLI	EI
Cs	HI	HI	VHI

The SWAM operator is used to combine the DM' decisions in the second step. Experts' weights are needed for splicing. According to their seniority and experience, experts are weighted as e1:0,45, e2:0,30, and e3:0,25. The decision matrix is generated by carrying out the SWAM operator operations in Eq 9. Table 6 shows the decision matrix.

Table 6. The decision matrix

	C1	C2	C3	C4
R1	(0,73 0,27 0,27)	(0,66 0,34 0,34)	(0,65 0,35 0,35)	(0,63 0,37 0,37)

R2	(0,72 0,28 0,28)	(0,70 0,30 0,30)	(0,70 0,30 0,30)	(0,73 0,27 0,27)
R3	(0,74 0,26 0,26)	(0,69 0,31 0,31)	(0,64 0,36 0,36)	(0,64 0,36 0,36)
R4	(0,71 0,29 0,25)	(0,76 0,24 0,24)	(0,68 0,32 0,32)	(0,62 0,38 0,38)
	C5	C6	C7	C8
R1	(0,67 0,33 0,33)	(0,67 0,33 0,33)	(0,77 0,23 0,23)	(0,70 0,30 0,30)
R2	(0,67 0,33 0,33)	(0,68 0,32 0,32)	(0,71 0,29 0,29)	(0,68 0,32 0,32)
R3	(0,57 0,43 0,43)	(0,80 0,20 0,20)	(0,66 0,34 0,34)	(0,66 0,34 0,34)
R4	(0,66 0,34 0,34)	(0,69 0,31 0,31)	(0,73 0,27 0,27)	(0,69 0,31 0,31)
	C9	C10	C11	
R1	(0,68 0,32 0,32)	(0,67 0,33 0,33)	(0,71 0,29 0,29)	
R2	(0,62 0,38 0,38)	(0,73 0,27 0,27)	(0,73 0,27 0,27)	
R3	(0,59 0,41 0,41)	(0,65 0,35 0,35)	(0,56 0,44 0,44)	
R4	(0,66 0,34 0,34)	(0,66 0,34 0,34)	(0,56 0,44 0,44)	

The weights of the criteria are calculated in the third step. Each criterion's weights are not equal. Each expert's level of priority for criteria is likewise diverse. Each expert's SF values for criteria are merged for this purpose. The expert team assessed each criterion using linguistic phrases. The evaluation findings are shown in Table 7. The SWAM operator is used to calculate the weight values of the criterion, and equation 9 is used to calculate them. The results are shown in Table 8.

Table 7. The Evaluation

	e1	e2	e3
Co	AMI	VHI	VHI
St	HI	VHI	HI
Tr	EI	SMI	HI
Rp	EI	SMI	VHI
Rc	HI	VHI	AMI
Rm	EI	SLI	HI
Rlc	VHI	AMI	AMI
Ci	VHI	EI	HI
Ie	AMI	SMI	HI
Sq	HI	EI	HI
Cs	HI	HI	VHI

Table 8. Weight Values of The Criterion

	W		
Co	0,85	0,15	0,15
St	0,73	0,27	0,27
Tr	0,59	0,41	0,41
Rp	0,64	0,36	0,36
Rc	0,80	0,20	0,20
Rm	0,54	0,46	0,46
Rlc	0,87	0,13	0,13
Ci	0,71	0,29	0,29
Ie	0,81	0,19	0,19
Sq	0,60	0,40	0,40
Cs	0,73	0,24	0,24

A weighted SF- decision matrix is created in the fourth stage. Equation 2 is used to create a weighted combined decision matrix after the weights of the criterion and the combined DECISION MATRIX are generated. The weighted SF decision matrix obtained is shown in Table 9.

Table 9. The Weighted SF- Decision Matrix

C1			C2			C3			C4		
(0,62	0,31	0,30)	(0,48	0,42	0,40)	(0,38	0,52	0,48)	(0,40	0,50	0,46)
(0,61	0,31	0,31)	(0,51	0,40	0,38)	(0,41	0,49	0,46)	(0,47	0,44	0,42)
(0,63	0,30	0,29)	(0,50	0,40	0,38)	(0,38	0,53	0,48)	(0,41	0,49	0,46)
(0,60	0,32	0,28)	(0,55	0,36	0,34)	(0,40	0,50	0,47)	(0,40	0,51	0,47)
C5			C6			C7			C8		
(0,54	0,38	0,37)	(0,36	0,55	0,50)	(0,67	0,26	0,26)	(0,50	0,41	0,39)
(0,54	0,38	0,37)	(0,37	0,54	0,50)	(0,62	0,32	0,31)	(0,48	0,42	0,40)
(0,46	0,47	0,45)	(0,43	0,49	0,48)	(0,57	0,36	0,36)	(0,47	0,44	0,41)
(0,53	0,39	0,38)	(0,37	0,54	0,50)	(0,64	0,30	0,29)	(0,49	0,41	0,39)
C9			C10			C11					
(0,55	0,37	0,36)	(0,40	0,50	0,50)	(0,52	0,37	0,37)			
(0,50	0,42	0,41)	(0,44	0,47	0,44)	(0,53	0,36	0,34)			
(0,48	0,45	0,43)	(0,39	0,51	0,47)	(0,41	0,49	0,47)			
(0,53	0,38	0,37)	(0,40	0,51	0,47)	(0,41	0,49	0,47)			

In the fifth stage, the score function in Eq.12 is written and translated to exact values for each value in the weighted SF- decision matrix. Table 10 shows the value of the score function.

Table 10. The value of the score function

	C1	C2	C3	C4	C5	C6	C7	C8	C9	C10	C11
R1	0,099	0,003	0,017	0,008	0,024	0,032	0,166	0,008	0,034	0,010	0,022
R2	0,088	0,013	0,005	0,000	0,024	0,028	0,091	0,003	0,007	0,000	0,031
R3	0,110	0,010	0,020	0,006	0,000	0,003	0,045	0,001	0,001	0,013	0,006
R4	0,077	0,040	0,009	0,010	0,019	0,025	0,114	0,005	0,023	0,011	0,006

The score values are used to find SF positive and SF negative ideal solutions. For each criterion, the lowest and greatest values of the score functions are determined. On the score function charts, the values discovered are colored. Yellow represents the one with the highest value according to the Eq.13 formula. Blue represents the lowest value according to the Eq.14 formula.

Positive ideal and negative ideal solutions are the values in the SF decision matrix that correspond to the highest and lowest scores. Table 11 lists the positive and negative solutions found.

Table 11. Positive and Negative Ideal Solutions

C	X^*			X^-		
Co	0,63	0,30	0,29	0,60	0,32	0,28
St	0,55	0,36	0,34	0,48	0,42	0,40
Tr	0,38	0,53	0,48	0,41	0,49	0,46
Rp	0,40	0,51	0,47	0,47	0,44	0,42
Rc	0,54	0,38	0,37	0,46	0,47	0,45
Rm	0,36	0,55	0,50	0,43	0,49	0,48
Rlc	0,67	0,26	0,26	0,57	0,36	0,36
Ci	0,50	0,41	0,39	0,47	0,44	0,41
Ie	0,55	0,37	0,36	0,48	0,45	0,43
Sq	0,39	0,51	0,47	0,44	0,47	0,44
Cs	0,53	0,36	0,34	0,41	0,49	0,47

Each criterion's distance from the positive ideal and positive negative solutions is calculated at the 6th steps. The Euclidean distance formulas in Eq 15-16 are used to compute the distances of each criterion to SF-NIS and SF-PIS. Table 12 summarizes the findings.

Table 12. Distance Values

Alternatives	$D(X_i, X^*)$	$D(X_i, X^-)$
R1	0,030	0,077
R2	0,043	0,064
R3	0,077	0,030
R4	0,052	0,060

The closeness ratio is calculated in the seventh stage. Table 13 shows how to determine the closeness ratio for each choice using the approach in Eq.19.

Table 13. The Closeness Ratio

Alternatives	Proximity Ratios	Ranking
R1	0,000	4
R2	0,602	3
R3	2,177	1
R4	0,954	2

Finally, the closeness ratio values are used to order the data. It is established that $R3 > R4 > R2 > R1$ when we ranked the companies according to the closeness ratios in the table. The 3PRLP firm with the greatest score is the 3rd Firm, and the 3PRLP firm with the lowest score is the 1th Firm, according to these values.

5. Discussion and Conclusion

The importance of selecting 3PRLPs has grown as firms' outsourcing activities have increased. This has the potential to reduce costs while significantly improving customer service. This paper presents a multi-criteria group decision making method for 3PRLP selection based on SF-TOPSIS. SF-TOPSIS provides a diverse set of preferences as well as independent membership functions. When determining the best solutions, the method employs the score function. The score function takes into account the degree of non-membership, the degree of indecision, and the degree of membership. The ratings of each alternative according to each criterion, as well as the weights of each criterion, are given as linguistic terms denoted by SFnumbers during the evaluation process. In addition, the global fuzzy mean operator is used to collect decision makers' opinions. The relative closeness coefficients of the alternatives are obtained and the alternatives are ranked after calculating the SF positive-ideal solution and the SF negative-ideal solution based on the Euclidean distance.

The proposed model for an aluminum producer business is presented in order to achieve efficiency and effectiveness in RL applications. With the help of three expert teams formed from within the company, four main criteria and eleven sub-criteria are determined. In order to be successful in 3PRLP applications, the company should pay more attention to the RL costs , collection , and industry experience criteria. The proposed approach empowers managers/practitioners to make decisions about 3PRLP implementation in their organizations. The obtained results are discussed with the sector and are found to be significant based on the criteria used.

The proposed method is designed for a single industry. In future studies, this method could be applied to a variety of industries. Furthermore, the proposed method can be compared to various fuzzy numbers, or it can be extended and compared to various MCDM methods using an integrated approach.

References

- [1] Chen, Z. S., Zhang, X., Govindan, K., Wang, X. J., & Chin, K. S. (2021). Third-party RLprovider selection: A computational semantic analysis-based multi-perspective multi-attribute decision-making approach. *Expert Systems with Applications*, 166, 114051.
- [2] Kannan, G., Pokharel, S., & Kumar, P. S. (2009). A hybrid approach using ISM and fuzzy TOPSIS for the selection of RLprovider. *Resources, conservation and recycling*, 54(1), 28-36.
- [3] Sünbül, M. B. (2014). Tersine lojistik servis sağlayıcısı seçiminde AHP yöntemi: Kahramanmaraş metal sanayi sektöründe bir uygulama (Master's thesis, Sosyal Bilimler Enstitüsü).
- [4] Karaağaçlı, Y. (2014). Üçüncü parti tersine lojistik sağlayıcı firma seçimi ve değerlendirilmesine yönelik bütünlük model tasarımı (Doctoral dissertation, Fen Bilimleri Enstitüsü).

- [5] Bai, C., & Sarkis, J. (2019). Integrating and extending data and decision tools for sustainable third-party RLprovider selection. *Computers & Operations Research*, 110, 188-207.
- [6] Zarbakhshnia, N., Soleimani, H., & Ghaderi, H. (2018). Sustainable third-party RLprovider evaluation and selection using fuzzy SWARA and developed fuzzy COPRAS in the presence of risk criteria. *Applied Soft Computing*, 65, 307-319.
- [7] Govindan, K., Palaniappan, M., Zhu, Q., & Kannan, D. (2012). Analysis of third party reverse logistics provider using interpretive structural modeling. *International Journal of Production Economics*, 140(1), 204-211.
- [8] Zarbakhshnia, N., Wu, Y., Govindan, K., & Soleimani, H. (2020). A novel hybrid multiple attribute decision-making approach for outsourcing sustainable reverse logistics. *Journal of Cleaner Production*, 242, 118461.
- [9] Gündoğdu, F. K., & Kahraman, C. (2019). A novel fuzzy TOPSIS method using emerging interval-valued spherical fuzzy sets. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 85, 307-323.
- [10] Kutlu Gündoğdu, F., & Kahraman, C. (2020). A novel spherical fuzzy analytic hierarchy process and its renewable energy application. *Soft Computing*, 24(6), 4607-4621.
- [11] Meade, L., & Sarkis, J. (2002). A conceptual model for selecting and evaluating third-party RL providers. *Supply Chain Management: An International Journal*.
- [12] Efendigil, T., Önüt, S., & Kongar, E. (2008). A holistic approach for selecting a third-party RLprovider in the presence of vagueness. *Computers & industrial engineering*, 54(2), 269-287.
- [13] Saen, R. F. (2010). A new model for selecting third-party RLproviders in the presence of multiple dual-role factors. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 46(1), 405-410.
- [14] Cheng, Y. H., & Lee, F. (2010). Outsourcing RLof high-tech manufacturing firms by using a systematic decision-making approach: TFT-LCD sector in Taiwan. *Industrial marketing management*, 39(7), 1111-1119.
- [15] Govindan, K., Sarkis, J., & Palaniappan, M. (2013). An analytic network process-based multicriteria decision making model for a reverse supply chain. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 68(1), 863-880.
- [16] Senthil, S., Srirangacharyulu, B., & Ramesh, A. (2014). A robust hybrid multi-criteria decision making methodology for contractor evaluation and selection in third-party reverse logistics. *Expert Systems with Applications*, 41(1), 50-58.
- [17] Prakash, C., & Barua, M. K. (2016). A combined MCDM approach for evaluation and selection of third-party RLpartner for Indian electronics industry. *Sustainable Production and Consumption*, 7, 66-78.
- [18] Pamucar, D., Chatterjee, K., & Zavadskas, E. K. (2019). Assessment of third-party logistics provider using multi-criteria decision-making approach based on interval rough numbers. *Computers & Industrial Engineering*, 127, 383-407.
- [19] Mishra, A. R., Rani, P., Krishankumar, R., Zavadskas, E. K., Cavallaro, F., & Ravichandran, K. S. (2021). A hesitant fuzzy combined compromise solution framework-based on discrimination measure for ranking sustainable third-party reverse logistic providers. *Sustainability*, 13(4), 2064.
- [20] Talip, A., & Ayçin, E. (2021). Üçüncü Parti Tersine Lojistik Servis Sağlayıcısı Seçimi Kriterlerinin Bulanık SWARA Yöntemi ile Değerlendirilmesi. *Yaşar Üniversitesi E-Dergisi*, 16(63), 1282-1300.
- [21] Kocakaya, K., Engin, T., Tektaş, M., & AYDIN, U. (2021). Türkiye’de Bölgesel Havayolları için Uçak Tipi Seçimi: Küresel Bulanık AHP-TOPSIS Yöntemlerinin Entegrasyonu. *Akıllı Ulaşım Sistemleri ve Uygulamaları Dergisi*, 4(1), 27-58.
- [22] Mathew, M., Chakraborty, R. K., & Ryan, M. J. (2020). A novel approach integrating AHP and TOPSIS under spherical fuzzy sets for advanced manufacturing system selection. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 96, 103988.
- [23] Kutlu Gündoğdu, F., & Kahraman, C. (2021). Optimal site selection of electric vehicle charging station by using spherical fuzzy TOPSIS method. In *Decision Making with Spherical Fuzzy Sets* (pp. 201-216). Springer, Cham.
- [24] Jaller, M., Otay, I. (2020, July). Evaluating sustainable vehicle technologies for freight transportation using spherical fuzzy AHP and TOPSIS. In *International Conference on Intelligent and Fuzzy Systems* (pp. 118-126). Springer, Cham.
- [25] Onar, S. C., Kahraman, C., Öztayşi, B., & Otay, I. (2020). Selection of learning analytics projects by using spherical fuzzy TOPSIS. In *Developments of Artificial Intelligence Technologies in Computation and Robotics: Proceedings of the 14th International FLINS Conference (FLINS 2020)* (pp. 226-234).
- [26] Boltürk, E. (2019, July). AS/RS technology selection using spherical fuzzy TOPSIS and neutrosophic TOPSIS. In *International Conference on Intelligent and Fuzzy Systems* (pp. 969-976). Springer, Cham.
- [27] Canpolat, M. (2019). Yazılım seçiminde Küresel Bulanık TOPSIS yöntemi ile çok kriterli karar verme (Master's thesis, Fen Bilimleri Enstitüsü).

Farklı Hacimlerdeki Uçucu Külün Isı İle Kürlenene Hava Sürükleyici Katkılı Çimento Harçlarına Etkisi

Oğuzhan ÖZTÜRK¹, Omeed Adwal Ali ALI², Ülkü Sultan KESKİN³, Cengiz ATIŞ⁴

*^{1,3} Konya Teknik Üniversitesi Mühendislik Ve Doğa Bilimleri Fakültesi İnşaat Mühendisliği, KONYA

² Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, KAYSERİ

⁴ Erciyes Üniversitesi Mühendislik Fakültesi İnşaat Mühendisliği, KAYSERİ

(Alınış / Received: 03.01.2021, Kabul / Accepted: 31.05.2022, Online Yayınlanma / Published Online: 23.08.2022)

Anahtar Kelimeler

Hava sürükleyici katkı,
Uçucu kül,
Isı kürü,
Mekanik özellikler

Öz: Uçucu külün doğası karbon kalıntısı içermektedir ve yüzey aktif maddeler ile karbon kalıntısı arasındaki etkileşim çimento esaslı malzemelerin performansı için sorun teşkil etmektedir. Buna ek olarak, beton gibi malzemelerin ısı ile kür edilmesi bu tip mikro yapısal bozulmayı daha açık hale getirebilir. Bu konuyu daha fazla detaylandırmak üzere, hava sürükleyici katkı maddesinin, farklı hacimlerde uçucu kül içeren ısı kürü ile kür edilmiş çimento harçları üzerindeki etkisi deneysel bir çalışma ile incelenmiştir. Uçucu kül içeren hava sürükleyici katkı çimento harçlarının mekanik özellikleri farklı yaşlarda değerlendirilmiştir. Karşılaştırmalı araştırma ayrıca mikro yapısal analizlerle de gerçekleştirilmiştir. Karbon esaslı malzemelerin ve hava sürükleyici katkı maddesinin etkileşimi mekanik ve mikro yapısal bulgular dikkate alınarak ayrıntılı olarak tartışılmıştır. Sonuçlar, hava sürükleyici katkı maddesi ile toplam bağlayıcı malzeme ağırlığına %25 uçucu kül kullanılmasının, hava sürükleyici katkı içermeyen ısı ile kür edilmiş çimento harçlarına kıyasla olumlu olduğunu göstermektedir. Ancak ısı ile kür edilmiş ve hava sürükleyici katkı maddesi içeren çimento esaslı harçlarda uçucu külün %55'ten fazla kullanımı ise tavsiye edilmemektedir.

Effect of Different Volumes of Fly Ash on Strength and Microstructural Properties of the Air-entrained Cement Mortars Produced with Heat Curing

Keywords

Air-entraining admixture,
Fly ash,
Heat curing,
Mechanical properties

Abstract: The nature of fly ash comprises residual carbon and the tendency of interaction between surfactants and carbon residue poses a problem for the performance of cement-based materials. Moreover, heat curing of concrete-like materials may be more prone to such microstructural degradation. To elaborate further on this issue, an experimental study was carried out to evaluate the effect of air-entraining admixture on the different volumes of fly ash-bearing heat-cured cement mortars. The mechanical properties of air-entrained cement mortars incorporating fly ash were evaluated at different ages. A comparative investigation was also performed with microstructural analysis. The interaction of carbonaceous materials and the air-entraining admixture was further discussed by taking account of the mechanical and microstructural findings. Results indicate that using air-entraining admixture with 25% fly ash by weight of total cementitious materials exhibited promising results in comparison with the heat-cured cement mortars that do not include air-entraining admixture. However, beyond 55% of fly ash by weight of total cementitious materials is not recommended for the air-entrained cement mortars produced with heat curing.

*Corresponding Author, email: oozturk@ktun.edu.tr

1. Introduction

The utilization of fly ash to produce more sustainable concrete is a well-documented practice. The appropriate use of fly ash in concrete mixtures results in limited heat of hydration, higher ultimate strength and reduced permeability of microstructure [1-3]. Moreover, fly ash enables to provide mitigation for durability problems such as sulfate attack [4], alkali-silica reactions [5], ingress of deleterious materials [6]. The use of fly ash in high-performance concrete was tested extensively and reported that fly ash incorporated concrete is more resistant to aggressive environments compared to that of fly ash-free concrete matrices [7]. On the other hand, chemical air-entraining admixtures (AEAs) based on surfactant chemistry are used to entrain the homogeneous air-void system in fresh concrete. These chemical admixtures are proved to be very effective in the use of the concrete mixture which exposes to frost action although air void distribution is also affected by other factors. However, it is reported that one of the most significant issues required to be taken into consideration when using fly ash is the adverse effect of air-entrained admixture. [8-10]. The reason for incompatibility is generally attributed to the non-ignited nature of carbon in fly ash [11]. The adsorption of surfactant in air-entraining admixture (AEA) onto carbonaceous material available in the fly ash is the main problem for the combined use of AEA and fly ash in concrete mixtures. [12]. The lack of effectiveness of AEA due to incompatibility of surfactant and carbonaceous material was reported in the literature for fly ash containing concrete [13]. Accordingly, reduced advantage of AEA lead to concrete mixtures to be more prone to frost actions. To precisely investigate the role of interaction between fly ash and air-entraining admixture, a comprehensive study was carried out on the various replacement ratios of fly ash together with AEA in cement-based composites.

The different types of curing for concrete production may also play significant role in terms of the air-entrained concrete incorporating fly ash. The influence of elevated curing temperature on the properties of cement mortars has been the subject of several studies [16]. The microstructural characteristics of concrete such as C-S-H gels, porosity and the hydration development are known to be affected in heat curing due to the formation of macroporous, nonuniform distribution of hydration products and delayed ettringite formation [17-19]. However, the effect of heat curing is not understood thoroughly on air-entrained concrete incorporating different volumes of fly ash and not encountered in the literature within the knowledge of authors. This study was aimed to clarify the effect of air-entraining on the heat cured cement mortar incorporated different volumes of fly ash. To do this, various mixtures were developed and interaction between AEA and fly ash was investigated in terms of mechanical behavior. In addition, petrographical and thermogravimetric analysis (TGA) were performed as a microstructural investigation to characterize chemical compounds of specimens. Together with microstructural analysis, mechanical findings were further discussed at different ages in accordance with the former experimental results.

2. Material and Method

2.1 Materials

Mixture design for cement mortars includes CEM I 42.5R ordinary Portland cement (PC), Class-F fly ash (FA) and fine silica sand with maximum aggregate size of 2 mm, water absorption capacity of 0.3% and specific gravity of 2.60. Tap water and air-entraining concrete admixture were used in the mixtures according to relevant standard TS EN 934-2 [20]. Chemical/physical properties of dry raw materials are given in Table 1.

Table 1. Chemical composition and physical properties of PC, FA and silica sand

Chemical Composition, %	PC	FA	Silica sand
SiO ₂	18.87	61.81	99.79
Al ₂ O ₃	5.62	19.54	0.06
Fe ₂ O ₃	2.54	7.01	0.02
MgO	2.63	1.71	0.01
CaO	62.78	1.77	0.02
Na ₂ O	0.40	1.50	0.02
K ₂ O	0.90	1.95	0.01
Loss on Ignition	2.20	2.50	0.07
SiO ₂ +Al ₂ O ₃ +Fe ₂ O ₃	27.03	88.36	99.87
<i>Physical Properties</i>			
Special Gravity	3.06	2.10	2.60
Blaine Fineness (m ² /kg)	325	269	-

2.2. Proportioning and preparation of specimens

Fly ash to Portland cement ratios (FA/PC) were 25/75%, 35/65%, 45/55%, 55/45%, 65/35%, 75/25% by weight, respectively (Table 2). The air-entraining admixture was added at 2% by volume of the total mixture. Water to cementitious materials (W/CM) was kept constant at 0.4 ratios. The same mixtures were also produced without using AEA to compare the results.

Table 2. Proportions of specimens

Mix ID	PC	W/CM	CM/Sand	AEA*	FA/PC**
<i>Mortar25-AEA</i>	1	0.40	0.33	2	0.33
<i>Mortar35_AEA</i>	1	0.40	0.33	2	0.54
<i>Mortar45_AEA</i>	1	0.40	0.33	2	0.82
<i>Mortar55_AEA</i>	1	0.40	0.33	2	1.22
<i>Mortar65_AEA</i>	1	0.40	0.33	2	1.86
<i>Mortar75_AEA</i>	1	0.40	0.33	2	3.00
<i>Mortar25</i>	1	0.40	0.33	-	0.33
<i>Mortar35</i>	1	0.40	0.33	-	0.54
<i>Mortar45</i>	1	0.40	0.33	-	0.82
<i>Mortar55</i>	1	0.40	0.33	-	1.22
<i>Mortar65</i>	1	0.40	0.33	-	1.86
<i>Mortar75</i>	1	0.40	0.33	-	3.00

* by volume of total mixture; ** by weight of binder

During the preparation of specimens, tap water was put into a mortar mixer together with the cement and mixing started for 30 seconds in 62 rounds per minute (rpm). Then, silica sand was gradually added into the mixer in 30 seconds and mixing was made for another 90 seconds at 125 rpm. AEA was gradually added into mixer tank for 30 seconds for the relevant mixtures. Similar consistency (flow diameter 20 ± 1) for each AEA incorporated mixture was achieved. Produced mixtures were molded to prismatic specimens with the dimension of $160 \times 40 \times 40$ mm. Three specimens were fabricated for each type of mixture at pre-determined test age. Molded fresh mortars were put into heat curing for the first 24 hours at 75°C . After 24 hours, mortars were taken from molds and kept in thermostat controlled curing tank for 27 days in a lime-saturated water at $20 \pm 2^\circ\text{C}$.

2.3. Testing

2.3.1 Mechanical tests

The flexural and compressive strengths of each mixture were evaluated in accordance with standard TS-EN 1015-11, 2000 [21]. The flexural strength of mortars was determined by three-point loading of a $160 \times 40 \times 40$ mm prism specimen. Loading rate was applied at 50 N/s and specimens were placed on supports by 30 mm distance from the two edges of the mortar (Figure 1-a). Compressive strength was determined on each half of $160 \times 40 \times 40$ mm prism specimen by uniaxial loading at 2400 N/s (Figure 1-b). Both tests were conducted at 3, 7, 28 and 90 days by using three specimens for each mixture.



Figure 1. 3-point flexural (a) and compression test (b) of specimens

2.3.2 Microstructural characterization

In addition to the evaluation of mechanical behavior of air-entrained cement mortar incorporating different volumes of fly ash, petrographical analysis was conducted to investigate compounds. Extracted thin sections from each specimen were prepared (Figure 3) and analyzed through polarized microscopes and petrographic analysis with the method proposed by Baccelle and Bosellini (1965) [22]. The components of each mixture were observed and identified.



Figure 2. Thin sections extracted from specimens for petrographical analysis

Besides mechanical tests, microstructural analysis was also performed to qualitatively investigate the microstructural conditions for specimens. To do this, thermogravimetric analyzer (TGA/DTA by Mettler Toledo) having alumina crucible under nitrogen atmosphere was used to have a better insight into the behavior of fly ash- and AEA-bearing specimens. In cement mortars, this technique is particularly useful to measure the consumption of calcium hydroxide by supplementary cementitious materials (SCM) such as fly ash [23]. Accordingly, 50 mg of powdered samples were heated in a flushed air atmosphere at a heating rate of 20 °C/minute between 25 to 900 °C in conformity with the relevant standard (ISO 11358). TGA measurements were calculated in accordance with the evaporation and decomposition of specimen products while DTG measurements were conducted to evaluate the temperature regions for the significant mass loss recorded for the specific compounds of the mixtures.

3. Results and Discussion

3.1 Mechanical tests

3.1.1 Compressive strength

The compressive strength of cement mortars was evaluated at 3, 7, 28 and 90 days. Test results were presented in Table 3 and Figure 4.a-f. Heat curing clearly accelerated the compressive strength of cement mortars at early ages without regard to the presence of AEA in mixtures. The early age strength gain by the utilization of heat curing is due to the high temperature that accelerated the cement hydration [24].

Table 3. Compressive strength of cement mortars at 3, 7, 28 and 90 days

Mix ID	3 days	7 days	28 days	90 days
<i>Mortar25_AEA</i>	20.71	25.44	31.34	40.80
<i>Mortar35_AEA</i>	17.48	21.64	29.08	35.56
<i>Mortar45_AEA</i>	15.49	17.19	26.16	30.50
<i>Mortar55_AEA</i>	13.19	14.64	20.34	25.82
<i>Mortar65_AEA</i>	7.99	9.01	16.47	23.64
<i>Mortar75_AEA</i>	6.26	8.82	12.00	13.46
<i>Mortar25</i>	18.39	24.47	31.83	43.76
<i>Mortar35</i>	17.90	22.00	31.43	36.09
<i>Mortar45</i>	17.26	18.33	26.76	33.75
<i>Mortar55</i>	13.31	14.81	20.78	26.13
<i>Mortar65</i>	11.66	12.07	17.61	24.43
<i>Mortar75</i>	9.29	9.50	12.84	15.64

At 3 days, the compressive strength of all AEA-bearing mortars was lower than reference specimens except Mortar25_AEA mixture (Figure 4.a). The compressive strength of Mortar25_AEA was 12.6% higher than its counterpart that does not contain AEA at 3 days. Mortar35_AEA, Mortar45_AEA, Mortar55_AEA, Mortar65_AEA, Mortar75_AEA specimens exhibited 2.3%, 10.2%, 1%, 31.5% and 32.6% lower compressive strength than Mortar35, Mortar45, Mortar55, Mortar65, Mortar75 specimens, respectively. As can be understood in Table 3, a

lesser early compressive strength of air-entrained mortars incorporated fly ash can be considered negligible especially for Mortar35_AEA, Mortar45_AEA, Mortar55_AEA mixtures. Generally speaking, 1% of AEA incorporation may reduce the compressive strength of ordinary Portland cement concrete up to 10% as Mehta et al. (2006) suggested [25]. For this reason, a decrease of 10% of compressive strength can be expected to take into account the fact that 2% of AEA used in the present study. This reduction can also be mitigated easily by some adjustments in mixture proportioning. However, 65% and 75% fly ash incorporated specimens by weight of total cementitious materials resulted in a distinct reduction in compressive strength at 3 days. This can be attributable to the higher pozzolanic materials available in the mortar matrices which could not have reacted with calcium hydroxide (CH) yet at 3 days. Also, as higher fly ash content corresponds to higher carbon available in the system, the higher probability of absorption of AEA bubbles onto fly ash particles may have led to weak zone and may have created undistributed air bubbles in the cement mortars. This may have reduced the cross-section area of mortars resisting under compression loading. The only mixture that acted adversely on this behavior was Mortar25_AEA, as previously mentioned. The reason can be explained by the lesser fly ash content that means a lower chance of carbonaceous exposure for AEA. Accordingly, air-entraining bubbles could have been distributed much more homogeneously. This finding is in line with the latest study performed by Puthipad et al. 2018. The amount of coalescence of air-entraining bubbles increases when the fly ash is used at higher ratios irrespective of AEA type [26]. Moreover, although air-entraining bubbles are expected to decrease the compressive strength of Mortar25_AEA specimens, the results were not in this line. Absorption of AEA was probably remained limited and more homogeneously distributed air-entraining bubbles were formed in Mortar25_AEA mixture. Also, spherical shape of AEA bubbles may have provided a lubricating effect on the fresh properties of AEA-bearing mortars [25] so that better workability properties may have created lesser weak zones [27]. This could have offset the detrimental voids of Mortar25_AEA mixture for compressive strength. 12.6% increase of average compressive strength of mortar25_AEA can be also explained by the improved particle distribution of the cementitious system by forming dense microstructure. On the other hand, in the case of fly ash increment, the compressive strength of mortars decreased at 3 days irrespective of AEA presence, as expected [28]. This trend is understandable since cementing ability of fly ash contributes only after hydration takes place between water and cement. So, a lesser amount of available CH can be available to react with fly ash particles to form hydration products at 3 days.

At 7 days, the similar trend can be also observable for the compressive strength of cement mortars. The compressive strength of Mortar25_AEA was 4% higher than reference mortar that does not contain AEA at 7 days (Figure 4.a). Mortar35_AEA, Mortar45_AEA, Mortar55_AEA, Mortar65_AEA, Mortar75_AEA specimens exhibited 1.6%, 6.2%, 1.1%, 25.3% and 7.1% lower compressive strength than Mortar35, Mortar45, Mortar55, Mortar65, Mortar75 specimens, respectively (Figure 4.b-f). 25% fly ash incorporated cement mortars by weight of binder (Mortar25_AEA) did not exhibit as higher compressive strength (4%) as the same mixture exhibited at 3 days (12.6%) compared to control mix. This can be related to the increased cementing capability of fly ash at 7 days as the mixtures started to saturate. Also, reductions of compressive strength were recorded for the 65% and 75% fly ash incorporated specimens by weight of total cementitious materials (25.4% and 7.2%, respectively) at 7 days, as given in Figure 4. Similarly at 3 days of curing, the increased fly ash content also resulted in lower compressive strength without regard to AEA addition at 7 days.

The behavior of cement mortars under compressive loadings changed at 28 days, as can be followed in Table 3 and Figure 4. Unlike test results at 3 and 7 days, compressive strength of 28 day-old Mortar25_AEA was 1.5% lower than the compressive strength of Mortar25. Also, Mortar35_AEA, Mortar45_AEA, Mortar55_AEA, Mortar65_AEA, Mortar75_AEA specimens exhibited 7.5%, 2.2%, 2.1%, 6.5% and 6.5% lower compressive strength than Mortar35, Mortar45, Mortar55, Mortar65, Mortar75 specimens, respectively. The reductions of compressive strength were comparable for all mixtures at 28 days. However, compressive strength of cement mortars was slightly lower than the similar cement mortars studied without heat curing in the literature. Therefore, the reductions in compressive strength were more influential in air-entrained cement mortars at later ages (at 28 days). This can be attributed to the reduced cross-section area of mortars due to entrained air bubbles and detrimental effect of heat curing on the account of larger hydration products formed at early ages which are unable to fill smaller voids.

The results of compressive strength at 90 days are in similar trend with the results at 28 days (Figure 4). For example, Mortar25_AEA, Mortar35_AEA, Mortar45_AEA, Mortar55_AEA, Mortar65_AEA and Mortar75_AEA specimens exhibited 6.7%, 1.5%, 9.6%, 11.8%, 3.2% and 14% lower compressive strength than Mortar25, Mortar35, Mortar45, Mortar55, Mortar65 and Mortar75 specimens, respectively. As can be seen from the results, the highest reduction of compressive strength was recorded for Mortar75_AEA specimens at 90 days (14%). It is probable that incorporation of 2% of AEA by volume of mixture together with the high content of fly ash (75%) might have created additional weak zones due to the adsorption of AEA surfactant onto residual carbon content (2.5% [Table 1]) of fly ash.

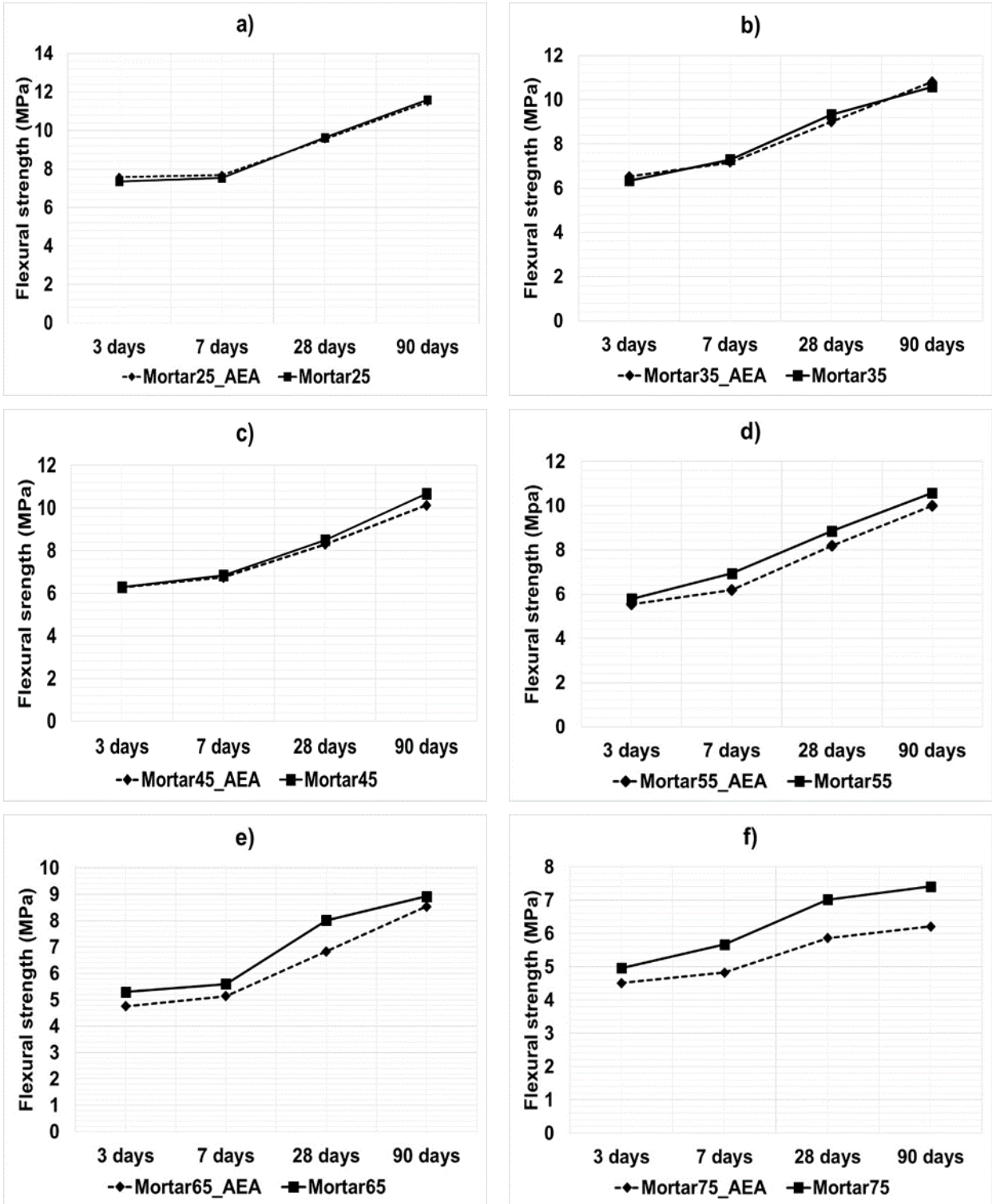


Figure 3. Comparison of compressive strength between air-entrained cement mortars and reference cement mortars with regard to fly ash content a) 25% b) 35% c) 45% d) 55% e) 65% f) 75% by weight of total binder at 3, 7, 28 and 90 days

3.1.2 Flexural strength

The flexural strength of cement mortars was evaluated at 3, 7, 28 and 90 days. Tests results were given in Table 4 and Figure 5.a-f.

Table 4. Flexural strength of cement mortars at 3, 7, 28 and 90 days

Mix ID	3 days	7 days	28 days	90 days
<i>Mortar25_AEA</i>	7.59	7.70	9.56	11.49
<i>Mortar35_AEA</i>	6.54	7.17	9.00	10.83
<i>Mortar45_AEA</i>	6.28	6.76	8.30	10.14
<i>Mortar55_AEA</i>	5.55	6.19	8.19	10.01
<i>Mortar65_AEA</i>	4.76	5.14	6.84	8.54
<i>Mortar75_AEA</i>	4.51	4.83	5.86	6.21
<i>Mortar25</i>	7.36	7.54	9.63	11.60
<i>Mortar35</i>	6.34	7.30	9.33	10.59
<i>Mortar45</i>	6.29	6.84	8.50	10.67
<i>Mortar55</i>	5.79	6.94	8.86	10.58
<i>Mortar65</i>	5.30	5.60	8.02	8.92
<i>Mortar75</i>	4.96	5.67	7.02	7.41

High-temperature curing (heat curing at 75 °C) clearly exhibited higher flexural strength than cement mortars cured in normal conditions at 3 and 7 days due to activation energy, as expected and also reported by literature studies [29]. This finding supports that heat curing conducted for 24 hours at 75 °C accelerated the hydration process. Accordingly, early age flexural strength of cement mortars increased without regard to air-entraining admixture. At 3 days, the flexural strength of all air-entrained cement mixtures was lower than reference specimens except Mortar25_AEA and Mortar35_AEA mixtures (Figure 4.a-b). The flexural strengths of Mortar25_AEA and Mortar35_AEA were 3.1% and 3.2% higher than Mortar25 and Mortar35 mixtures, respectively. This slight increase of flexural strength is probably due to optimum increased activation energy thanks to curing at high temperature for the given fly ash content [29] mitigating the negative effect of AEA for flexural strength. It can be said that use of 25% fly ash by weight of total binder can be regarded as optimum threshold taking into account compressive and flexural strength results in the presence of 2%-AEA. The higher fly ash content resulted in a reduction of flexural strength for the air-entrained cement mortars compared to their reference mixtures. For example, the flexural strength of Mortar55_AEA, Mortar65_AEA, Mortar75_AEA specimens were 4.1%, 10.1%, and 9% lower than Mortar55, Mortar65, Mortar75 specimens at 3 days, respectively. Similar behavior can be also followed at 7 days for the air-entrained cement mortars incorporated fly ash. Except for Mortar25_AEA mixture, other mixtures exhibited lower flexural strength than mortars without air-entraining. At 7 days, higher reduction of flexural strength of Mortar 65_AEA and Mortar75_AEA (8% and 15%, respectively) can be explained by the higher chance of carbonaceous contact with AEA resulting in non-uniform void distribution.

The air-entrained cement mortars totally underperformed in terms of flexural strength at 28 and 90 days in comparison with the plain cement mortars incorporated fly ash. However, comparable results were recorded for Mortar 25_AEA and Mortar35_AEA mixtures. At 28 days, Mortar25_AEA, Mortar35_AEA, Mortar45_AEA, Mortar55_AEA, Mortar65_AEA, Mortar75_AEA specimens were 0.7%, 3.5%, 2.3%, 7.5%, 14.7% and 16.5% lower in flexural strength than Mortar25, Mortar35, Mortar45, Mortar55, Mortar65, Mortar75 specimens, respectively. As seen in Table 4, reduction of flexural strength at 90 days was higher beyond the use of 65% fly ash by weight of the total binder. Reduction of flexural strength of high-volume fly ash incorporated specimens was expected to disappear at later ages, however, this was not the case. This finding suggests that heat-cured air-entrained cement mortars could have been more susceptible to the detrimental effect of the contact between residual carbon and AEA surfactants. Curing with the elevated temperature is reported to have a significant influence on hydration process resulting in an increased proportion of large pores in cement paste [30]. Therefore, additional fly ash ratio into cement mortars could have led to weaker microstructure due to incompatibility of AEA and fly ash under heat-curing.

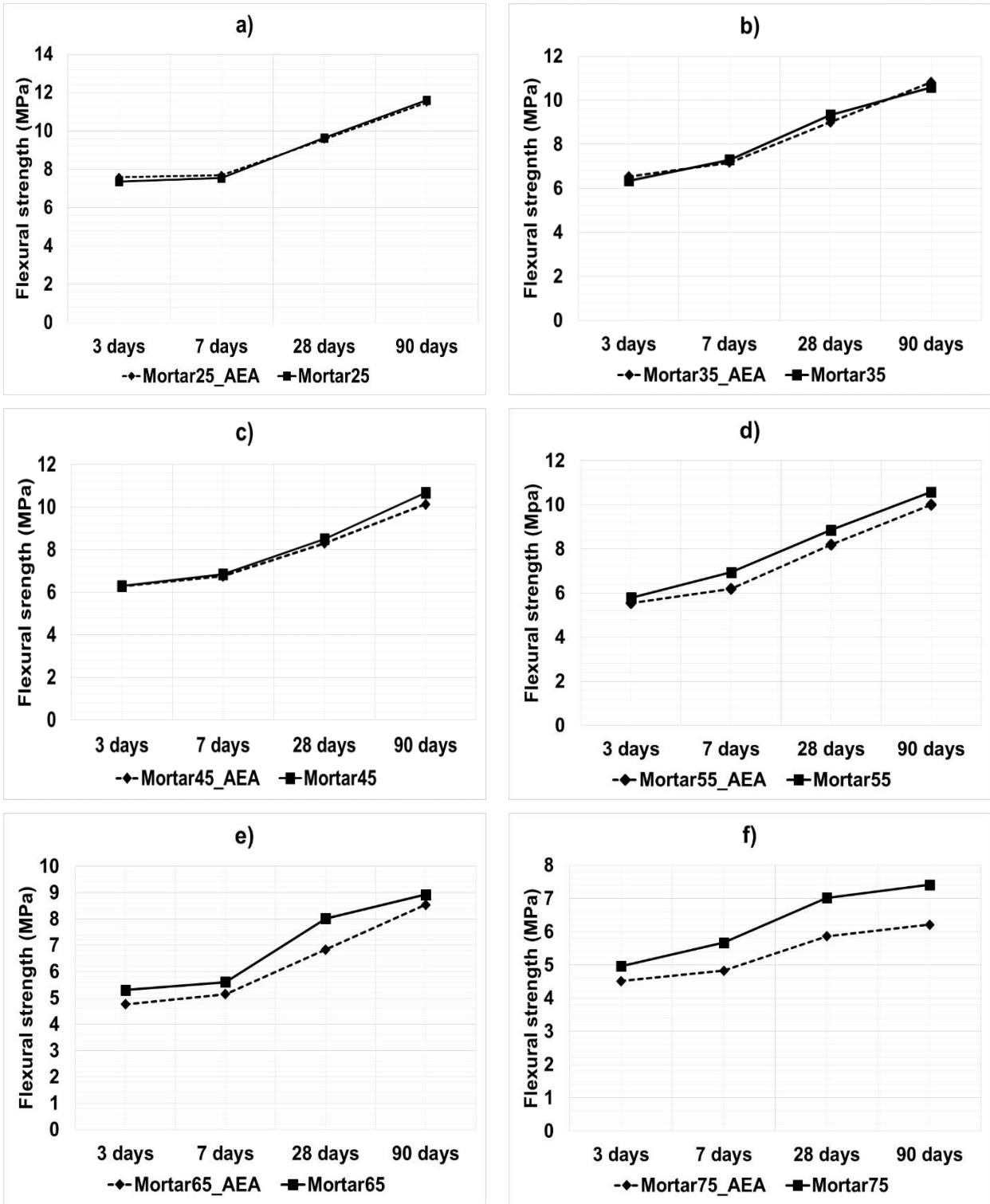


Figure 4. Comparison of flexural strength between air-entrained cement mortars and reference cement mortars with regard to fly ash content a) 25% b) 35% c) 45% d) 55% e) 65% f) 75% by weight of total binder at 3, 7, 28 and 90 days

3.2 Microstructural Tests

3.2.1 Petrographical analysis

Prepared thin sections from each specimen were analyzed petrographically at 28 days. Compounds of each mixture were identified and given in Table 5.

Table 5. Petrographical analysis of specimens at 28 days

Mix ID	Total porosity (%)	Fly ash (%)	Cement paste (%)	Sand<2mm (%)
<i>Mortar25_AEA</i>	10.2	2.8	45	42.0
<i>Mortar35_AEA</i>	10.7	4.4	47	37.9
<i>Mortar45_AEA</i>	12.4	5.0	42	41.6
<i>Mortar55_AEA</i>	12.8	5.2	38	44.0
<i>Mortar65_AEA</i>	13.1	6.7	34	46.2
<i>Mortar75_AEA</i>	13.2	8.3	33	45.5
<i>Mortar25</i>	9.7	3.1	43	44.2
<i>Mortar35</i>	9.7	3.2	42	45.1
<i>Mortar45</i>	9.4	3.8	48	38.8
<i>Mortar55</i>	9.2	4.7	49	37.1
<i>Mortar65</i>	9.2	6.9	52	31.9
<i>Mortar75</i>	9.2	7.5	51	32.3

As can be seen in Table 5, air-entrained cement mortars have higher porosity than the reference mortars without regard to fly ash content, as expected. However, the least porosity difference can be observed between *Mortar25_AEA* and *Mortar25*. Moreover, cement paste rate of *Mortar25_AEA* is 4.4% higher than the *Mortar25* specimens due to probable reasons as stated previously. This result supports mechanical findings that 25% of fly ash incorporation into air-entrained cement mortars are comparable with their reference specimens. Similarly, *Mortar35_AEA* has higher cement paste than *Mortar35* mixtures according to the given results in Table 5. However, the total porosity of *Mortar35_AEA* is higher than the *Mortar25_AEA* which means a higher chance of the reduction in mechanical properties is possible compared to their reference counterparts at 28 days. An increased porosity rate along with fly ash content implies that air bubbles had more tendency to form near carbonaceous materials resulted in non-uniform voids entrained into the mortar matrices. In Figure 5, microscopic image of mixture incorporated 75% fly ash and 2% AEA (*Mortar75_AEA*) can be seen.

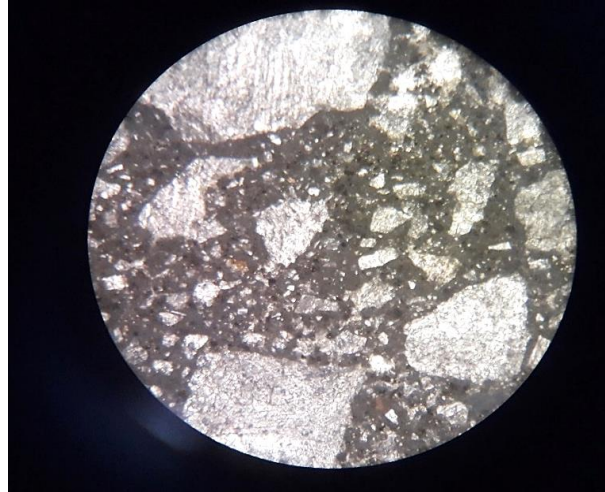


Figure 5. Microstructure of air-entrained cement mortar incorporated 75% fly ash by weight of total cementitious materials (image is within 1000 μ diameter)

Also, interaction of residual carbon in LOI and air-entraining admixtures probably affected the rate of cement paste in mortars. This made the mixtures having more weak zones between hydration products thus increasing overall porosity. The findings of petrographical analysis are in line with the results of compressive and flexural strength results. Therefore, it can be suggested that only 25% fly ash content may not have negative effect to the mechanical properties of cement mortars in the presence of 2% AEA by volume of total mixture.

3.2.2 TGA/DTA analysis

The thermogravimetric analysis (TGA) was conducted to evaluate the composition of the fly ash-bearing air-entrained cement mortars. TGA/DTA was used to evaluate the change in mass of a material with the increase in temperature. As given before (Table 1), loss on ignition (LOI) of fly ash is (2.5% based on the standard LOI test) generally regarded as the carbon content of ash. However, this may be inadequate knowledge because weight change of fly ash can be also due to calcination of carbonates, desorption of bound water, and oxidation of other minerals. To elaborate aforesaid findings, a carbon content of mixtures together with other hydration products such as bounded water, C-S-H, calcium hydroxide (CH) and calcite were investigated through TGA/DTA analysis. However, it can be inferred that decomposition of carbonaceous materials in cement mortars was not explicit although the mass change of water, C-S-H, CH and calcite compounds were clearly seen in Figure 6.

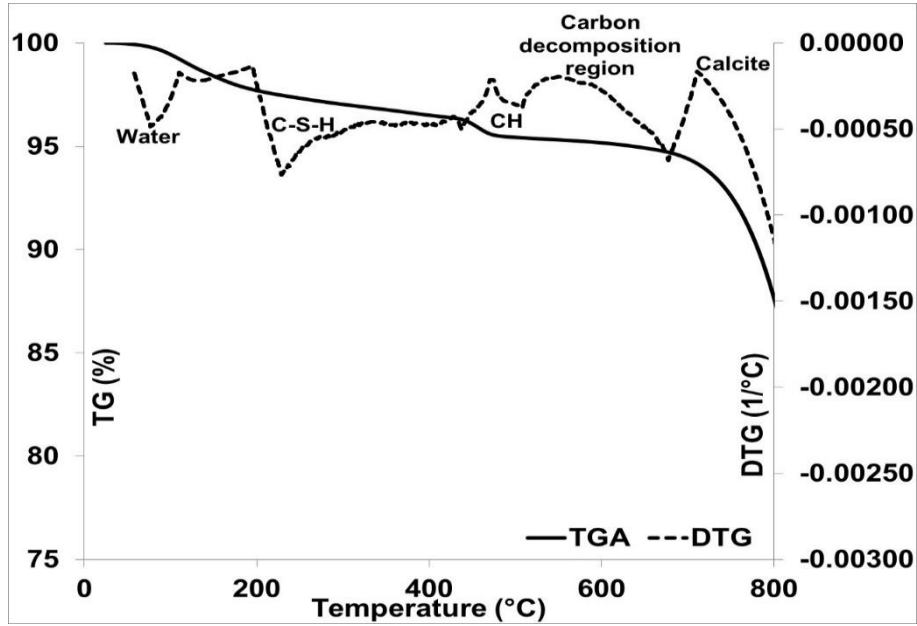


Figure 6. TGA and DTA curves of Mortar25_AEA at 28 days

The results were in line with the studies in the literature [31] that oxidation of carbon-based materials can be seen at different temperatures. However, the mass change of carbon materials may have started between 650-700 C°. According to the suggestion of Paya et al. (1998) [32], carbonaceous materials are oxidized at temperatures between 450°C and 750°C. The smooth slope of TGA-DTA curves of air-entrained cement mortar (Mortar25_AEA) between 450°C and 650°C indicates that decomposition can be only started after 650 C° where sudden drop continues until 750 C° (Figure 6). This temperature gap was also validated by Yu et al., (2000) [33]. Moreover, Fan and Brown (2001) [34] reported that volatile organic compounds (VOCs) in fly ash are decomposed when a specimen is heated to 750 C°. A precise temperature range for the VOCs that are decomposed from fly ash has not been revealed, however, mass change of coal begins at the temperatures between 350 and 400°C [35]. The presented figure shows that decomposition of carbon compounds could have only started after the temperature of 650 C° because other compounds of cement mortars have characteristically compatible and easily identifiable in accordance with their decomposition temperatures [36]. For example, decompositions of water and C-S-H products were at the temperatures of 90 C° to 170 C°. Also, CH products were vaporized between 430 and 480 C° while calcite compounds were fully decomposed at 770 C°, as seen in Figure 6.

4. Conclusions

This study investigated the interaction between air-entraining admixture and increased fly ash content in heat cured cement mortars. To characterize the mechanical properties, compressive strengths and flexural strengths of air-entrained cement mortars incorporated different amount of fly ash were evaluated. Also, the microstructural investigation was performed through petrographical and TGA/DTA analysis. Mechanical and microstructural characterizations were compared, and the presented study reached the following conclusions:

- Heat curing increased the early age strength of cement mortars both in compressive and flexural strength at 3 and 7 days without regard to the presence of air-entraining admixture. Generally, AEA-bearing cement mortars incorporated fly ash were lower than reference specimens in compressive and flexural strength at all ages.

However, the inclusion of 25% fly ash by weight of total cementitious materials into air-entrained mortar matrices made mechanical results comparable with specimens that do not contain AEA.

- An increased fly ash content in air-entrained cement mortars posed a negative effect on mechanical properties. It can be deduced that detrimental effect of carbonaceous materials in contact with air-entraining bubbles can be offset by limiting the fly ash utilization to a certain extent (25%).
- Petrographical analysis revealed that inhomogeneous distribution of air-entraining bubbles in cement mortars due to increased fly ash content promoted additional porosity by worsening void space. In the petrographical analysis, thin sections of specimens indicated that only 25% fly ash included cement mortars can be excluded from the worsened of void space.
- Similar to the LOI test, TGA/DTA analysis cannot individually evaluate the carbon content of fly ash in mortars. As decomposition of carbonates occurs at the temperatures in which carbonaceous materials oxide, higher amounts of carbonates prevented to the measurement of carbon content in TGA/DTA tests. However, it is probable that the mass change of compounds in LOI content took place between 650-700 C°.

References

1. Chousidis N., Rakantaal E., Batisa J.G. Mechanical properties and durability performance of reinforced concrete containing fly ash. *Construction and Building Materials* 101:1, 810-817, 2015.
2. Saha A.K. Effect of class F fly ash on the durability properties of concrete. *Sustainable Environment Research* 28 1: 25-31, 2018a.
3. Nagrockienė D., Daugėla A Investigation into the properties of concrete modified with biomass combustion fly ash. *Construction and Building Materials* 174: 369-375, 2018.
4. Nie Q., Zhou C., Li H., Shu X., Gong H., Huang B. Numerical simulation of fly ash concrete under sulfate attack. *Construction and Building Materials* 84:1, 261-268, 2015.
5. Saha A.K., Khan M.N.N., Sarker P.K., Shaikh F.A., Pramanik A. The ASR mechanism of reactive aggregates in concrete and its mitigation by fly ash: A critical review. *Construction and Building Materials* 171, 743-758, 2018b.
6. Lopez-Calvoa, H.Z., Montes-Garciáb P., Jiménez-Quero V.G., Gómez-Barranco H., Bremner, T.W., Thomas M.D. Influence of crack width, cover depth and concrete quality on corrosion of steel in HPC containing corrosion inhibiting admixtures and fly ash. *Cement and Concrete Composites* 88: 200-210, 2018.
7. Kaplan G., Yildizel S.A., Memiş S., Öztürk A.U. The optimization of calcareous fly ash-added cement containing grinding aids and strength-improving additives *Adv. Civ. Eng.*, 2018. pp. 1-9, 10.1155/2018/8917059
8. Pedersen K.H., Jensen A.D., Skjøth-Rasmussen M.S., Dam-Johansen K. A review of the interference of carbon containing fly ash with air entrainment in concrete. *Progress in Energy and Combustion Science* 34 2: 135-154, 2008.
9. Pedersen K.H., Jensen A.D., Dam-Johansen K. The effect of low-NO_x combustion on residual carbon in fly ash and its adsorption capacity for air entrainment admixtures in concrete. *Combustion and Flame* 157 2: 208-216, 2010.
10. Dąbrowski M., Glinicki M.A., Gibas K., Józwiak-Niedźwiedzka D. Effects of calcareous fly ash in blended cements on chloride ions migration and strength of air entrained concrete. *Construction and Building Materials* 126: 1044-1053, 2016.
11. Du L., Folliard K. Mechanisms of air entrainment in concrete. *Cement and Concrete Research* 35, 8: 1463-1471, 2005.
12. Hill R.L., Sarkar S.L., Rathbone R.F., Hower J.C. An examination of fly ash carbon and its interactions with air entraining agent. *Cement and Concrete Research* 27, 2: 193-204, 1997.
13. Jolicoeur C., To T.C., Nguyen T.S., Zhang Z., Hill R., Page M. Sacrificial Admixtures for air entrainment in fly ash concrete, In proceeding of a conference on fly ash, silica fume, slag, and natural pozzolans in concrete and 9th International conference on recent advances in concrete Technology (V.M. Malhotra. (ed)), Warsaw, Poland, 299-318, 2007.
14. Chari M.N., Shekarchi M., Sobhani J., Chari M.N. The effect of temperature on the moisture transfer coefficient of cement-based mortars: An experimental investigation. *Construction and Building Materials* 102 1: 306-317, 2016.
15. Guelmine L. Hadjab H., Benazzouk A. Effect of elevated temperatures on physical and mechanical properties of recycled rubber mortar. *Construction and Building Materials* 126, 77-85, 2016.
16. Farzadnia N., Ali A.A.A., Demirboga R. Characterization of high strength mortars with nano alumina at elevated temperatures. *Cement and Concrete Research* 54: 43-54. 2013.

17. Kjellsen K.O., Detwiler R.J., Gjorv O.E. Development of microstructures in plain cement pastes hydrated at different temperatures. *Cement and Concrete Research* 21:1, 179-189, 1991.
18. Loubaba Rida, Adil Hafidi Alaoui, Effect of high volume fly ash and curing temperature on delayed ettringite formation, *Materials Today: Proceedings*, 2022, <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2022.02.110>.
19. G. Barluenga, M. Giménez, A. Sepulcre, I. Palomar, Effect of full scale pumping at early age and on hardened microstructure and properties of SCC with fly ash in hot-dry curing conditions, *Construction and Building Materials*, Volume 191, 2018, 1128-1138, <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2018.10.110>.
20. TS EN 934-2, Admixtures for concrete, mortar, and grout-Part 2: Concrete admixtures-Definitions, requirements, conformity, marking and labeling, Ankara, Turkey, 2011.
21. TS EN 1015-11, Methods of Test for Mortar for Masonry – Part 11: Determination of Flexural and Compressive Strength of Hardened Mortar Turkish Standards Institution. Ankara, Turkey, 2000.
22. Baccelle, L.S., Bosellini A. Diagrammi per la stima visiva della composizione percentuale nelle rocce sedimentarie: *Annali dell'Università di Ferrara*, Bologna, Italy, 1965.
23. Baert G., Hoste S., De Schutter G., De Belie N. Reactivity of fly ash in cement paste studied by means of thermogravimetry and isothermal calorimetry. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry* 94, 2 485–492, 2008.
24. Ballester P., Hidalgo A., Mármol A., Morales J., Sánchez L. Effect of brief heat-curing on microstructure and mechanical properties in fresh cement based mortars. *Cement and Concrete Research* 39 7, 573-579, 2009.
25. Mehta P.K., Monteiro P.J.M. *Concrete, microstructure, properties and materials*, McGraw-Hill Education, USA, 2006.
26. Puthipad N., Ouchi M. Effects of fly ash, mixing procedure and type of air-entraining agent on coalescence of entrained air bubbles in mortar of self-compacting concrete at fresh state. *Construction and Building Materials* 180: 437-444, 2018.
27. Ozturk O, Dalgic B, Keskin U.S. Mechanical and workability evaluation of self-compacting concrete incorporating high volume ground granulated blast furnace slag, *Cement, Wapno, Beton* 2017(2):145-153
28. Lam L., Wong Y.L., Poon C.S. Degree of hydration and gel/space ratio of high-volume fly ash/cement systems *Cement and Concrete Research* 30: 747-756, 2000.
29. Marios S., Alexandros H., Kanavaris F., Kwasny J. Effect of temperature on the strength development of mortar mixes with GGBS and fly ash *Magazine of Concrete Research* 69:15, 787-801, 2017.
30. Ba, M. Effects of steam curing on strength and porous structure of concrete with low water/binder ratio. *Construction and Building Materials*, 25, 1: 123–128, 2011.
31. Mohebbi M., Rajabipour F., Scheetz B.E. Evaluation of Two-Atmosphere Thermogravimetric Analysis for Determining the Unburned Carbon Content in Fly Ash. *Advances in Civil Engineering Materials* 6 1: 258-279, 2017.
32. Payá J., Monzó J., Borrachero M.V., Perris E., Amahjour F. Thermogravimetric Methods for Determining Carbon Content in Fly Ashes. *Cement and Concrete Research* 28, 5: 675-686, 1998.
33. Yu J., Kulaots I., Sabanegh N., Gao Y., Hurt R.H., Suuberg E.S., Mehta A. Adsorptive and Optical Properties of Fly Ash from Coal and Petroleum Coke Co-firing, *Energy and Fuels* 14: 591-596, 2000.
34. Fan M., Brown R.C. Comparison of the loss-on-ignition and thermogravimetric analysis techniques in measuring unburned carbon in coal fly ash, *energy fuels*, 15: 6, 1414–1417. 2001.
35. Deboucha W., Leklou N., Khelidj A., Oudjit M.N. Hydration development of mineral additives blended cement using thermogravimetric analysis (TGA): Methodology of calculating the degree of hydration. *Construction and Building Materials*, 146 687-701, 2017.
36. De Weerd K., Ben Haha M., Le Saout G., Kjellsen K.O., Justnes H., Lothenbach B., Hydration mechanisms of ternary Portland cements containing limestone powder and fly ash. *Cement and Concrete Research* 41, 3: 279-291, 2011.

Türkiye'nin Farklı İklim Bölgelerinde Yer Alan Eğitim Yapısı Dersliklerinin TS EN 17037 "Binalarda Gün ışığı Kullanımı" Standartı Çerçevesinde Değerlendirilmesi

Elif Şura Özen ¹, Özlem Sümengen ^{*2}

¹Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Mimarlık Anabilim Dalı, KAYSERİ

^{*2}Erciyes Üniversitesi Mimarlık Fakültesi Mimarlık Bölümü, KAYSERİ

(Alınış / Received: 14.05.2022, Kabul / Accepted: 18.07.2022, Online Yayınlanma / Published Online: 23.08.2022)

Anahtar Kelimeler

Güneş ışığı,
TS 17037
Eğitim Yapıları,
İklim
Enerji Kullanımı

Öz: Enerjinin etkin kullanımı sürdürülebilir mimarlık ve enerjinin sürdürülebilirliği için gün geçtikçe önemi artan bir konu olmakla beraber yapılarda güneş ışığı kullanımı da etkin bir parametre olarak tasarım sürecindeki yerini almıştır. Her tür yapı tipolojisi için güneş ışığı kullanımı aydınlık miktarı ve kalitesi, enerjinin etkin kullanılması için önemli bir etken olmakla birlikte güneş ışığı kullanımına yönelik birçok çalışma bulunmaktadır. Yapı tiplerine ve enerjinin kullanıldığı alana göre bu alanda yapılan çalışmalar farklılıklar göstermekle birlikte gelişen teknolojik imkânlar sayesinde binalarda enerji verimliliği çalışmalarının sistemli bir şekilde artmaya devam ettiği görülmektedir. Yaygın yapı tipolojileri kapsamında yer alan Eğitim yapıları ise, enerji ihtiyacının ve güneş ışığı kullanımının en yoğun olduğu yapı tiplerinden biri olarak karşımıza çıkmaktadır. Ülkemizde son yıllarda eğitim yapıları başta olmak üzere kamu yapılarında tip projelerin farklı bölgelerde ve iklim türlerinde uygulandığı görülmektedir. Bu çalışmada Türkiye'nin farklı iklim bölgelerinde Milli Eğitim Bakanlığı'na bağlı bir tip eğitim yapısı örneği üzerinden hacimdeki güneş ışığı alımı ve buna bağlı olarak enerji ihtiyaçları karşılaştırılarak, bu yapı örneklerinin aynı plan şemaları ile önerilen revizyonlarla birlikte farklı iklim bölgelerinde kullanımı değerlendirilecektir.

Evaluation of Classrooms of Typical Educational Buildings Built in Different Climate Regions of Turkey in the Framework of TS EN 17037 "Daylight Use in Buildings" Standard

Keywords

Daylight,
TS 17037
Educational Buildings,
Climate
Energy Use

Abstract: Although the effective use of energy is an issue that is increasing day by day for sustainable architecture and the sustainability of energy, the use of daylight in buildings has also taken its place in the design process as an effective parameter. For all types of building typologies, the use of daylight, the amount and quality of light, is an important factor for the effective use of energy, and there are many studies on the use of daylight. Although the studies carried out in this field differ according to the building typicals and the area where energy is used, it is seen that the energy efficiency studies in buildings continue to increase in a systematic way thanks to the developing technological opportunities. Educational buildings, which are within the scope of common building typologies, appear as one of the building types with the most intense energy need and daylight use. In our country, it is seen that typical projects are implemented in different regions and climate typical in public buildings, especially in educational buildings. In this study, the use of these building samples in different climatic zones with the same plan schemes and the proposed revisions was evaluated by comparing the daylight intake in the volume and accordingly the energy needs over a type of education structure example affiliated to the Ministry of National Education in different climatic regions of Turkey.

*İlgili Yazar, email: osumengen@hotmail.com

1. Giriş

Enerji etkin tasarımı ve enerjinin doğru bir şekilde kullanılması en küçük yapı biriminden itibaren bütün yapıların tasarım aşamasında en önemli kriterlerden biri olarak karşımıza çıkmaktadır. Yapma ve doğal aydınlatma ile beraber çevresel etmenler de tasarıma dâhil edilerek hem iç mekânda hem de çevresel olarak görsel konfor koşulları sağlanmaktadır [1]. Günışığı kullanımı toplam bina enerji tüketim maliyetini azaltırken, doğal ışığın hacimde kullanılması kullanıcılar için de görsel anlamda uyarıcı ve üretken bir alan oluşturmaktadır [2]. Bunlarla birlikte günışığı; mekânsal kaliteyi artıran ve insanın doğa ile bütünleşmesini sağlayan önemli bir mekânsal tasarım girdisidir. Enerjinin etkin kullanımı tasarımda öncelikli bir etken haline geldikçe, günışığından yararlanma yöntemleri de tasarım sürecine dahil edilmiştir [3]. Kullanıcılardaki fizyolojik ve psikolojik tesirlerin yanı sıra enerji korunumu ve verimliliğinin en üst düzeyde olması için de günışığı kullanımı oldukça önemlidir. Gün ışığının etkin kullanılmasında, düzgün bir aydınlık sağlanması, direkt günışığından korunarak kamaşmanın önüne geçilmesi, iklim kontrolü ve diğer çevresel etmenlere uyumlu bir tasarımın gerçekleştirilmesi öncelikli hedefler arasındadır. Bu hedefler, bulunulan iklim bölgesinin özellikleri, binanın işlevi ve kullanım saatleri gibi değişkenlere bağlı olarak farklı önceliklere sahip olabilirler [4]. Günışığı kullanımı her yapı tipolojisinde olduğu gibi eğitim yapısında da görsel konforunun sağlanması için büyük önem taşımaktadır.

Eğitim yapıları kapsamında ele alınan sınıflar ise, birden çok aktivitenin yapıldığı ve aydınlanma kalitesinin öğrencilerin öğrenme aktivitesi için kritik öneme sahip olduğu mekânlardır [5]. Yener, sınıf mekânlarındaki aydınlatmanın sınıfın sahip olduğu objeleri de içerek şekilde okuma, yazma gibi aktivitelere olanak sağlayacak düzeyde olması gerektiğini belirtmiştir[6]. Okullarda öğretilen okuma, yazma gibi birçok aktivite görsel performansı etkileyen aydınlatma tasarımının doğal ve ana birer sonucu olarak kabul edilmektedir [7]. Bir sınıfta yeterli aydınlık miktarı ve kalitesinin oluşturulmaması öğrenci aktiviteleri üzerinde olumsuz etkiler oluşmasına sebep olmaktadır[8]. Aydınlatma miktarının yeteri kadar sağlanmadığı bir sınıfta öğrencinin öğrenme yeteneğine olumsuz tesir edecek durumlar ortaya çıkması muhtemeldir. Işık yetersizliği öğrencinin gözlerinde bir baskı oluşturarak yüksek stres seviyesine sebep olurken bilginin işlenebilirlik seviyesini de olumsuz yönde etkilemektedir[9].

Bir sınıfın geometrik yapısı ve bunu içeren parametreler günışığı alımını ve buna bağlı olarak görsel konforu etkilemektedir. Gün ışığı kullanımını optimize etmek için bu geometri tasarıma doğru bir biçimde dahil edilmelidir[10]. Eğitim yapılarında aydınlatma sistemleri, temelde öğretmenlerin, öğrencilerin ve personelin belirli eylemleri konforlu bir ortamda kolay ve rahat bir şekilde yürütmelerini sağlayacak, enerjiyi etkin kullanacak bir biçimde düzenlenmelidir. Görsel konfor gereksinimlerini karşılayan bir aydınlatma düzeni elde etmek için, bir okuldaki tüm mekânları ve mekânlardaki işlevleri ayrı ayrı ele almak gereklidir[11]. Bir eğitim yapısının sahip olması gereken birçok özellik bulunmaktadır. Bunlardan bazıları eğitim ve yaş grubuna göre bir arazide yer alması, açık kapalı alanların dengeli olması, iklim koşullarının gözetilmesi, çevresinin imar durumu ve okulda kullanılan doğal ışığın gözetilmesi gibi noktalardır [12]. Ülkemizde birçok öğrencinin eğitim gördüğü yapılar genel olarak aynı mimariye sahip tip projeler olarak tasarlanmaktadır ve bu tip eğitim yapıları coğrafi şartlar gözetilmeksizin tüm bölgelere ve illere uygulanmaktadır [13]. Duraler ve Yener, doğu ve batı cephelerindeki derslerin günün belirli saatlerinde kullanıcı kontrolünde güneş kontrol elemanı eklentisi ile kullanımını önerdikleri çalışma, tip eğitim yapısında yöneliminin ve cephe seçiminin önemli unsurlar olduğunu göstermiştir[14]. Sechi ve diğ. yaptıkları çalışmada okul binalarının cephelerinin tipik yönelimi, büyük pencerelerinin varlığı ve okul binalarının kalıcı konumu çevresel etmenlerle birleştiğinde görsel konfor temelinde bir sorun yaratabileceğini gözlemlemişlerdir[15].

Binanın güneş ışığından yararlanabilmesi için bina konumunun topografik durumu doğal havalandırma ve gün ışığından yararlanma açısından önemlidir. Güneş radyasyonunun geliş açısı arazinin yönelimi ve eğimi tarafından etkilenmektedir [16]. Gün ışığının aydınlatma ve ısıtma özellikleri bulunmaktadır. Soğuk iklime sahip, güneş ışığının çok etkili olmadığı yerlerde, doğal ışık mekânda istenen bir tasarım öğesidir, güneşin çok etkili olduğu sıcak yerlerde ise tasarımda doğal ışığın rahatsız edici aşırı parlak ve ısıtıcı etkisi farklı yöntemlerle önlenmeye çalışılmaktadır[17]. Adane ve Dabe sıcak ve kuru iklim bölgelerinde düşük katlı konut binalarında bina profillerinin gün ışığı ve iç mekân performansına etkisini araştırdıkları çalışmalarında gün ışığı ve iklim doğrudan konut yapı tipi üzerinden ilişkilendirilmiştir. Çalışmada aynı zamanda "tip tasarım" olarak adlandırılan konut binaları üzerinden bu gün ışığı çalışmasının yapılarak bina profili derinliğinin saptanması amaçlanmıştır ve Radiance eklentili Ecotect programını kullanılarak gün ışığı analizleri yapılmıştır. Nagpur bölgesinden seçilen tip tasarım konut için hava durumu "Energy Plus" web sitesinden elde edilmiştir. Tip tasarım konutun kullanılan ve yaşanan bölgelerinde simülasyon yardımıyla yapılan analizlerin sonucunda aydınlık düzeyinin yeterli olmadığı sonucuna ulaşılmıştır. Araştırma sonunda bina yönelimini ve profilinin binanın gün ışığı kullanımında etkisinin yanı sıra sıcak kuru iklim bölgelerinin ve gün ışığının ilişkisi de az katlı tip tasarım konut üzerinden elde edilmiştir[18]. Bokel ve diğ. bir simülasyon aracılığıyla literatürde gün ışığı ile ilgili sunulmuş standartlar ve iklimsel veriler eşliğinde Çin'de soğuk iklim bölgesinde yer alan bir okul üzerinden iklim, gün ışığı ve ısınma arasındaki ilişkiyi incelemişlerdir[19]. İklim verilerinin tasarımıyla ilişkisini belgeleyen bir başka çalışma Yılmaz tarafından yapılmış olan "Farklı İklim Bölgelerinde Bir İlköğretim Tip Projesinin Enerji Etkin Geliştirilmesine Yönelik Uygulama Örneği" adlı çalışmasıdır. Yılmaz mevcut bir tip eğitim yapısını

Türkiye'deki iklim bölgelerini gözetip "Design Builder" adlı simülasyon programını kullanarak enerji tüketimi açılarından ele almış ve karşılaştırmıştır. Seçilen Tip eğitim yapısı bir ilkokul olup, beş farklı iklim bölgesini ifade eden Erzurum, Antalya, Ankara, İstanbul ve Diyarbakır pilot illerine ilişkin veriler simülasyon programına işlenmiştir. Çalışmada iklimsel veriler ve tip projeler arasındaki çelişkiler ortaya konmuştur[20].

Kutlu ve diğ. çalışmasında; sıcak ılıman iklimde bulunan bir tip eğitim yapısının dersliğinde Radiance programı ile gün ışığı analizi yapılmıştır. Çalışmadan elde edilen sonuçlar ile sıcak-ılıman iklimde bulunan bir okul dersliği için cephe tasarım önerileri ve farklı cephe yönleri için hem iklimsel şartlara uygun hem de görsel konforu sağlayan sistemler ile gün ışığına duyarlı kontrol edilebilen yapma aydınlatma sistemleri geliştirmişlerdir[21]. Sürdürülebilir tasarım ilkeleri dikkate alınarak tasarlanan okulların taşıdığı öğrenmeyi destekleyen role destek olarak, sürdürülebilir okul tasarımında önem taşıyan gün ışığı kullanımı, ısıtma ve soğutma için kullanılan yöntemler, doğal havalandırma, rüzgâr enerjisinden yararlanma, su kullanımı ve malzeme seçimi olarak kategorize edilmiş olan temel ilkeler incelenmektedir [22].

Okulların eğitim ve mekân kalitesini arttırmaya yönelik çalışmalardan biri olan tasarım kılavuzları ülkelerin ulusal eğitim sistemi, standart ve yönetmeliklerine uygun, enerjiyi etkin kullanan okulların inşa edilmesini ve okulların yenilenerek çağın şartlarına uyum sağlamasını amaçlamaktadır [23]. Kılavuzlarda, mekânlara ilişkin özellikler, tasarım önerileri, sağlanması gereken konfor koşulları (görsel, işitsel ve ısıl konfor) ve enerji etkin kullanımı gibi farklı konularda bilgiler bulunmaktadır [24]. MEB Eğitim Yapıları asgari tasarım standartları kılavuzunda dersliklerin yönlendirilmesiyle ilgili öneriler iklim bölgelerini içerecek şekilde verilmiştir. Bu kılavuza göre bir derslik tasarımının gün ışığını sol taraftan alması gerektiği belirtilmiş olup aydınlık düzeyi değerleri kütüphane ve laboratuarlarda en az 500 lx, koridor vb. alanlarda 150 lx, genel eğitim mahallerinde ise en az 300 lux olmalıdır. Derslik pencerelerinin alanının taban alanına oranı en az %25 olmalıdır, bu oranın iklim bölgesine bağlı olarak *gerekirse* %50 artırılabilceği belirtilmiştir [25]. Konunun değerlendirme ölçütü olan Binalarda Günışığı kullanımı standartlarını içeren TS EN 17037 Binalarda Günışığı Standardı CEN/TC 169 "Lightandlighting - Işık ve aydınlatma" Teknik Komitesi tarafından hazırlanmış, CEN tarafından 29.07.2018 tarihinde onaylanmış ve Türk Standartları Enstitüsü Teknik Kurulu'nun 28.01.2019 tarihli toplantısında Türk Standardı eşdeğeri olarak kabul edilerek yayımına karar verilmiştir. Bu standarda göre mekânlardaki gün ışığının minimum performansı tanımlanmıştır. Gün ışığının aydınlatma unsuru olduğu hacimler için minimum gün ışığının sağlanması, güneş ışığına maruz kalma ve kamaşma kapsamında birtakım öneriler sunulmuştur [26].

2. Materyal ve Metot

Çalışmada Türkiye'nin İklim Bölgelerini ifade eden 5 pilot il seçilmiş ve bu iklim bölgeleri tanıtılmıştır. Bu beş ile yapıldığı teyit edilen tip eğitim yapısı vaziyet planı, kat planları ve cepheleriyle incelenmiştir. Tip eğitim yapısı dersliği üzerinden beş pilot ilde gün ışığı farklı mevsim ve farklı saatlere göre analiz edilmiş, bu analizler ve gün ışığı simülasyonları TS EN 17037 Binalarda Günışığı Standartları referans alınarak tablolar halinde düzenlenmiş olup bulgular kısmında edinilen sonuçlar grafik ve tablo olarak değerlendirilmiştir.

2.1 Türkiye'nin farklı iklim bölgelerinin tanıtılması

Türkiye, iklim kuşaklarından ılıman kuşak ile subtropikal kuşak arasında yer almakta olup coğrafi konumuna bağlı olarak farklı iklim tipleri görülmektedir. Bu çeşitliliğe sebep olan kıyı bölgelerde deniz sebebiyle ılıman iklim görülürken iç kesimlerde karasal iklim özellikleri öne çıkmaktadır[20].

2.1.1 Ilımlı nemli iklim bölgesi

Türkiye'nin ılımlı iklim bölgesi Balıkesir'den başlayarak kuzey sahil şeridini içeren illeri kapsamaktadır. Deniz faktörü sebebiyle bu iklim bölgesi nemli olup ılıman bir ısı seviyesine sahiptir. Bu bölgelerde binaların serbest formlu olduğu görülmektedir. Kübik form genel olarak yaygındır ve yamacın eğimine paralel olacak biçimde farklı zemin kotlarına konumlandırılmaktadırlar. Geleneksel binalarda ise ahşap iskelet ve yığma taş duvarlar üzerine oturan iki katlı yığma sisteme rastlanmaktadır[20].

2.1.2 Ilımlı kuru iklim bölgesi

Türkiye'nin iç kesimlerinin sahip olduğu iklim özelliklerini içermektedir. Denizle herhangi bir sınır olmamasından kaynaklı olarak gün içi mevsimlik sıcaklık farkları ılıman nemli iklim bölgesine göre fazladır. Kışların yazlara göre daha baskın yaşandığı görülmektedir [20]. Bu bölgelerde Vadi yamaçlarında eğime paralel olacak biçimde yerleşen dağınık ya da yoğun olarak gruplanmış güneşe doğru bir yerleşimin olduğu görülmektedir. Nemli bir bölge olmadığı için rüzgârın konfor etkisi çok göz önüne alınmamaktadır[20].

2.1.3 Sıcak nemli iklim bölgesi

Türkiye'nin Balıkesir'e kadar güney ve batı sahil şeridini içeren bölgesidir. Güneyde yer alması ve denizin de etkili olması sebebiyle nemli ve sıcaktır. Güneş ışınlarının açısına bağlı olarak yazların sıcak ve kurak kışların ise ılık ve yağışlı olduğu görülmektedir. Bina formu olarak uzun dikdörtgen formlara rastlanmaktadır. Mekândaki hava sirkülasyonunu sağlayabilmek için ise zeminden kaldırılmış döşeme ve yüksek çatı kullanımı faydalı bulunmaktadır. Güneş ışınlarından yeterince korunabilmek için ise geniş saçaklar kullanılmalıdır. Bu bölgede büyük bir kısmı dışarıda geçtiği için sofa, taşlık, veranda kullanımı yaygındır. Duvarlarda rüzgâr hareketine imkân sağlayan geniş açıklıklar bulunmaktadır [20].

2.1.4 Sıcak kuru iklim bölgesi

Türkiye'nin güneydoğusunu içeren iklim bölgesidir. Güneyde yer aldığı için sıcaktır; ancak denize kıyısı olmadığı için kuru iklim bölgesidir. Bu bölgede kışın don olaylarına az rastlanırken, yaz mevsiminde şiddetli sıcaklar hakimdir [20]. Vadi rüzgârlarının etkisinin azaltılması için sıcak kuru iklim bölgelerinde vadi tabanlarının tercih edildiği görülmektedir. Bu durum rüzgârdan korunmaya da olanak sağlamaktadır. Bu bölgede en sıcak dönemde güneş ışınlarından korunmak amacıyla az katlı ve sıkışık dokunun tercih edildiği görülmektedir. Rüzgârın nem sirkülasyonuna etkisi olduğu sürece rüzgârdan da yararlanılmaktadır. [20].

2.1.5 Soğuk iklim bölgesi

Türkiye'nin iç ve doğu bölgelerini içeren bu iklim bölgesinin en belirgin özellikleri Erzurum'da görülmektedir. Kışlar çok soğuk yazlar ise ılık geçmektedir. Bu bölgelerde enerji etkinliğini maksimum düzeye çıkarabilmek için güneş ışınlarından optimum düzeyde faydalanılması gerekmektedir. Yapıların güneye yönlendirilmesi, kare ya da kareye yakın kompakt formlar kullanılması uygun bulunmaktadır. Isı kayıplarını minimize etmek için yapıyı etkileyen kontrolsüz hava hareketlerinden kaçınılmalıdır [20].

Çalışmada ele alınan tip eğitim yapısının ülkemizde var olan 5 iklim bölgesinden seçilen 5 pilot ilde uygulandığı kabul edilmiştir. Bu iller ve iklim bölgeleri:

- Ankara, ılımlı kuru iklim bölgesi.
- Antalya, sıcak nemli iklim bölgesi.
- Diyarbakır, sıcak kuru iklim bölgesi.
- Erzurum, soğuk iklim bölgesi.
- İstanbul, ılımlı nemli iklim bölgesi olarak belirlenmiştir.

2.2 Örneklem yapı özellikleri

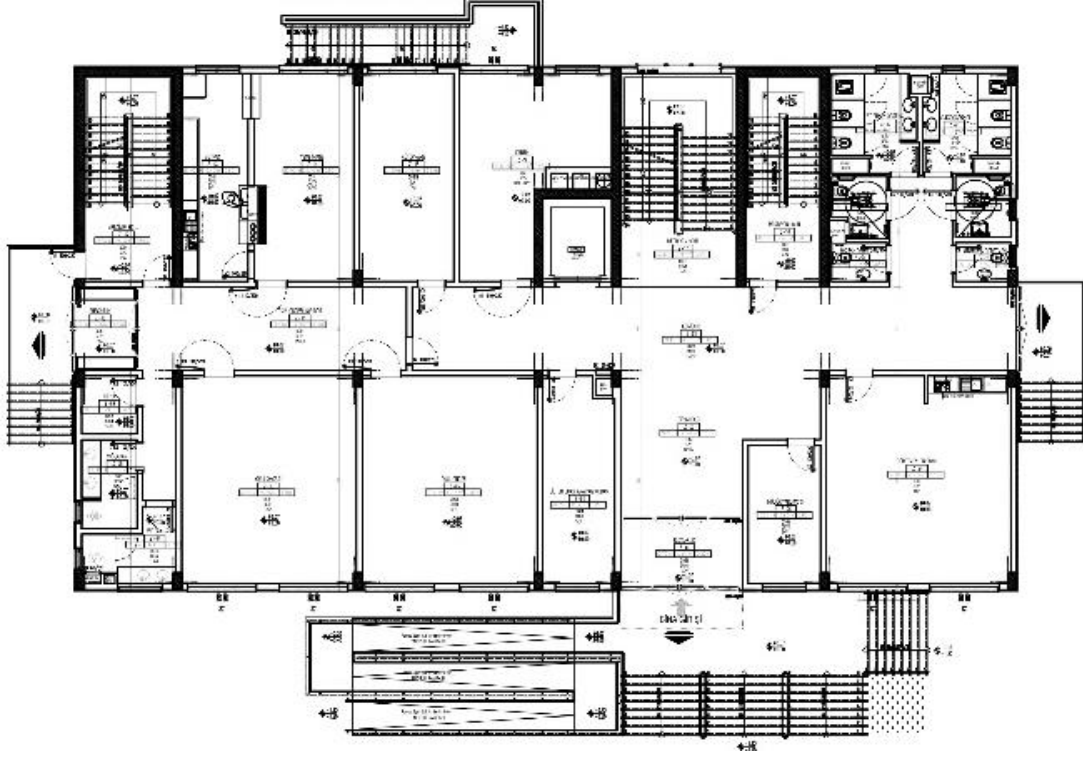
Çalışma alanı olarak seçilen eğitim yapısı; Milli Eğitim Bakanlığı tarafından hazırlanarak uygulanan 12 derslikli bir ilkökul projesidir (Şekil 1). Proje, Milli Eğitim Bakanlığı tarafından gerekli olan her bölgede uygulanmıştır. Bodrum kat ile birlikte toplam 5 katlı olan yapı 280 kişi kapasiteli olup yüksekliği 24,5 metredir. Yapının toplam inşaat alanı 3212,41 metrekaredir. Şekil 1'de tip eğitim yapısına ait görsel yer almaktadır [27].



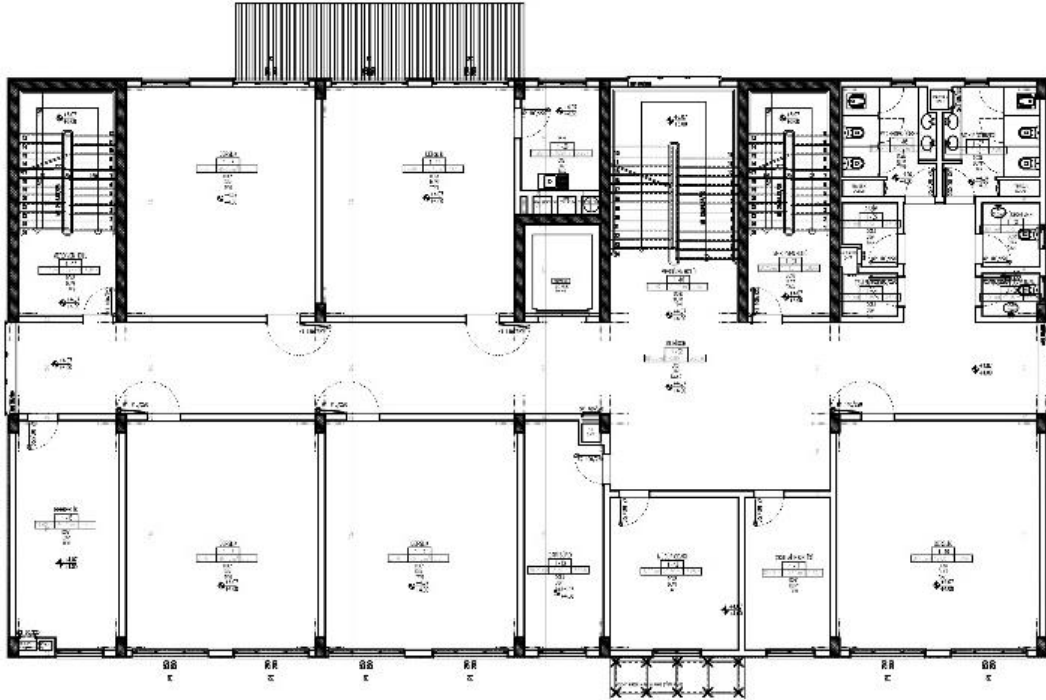
Şekil 1. Çalışma alanı olarak seçilen 12 derslikli tip ilkökul yapısı. Sivas İl Milli Eğitim Müdürlüğü Emlak ve İnşaat İşleri (2021).

2.2.1 Plan şemaları

Milli Eğitim Bakanlığı tarafından gerekli görülen her bölgede inşa edilen bu eğitim yapısının zemin katında yemekhane, kantin, kütüphane, rüzgârlık ve okul öncesi eğitimin verildiği derslikler yer almaktadır. Zemin kat girişinde dışarıyla ilişki kuran rüzgârlık; kat holü ve dış bölge arasında aracı görevi görmektedir. Mahaller uzun bir sirkülasyon aksına karşılıklı olarak yerleştirilmiştir (Şekil 2). Birinci katta ise güney ve kuzeye konumlandırılmış dersliklerle beraber idari birimler görülmektedir (Şekil 3).



Şekil 2. Zemin kat planı. Sivas İl Milli Eğitim Müdürlüğü İnşaat Emlak İşleri (2021).



Şekil 3. Birinci kat planı. Sivas İl Milli Eğitim Müdürlüğü İnşaat Emlak İşleri (2021).

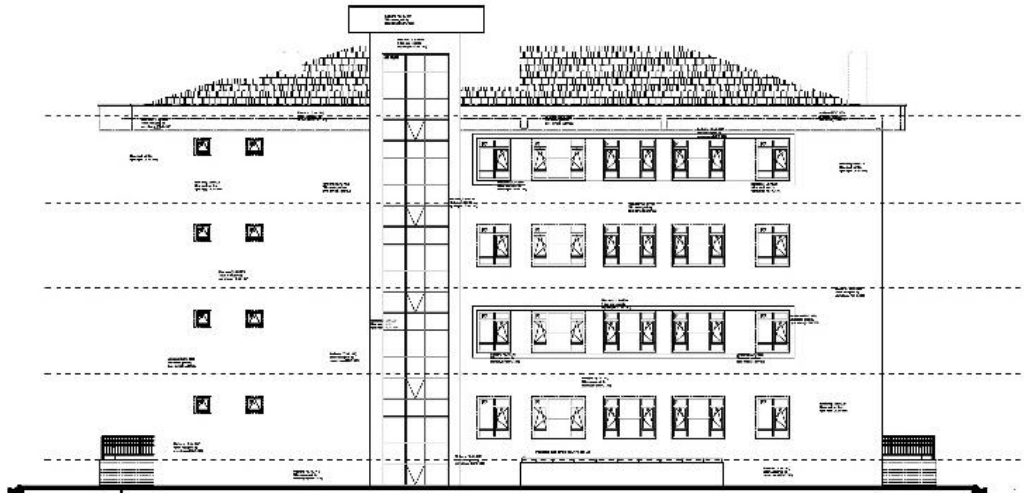
İkinci katta atölyeler ve kuzey-güney cepheye konumlandırılmış derslikler bulunmaktadır. Üçüncü katta ise bu katlardan farklı olarak doğu cephesinde konumlandırılmış bir konferans salonu bulunmaktadır. İkinci ve üçüncü katlarda da aynı plan şeması uygulanmıştır.

2.2.2 Görünüşler

Seçilen eğitim yapısında derslikler ve atölyeler kuzey ve güney cepheye karşılıklı olarak yerleştirilmiştir. Oldukça yalın bir düzenlemenin yanı sıra kuzey cephede tip eğitim yapılarında yaygın olarak kullanılan bir kule formu yükseltilmiştir. Batı cephenin orta kısmında boydan boya şeffaf cephe dikkat çekmekte olup, bunun dışında bu cephede herhangi bir pencere açıklığına rastlanmamaktadır. Şekil 4 ve 5'te yapının güney ve kuzey görünüşlerine yer verilmiştir.



Şekil 4. Yapının güney görünüşü. Sivas İl Milli Eğitim Müdürlüğü İnşaat Emlak İşleri. (2021)



Şekil 5. Yapının kuzey görünüşü. Sivas İl Milli Eğitim Müdürlüğü İnşaat Emlak İşleri. (2021)

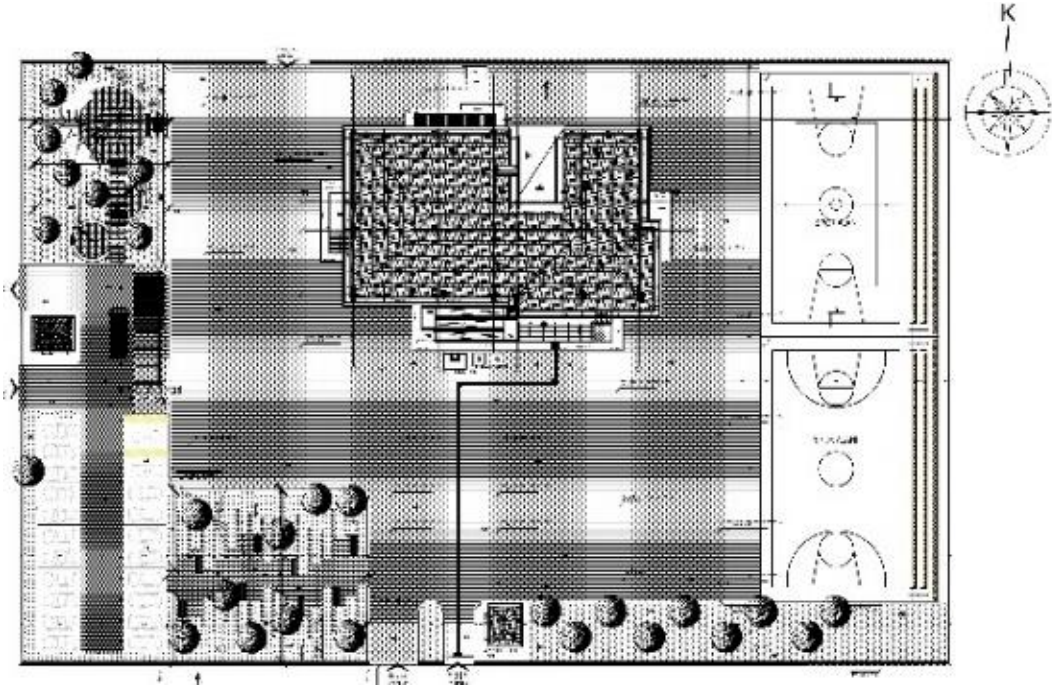
2.3 Uygulanan Yöntem

Türkiye'de gerekli olan her ile uygulandığı teyit edilen tip eğitim yapısı seçilmiştir. Yapı 2D AutoCAD çizimleri üzerinden VELUX Daylight Visualizer 2 programında modellenmiş ve yapının güney cephesine konumlandırılmış derslik üzerinden gerekli tasarım parametreleri oluşturularak simülasyonlar gerçekleştirilmiştir [28]. Yapının güney cephesinden bir derslik temel alınarak bu çalışma gerçekleştirilmiştir. Güney cephesindeki derslik sayısının fazla olmasının yanı sıra binanın konumlandırılışının güneşe göre yönelimi doğal aydınlatma tasarımı ile doğrudan ilgilidir. Kuzey Yarım Küre'de güneş ışınlarını güneyden en büyük açılarla alan Türkiye için binaların güney cephesindeki cam yüzeyler, kışın güneş enerjisi istenildiği zaman verimli olduğu gibi, güneş kontrolünün de dış görüşü kesmeden yapılması mümkündür [29]. Çalışmada dersliklerin kuzey ve güneye konumlandırıldığı, dört mevsimde ve günün belirli saatlerinde kullanılan bir eğitim yapısı ele

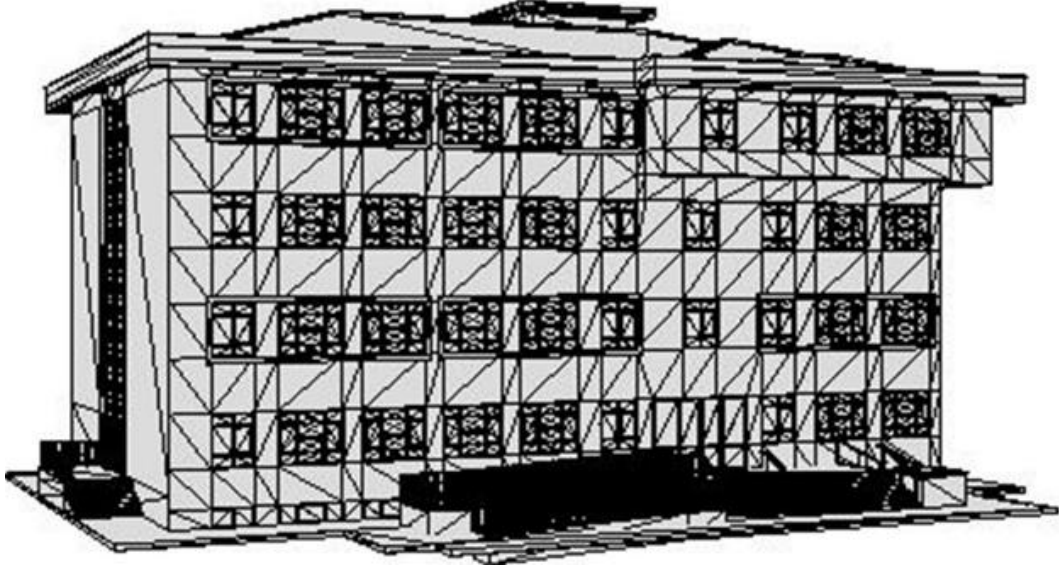
alındığı için gün ışığından daha fazla yararlanan cephe ele alınmış, böylelikle analizler optimize koşulları içerecek şekilde yapılmıştır. Her bir il için programda enlem ve boylamlar ayrı olarak girilmiştir. Dersliğin penceresinde kullanılan cam malzemenin ışık geçirgenliği MEB'in Eğitim Yapıları Asgari Tasarım Kılavuzuna göre ayarlanmıştır. TS EN 17037 standartında belirtildiği gibi analizler, dersliğin penceresi zeminden 0.85 m yüksek olacak şekilde modellenmiş ve simülasyon bu doğrultuda gerçekleştirilmiştir. Türkiye uluslararası standartlara göre ortalama gök modeline sahip bir ülke olarak kabul edilmiştir[30]. Her bir il için farklı mevsim ve saatlerde yapılan günışığı analizleri sonucunda elde edilen aydınlık düzeyleri TS EN 17037 Binalarda Günışığı Standartları Kılavuzuna göre değerlendirilmiş ve tablo haline getirilmiştir. TS EN 17037'nin yanı sıra eğitim yapıları için detaylı standartlar sunan TS –EN 12464-1 Light and Lighting: Lighting Of Work Places-Indoor Work Places, Brussels:CEN kılavuzu da referans olarak ele alınmıştır.

2.3.1 Beş farklı iklim bölgesine göre tip eğitim yapısı dersliğinin günışığı analizleri

Tip Eğitim yapısının, beş farklı iklim bölgesini temsil eden illerde, aynı yönelim ile konumlandırıldığı kabul edilmiştir (Şekil 6). Şekil 6'da tip eğitim yapısının konumlanmasını ifade eden vaziyet planına yer verilmiştir. Örnek yapı olarak seçilen tip eğitim yapısı Türkiye'de gerekli görülen tüm il ve ilçelerde uygulanmıştır. Çalışmada iklimsel veriler üzerinden analizler yapılacağı için ülkemizin beş farklı iklim tipini temsil eden Ankara, Antalya, Diyarbakır, Erzurum ve İstanbul illeri VELUX Daylight Visualizer 2 programında lokasyon olarak seçilmiştir ve yapı VELUX Daylight Visualizer 2 Programında modellenmiştir (Şekil 7).



Şekil 6. Tip eğitim yapısı vaziyet planı. Sivas İl Millî Eğitim Müdürlüğü İnşaat Emlak İşleri.(2021).



Şekil 7. Yapının modeli (Velux Daylight V2)

Türkiye’de görsel konfor koşullarının değerlendirilmesi için TSE tarafından onaylanan “TS EN 12464-1: Çalışma Alanlarının Aydınlatılması Standardı” kullanılmaktadır [31]. Çalışmada bir dersliğin ihtiyacı olan minimum aydınlık düzeyi aylara ve saatlere göre incelendiği için TS EN 12464-1’in eğitim yapısı mekânlarında olması gereken minimum aydınlık düzeyleri de tablo olarak ifade edilmiştir.

Tablo 1. TS EN 12464-1 Çalışma alanlarının aydınlatılması standardı. (TS EN 12464-1, 2013).

AYDINLATILACAK YER	MİNİMUM AYDINLIK DÜZEYİ (lx)
Sınıflar, özel ders odaları	300
Akşam dersleri ve yetişkin eğitimi için sınıflar	500
Konferans salonu	500
Sanat odaları	500
Teknik çizim odaları	750
Uygulama odaları ve laboratuvarlar	500
Bilgisayar uygulama odaları	300
Holler	200
Dolaşım alanları, koridorlar	100
Merdivenler	150
Öğrencilerin ortak kullandığı alanlar	200

Eğitim yapılarında günışığının önemi ve gerekliliğine önceki bölümlerde yer verilmiş olup çalışmanın bu bölümünde mekânlardaki gün ışığı alımının hesaplanmasına ve TS EN 17037 binalarda gün ışığı standartlarına göre değerlendirilmesine yer verilmiştir (Tablo 2). Hedef gün ışığı faktörü DT, Minimum Hedef Gün Işığı Faktörü DTM, yıl boyunca gündüz saatlerinin yarısından fazlasında günışığı faktörü 300 lx’ü sağlayan değer D300, yıl boyunca gündüz saatlerinin yarısından fazlasında 100 lx değerini taşıyan gün ışığı faktörü D100 olarak tanımlanmaktadır[32].

Tablo 2. TS EN 17037 Binalarda Gün Işığı Standartlarına göre minimum günışığının sağlanması şartları (Bircan Ve Yener, 2019)

Öneri Seviyesi	Günüşığı Açıklık Tipi	Aydınlık Düzeyi	Günüşığı Faktörü
Minimum Öneri	Cephe Açıklığı	300 lx: Hacim×0,5	DT>D300 Hacim×0,50
		100lx :Hacim×0,95	DTM>D100 Hacim×0,95
Minimum Öneri	Çatı Açıklığı	300 lx: Hacim×0,95	DTM>D300 Hacim×0,95

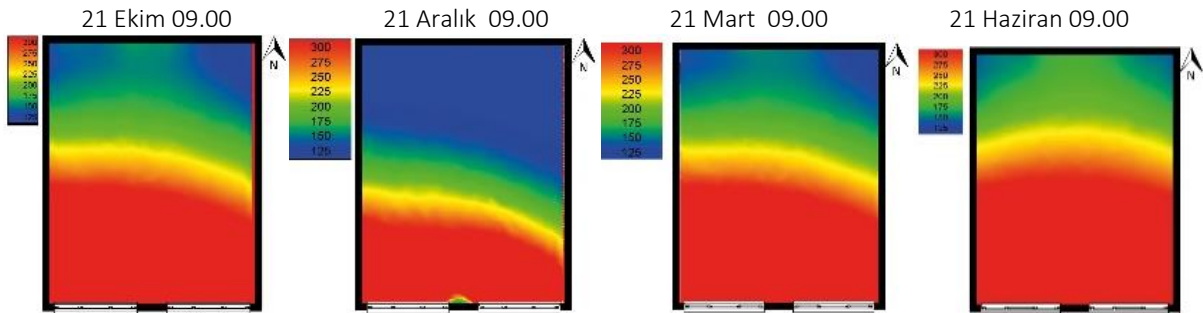
Avrupa Standartlar Komitesine (CEN) üye ülkelerin başkentleri için $E_{v,d,med}$ (gökten gelen yayınık ışığın yatayda oluşturduğu medyan aydınlık düzeyi) değerleri ve buna bağlı olarak hacimde sağlanması gereken minimum ortalama günışığı faktörü belirtilmiştir.

CIE raporlarıyla beraber TS EN 17037 Binalarda Gün Işığı standartlarında da medyan aydınlık düzeyleri 33 ülkenin başkenti için hesaplanmış ve Ankara ili için $E_{v,d,med}=19\ 000$ lx olarak verilmiştir. Meteoroloji Genel Müdürlüğü resmi sitesinden edinilen güneşlenme süresi dağılımı verileri ve Türkiye için güneşlenme süresinin mekânsal analizlerini içeren çalışmalarında Kandırmaz ve Zateroğlu'nun Türkiye'nin illeri için yıllık güneşlenme sürelerini ifade eden çalışmasındaki veriler temel alınmıştır. Bu veriler referans alınarak, TS EN 17037 Binalarda Gün Işığı Standardında Ankara için verilen 19 000 lx değerindeki medyan değer üzerinden bağlantı kurularak diğer iller için de hesaplanmıştır [33] [34]. Bu durumda seçilen pilot iller için medyan aydınlık düzeyleri ; Ankara 19 000 lx, Antalya 23 000 lx, Diyarbakır 22 000 lx, Erzurum 18 000 lx, İstanbul ise 13 000 lux olarak hesaplanmıştır. TS EN 17037 Binalarda Gün ışığı standartlarına göre hacimlerde gün ışığı saatlerinin %50'sinde 300 lx aydınlık düzeyi değerinin sağlanması için Minimum Günışığı faktörü %1.6 ve 100 lx için %0.5 olarak belirtilmiştir [26]. Milli Eğitim Bakanlığı'nın (MEB) asgari tasarım standartları kılavuzunda yer alan öneriler doğrultusunda tasarlanan tip eğitim yapısında seçilen derslik özellikleri aşağıdaki gibidir;

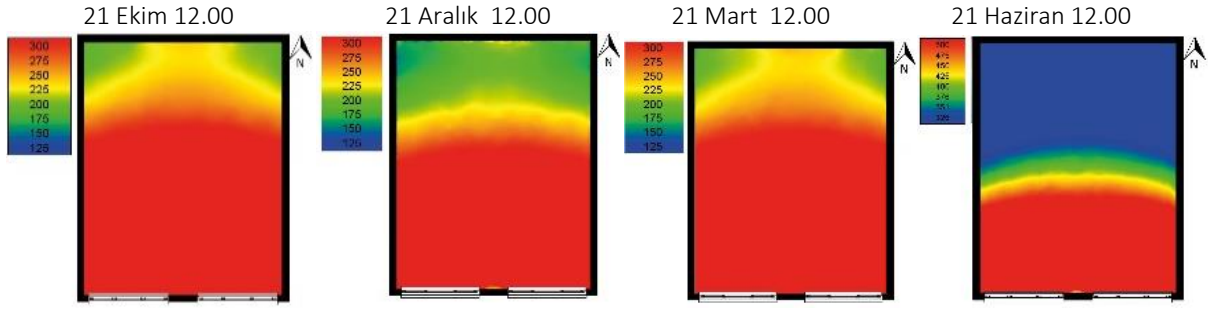
- Öğrenci Kapasitesi: 30
- Hacim Boyutları: 7.5 m*6.3m
- Hacim yüksekliği: 3.85 m
- Derslik alanı: 46.45 metrekare
- Pencere Boyutları: 2.5 m* 2 m
- Pencere Adedi: 2
- Camın Işık Geçirme Katsayısı %60 (Milli Eğitim Bakanlığı, 2015)
- Pencere Alanı/Taban Alanı: yaklaşık olarak %21 oranında olup kılavuzda belirtilen %25 standardını karşılamamaktadır.

Binalarda yeterli güneş ışığının iç mekâna alınması ve minimum güneşlenme süresi ölçütlerinin sağlanması, TS EN 17037:2019 standardında sağlık yapıları, eğitim binaları ve konut binaları gibi tipolojiler başta olmak üzere güneş ışığı alımının önemli olduğu tüm mekânlarda vurgulanmıştır[35]. Analizler sadece iklim bölgeleri farklılaşacak şekilde diğer fiziksel koşullar sabit kabul edilerek yapılmıştır. Günışığı analizlerini yapabilmek için CIE Standartlarına bağlı olarak "ortalama gök modeli" seçilmiştir. VELUX programında edinilen görseller Photoshop CS6 programında 2 boyutlu AutoCAD çizimlerine aktarılmıştır. Milli Eğitim Bakanlığı'na bağlı eğitim yapıları; ağırlıklı olarak eylül ayında faaliyete geçip haziran ayında kapanan ve hafta içi kullanılan mekânlardır, buna göre en aktif olan ders dönemini temsilen 4 ay seçilmiştir. Bu aylar Ekim, Aralık, Mart ve Haziran olmak üzere hesaplama günü olarak da her ayın 21'i olarak belirlenmiştir. Ayrıca ilköğretimlerde ağırlıklı olarak örgün öğretim söz konusu olduğu için gün ışığı alımı için hesaplama saatleri 09.00, 12.00 ve 15.00 olarak seçilmiştir.

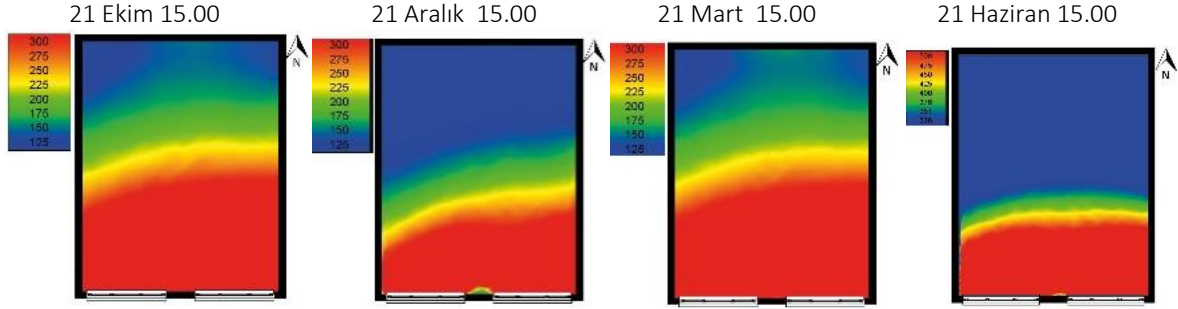
Ilımlı kuru iklim bölgesi için seçilen pilot il olan Ankara'nın gün ışığı analizleri belirtilen saat dilimlerine göre yapılmıştır ve edinilen sonuçlar Şekil 8-9-10 ve Tablo 3'te belirtilmiştir.



Şekil 8. Ankara ili (35,5 N- 32,5 E) için hacimlerde günışığı alımı simülasyon sonuçları-09.00



Şekil 9. Ankara ili (35,5 N- 32,5 E) için hacimlerde günışığı alımı simülasyon sonuçları-12.00



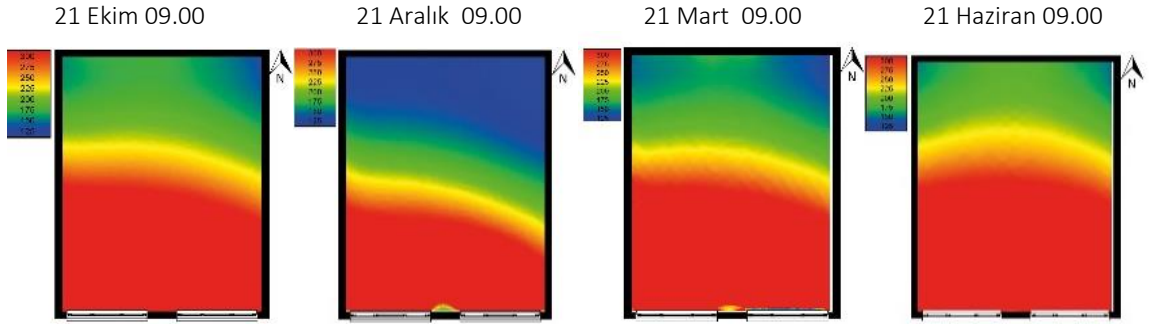
Şekil 10. Ankara ili (35,5 N- 32,5 E) için hacimlerde günışığı alımı simülasyon sonuçları-15.00

Tablo 3. Seçilen tip eğitim yapısı güney cephe dersliğinin Ankara (35,5 N- 32,5 E) ili için farklı zaman dilimlerindeki aydınlık düzeylerinin TS EN 17037 Standartlarına göre değerlendirilmesi

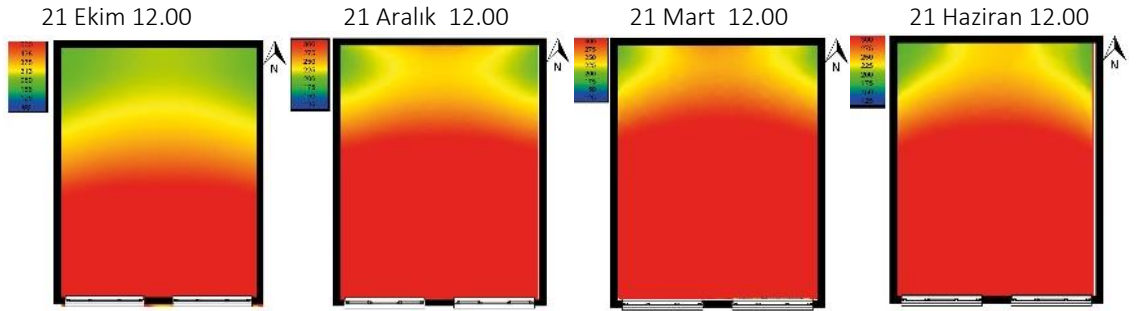
Ankara (35,5 N, 3	Max. Aydınlik Düzeyi	Min. Aydınlik Düzeyi	Gün Işığı Performansı Sınıflandırması (%)	
			100 lx ≤	300 lx ≤
21 Ekim 09:00	1263 lx	101 lx	%100	%35
21 Ekim 12:00	1404 lx	115 lx	%100	%56
21 Ekim 15:00	1217 lx	93 lx	%98	%39
21 Aralık 09:00	734 lx	62 lx	%71	%23
21 Aralık 12:00	1426 lx	102 lx	%100	%52
21 Aralık 15:00	528 lx	43 lx	%64	%15
21 Mart 09:00	1391 lx	107 lx	%100	%42
21 Mart 12:00	2238 lx	163 lx	%100	%59
21 Mart 15:00	1290 lx	101lx	%100	%34
21 Haziran 09:00	1572 lx	124 lx	%100	%45
21 Haziran 12:00	2360 lx	153 lx	%100	%55
21 Haziran 15:00	1576 lx	120lx	%100	%44

Ankara ili Ekim ayında saat 09.00 ve 15.00'da istenilen mekânın %50'sinde en az 300 lx değerindeki aydınlık düzeyi kriterini sağlayamamış, TS EN 17037 standardına göre minimum koşulu Ekim ayında sadece saat 12.00'da uygunluk göstermiştir. Mekânın %95'inde en az 100 lx değerini içeren aydınlık düzeyi kriteri ekim ayında her saat için sağlanmıştır. Aralık ayında saat 12.00'da 100 lx değerini içeren aydınlık düzeyi kriteri hacmin tamamında ve 300 lx değerindeki aydınlık düzeyi kriteri hacmin %52'sinde sağlanmış, diğer zaman dilimlerinde her iki minimum koşul da karşılanamamıştır. Mart ayında 100 lx değerindeki aydınlık düzeyi kriteri seçilen her saat için karşılanırken, 300 lx değerindeki aydınlık düzeyi kriteri saat 09.00 ve 15.00'da mekânının %50'sinde etkili olacak şekilde karşılanamamıştır. Haziran ayı için 100 lx değerindeki aydınlık kriterinin hacmin tamamında tüm zaman dilimlerinde sağlandığı görülürken, 300 lx değerindeki aydınlık düzeyi kriterinin hacmin en az % 50'lik kısmında etki etmesi saat 12.00'da gerçekleşmiştir.

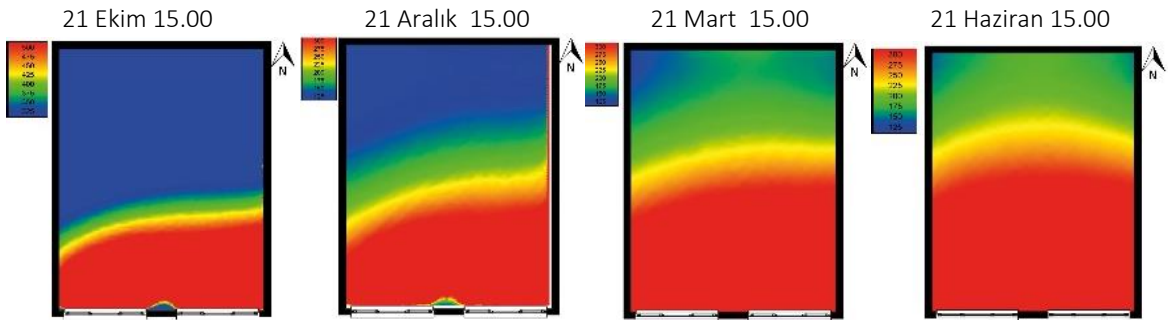
Sıcak nemli iklim bölgesi için seçilen pilot il olan Antalya'nın gün ışığı analizleri farklı zaman dilimlerine göre yapılmıştır ve edinilen sonuçlar Şekil 11-12-13 ve Tablo 4'te belirtilmiştir.



Şekil 11. Antalya ili (36.68 N-30,98 E) için hacimlerde günışığı alımı simülasyon sonuçları-09.00



Şekil 12. Antalya ili (36.68 N-30,98 E) için hacimlerde günışığı alımı simülasyon sonuçları-12.00



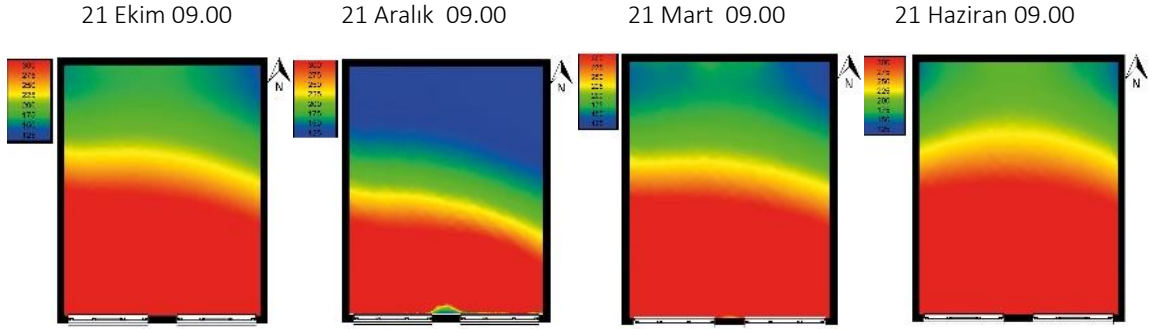
Şekil 13. Antalya ili (36.68 N-30,98 E) için hacimlerde günışığı alımı simülasyon sonuçları-15.00

Tablo 4. Seçilen tip eğitim yapısı güney cephe dersliğinin Antalya (36,68 N- 30,98 E) ili için farklı zaman dilimlerindeki aydınlık düzeylerinin TS EN 17037 standartlarına göre değerlendirilmesi

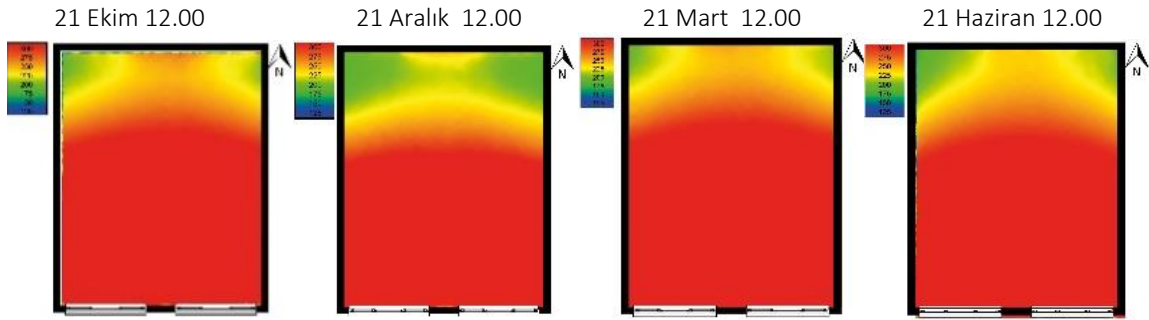
Antalya(36.6815, 30.984,E)	Max. Aydınlik Düzeyi(lx)	Min. Aydınlik Düzeyi(lx)	Gün Işığı Performansı Sınıflandırması(%)	
			100 lx ≤	300 lx ≤
21 Ekim 09:00	1395 lx	120 lx	%100	%
21 Ekim 12:00	2253 lx	186 lx	%100	%61
21 Ekim 15:00	1298 lx	111 lx	%100	%
21 Aralık 09:00	868 lx	87 lx	%96	%3
21 Aralık 12:00	1282 lx	108 lx	%100	%
21 Aralık 15:00	736 lx	77 lx	%94	%
21 Mart 09:00	1402 lx	114 lx	% 100	%
21 Mart 12:00	2242 lx	183 lx	%100	%57
21 Mart 15:00	1284 lx	111 lx	%100	%
21 Haziran 09:00	1502 lx	131 lx	%100	%42
21 Haziran 12:00	2210 lx	156lx	%100	%56
21 Haziran15:00	1506 lx	130 lx	%100	%50

Antalya ilinde Ekim ayında saat 09.00 ve 15.00 saatlerinde mekânın %95'inde 100 lx değerindeki aydınlık düzeyi kriteri sağlanmış, saat 12.00'da ise bu kriterle beraber mekânın %50'sinde 300 lx değeri içeren minimum aydınlık düzeyi kriteri karşılanmıştır. Aralık ayında saat 12.00'da her iki koşul da karşılanırken, saat 15.00'da iki minimum aydınlık düzeyi kriteri de karşılanamamıştır. Mart ayında saat 09.00'da ve saat 15.00'da mekânın %50'sinde en az 300 lx değerindeki aydınlık düzeyi kriterinin karşılanmadığı görülürken saat 12.00'da her iki koşulun sağlandığı görülmektedir. Haziran ayında saat 09.00'da 300 lx değerindeki aydınlık düzeyi kriterinin hacimde istenilen oranda karşılanmadığı görülürken bunun dışındaki zaman dilimlerinde gerekli koşulların sağlandığı görülmektedir.

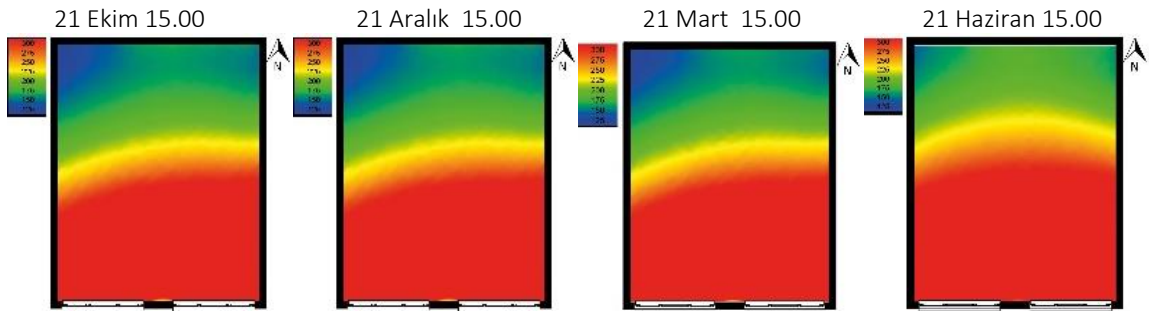
Sıcak kuru iklim bölgesi için seçilen pilot il Diyarbakır için elde edilen veriler ve değerlendirmeler Şekil 14-15-16 ve Tablo 5'te belirtilmektedir.



Şekil 14. Diyarbakır ili (38,066 N- 40,2715 E) için hacimlerde günışığı alımı simülasyon sonuçları-09.00



Şekil 15. Diyarbakır ili (38,066 N- 40,2715 E) için hacimlerde günışığı alımı simülasyon sonuçları-12.00



Şekil 16. Diyarbakır ili (38,066 N- 40,2715 E) için hacimlerde günışığı alımı simülasyon sonuçları-15.00

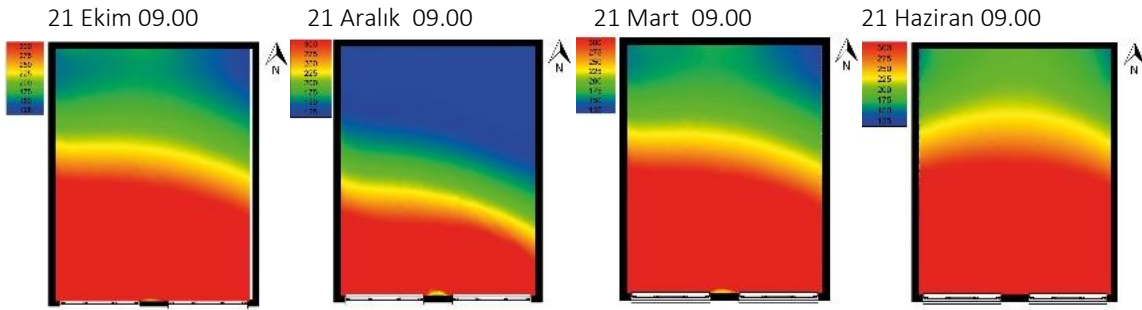
Tablo 5. Seçilen tip eğitim yapısı güney cephe dersliğinin Diyarbakır (38,066 N- 40,2715 E) ili için farklı zaman dilimlerindeki aydınlık düzeylerinin TS EN 17037 Standartlarına göre değerlendirilmesi

Diyarbakır(38.066, 40.2715,E)	Max. Aydınlik Düzeyi(lx)	Min. Aydınlik Düzeyi(lx)	Gün Işığı Performansı Sınıflandırması (%)
			100 lx ≤ 300 lx ≤
21 Ekim 09:00	1347lx	120 lx	%100
21 Ekim 12:00	2234 lx	186 lx	%100
21 Ekim 15:00	1279 lx	107 lx	%96
21 Aralık 09:00	789 lx	74 lx	%92
21 Aralık 12:00	1529lx	102 lx	%100

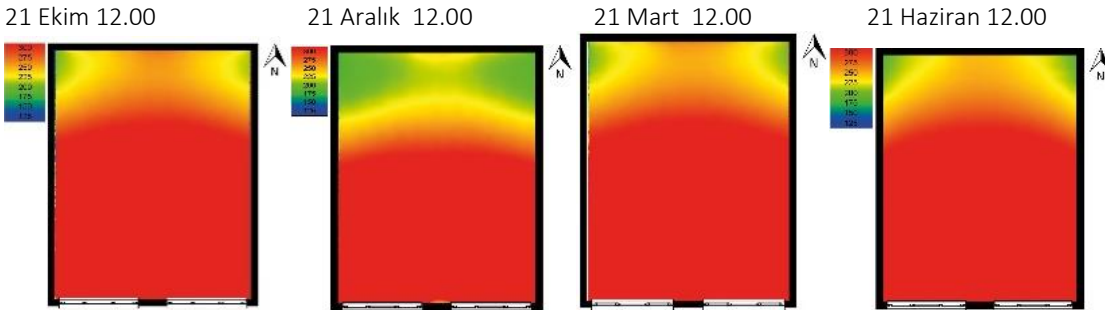
21 Aralık 15:00	749 lx	73lx	%90
21 Mart 09:00	1385 lx	112 lx	%100
21 Mart 12:00	2270 lx	185 lx	%100
21 Mart 15:00	1372 lx	105 lx	%100
21 Haziran 09:00	1582 lx	130 lx	%100
21 Haziran 12:00	2387 lx	168 lx	%100
21 Haziran 15:00	1494lx	136 lx	%100

Diyarbakır'da Ekim ayında her saat mekânın %95'inde en az 100 lx değerindeki aydınlık düzeyi kriteri karşılanırken, saat 12.00 dışında 300 lx değerinde aydınlık düzeyi kriteri sağlanamamıştır. Aralık ayında saat 12.00'da gerekli aydınlık düzeyleri kriterleri gerekli oranlarda karşılanırken, diğer zaman dilimlerinde gerekli koşullar karşılanamamıştır. Mart ayında her saat dilimi için 100 lx değerindeki aydınlık düzeyi kriteri karşılanırken, 300 lx değerindeki koşul sadece saat 12.00'da karşılanmıştır.

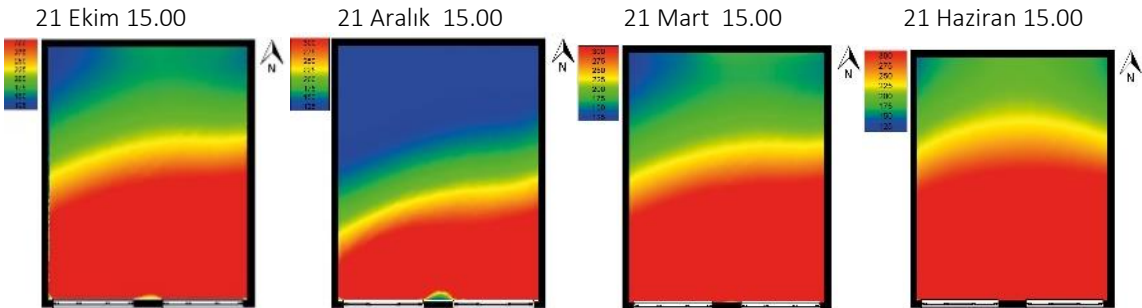
Soğuk iklim bölgesi olarak seçilen pilot il Erzurum için elde edilen veriler ve değerlendirmeler Şekil 17-18-19 ve Tablo 5'te belirtilmektedir.



Şekil 17. Erzurum ili (40,0515 N- 41,443 E) için hacimlerde günışığı alımı simülasyon sonuçları-09.00



Şekil 18. Erzurum ili (40,0515 N- 41,443 E) için hacimlerde günışığı alımı simülasyon sonuçları-12.00

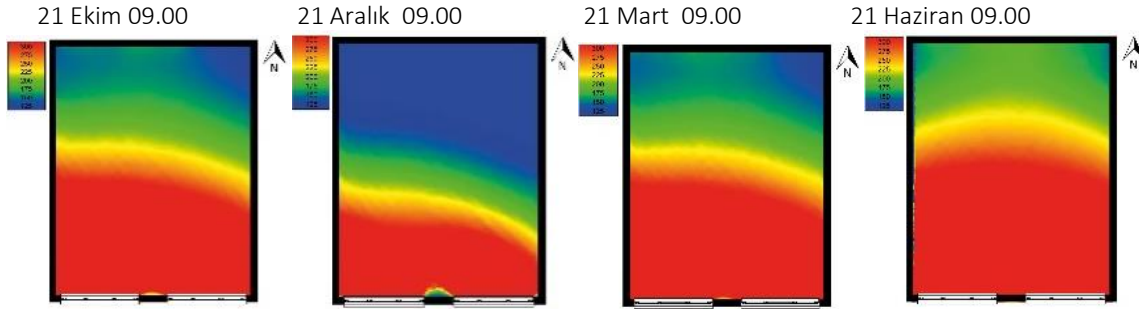


Şekil 19. Erzurum ili (40,0515 N- 41,443 E) için hacimlerde günışığı alımı simülasyon sonuçları-15.00

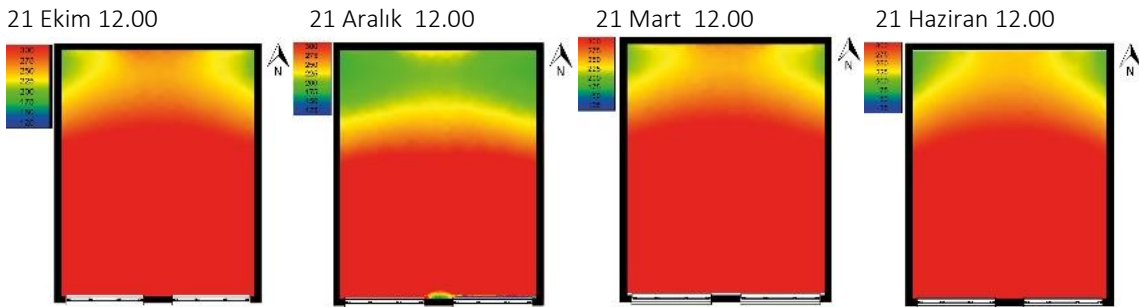
Tablo 6. Seçilen tip Eğitim yapısı güney cephe dersliğinin Erzurum(40,0515 N- 41,443 E) ili için farklı zaman dilimlerindeki aydınlık düzeylerinin TS EN 17037 Standartlarına göre değerlendirilmesi

Erzurum(40.0515, 41.443,E,)	Max. Aydınlik Düzeyi(lx)	Min. Aydınlik Düzeyi(lx)	Gün Işığı Performansı Sınıflandırması (%)	
			100 lx ≤	300lx ≤
21 Ekim 09:00	1293lx	113 lx	%100	%6
21 Ekim 12:00	2110 lx	195 lx	%100	%6
21 Ekim 15.00	1215 lx	100 lx	%100	%
21 Aralık 09:00	596 lx	73 lx	%76	%
21 Aralık 12:00	976 lx	177 lx	%100	%
21 Aralık 15:00	856 lx	42 lx	%75	%
21 Mart 9:00	1296 lx	113 lx	%100	%
21 Mart 12:00	2026 lx	193 lx	%100	%
21 Mart 15:00	1268lx	112 lx	%100	%
21 Haziran 09:00	1558 lx	139 lx	%100	%
21 Haziran 12:00	2353 lx	173 lx	%100	%
21 Haziran 15:00	1493 lx	135 lx	%100	%

Erzurum'da Ekim ayında 300 lx aydınlık düzeyi değeri minimum kriterin saat 9.00 ve 15.00'da sağlanmadığı, 12.00'da aydınlık düzeyi değerlerinin istenilen kriterleri karşılandığı görülmektedir. Mekânın %95'inde 100 lx değerindeki aydınlık düzeyi kriteri seçilen her saat için karşılanmıştır. Aralık ayında sadece 12.00'da gerekli iki koşul karşılanırken, diğer zaman aralıklarında her iki kriter de sağlanamamıştır. Mart ayında saat 12.00'da her iki aydınlık düzeyi kriterinin de karşılandığı, diğer saatlerde ise yalnızca mekânın %95'inde 100 lx değerindeki aydınlık düzeyi kriterine ulaşıldığı görülmektedir. Haziran ayı için ise seçilen saatlerde gerekli tüm kriterler sağlanmıştır. Ilımlı nemli iklim bölgesi olarak seçilen pilot il İstanbul için elde edilen veriler ve değerlendirmeler Şekil 20-21-22 ve Tablo 6'da belirtilmektedir.

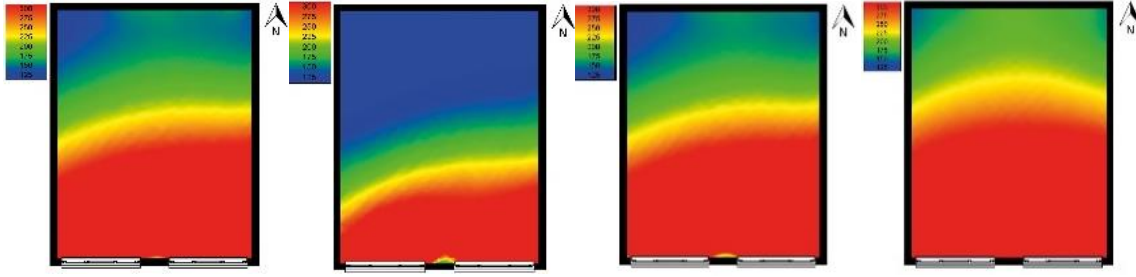


Şekil 20. İstanbul ili (41,1 N- 28,6 E) için hacimlerde günışığı alımı simülasyon sonuçları-09.00



Şekil 21. İstanbul ili (41,1 N- 28,6 E) için hacimlerde günışığı alımı simülasyon sonuçları-12.00

21 Ekim 15.00 21 Aralık 15.00 21 Mart 15.00 21 Haziran 15.00



Şekil 22. İstanbul ili (41,1 N- 28,6 E) için hacimlerde günışığı alımı simülasyon sonuçları-15.00

Tablo 7. Seçilen tip eğitim yapısı güney cephe dersliğinin İstanbul (41,1 N- 28,6 E) ili için farklı zaman dilimlerindeki aydınlık düzeylerinin TS EN 17037 Standartlarına göre değerlendirilmesi

İstanbul(41,1 N, 28,6, E,)	Max. Aydınlık Düzeyi	Min. Aydınlık Düzeyi	Gün Işığı Performansı Sınıflandırması (%)	
			100 lx ≤	300 lx ≤
21 Ekim 09:00	1224 lx	114 lx	%100	%47
21 Ekim 12:00	2177 lx	195 lx	%100	%68
21 Ekim 15:00	1301 lx	105 lx	%100	%43
21 Aralık 09:00	667lx	67lx	%65	%24
21 Aralık 12:00	1354x	163 lx	%100	%53
21 Aralık 15:00	662 lx	62 lx	%74	%24
21 Mart 09:00	1332 lx	108 lx	%100	%41
21 Mart 12:00	2178 lx	191 lx	%100	%63
21 Mart 15:00	1297lx	106lx	%100	%39
21 Haziran 09:00	1646 lx	138lx	%100	%48
21 Haziran 12:00	2387 lx	172 lx	%100	%60
21 Haziran 15:00	1644lx	133lx	%100	%48

İstanbul'da Ekim ve Aralık ayı için yetersiz bir günışığı performansı görülmektedir. Ekim ayı için her saat diliminde 100 lx değerindeki aydınlık düzeyi kriteri mekânın en az %95'inde sağlanırken, 300 lx değeri içeren aydınlık düzeyi kriterine mekânın %50'sinde rastlanılan tek saat 12.00 olmuştur. Mart ayında seçilen her saatte mekânın %95'inde 100 lx değerindeki aydınlık düzeyi kriteri sağlanırken 300 lx değerindeki aydınlık düzeyi kriteri sadece saat 12.00'da karşılanmıştır. İstanbul ili için Haziran ayı da diğer illere göre olumsuz sonuç vermiş olup 100 lx değerindeki minimum kriteri her saat diliminde mekânın tümünde ulaşılırken, 300 lx değerindeki aydınlık düzeyi kriteri sadece 12.00'da karşılanmıştır.

Farklı mevsimlerde ve farklı saatlerde seçilen pilot illere göre gün ışığı analizleri yapılmış ve TS EN 17037'ye göre gün ışığı performanslarını belirten tablolara yer verilmiştir. Farklı mevsimlerde ve farklı saatlerde değişiklik gösteren aydınlık düzeyleri sonuç kısmında değerlendirilmiştir. Her il için gün ışığı analizleri, CIE kılavuzuna uygun olacak şekilde Türkiye için kabul edilen "ortalama gök koşulu" modeline göre yapılmıştır. Bu hesaplamaların sonuçlarına göre Aralık ayı tüm illerde TS EN 17037 standardı gün ışığı aydınlık düzeyi kriterlerini en az oranda karşılayan ay olmuştur. Haziran ayı tüm iklim bölgeleri için hemen hemen %100 verimliliğin gerçekleştiği, TS EN 17037 standardına göre aydınlık düzeyi kriterlerini en yüksek oranda sağlandığı ay olarak gözlemlenmiştir. Bunlara bağlı olarak, cephe açıklıklarında yapılacak revizyonların Aralık ve Haziran ayları dışındaki aylarda etkisinin daha belirgin olarak ortaya konabileceği görülmektedir. Bu nedenle çalışmanın devamında revizyonlara bağlı olarak değişen gün ışığı etkisi Ekim ve Mart ayları kapsamında ele alınmıştır.

2.3.2 Farklı iklim bölgelerindeki tip eğitim yapısında cephe açıklığı revizyonunun gün ışığı performansına etkisi

Çalışmanın bu bölümünde ise seçilen pilot illerde yer alan örneklem yapıdaki dersliklere ait cephe açıklıklarının artırılması durumunda mart ayı için hacimde oluşan aydınlık düzeyi değerleri incelenmiştir. Hacimlerin gün ışığı alımında farklı saatler ve iller için farklılaşan sonuçlar vermesi nedeni ile cephe açıklıklarındaki revizyonların etkisinin hesaplanmasında Mart ayı esas alınmıştır.

Pencere konfigürasyonu, gün ışığının yoğunluğunu ve homojenliğini önemli ölçüde etkilemektedir [36]. Gün ışığının iç mekândaki dağılımında pencerenin büyüklüğü, şekli ve konumu önemli bir etkidir[37]. Yapıda günışığı faktörü esas alınarak tasarlanmış bir pencere, enerji tüketimini önemli oranda azaltabilmekte olup binada toplam enerji tüketiminin %15 ve %30'luk payının aydınlatma kaynaklı olduğu bilinmektedir. Çalışmanın ilk bölümlerinde belirtildiği gibi MEB'in 2015 Asgari tasarım Kılavuzu Standartlarında Pencere Alanı /Taban alanı en az %25 olmalıyken çalışmada kullanılan bu derslik için bu oran yaklaşık olarak %21'dir. Yapıda pencere ölçüsü, pencere formu ve oda ölçüleri, gün ışığını etkileyen temel üç faktör olarak sayılabilmektedir [38]. Özellikle, okullar gibi, gün boyunca kullanılan yapılarda, görsel konfordan ödün vermeden sağlanan etkin enerji kullanımı ile büyük oranda enerji tasarrufu elde edileceği bilinmektedir [39].

Bu bilgiler kapsamında örneklem yapıya ait dersliğin pencere alanı %25'e çıkarılmış ve her il için mart ayı saat 09.00, 12.00 ve 15.00'da hesaplamalar yeniden yapılmıştır. Elde edilen veriler Tablo 8-9 ve 10'da yer almaktadır.

Tablo 8. Revizyon -2 için değişen günışığı değerleri (Mart Ayı Saat:09.00)

İl	Max. Aydınlik (lx)	Min Aydınlik Düzeyi (lx)	Gün Işığı Performansı Sınıflandırması (%)	
			100 lx ≤	300 lx ≤
Ankara	1034 lx	102 lx	%100	%62
Antalya	1107 lx	102 lx	%100	%63
Diyarbakır	906 lx	99 lx	%100	%65
Erzurum	973 lx	102 lx	%100	%61
İstanbul	1030 lx	133 lx	%100	%60

Tablo 9. Revizyon-2 için değişen günışığı değerleri (Mart Ayı Saat:12.00)

İl	MaxAydınlik (lx)	Min Aydınlik Düzeyi (lx)	Gün Işığı Performansı Sınıflandırması (%)	
			100 lx ≤	300 lx ≤
Ankara	1462 lx	139 lx	%100	%85
Antalya	1496 lx	144 lx	%100	%87
Diyarbakır	1300 lx	150 lx	%100	%86
Erzurum	1268 lx	141 lx	%100	%87
İstanbul	1395 lx	133 lx	%100	%86

Tablo 10. Revizyon-2 için değişen günışığı değerleri (Mart Ayı Saat:15.00)

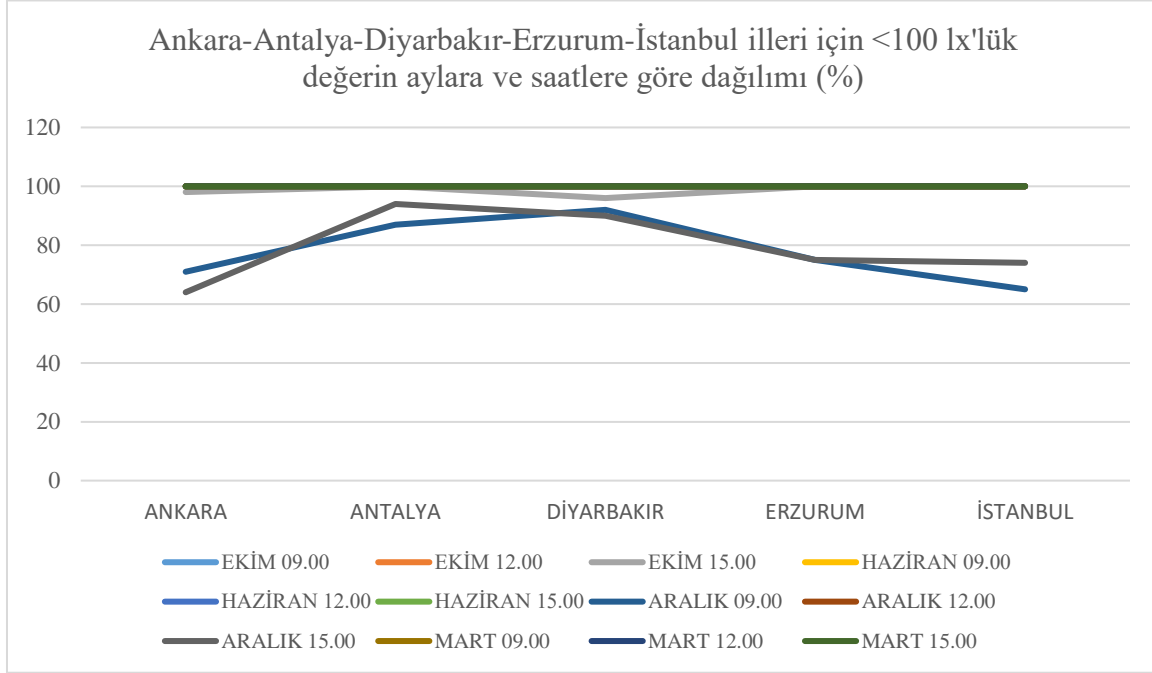
İl	Max.Aydınlik (lx)	Min Aydınlik Düzeyi (lx)	Gün Işığı Performansı Sınıflandırması (%)	
			100 lx ≤	300 lx ≤
Ankara	1023 lx	101 lx	%100	%60
Antalya	1056 lx	104 lx	%100	%62
Diyarbakır	906 lx	99 lx	%100	%63
Erzurum	1002 lx	100 lx	%100	%59
İstanbul	978 lx	96 lx	%100	%59

Tablo 12-13ve 14'te seçilen tip eğitim yapısının dersliğinde pencere alanı/tabana oranının %21'den %25'e çıkarılmasıyla beraber iklim bölgelerini temsil eden pilot iller bazında mart ayına ait farklı zaman dilimlerindeki aydınlık düzeyleri yer almaktadır.

3. Bulgular

Örnek alan çalışmasında Milli Eğitim Bakanlığı İnşaat ve Emlak İşleri Şubesinin Türkiye'nin her ilinde uyguladığı 12 derslikli tip eğitim yapısının güney cephesine konumlandırılmış 30 kişi kapasiteli dersliğine ait gün ışığı analizleri, Türkiye'nin farklı iklim bölgelerini temsil eden Ankara, Antalya, Diyarbakır, Erzurum ve İstanbul illerinde farklı zaman dilimlerinde yapılmıştır. Tip eğitim binasında dersliklerdeki gün ışığı düzeyinin saatlere ve aylara göre farklılıkları ortaya konmuştur. TS EN 17037 standartlarına göre değerlendirme yapıldığında seçilen iller için hem ortak hem de farklı noktalar göze çarpmaktadır. Mevsim, saat gibi doğal etkenlerin yanı sıra yapı cephesindeki revizyonların; yapının hacimlerindeki gün ışığı

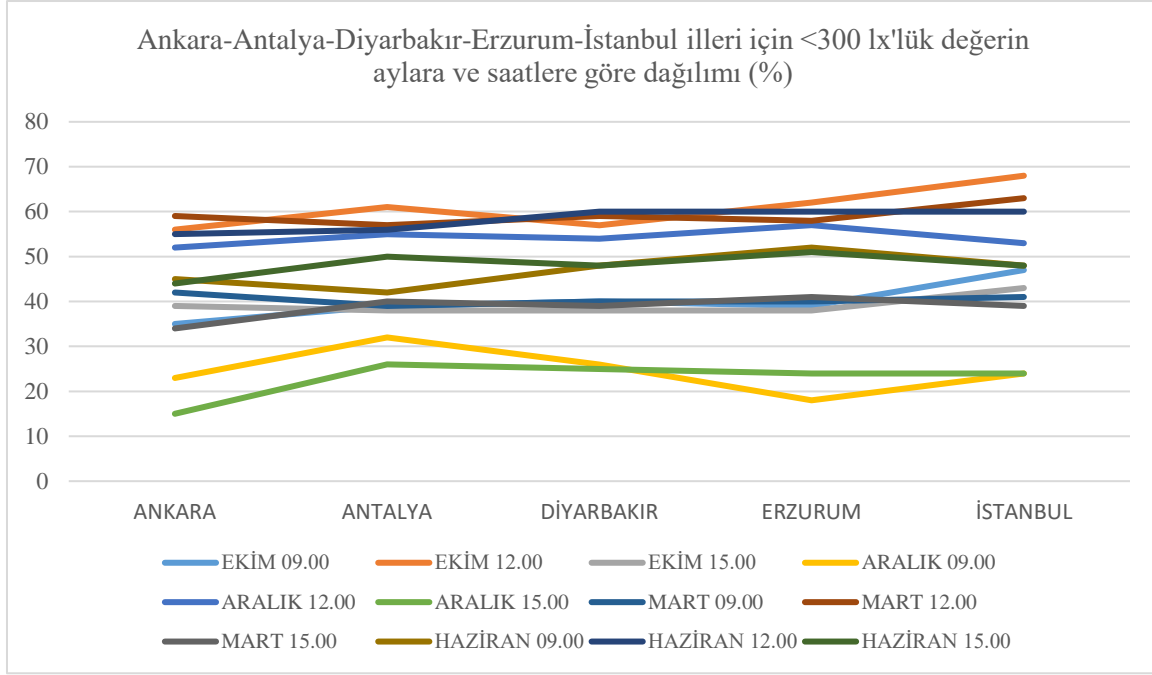
miktarını değiştirdiği görülmektedir. Tüm parametrelerin sabit olduğu sadece coğrafik konumun ve iklim bölgesinin farklılaştığı tip eğitim yapısına ait bir derslikten elde edilen veriler aşağıdaki grafikte yer almaktadır.



Şekil 23. Ankara-Antalya-Diyarbakır-Erzurum-İstanbul illeri <100'lük değerlerin aylara ve saatlere göre dağılımını gösteren grafik.

Yukarıdaki grafikte beş pilot ilde yapılan gün ışığı aydınlık düzeyleri, oluşturulan tablolardan yola çıkılarak karşılaştırmalı olarak gösterilmiştir. Grafikten de anlaşıldığı üzere mekânın %95'inde 100 lx değerindeki aydınlık düzeyi kriteri her ilde Ekim, Mart ve Haziran ayları için seçilen her saatte sağlanmıştır. Burada dikkat çeken nokta aralık ayıdır. Mekânın %95'inde 100 lx değeri içeren aydınlık düzeyi kriteri aralık ayında saat 09.00 ve 15.00'da hiçbir il için sağlanamazken aralık ayında 12.00'da her il için sağlanmaktadır. Bu sonuçlarda ortalama gök modeline sahip olunmasının yanı sıra havadaki bulutluluk oranının kış mevsiminde saatlere göre oranı etkili olmuştur.

Yapılan çalışmada TS EN 17037 Standardında belirtilen "mekânın %95'inde 100 lx değeri sağlayan aydınlık düzeyi kriteri" bu pilot iller için seçilen saat ve aylarda büyük farklılıklar göstermemiştir. Bu noktada TS EN 17037 Standardında belirtilen "mekânın %50'sinde 300 lx değeri sağlayan aydınlık düzeyi kriteri" daha okunaklı sonuçlar sunacaktır. Beş pilot il aşağıda verilen grafikte belirlenen aylara ve saatlere göre "mekânın %50'sinde 300 lx değeri sağlayan aydınlık düzeyleri" üzerinden karşılaştırılmıştır.



Şekil 24. Ankara-Antalya-Diyarbakır-Erzurum-İstanbul illeri <300'lük değerlerin aylara ve saatlere göre dağılımını gösteren grafik.

Aydınlık düzeyi ve zaman ve farklılıkları arasındaki ilişkiyi ifade eden grafiklerden anlaşıldığı üzere her il için tip eğitim yapısının gün ışığı analizi farklı zaman dilimlerinde farklı değerlere sahiptir. Bu değerler "mekânın %95'inde 100 lx ve mekânın %50'sinde 300 lx değerlerini sağlayan aydınlık düzeyi" kriterlerine göre karşılaştırılmıştır (Tablo 11).

Tablo 11. 5 farklı iklim bölgesini temsil eden pilot illerin saatlere göre aydınlık düzeyi standartlarını sağlama oranlarının karşılaştırılması.

İl	Ekim	Aralık	Mart	Haziran
Ankara	100 lx ≤ %100 300lx ≤ %33	100 lx ≤ %33 300lx ≤ %33	100 lx ≤ %100 300lx ≤ %33	100lx ≤ %100 300lx ≤ %33
Antalya	100 lx ≤ %100 300lx ≤ %33	100 lx ≤ %67 300lx ≤ %33	100 lx ≤ %100 300lx ≤ %33	100lx ≤ %100 300lx ≤ %67
Diyarbakır	100 lx ≤ %100 300lx ≤ %33	100 lx ≤ %33 300lx ≤ %33	100 lx ≤ %100 300lx ≤ %33	100 lx ≤ %100 300lx ≤ %33
Erzurum	100 lx ≤ %100 300lx ≤ %33	100 lx ≤ %33 300lx ≤ %33	100 lx ≤ %100 300lx ≤ %33	100 lx ≤ %100 300lx ≤ %100
İstanbul	100 lx ≤ %100 300lx ≤ %33	100 lx ≤ %33 300lx ≤ %33	100 lx ≤ %100 300lx ≤ %33	100lx ≤ %100 300lx ≤ %33

Şekil 23-24 ve tablo 11'de yer aldığı üzere tip eğitim yapısının aydınlık düzeyinin farklı iklim bölgelerindeki seçilen illere göre farklılık gösterdiği görülmektedir. Bu verilere göre;

- Gün ışığının hacimde sağladığı aydınlık düzeyi kriterinde seçilen her il için en verimli saat 12.00 olmuştur.
- Antalya ili için gün ışığı aydınlık düzeyi değerleri ve performans verimliliği diğer illere göre daha olumlu sonuçlar vermiştir.
- Seçilen 12 derslikli tip eğitim yapısının gün ışığı kalitesi sınıflandırmasında en olumsuz sonuçlar İstanbul, Ankara ve Diyarbakır illerinde görülmüştür.
- Aralık ayı her il için en olumsuz sonuçları gösteren ay olmuştur. Standartta göre sağlanması gereken minimum aydınlık düzeyi kriterlerinin en az oranda sağlandığı ay olmuştur.
- Haziran ayı gerekli minimum aydınlık düzeyi değerlerinin karşılanması bağlamında en yüksek oranları vermiştir.
- Gün ışığı analizleri incelendiğinde TS EN 17037 Standardına göre "mekânın %50'sinde en az 300 lx değerini sağlanması" kriterine büyük oranda yaklaşamamıştır. Saat 12.00'da her il için belirlenen her ayda bu kriterler

sağlanmıştır. Ancak diğer zaman dilimlerinde standarda göre minimum değerleri içeren kriterlerin sağlanamamış olması öğrencilerin öğrenme aktivitesi için ve enerji tüketimi açılarından olumsuz bir sonuç doğurmaktadır.

Tip eğitim yapılarının iklim farkları ele alınmadan ve cephe yönelimi gözetilmeksizin inşa edilmesinin görsel konfor anlamında olumsuz sonuçlar doğuracağı ve enerji tüketimi artışı olarak geri döneceği aşikârdır. Aynı zamanda cephe açıklıklarının her iklim tipinde standart olmasının işlevsel olmadığı görülmektedir. Bu durum sonraki dönemlerde bu yapının cephelerinde farklı elemanları ve cephe kabuğu ihtiyacını ortaya çıkaracağı için maliyetin öngörüldüğünden yüksek olmasına yol açmaktadır.

Çalışmanın bir diğer bölümünde ise cephe açıklıklarının revize edildiği farklı bir senaryo ele alınmıştır. Bunun sebebi, parametrelerin revize edilmesi halinde mevcut durumda meydana gelen değişimlerdir. Önceki bölümlerde belirtildiği gibi gün ışığı kullanımını etkileyen en önemli parametrelerden biri düşey ve yatay cephe açıklıklarıdır. Seçilen eğitim yapısının dersliğindeki pencere alanının taban alanına oranı %21'den %25'e çıkarıldığında gün ışığı performansında meydana gelen değişim analizleri yapılmıştır. Pencere alanının artırılması ve Milli Eğitim Bakanlığı Eğitim yapılarında Asgari Tasarım Kılavuzu Standartlarında verilen orana getirilmesi aydınlık düzeyi bağlamında her ilde mart ayının belirlenen zaman aralıkları için artışa sebep olmuştur.

- 100 lx değerindeki aydınlık düzeyi kriteri, pencere alanının artırılmasıyla her ilde mart ayı için farklı zaman dilimlerinde sağlanmıştır. Pencere alanının yaklaşık %21 olduğu durumda da 100 lx değerindeki aydınlık düzeyini içeren kriter hemen her ilde yüksek oranda sağlandığı için pencere alanının aydınlık düzeyine etkisinde 300 lx değerindeki aydınlık düzeyi kriterinin mekânın %50'sinde sağlanması esas alınmaktadır.
- Pencere alanının artırılmasıyla her il için mart ayı seçilen her saatte 300 lx değerindeki aydınlık kriteri, mekânın %50'sinde elde edilmesi koşulu sağlanmıştır.
- Kılavuzda belirtilen asgari pencere alanı oranına uyulması (%25) her ilde mart ayı için aydınlık düzeyi değerlerinde artış sağlamıştır.

4. Tartışma ve Sonuç

Türkiye'nin 5 farklı iklim bölgesi için Milli Eğitim Bakanlığı'na bağlı tek tip eğitim yapısındaki dersliklerin gün ışığı performansının değerlendirildiği bu çalışmada iklimsel verilerin tasarım aşamasında ele alınması gereken önemli bir parametre olduğu sayısal göstergelerle ortaya konmaktadır. Gün ışığının farklı iklimlerde etkin kullanılması birçok parametreye bağlı olup cephe malzemesi, cam ve güneş kırıcı seçimi, cephe yönelimi, pencere boyutları gibi değişkenler sonuçlara etki etmektedir. Gün ışığını etkileyen parametrelerden cephe açıklıklarının artırılması görsel konfor koşullarındaki minimum standartları sağlamıştır; ancak iklimsel verilerin göz önüne alınmadığı bir yapıda enerjinin etkin kullanımından söz edilememektedir. Farklı iklim koşullarını ifade eden beş pilot il üzerinden yapılan bu çalışmada temel parametre olarak gün ışığı aydınlık düzeyi ele alınmıştır.

Çalışmada pencere alanını artırmak kısa vadede çözüm önerilerinden biri olmuştur; ancak bu durum Erzurum gibi soğuk iklim bölgesinde yer alan illerde ısı kaybının artması ile enerjinin etkin kullanımına engel teşkil edecektir. Çalışma öncesinde öngörülen aksine güneşli gün süresi coğrafi konumu nedeniyle diğer illere göre fazla olan Antalya ili özellikle "mekânın %50'sinde 300 lx değerindeki aydınlık düzeyi" kriterini sağlamakta yetersiz kalırken diğer iller daha olumlu sonuçlar vermiştir. Ankara ve Erzurum'un söz konusu tip eğitim yapısı için TS EN 17037 standardına gün ışığının minimum aydınlık düzeyini içeren kriterlerini sağlamakta uygun iller olduğu; ancak bu tip eğitim yapısının Antalya, İstanbul ve Diyarbakır illeri için bu illerin farklı coğrafi ve topografik özelliklerinin temel alınarak yeniden düzenlenmesi gerektiği görülmektedir. Her mevsim güneş ışınlarını aynı açı ile alan Erzurum ve Ankara illeri için sonuçların birbirine benzer çıktığı görülmektedir. Erzurum'da enerji maliyetini artırsa da gün ışığının kazanımı noktasında ortak bir payda olduğu görülmektedir. Benzer şekilde Antalya ve Diyarbakır illerinde enerji maliyeti konusunda gün ışığında bir verimden bahsetmek mümkün değildir; ancak ısı korunumu gibi konularda bu iki il daha avantajlı olacaktır. Belirgin bir iklim parametresi olan gün ışığını değeri seçilen beş pilot ilde farklılık göstermiştir ve bu durum diğer konfor gereksinimleri için binalarda tüketilen enerjinin belirlenmesinde birçok farklı sonuçları beraberinde getirecektir. Çalışmada hedeflenen sonuç olarak "tip yapı" kavramının yeniden gözden geçirilmesinin ve aynı yapının farklı iklim bölgelerinde benzer tipolojide inşa edilmemesinin gerekliliği görülmektedir. Tip eğitim yapısı dersliği üzerinden yapılan bu çalışmada bu derslik TS EN 17037 Standardına göre sağlaması gereken minimum aydınlık düzeyi değerlerini karşılamamıştır. Buna bağlı olarak yapının bütünü için bir enerji verimliliğinden bahsetmek mümkün değildir. Tasarımda iklim girdisinin tasarım sürecinin yanı sıra yapının kullanımında da önemli bir parametre olduğu görülmektedir. Sonuçların mevsimlere göre ilden ilde farklılık göstermesi beklenen bir durumdur; ancak hâlihazırda çalışmada varılmak istenen sonuçta özellikle öğrenme üzerinde etkili olan gün ışığının ve buna bağlı değişen birçok noktanın her topografik bölge üzerinden ayrı ayrı ele alınmasıdır. Bir tip eğitim yapısının gerekli

görülen her yere yapılması sağlıklı bir sonuç vermeyecek ve sonuçta çalışmanın içeriğinde görüldüğü gibi temel standartlarda belirtilen minimum aydınlık düzeyinin sağlanmadığı eğitim yapıları ortaya çıkacaktır.

Gün ışığını optimize kullanmak için pencere alanının artırılmasının yanı sıra uygun cephe seçimi, bina kabuğunun yenilenmesi gibi yöntemler mevcuttur; ancak inşa edilmiş bir yapı üzerinden bu revizyonların yapılması maliyet ve zaman yönünden uygulanabilir görülmemektedir. Bu sonuçlar enerjinin etkin kullanımı göz önünde bulundurularak tasarım sürecine iklimsel verilerin dâhil edilmesi gerekliliğini ortaya koymaktadır.

Pencere boyutlarının, açıklık oranlarının, cam tipleri ve diğer parametrelerin sabit olduğu koşullarda her iklim bölgesi için eşit verimlilik ve gün ışığı performansının sağlanması mümkün görünmemektedir. Bu nedenle tek tip yapıların her iklim bölgesinde uyarlanması ile ilgili koşulların, binaların enerji performansı ve gün ışığı standartlarının sağlanmasındaki yetersizliği bu çalışmada yapılan hesaplamalarla ve karşılaştırmalarla ortaya konmuştur. Standartlaşmanın getirdiği koşullar düşük maliyetli ve süreci hızlandıran biçimde ele alınsa da gün ışığı etkisinin farklı iklim bölgelerindeki değişkenliği enerji verimliliğinde olumsuz sonuçlar doğuracaktır. Tüm bunlar; iklim parametrelerinin tasarım sürecinde önemli bir girdi olduğunu ve cephe açıklıkları, pencere boyutları, yönlenme gibi etkenlerin her bölge için özgün bir şekilde ele alınması gerekliliğini ortaya koymaktadır. Tasarım sürecinde doğal aydınlatma verileri ile iklimsel veriler eş zamanlı olarak incelenmeli, analiz edilmeli ve uygulama aşamasına geçilmelidir. Bu çalışmanın, farklı iklim bölgelerindeki tek tip yapıların uygulanmasının gün ışığı ve enerji tüketimine olan etkisini sayısal veriler ile ortaya koyarak bundan sonraki çalışmalara da kılavuz niteliğinde olması hedeflenmektedir.

Kaynakça

- [1] Al-Khatatbeh, B. & Mahdeb, S.(2017).Improving visual comfort and energy efficiency in existing classrooms using passive daylighting techniques. *Energy Procedia*, 136,102-108.
- [2] Kutlu, R.(2019).Bir tasarım ögesi olarak günışığı. *The Turkish Journal Of Design And Communtion*, 9(2), 226-233.
- [3] Arpacıoğlu, Ü. (2012). Mekânsal kalite ve konfor için önemli bir faktör: gün ışığı. *Mimarlık*, (368), 48-53.
- [4] Yener, A. (2007). *Binalarda gün ışığından yararlanma yöntemleri: çağdaş teknikler*. Ulusal Tesisat Mühendisliği Sempozyumu Bidirileri Kitabı.
- [5] Cooper, A., Megri, A., Sobers, A. &Yu, Y. (2014). Illuminance evaluation and assessment at three elementary schools. *American Journal of Engineering and Applied Sciences*,7 (1), 129-136.
- [6] Yener, A. (2011). Güneş kontrollü sınıflarda günışığı analizi. *Mimarlık Bilimi İncelemesi*, 45(4), 311-316.
- [7] Newsham, GR. & Veitch, J.A.(1998). Determinants of lighting quality I: State of the science. *Journal of the Illuminating Engineering Society*, 27 (1), 92-106.
- [8] Hwang, T. & Kim, J.T.(2011). Effects of indoor lighting on occupants' visual comfort and eye health in a green building. *Indoor and Built Environment*, (20), 75–90.
- [9] Liberman, J. (1991). *Light Medicine of the future*. Bear &Company Publishing.
- [10] Bakmohammadi, P. & Norzai, E.(2020). Optimization of the design of the primary school classrooms in terms of energy and daylight performance considering thermal and visual comfort. *Energy Reports*, 6, 1590-1607.
- [11] Çelik, K.(2018). *Eğitim yapılarında sürdürülebilir aydınlatma tasarımı için bütüncül bir yaklaşım* (Yayın No:514981)[Doktora tezi, Yıldız Teknik Üniversitesi]. Ulusal Tez Merkezi.
- [12] Barkul, Ö. & Köse, Ç.(2012). İlköğretim yapılarında tip proje uygulama sorunları üzerine bir inceleme. *Megaron*, 7 (2), 94-102.
- [13] Yılmaz, A. (2012). İlköğretim okullarının fiziksel yapılarının eğitim ve öğretim açısından değerlendirilmesi. *Balıkesir Üniversitesi Sosyal Bilimler Enstitüsü Dergisi*, 115(28), 77-107.
- [14] Duraler, Y.(2017). *Tip ilkokul dersliklerinin gün ışığından etkin yararlanmasına yönelik bir çalışma* (Yayın No. 465403)[Yüksek lisans tezi, İstanbul Teknik Üniversitesi].Ulusal Tez Merkezi.

- [15] Pierangioli, L., Randazzo, M., Secchi, S. & Scurpi, F.(2015). Retrofit strategies for the improvement of visual comfort and energy performance of classrooms with large windows exposed to East. *Energy Procedia*, 78, 3144-3148.
- [16] Kılıç, E.S.(2021).Improving visual comfort and energy efficiency in existing classrooms using passive daylighting techniques. *Okul Öncesi Eğitim Yapılarında Enerjinin Etkin İyileştirme Stratejileri, Uludağ Üniversitesi*. Yüksek lisans tezi, Uludağ Üniversitesi].
- [17] Tezel, D.(2007). *Mekân tasarımında doğal ışığın etkileri* (Yayın No.222620) [Yüksek lisans tezi, İstanbul Teknik Üniversitesi]. Ulusal Tez Merkezi
- [18] Adane, V. & Dabe, T.(2018). The impact of building profiles on the performance of Daylight and indoor temperatures in low-rise residential building for the hot and dry climatic zones. *Building and Enviroment*, 140, 173-183.
- [19] Bokel, R., Dobbelseen, A., Sun, Y. &Zhang, Q.(2017). Optimization of thermal and daylight performance of school buildings based on a multi-objective genetic algorithm in the cold climate of China. *Energy And Buildings*, 139, 371-384.
- [20] Yılmaz, Y.(2009). *Farklı iklim bölgelerinde bir ilköğretim tip projesinin enerji etkin geliştirilmesine yönelik uygulama örneği* (Yayın No.251958) [Yüksek lisans tezi, İstanbul Teknik Üniversitesi]. Ulusal Tez Merkezi.
- [21] Manav, M., Kutlu, R., Küçükdoğu, M. Ve Yener, A.(2012). Daylight analysis and lighting energy management for schools in hot-temperate climates. . *İtü Az*, 9 (1), 149-164.
- [22] Dostoğlu, N. & Şahin, E.(2015). Okul binaları tasarımında sürdürülebilirlik. *Uludağ Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Dergisi*, 20(1), 75-91.
- [23] Çelik, K. & Ünver, R.(2017, 18-19 Ekim). *Aydınlatmanın eğitim yapıları tasarım kılavuzlarındaki yeri* [Konferans sunumu]. Dokuzuncu Ulusal Aydınlatma Sempozyumu, İzmir. Türkiye.
- [24] Çelik, K. & Ünver, R.(2019). Eğitim yapıları tasarım kılavuzları bağlamında dersliklerin görsel konfor ve enerji kullanımı açısından değerlendirilmesi. *Journal of International Research*, 12 (63), 441-446.
- [25] Milli Eğitim Bakanlığı. (2015). Eğitim Yapıları Asgari Tasarım Standartları Kılavuzu, İnşaat ve Emlak İşleri Müdürlüğü.
- [26] TS EN 17037. (2019). *Binalarda Günışığı Standartı*.
- [27] Sivas İl Milli Eğitim Müdürlüğü. (2021). *Arşiv*. İnşaat ve Emlak İşleri Şubesi.
- [28] Velux, Daylight Visualizer 2.(2021, 1 Temmuz). <https://www.velux.com/what-we-do/digital-tools/daylight-visualizer>
- [29] Kazanasmaz, Z.T. (2009, 07-09 Mayıs). *Binaların doğal aydınlatma performanslarının değerlendirilmesi*. 5. Ulusal Aydınlatma Sempozyumu, İzmir, Türkiye.
- [30] Onak, B. & Yıldırım, N. (2020). Eğitim Yapılarında Aydınlatma Türü ve Kullanımı Önerileri: Kocaeli Üniversitesi Mimarlık Fakültesi Binası. *Mimarlık ve Yaşam*, 5(2), 361-380.
- [31] TS EN 212464-1.(2013). *Light And Lighting:Lighting Of Work Places-Indoor Work Places*.
- [32] Bircan, P. & Yener, A.(2019, 18-19 Eylül). *İlköğretim dersliklerinde gün ışığı performansının TS EN 17037 standardı açısından değerlendirilmesine ilişkin bir çalışma* [Konferans sunumu]. 12. Ulusal Aydınlatma Sempozyumu, İstanbul, Türkiye.
- [33] Meteoroloji Genel Müdürlüğü, (2022, 14 Nisan). <https://www.mgm.gov.tr/>
- [34] Kandırmaz, H., Zateroğlu, T. Türkiye için Güneşlenme Süresinin Mekansal Analizi (2018). *SETSCI Conference Indexing System*, 3, 590-593.
- [35] Şener, F.(2021, 20 Kasım). TS EN 17037 Binalarda Gün ışığı standartı ve uygulaması.
- [36] Korsayi, S.S., Tahsildoost, M. & Zomorodian, Z.S. (2016). The effect of window configuration on Daylight performance in Classrooms: a field and simulation study. *International Journal Of Architectural Engineering And Urban Planning*, 26(1). 15-24.

- [37] Acosta, I. (2015). Analysis of daylight factors and energy saving allowed by windows under overcast sky conditions. *Renewable Energy*, 77, 194-207.
- [38] Arpacioğlu, Ü., Çalışkan, C.İ. & Şahin, B.(2020). Mimari planlamada günüşi etkisinin artırılması için tasarım destek modeli. *Tasarım-Kuram*, 16(29), 53-78.
- [39] Başkan, T. & Sözen, M. (2006). Dersliklerde görsel konfor ve etkin enerji kullanımı: Bir örnek derslik aydınlatması. *Megaron*, 1(2-3), 143-153.

Farklı Rüzgar Hızlarında Çoklu Bina Etrafındaki Rüzgar Yükünün Sayısal olarak İncelenmesi

Burak DURAN^{ID}*, Halil Hakan AÇIKEL^{ID}*₂

*_{1,2} Erciyes Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Enerji Sistemleri Mühendisliği, KAYSERİ

(Alınış / Received: 18.05.2022, Kabul / Accepted: 20.07.2022, Online Yayınlanma / Published Online: 23.08.2022)

Anahtar Kelimeler

Bina Aerodinamiği,
Rüzgar Yükü,
ANSYS Fluent,
Türbülans

Öz: Bu çalışmada, birden çok sayıdaki bina yapılarının birbiri üzerindeki rüzgar yükünün sayısal olarak irdelenmesi gerçekleştirilmiştir. Bina yapıları üzerinde meydana gelen sürüklenme katsayısı, farklı rüzgar hızlarına göre oluşan türbülans kinetik enerjisi, bina yapısı etrafında meydana gelen girdap oluşumları incelenmiştir. Birden fazla sayıdaki bina yapılarının farklı konumlarda yerleşimleri gerçekleştirilerek, bu etkilerdeki değişimin ne ölçüde olduğu incelenmiştir. Yapıların farklı konumlandırılması ile birlikte rüzgarın olumsuz etkilerinin iyileştirilmesi üzerine simülasyonlar gerçekleştirilmiştir. Bu çalışmada gerçekleştirilen sayısal analizler boyunca Realizable k- ϵ türbülans modeli uygulanmıştır. Sayısal modellemelerden elde edilen sonuçlara göre binalar arasındaki mesafenin azalması binaların sürüklenme katsayılarında düşmeye yol açmıştır.

Numerical Analysis of Wind Load Around Multiple Buildings at Different Wind Speeds

Keywords

Building aerodynamics,
Wind Load,
ANSYS Fluent,
Turbulence

Abstract: In this study, numerical analysis of the wind load of multiple building structures on each other was carried out. The drag coefficient on the building structures, the turbulent kinetic energy formed according to different wind speeds, the eddy formations around the building structure were examined. The placement of more than one building structures in different locations has been performed, and the extent of the change in these effects has been examined. Simulations were carried out on the improvement of the negative effects of the wind with the different positioning of the structures. Realizable k- ϵ turbulence model was applied throughout the numerical analyzes performed in this study. According to the numerical modeling results, decreasing the distance between the buildings resulted in a decrease in the drag coefficients of the buildings.

*İlgili Yazar, email: hhacikel@erciyes.edu.tr

1. Giriş

Son yıllarda şehir merkezlerinde görülen arazi eksikliği nedeniyle bina yapılarındaki yerleşim önemli bir hal almıştır. Bununla birlikte, bina yapılarının konumlandırılmasında, bina üzerindeki olumsuz rüzgar etkilerinin en aza indirilmesi önemli hale gelmektedir. Bu nedenle binalarda meydana gelen rüzgar etkilerinin azaltılması ile ilgili bir çok çalışma gerçekleştirilmiştir. Birden fazla bina sayısı üzerine yapılan çalışmalarda, binalar arası açılarının değiştirilmesi ile birlikte rüzgar etkilerinin ne ölçüde değiştiği üzerine bir çalışma Cürebal ve Özmen [1] tarafından yapılmıştır. Farklı türbülans modellerinde ve 8 farklı bina modeli üzerine yapılan çalışmada, iki bina arasındaki açının değişmesi sonucunda basınç katsayısında (C_p) değişmelerin ortaya çıktığı görülmüştür. Fertelli ve Balta [2] yaptıkları sayısal çalışmada tek ve iki bina modellemesi ile birlikte rüzgar yükünün etkisini incelemişler. Sivas ili için yapılan sayısal analizde RNG k- ϵ türbülans modeli kullanarak atmosferik sınır tabaka hız profili oluşturulup akım çizgileri, hız vektörleri, ortalama hız ve türbülans kinetik enerji dağılımları ve basınç dağılımları katsayıları

incelenmiştir. Modellemeden elde edilen sonuçlara göre doğrudan rüzgara etkisinde kalan kısımlarda pozitif basınç katsayısı, yan ve arka yüzeylerde negatif basınç katsayısı oluşmuştur. Demir [3] karışık geometriye sahip bina üzerindeki rüzgar yükünü incelemiştir. Yaptığı çalışmada, Spalart-Allmaras, Transition SST ve $k-\omega$ SST olmak üzere 3 farklı türbülans modelini kullanmıştır. Ele alınan binanın batı cephesinde basınç katsayısı pozitif, diğer cephelerde negatif olarak olmuştur. Kuzeydoğu bölgesinde oluşan girdapların etkisi ile C_p değerlerinde ani değişimler olmuştur. Paltun ve diğerleri [4] tarafından yapılan araştırmada, rüzgarın yüksek binalar üzerinde oluşan ciddi aerodinamik etkilerin olumsuz etkileri azaltmaya çalışmışlar. Binanın yüksek bölümlerinde kesit alanının küçültülmesi ve bina cephesine açıklıklar eklenmesi sonucunda binaya etki eden rüzgar yükünde değişiklikler olmuştur. Özellikle bina çatı kısmına yakın kesimlerde oluşturulacak açıklıklar sayesinde bina aerodinamiğinde olumlu etkiler meydana gelmiştir. Silva ve arkadaşları [5] kentsel rüzgar enerjisi kullanımında optimum bina-çatı şeklinin belirlenmesi için izole edilmiş ve kentsel ortamdaki binanın analizi gerçekleştirmişler. Çalışmada çatı-duvar geçiş geometrisinin analizi, optimum çatı genişliği, hassasiyet analizi ve akış üzerindeki bina en-boy etkisi araştırılmıştır. Buffa ve diğerleri [6] yüksek katlı bina yapıları LES (Large Eddy Simulation) modeli ile incelenmiştir. Hem bina yüzeyi hem de sonrasında tanımlanan miktarlar ile deneysel veriler karşılaştırılmıştır. Giriş türbülansının yeniden yapılandırılması, bina yüzeyindeki sınır koşulları ve ızgara çözünürlüğü sonuçlarının analizi gözlemlenmiştir. Gölbaşı ve arkadaşları [7] 4 farklı bina modeli etrafındaki akış alanında, ortalama hız ve türbülans hız profillerini parçacık görüntülü hız ölçümü (PIV) yöntemi ile deneysel olarak inceleyip elde edilen sonuçları ANSYS Fluent programı ile elde edilen sonuçlar karşılaştırmışlar. Bina geometrilerine göre bina arka kısmında meydana gelen girdap büyüklüklerinde değişimler olduğu görülmüştür. Avini ve diğerleri [8] tarafından 80 m yüksekliğindeki dikdörtgen kesitli bir binada konfor kriterlerini göz önüne alarak yapılan çalışmada en üst katta rüzgar kaynaklı yatay tepe ivmelenmeleri gözlemlenmiştir. Çevredeki yapıların rüzgar hareketinin ortalama bileşenini önemli ölçüde etkilediği belirlenmiştir. Kumar ve diğerleri [9] yüksek bir binanın alçak bir binanın çatısındaki emme basıncı üzerindeki etkisini araştırmışlar. Yapılan uygun tasarım ile emme basıncında %30'luk azalmaların sağlanabileceği gözlemlenmiştir. Çeşitli boyutlardaki binaların etrafında yaya seviyesindeki rüzgar hızının, bina yüksekliği ve bina en boy oranına etki etmektedir [10]. Sınır tabaka akışındaki bir bina için yaya seviyesindeki rüzgarın aşağı yönlü etkisinin önemli olduğu gözlemlenmiştir. Sınır tabaka akışındaki maksimum hızlanma oranının, düzgün türbülanslı akıştan daha büyük olduğu belirlenmiştir. Yapılan sayısal analizlere göre, sabit genişliğe sahip binalarda maksimum hızlanma oranı ve hızlanma alanı artmıştır. Elshaer ve diğerleri [11] kentsel bölgelerde yoğunlaşan bina yapıları üzerindeki akış etkilerini, yapıların şekline, konumuna ve yüksekliğine bağlı olarak değişimini incelemiştir. İki farklı durum için yapılan çalışmada ortalama rüzgar basınçlarının azalmasına rağmen, kentsel bölgede meydana gelen yoğunluk arttıkça rüzgar basıncındaki dalgalanmalarda artış görülmüştür. Daemei ve arkadaşları [12] tarafından, yüksek bina yapılarındaki rüzgara karşı olan hassasiyet incelenmiştir. Bina yapıları üzerindeki farklı aerodinamik değişimler ve farklı açılar üzerinden yapılan incelemeler sonucunda, bina yapıları üzerindeki sürükleme katsayılarında %66 ve %24 oranında bir azalmanın gerçekleştiği görülmüştür. Ricci, Patruno, Miranda ve Ubertaini [13] tarafından, en-boy oranı 5:1 olan bir dikdörtgen silindir etrafındaki akış incelenmiştir. LES modeli ile akış simülasyonları gerçekleştirilmiştir. Türbülanslı akışlar altında, farklı akış çeşitlerinde meydana gelen değişimler incelenmiştir. Farklı türbülans seviyelerinde akış alanı boyutunda yapılan değişimler ile birlikte, farklı konfigürasyonların akış üzerindeki etkileri incelenmiştir. Bruno ve Obero [14] tarafından, bir kare silindir aerodinamik yapısı etrafındaki akışın çeşitli türbülans modelleri kullanılarak modellenmiştir. Yapılan çalışmada farklı ağ yapılarının sayısal modelleme de meydana getirdiği hatalar araştırılmıştır. Düşük kalitedeki ağ yapılarının sayısal olarak gerçekleştirilen çalışmalarda hata oranının ne olduğu ve bu hataların ağ yapıları üzerinde gerçekleştirilen iyileştirilmelerin etkileri belirlenmiştir. Abdelfatah ve diğerleri [15] alçak binalardaki kasırga gibi şiddetli rüzgar olaylarına karşı savunmasızlık ve sıklıkla görülen kayıpların etkisini incelemişler. Farklı yükseklikte ve farklı çatı yüksekliklerine sahip yapılardaki bina duvarları, zemini ve çatısı üzerindeki meydana gelen basınç katsayılarını (C_p) araştırmışlar. Daniels ve arkadaşları [16] LES yöntemi ile yüksek binalar üzerindeki akışın yapısı incelenmiştir. Case, Sarkar ve Siritharan [17] gerçek hayatta karşılaşılan kasırga girdap oranlarına göre modellenen düşük katlı binalar üzerindeki kuvvet ve basınç etkileri belirlenmiştir. Mara ve arkadaşları [18] kentsel bölgelerdeki yüksek binaların yakındaki yapılarla etkileşimden dolayı ortaya çıkan akış etkileri incelenmiştir. Aynı yükseklik ve geometriye sahip iki bina arasındaki rüzgar etkileri, rüzgar tüneline deneysel olarak araştırılmıştır. Zhou ve diğerleri [19] yüksek binalara etki eden rüzgar etkisinin, farklı hücum açılarında bükülmüş rüzgar profili ve geleneksel rüzgar profilinin bina üzerindeki rüzgar yüklerini karşılaştırılmıştır. Elde edilen sonuçlara göre, bina üzerindeki yükün büyük oranı bükülmüş rüzgar tarafından oluşmuştur. Marsland ve arkadaşları [20] tarafından, modern yüksek binalarda rüzgar nedeniyle ortaya çıkan titreşimin engellemeye çalışmışlardır. Bina katlarındaki cephelerdeki açıklıklarının, konum ve miktarının bina üzerindeki titreşim sorununda daha iyi performans sağladığını gösterilmişler. Yan ve diğerleri [21] tarafından, farklı arazi koşullarında yüksek binalardaki rüzgar etkilerini değerlendirmişler. Elde edilen sonuçlara göre arazi koşullarındaki artan pürüzlülük, rüzgar hızını önemli ölçüde azaltmıştır. Genç ve arkadaşları [22] düşük Reynolds sayılı akışlarda kanat profili üzerinde akışta türbülansa geçiş etkilerini deneysel ve sayısal olarak incelemişler. Elde edilen sayısal sonuçlarda kkl-w türbülans modelinin deneysel sonuçlara daha yakın olduğu görülmüştür.

Bu çalışmada, 5:1 en boy oranına (Aspect Ratio) sahip bina yerleşimlerinin farklı rüzgar hızlarında sayısal olarak modellenmiştir. Yapılan bu modelleme ile binaların konumun sürüklenme katsayısı (C_D) üzerindeki etkisi ve binaların arkasında oluşan hız ve basınç dağılımları araştırılmıştır.

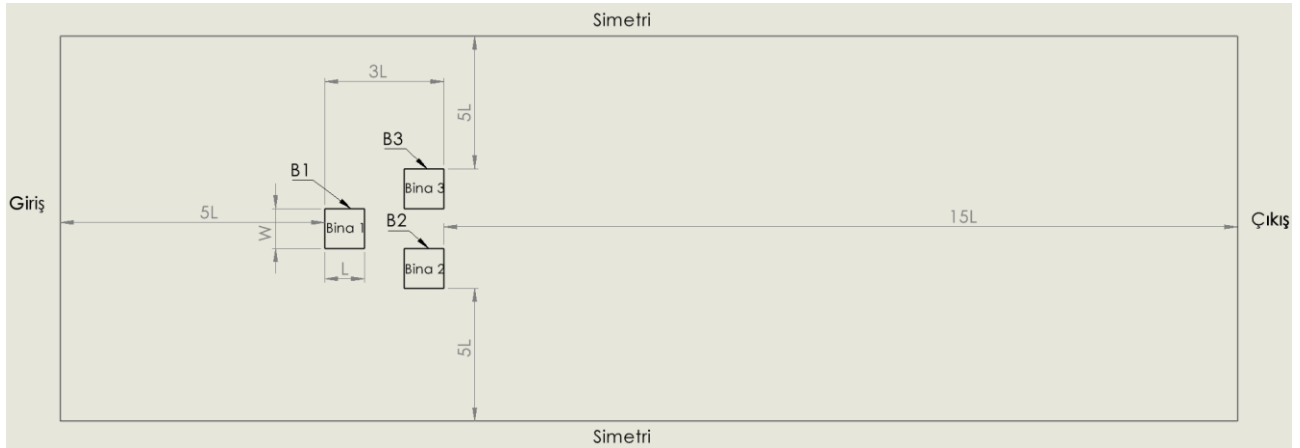
2. Materyal ve Metot

2.1. Sayısal Metot

Yapılan bu çalışmada, aynı boyut ve tipteki üç adet bina yapısı üzerindeki akış farklı mesafeler için 3 boyutlu olarak ANSYS Fluent paket yazılımı ile sayısal olarak modellenmiştir. Sayısal modellemede Reynolds Ortalamalı Navier-Stokes (RANS) denklemi kullanılmıştır. Çözüm aşamasında, türbülanslı akışın karmaşıklığı nedeniyle, yeterli doğrulukta çözüm elde edilebilmesi adına geliştirilmiş modellerden biri olan Realizable k- ϵ türbülans modeli seçilmiştir. Ayrık denklem çözümleri için COUPLED algoritma şeması kullanılırken, gradyan hesabı için 'Least Squares Cell Based' yaklaşımı kullanılmış, geriye kalan diğer tüm parametreler ise 'Second Order Upwind' yaklaşımı kullanılarak gerçekleştirilmiştir.

2.2. Sayısal Model

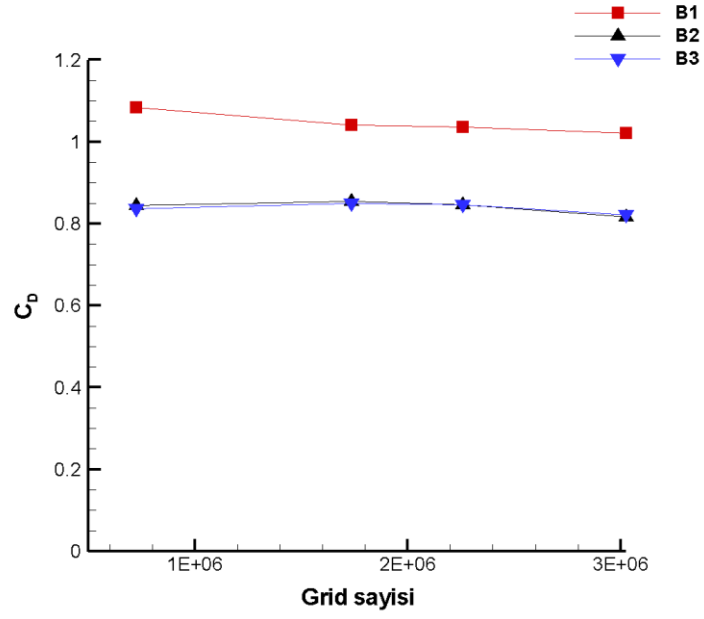
Simülasyon geometrisi, bina kenar uzunluğu $L=1m$, bina yüksekliği $H=5m$, bina genişliği ise $W=1m$ boyutlarındaki üç aynı tip bina yapısının, aynı uzaklıklarda konumlandırılması ile oluşturulmuş ve Şekil 1'de gösterilmiştir. Akış alanının sol tarafı giriş sağ tarafı ise çıkış olarak tanımlanmıştır. Öndeki bina B1 arkada yer alan binalar B2 ve B3 ile gösterilmiştir. Binaların yan tarafında kalan yüzeyler sınır tabaka etkilerinden dolayı etkilenmemesi için simetri olarak tanımlanmıştır.



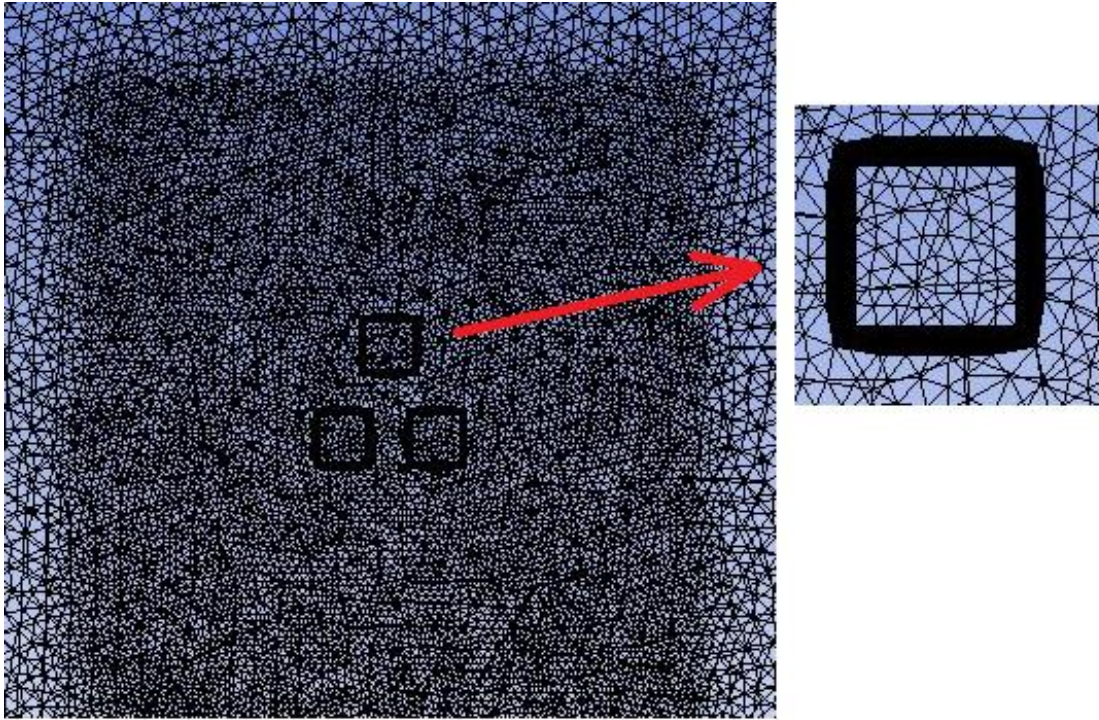
Şekil 1. Bina yerleşimi ve akış alanı

Simülasyon, doğru hesaplama alanı sağlayabilmek adına, binaların boyutu ve toplam alanı dikkate alınarak, akış alanı girişinden $5L$, çıkıştan $15L$ ve bina geometrisi yan bölgelerinden $5L$ uzunluklarında konumlandırılmıştır [23]. Çalışmada, 'Tetrahedrons' ağ yapısı kullanılmıştır ve sonuçların ağ yapısından etkilenmemesi adına ağdan bağımsızlık çalışması yapılmıştır. 4 farklı ağ yoğunluğu kullanılarak çözümler gerçekleştirilmiş ve Şekil 2'de sunulmuştur.

Ağ bağımsızlığı çalışmalarının sonuçlarının değerlendirilmesi ile birlikte binaların sürüklenme katsayılarındaki değişimlerin %1'in altında olmasından dolayı sonuçların neredeyse yaklaşık 2,25 milyon eleman sayılı ağ yapısı seçilerek çözümler yapılmıştır. Çözümde kullanılan akış alanı için belirlenen sınır şartları, giriş koşulu için 'velocity-inlet', çıkış koşulu için 'pressure-outlet', duvar sınır koşulları için ise 'symmetry' olarak seçilmiştir. Bina yapıları üzerinde kullanılan sınır tabakaları, büyüme oranı 1 olacak şekilde, toplam kalınlık metodu kullanılmış ve toplam katman sayısı 10 olarak belirlenmiştir. Çözümlerde yakınsama kriteri için 10^{-5} dikkate alınmıştır.



Şekil 2. Ağdan bağımsızlık çalışması



Şekil 3. Sayısal modellemede kullanılan ağ yapısı

Şekil 3 sayısal modellemede kullanılan ağ yapısını göstermektedir. Akış alanındaki ağ yapısı oluşturulurken ilk önce binaların üzerinde oluşan sınır tabaka etkilerini görebilmek için sınır tabaka ağ yapısı kullanılmıştır. Daha sonra binaların etrafında daha sık ağ yapısı eklenmiştir.

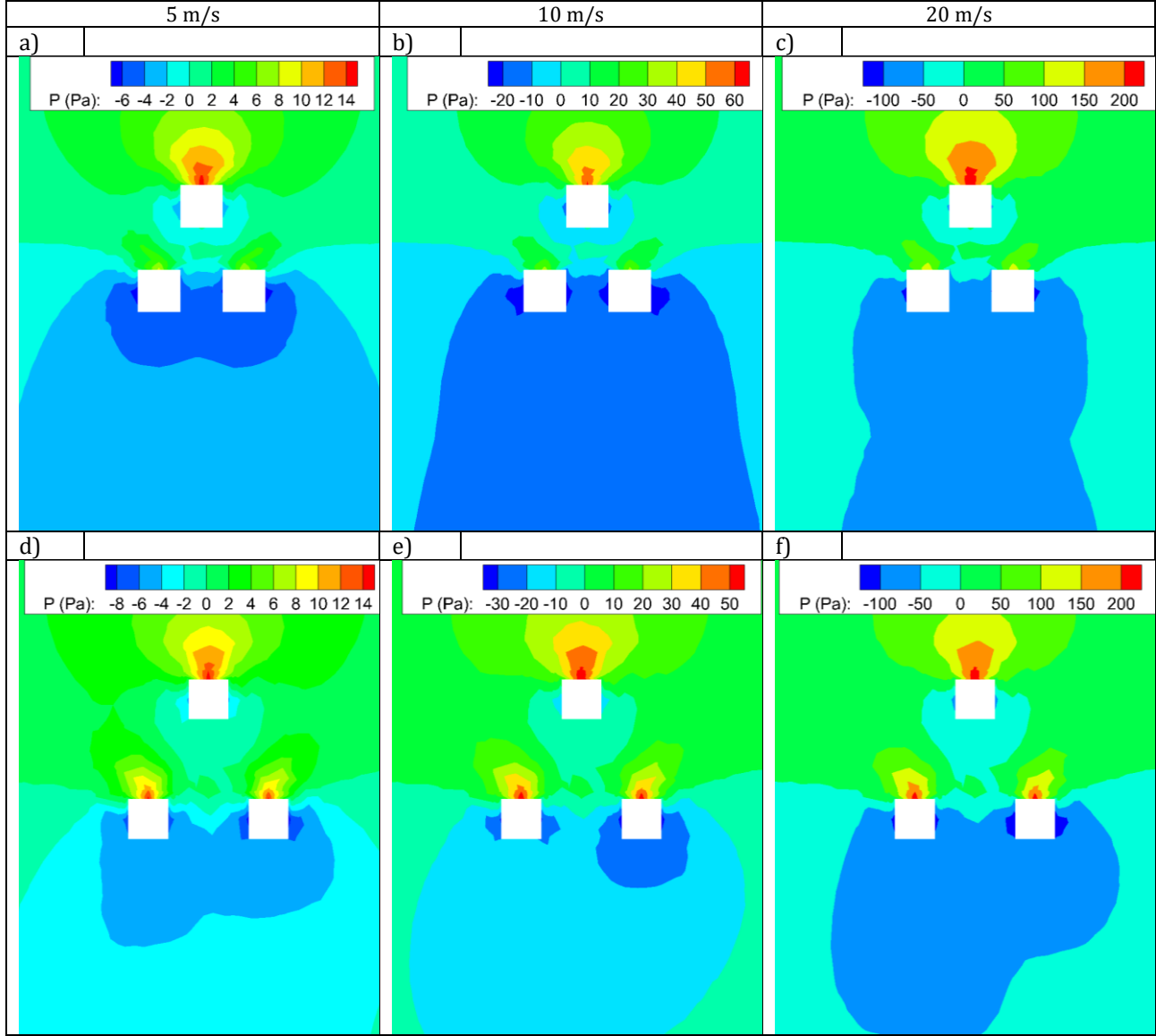
3. Bulgular

3.1. Binaların Basınç Dağılımları

Şekil 4'te farklı rüzgar hızları için (5 m/s, 10 m/s, 20 m/s) yapılan sayısal modellemeye ait basınç dağılımları gösterilmiştir. Basınç dağılımları incelendiğinde en yüksek basıncın tüm rüzgar hızları için öndeki binayı akış ile

karşılaştığı gölgede oluşmuştur. Basınç dağılımlarına göre elde edilen sonuçlarda rüzgar hızının artması ile bina yüzeyinde oluşan basınç yükünün arttığı görülmektedir.

Şekil 4'te farklı rüzgar hızları için (5 m/s, 10 m/s, 20 m/s) yapılan sayısal modellemeye ait basınç dağılımları gösterilmiştir. Basınç dağılımları incelendiğinde en yüksek basıncın tüm rüzgar hızları için öndeki binayı akış ile karşılaştığı gölgede oluşmuştur. Basınç dağılımlarına göre elde edilen sonuçlarda, rüzgar hızının artması ile bina yüzeyinde oluşan basınç yükünün arttığı açık bir şekilde görülmektedir. Gelen akışa doğrudan maruz kalan yüzeylerde basınç yükünün, binaların kalan diğer bölgelerine oranla çok daha yüksek bir basınç yüküne maruz kaldığı görülmektedir.



Şekil 4. Farklı rüzgar hızları için basınç dağılımları

Akışa doğrudan maruz kalmayan bina yan ve arka yüzeylerinde ise, meydana gelen akış ayrılması durumları neticesinde negatif basınç katsayıları ile karşılaşmaktadır. Binalar arasındaki mesafenin Şekil 4d, 4e ve 4f'de görüldüğü üzere iki bina boyu olduğu durumlardaki elde edilen sonuçlarda görülen negatif basınç katsayısı, binalar arasındaki mesafenin Şekil 4a, 4b ve 4c'de görüldüğü gibi bir bina uzunluğunda olduğu durumlara göre daha düşük seviyelerde ölçülmüştür.

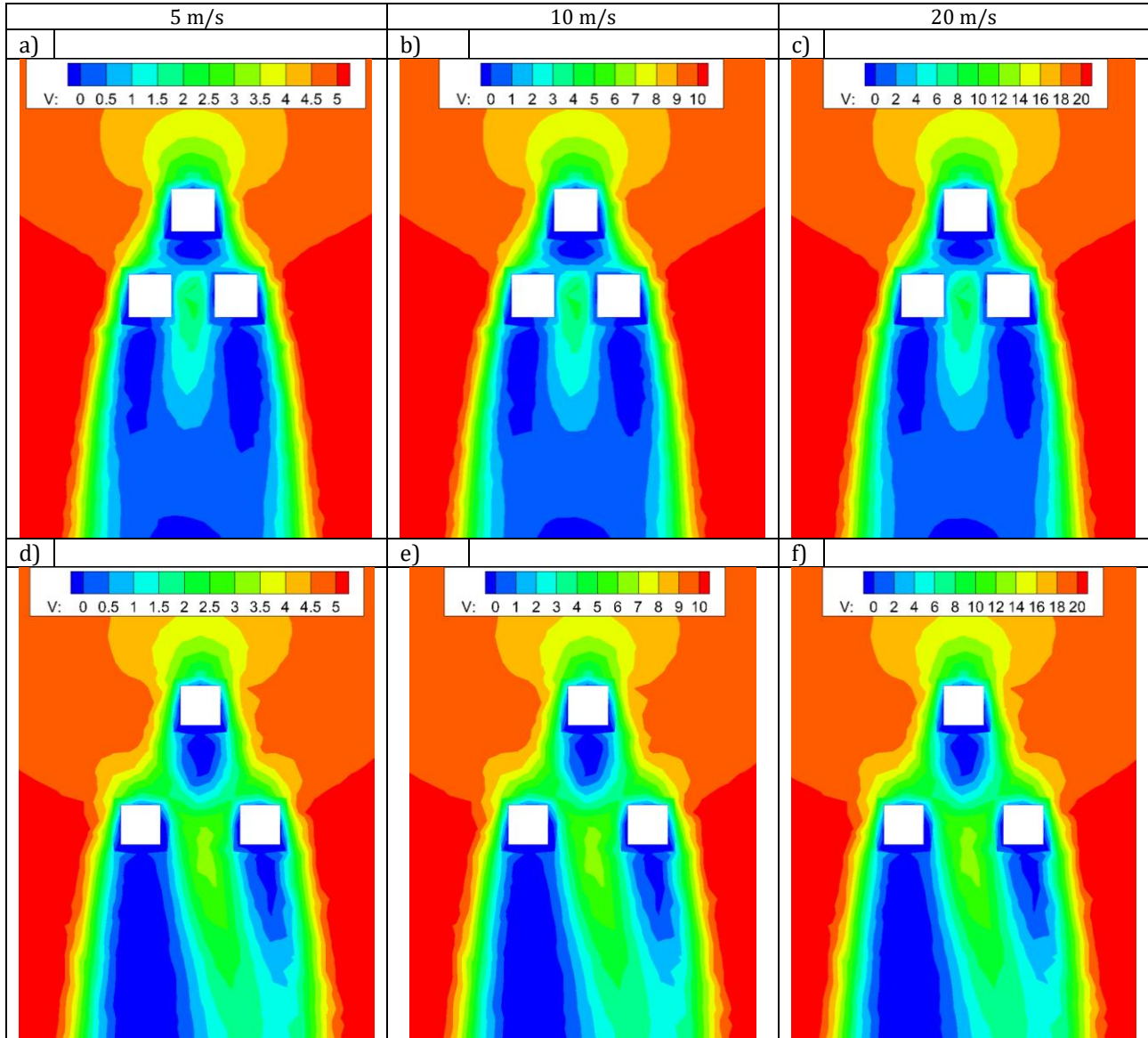
Örneğin Şekil 4c'de ölçülen dar bina modelinde en düşük negatif basınç katsayısı yaklaşık -130Pa olmasına karşın, aynı hız değerlerinde Şekil 4f'de genişletilmiş bina modelinde ölçüden en düşük negatif basınç katsayısı ise yaklaşık -155 Pa olarak ölçülerek ciddi oranda düşüş meydana geldiği görülmektedir. Buna karşın binalar arasındaki mesafenin Şekil 4b'de görüldüğü gibi bir bina uzunluğunda olduğu durumda Şekil 4e'deki gibi binalar arası mesafenin iki bina uzunluğunda artırılması sonucunda, ön binalardaki basınç yükünün, bir bina uzunluğundaki mesafe oranında görüldüğü gibi yaklaşık olarak 64 Pa gibi neredeyse aynı değerlerde olduğu

görülmüştür. Diğer yandan ise Şekil 4e'deki arka bölgede kalan iki binanın akışla karşılaştığı bölgelerinde yaklaşık 22 Pa değerinden, yaklaşık olarak 64 Pa kadar ölçülen önemli ölçüde basınç yükü artışı görülmektedir. Binalar arası mesafenin Şekil 4d, 4e ve 4f'deki gibi arttırıldığı durumda arka iki bina arasındaki basınç yükünün, Şekil 4a, 4b ve 4c'ye göre arttığı ve bunun da arka iki bina üzerindeki basınç yükünün artmasıyla doğrudan ilgisi olduğu görülmektedir.

Elde edilen sonuçlardan yola çıkarak, binalar arası mesafenin arttırılması ile birlikte, bina yapıları üzerinde pozitif ve negatif basınç yüklerinde artış görülmektedir. Binaların konumlandırılmasında olumsuz basınç etkileri ve dolayısıyla karşılaşılan olumsuz konfor etkilerinin önüne geçilebilmesi adına bina aralarındaki mesafe uzunluğunun dikkate alınması önem arz etmektedir.

3.2. Binaların Hız Dağılımları

Şekil 5'te görüldüğü gibi akış hızının arttırılması sonucunda bina çevresinde meydana gelen türbülanslı akış nedeniyle doğrusal bir biçimde artış söz konusu olmaktadır. Akışa dik şekilde konumlandırılmış olan bina yapıları ele alındığında, akışın direkt olarak temas ettiği bina ön yüzlerinde, hız değerlerinin düşük seviyelerde kaldığı görülmektedir. Bina etrafından ayrılan akışın, türbülans etkisiyle, bina yüzeylerine nazaran oldukça yüksek seviyelerde olduğu görülmektedir.



Şekil 5. Farklı rüzgar hızları için hız dağılımları

Binalar arasındaki mesafenin Şekil 5a, 5b ve 5c'de görüldüğü üzere bir bina uzunluğunda olduğu durumlarda, binalar arasındaki hız değerlerinin ve ayrıca arka bölgedeki iki bina arasında meydana gelen hız değerlerinin düşük seviyelerde olduğu görülmektedir.

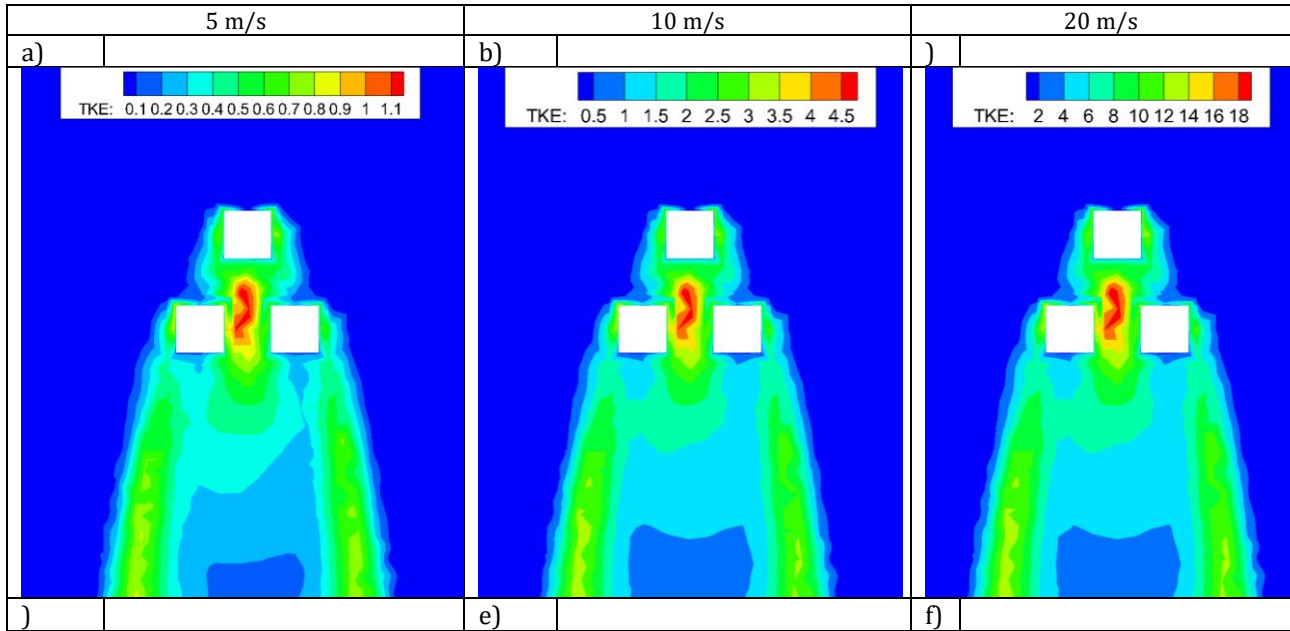
Örneğin, Şekil 5c'de binalar arasındaki hız oranının en yüksek olduğu değer yaklaşık olarak 9 m/s'ye kadar ölçülürken, bu değer Şekil 5f'de ise yaklaşık olarak 16 m/s değerlerine kadar çıkmaktadır. Buna karşılık binalar arasındaki mesafenin Şekil 5d, 5e ve 5f'de görüldüğü gibi iki bina uzunluğunda arttırıldığı durumlarda ise, ön bina ile arka iki bina arasında meydana gelen hız değerlerinin arttığı görülmektedir. Ayrıca arka iki bina arasındaki mesafenin Şekil 5d, 5e ve 5f'de artmasıyla birlikte, ayrılmış olan akış vasıtasıyla binalar arasındaki hız değerlerinin, dar bina modellemesine göre daha yüksek seviyelerde olduğu görülmektedir.

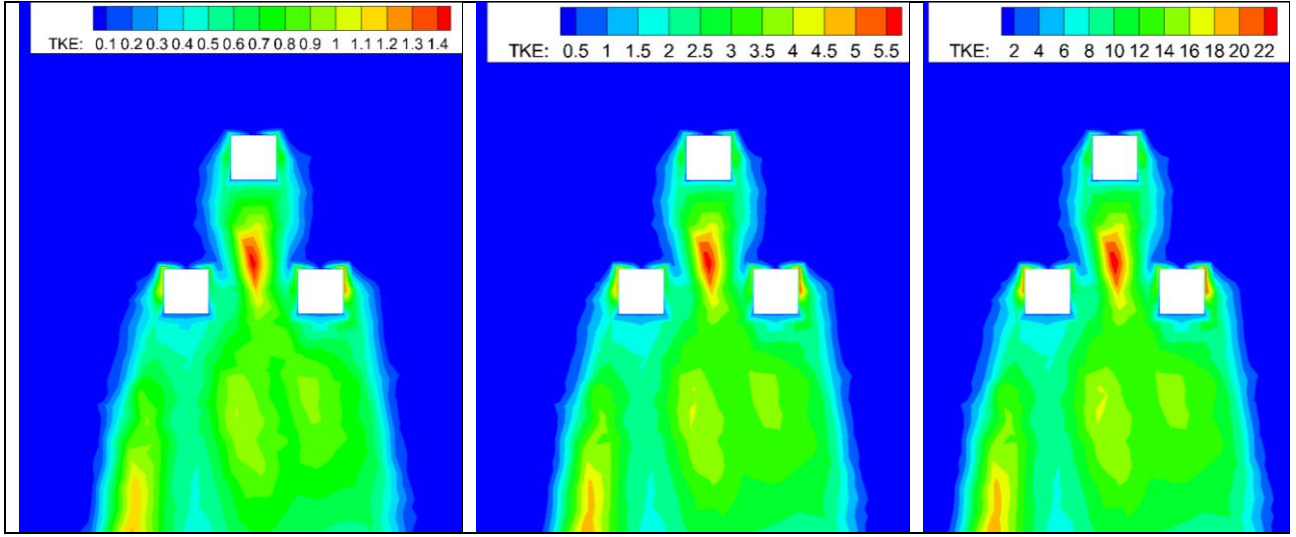
Bina yapıları etrafındaki akış ayrılması durumları neticesinde meydana gelen, en yüksek hız değerlerinin görüldüğü bölgelerde, binalar arasındaki mesafenin arttırılması ile birlikte hız değerlerinin belli bir ölçüde azaldığı görülmektedir.

Binalar arasındaki mesafenin arttırıldığı Şekil 5d, 5e ve 5f görsellerinde, artan bina arası mesafeler neticesinde arka bölgede bulunan iki bina modelinin ardında ölçülen hız değerleri, çeşitli akış bozulmaları ve mesafe nedeniyle Şekil 5a, 5b ve 5c'ye göre simetrik olarak benzer değerlerde çıkmadığı görülmektedir. Örneğin, Şekil 5a'da arka iki bina arkasındaki görülen hız değerleri neredeyse 0 olarak ölçülürken, Şekil 5d'de bina 2 arkasındaki değer yaklaşık 0'ken, bina 3'teki hız değeri yaklaşık 2.3 değerlerinde ölçülerek aralarındaki asimetrik hız farkı oluşmaktadır. Aynı zamanda akışın direkt olarak etki etmediği bina arka yüzeylerinde en düşük hız seviyeleri ölçülmüştür. Binalar arasındaki mesafenin arttırılması, üç bina arasındaki düşük hız seviyesinde artışa neden olarak olumsuz etki göstermektedir. Rüzgar hızının yüksek olduğu bölgelerde, rüzgarın olumsuz etkilerinin en aza indirmek amacıyla, binalar arasındaki mesafenin ayarlanmasına dikkat edilerek olumsuz etkilerin önüne geçilmesine özen gösterilmelidir.

3.3. Binaların Türbülans Kinetik Enerji Dağılımları

Şekil 6'da farklı rüzgar hızları için (5 m/s, 10 m/s, 20 m/s) yapılan sayısal modellemeye ait türbülans kinetik enerji dağılımı gösterilmiştir. Akış hızının artmasıyla birlikte türbülans kinetik enerji değerlerinde doğrusal bir artış meydana gelmektedir. Binalar arası mesafenin bir bina uzunluğunda olduğu durumda, üç bina arasında meydana gelen türbülans kinetik enerji değeri en yüksek seviyede elde edilmektedir. Buna karşılık binalar arası mesafenin, iki bina uzunluğunda arttırılması neticesinde, türbülans kinetik enerji değeri dar bina modellemesine nazaran binalar arasında daha düşük seviyelerde görülmektedir. Bina yan ve arka bölümlerinde yüksek seviyelerde seyreden türbülans kinetik enerji değeri, binaların arasındaki mesafenin arttırılması sonucunda, dar bina modellemesine göre daha geniş bir alanda yüksek seviyelerde olduğu gözlemlenmiştir. Ayrıca binalar arası mesafenin arttırılması ile beraber, arka iki bina etrafındaki türbülans kinetik enerjisi dar bina modellemesine göre daha yüksek değerlerde olduğu görülmektedir. Binaların etkisinde olmayan akış hattı boyunca, türbülans kinetik enerji en düşük seviyelerde görülmektedir.





Şekil 6. Farklı hızlar için türbülans kinetik enerji (TKE) dağılımları

3.4. Binaların Sürüklenme Katsayıları

Farklı rüzgar hızlarında binalar arasındaki mesafenin bir ve 2 bina genişliği kadar olduğu durumlara ait sürüklenme katsayısı değerleri Tablo 1’de verilmiştir. B1 öndeki binaya, B2 ve B3 ise arkadaki binaları göstermektedir. Gu ve arkadaşları [24] yaptıkları çalışmada 2 boyutlu dikdörtgen yapılarda en boy oranı arttıkça sürüklenme katsayısının azaldığını görmüşler. En düşük rüzgar hızı olan 5 m/s için öndeki binanın sürüklenme katsayısı 1.037 iken arkadaki binaların sürüklenme katsayısı 0.840’a düşmüştür. Rüzgar hızının artması ile birlikte öndeki binanın sürüklenme katsayısı 1.037’den 1.034’e düşmüştür.

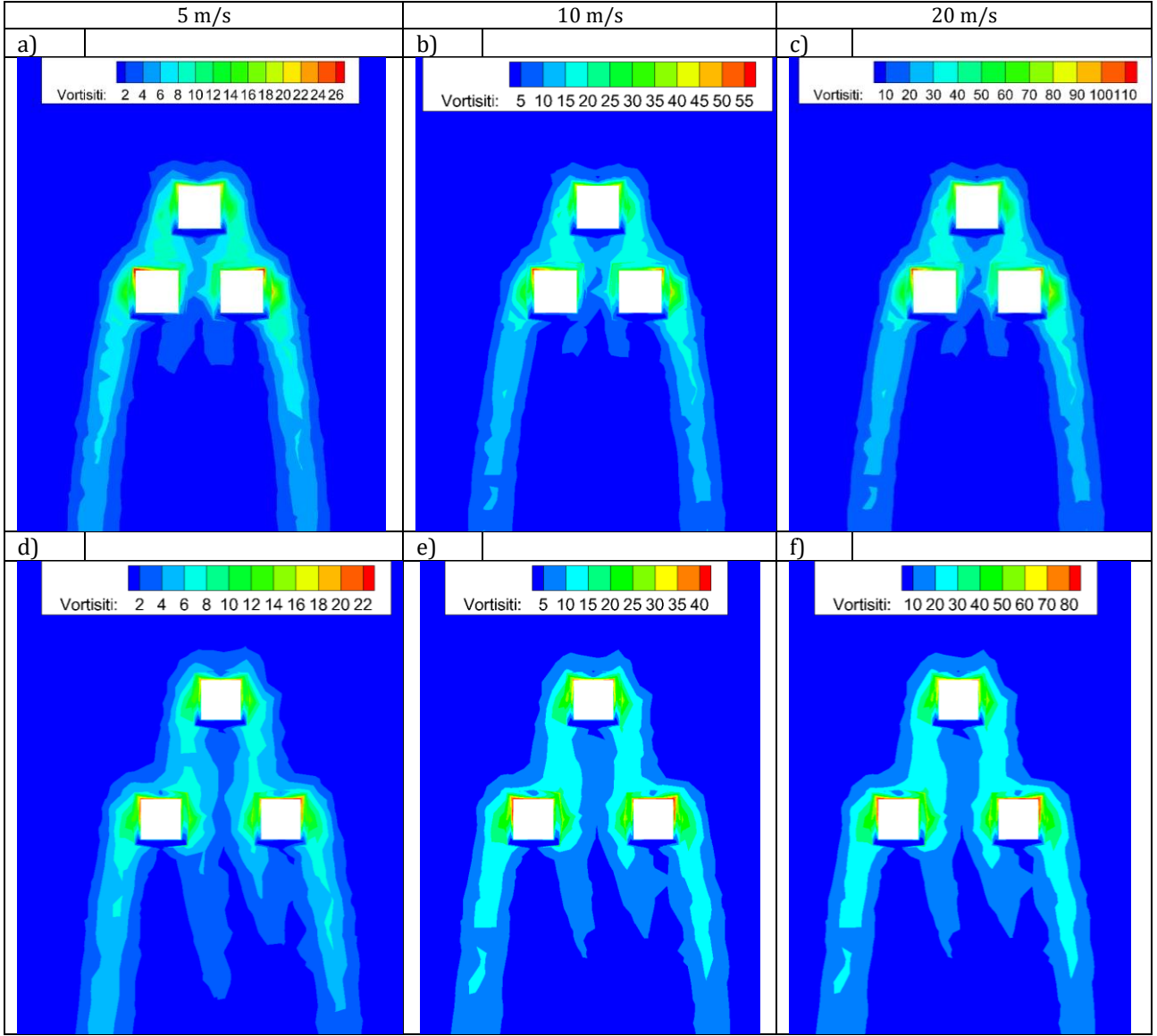
Tablo 1. Farklı mesafelerde binaların sürüklenme katsayıları

Bina/Hız	1m			2m			
	5 m/s	10 m/s	20 m/s	Bina/Hız	5 m/s	10 m/s	20 m/s
B1	1,037	1,035	1,034	B1	1,106	1,105	1,104
B2	0,840	0,846	0,847	B2	1,327	1,329	1,331
B3	0,846	0,846	0,847	B3	1,215	1,219	1,220

Rüzgar hızının artması arkadaki binaların sürüklenme katsayısında çok fazla değişikliğe yol açmamıştır. Binalar arasındaki mesafenin 2 bina genişliğine çıkarılması tüm binaların sürüklenme katsayılarında artışa yol açmıştır. Öndeki bina için bir bina genişliğinde 5 m/s’lik rüzgar hızında sürüklenme katsayısı 1.037 iken, iki bina genişliğinde 1.106 olmuştur. Rüzgar hızının maksimum olduğu durumda ise (20 m/s) her iki durum için sürüklenme katsayıları sırası ile 1.034 ve 1.104’tür. Arkadaki binaların sürüklenme katsayılarındaki artış ise daha yüksektir. En yüksek rüzgar hızı olan 20 m/s için arkada yer alan binaların sürüklenme katsayısı yaklaşık 0.84’ten 1.22’ye yükselmiştir.

3.5. Binaların arkasında oluşan vorteks dağılımları

Farklı hız ve bina yerleşimlerine ait vortisite dağılımları Şekil 7’de sunulmuştur. Şekil 7a, 7b ve 7c bir bina mesafesi için vorteks dağılımlarını gösterirken Şekil 7d, 7e ve 7f ise 2iki bina mesafesi için oluşan vorteks dağılımlarını göstermektedir. Binalar arasındaki uzaklık bir bina kadar olduğunda rüzgar hızının artması ile birlikte vortisite değeri 26’dan 110’a yükselmiştir. En yüksek rüzgar hızı olan 20 m/s için binalar arasındaki mesafenin 2 bina boyuna çıkarılması ile oluşan maksimum vortisite değeri 110’dan 80’e düşmüştür.



Şekil 7. Farklı hızlar için vortisiti dağılımları

4. Tartışma ve Sonuç

Bu çalışmada, farklı rüzgar yüklerinde çoklu binaların etrafındaki akış sayısal olarak araştırılmıştır. Çalışmada binalar arasındaki mesafenin bir ve iki bina genişliği olduğu durumlar ele alınmıştır. Binaların etrafında oluşan akış yapıları ve binaların sürüklenme katsayıları farklı rüzgar hızları için değerlendirilmiştir. Sayısal modellemeden elde edilen sonuçlara göre, arkadaki binaların arasındaki mesafe arttıkça binaları sürüklenme katsayısı (C_D) da artmaktadır. Örneğin çalışmada belirlene en yüksek rüzgar hızı olan 20 m/s için sürüklenme katsayısı yaklaşık 0.85'ten 1.21'e yükselmiştir. Binaların arkasındaki negatif basınç değerlerinde ise yaklaşık %20'lik bir artış olmuştur. Rüzgar hızının artması binaların arkasında oluşan vortisiti değerlerinin artırırken aynı rüzgar hızında binaların arasındaki mesafenin artması oluşan maksimum vortisiti değerlerinde azalmaya yol açmıştır.

Kaynakça

- [1] Cürebal, T., & Özmen, Y., 2022. "Açılı konumlandırılmış iki bina arasındaki açının hız ve basınç dağılımı üzerine etkisinin sayısal incelenmesi. Politeknik Dergisi, 361-371.
- [2] Fertelli, A., & Balta, M., 2017. Tek ve iki bina etrafındaki rüzgar etkilerinin sayısal olarak incelenmesi. Çukurova Üniversitesi Mühendislik-Mimarlık Fakültesi Dergisi, 32.3: 111-120.

- [3] Demir, H., 2021. Numerical Investigation of Wind Loads on Building with Various Turbulence Models. Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fen Bilimleri Dergisi, 37.2.
- [4] Paltun, S., Gültekin, A., & Çelebi, G., 2015. Binaların Aerodinamik Biçimsel Yapısının İrdelenmesi Bina Formu ve Rüzgar İlişkisi. 2nd International Sustainable Buildings Symposium, 28-30 Mayıs, Ankara, 431-439.
- [5] Toja-Silva, F., et al. 2016. An empirical–heuristic optimization of the building-roof geometry for urban wind energy exploitation on high-rise buildings. *Applied Energy*, 164, 769-794.
- [6] Buffa, E., Jacob, J., & Sagaut, P., 2021. Lattice-Boltzmann-based large-eddy simulation of high-rise building aerodynamics with inlet turbulence reconstruction. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 212, 104560.
- [7] Gölbaşı, D., Buyruk, E., Karabulut, K., & Şahin, B., 2017. Değişik Bina Modelleri İçin Akış Alanlarının Deneysel ve Sayısal Olarak İncelenmesi. 13. Ulusal Tesisat Mühendisliği Kongresi, 19-22 Nisan, İzmir, 229-248.
- [8] Avini, R., Kumar, P., & Hughes, S., 2019. Wind loading on high-rise buildings and the comfort effects on the occupants. *Sustainable cities and society*, 45, 378-394.
- [9] Kumar, S., Elanchezian, C., & Ramnath, B., 2019 Wind Effects of an Upstream Building on a Low-Rise Building. *Materials Today: Proceedings*, 16, 444-448.
- [10] Tamura, Y., Xu, X., & Yang, Q., 2019. Characteristics of pedestrian-level Mean wind speed around square buildings: Effects of height, width, size and approaching flow profile. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 192, 74-87.
- [11] Elshaer, A., et al. 2017. Variations in wind load on tall buildings due to urban development. *Sustainable cities and society*, 34, 264-277.
- [12] Daemei, A., et al. 2019. Study on wind aerodynamic and flow characteristics of triangular-shaped tall buildings and CFD simulation in order to assess drag coefficient. *Ain shams engineering journal*, 10.3, 541-548.
- [13] Ricci, M., et al. 2017. Flow field around a 5: 1 rectangular cylinder using LES: Influence of inflow turbulence conditions, spanwise domain size and their interaction. *Computers & Fluids*, 149, 181-193.
- [14] Bruno, L., & Oberto, D., 2022. Effects of cell quality in grid boundary layer on the simulated flow around a square cylinder. *Computers & Fluids*, 238, 105351.
- [15] Abdelfatah, N., et al. 2022. Experimental investigation of wind impact on low-rise elevated residences. *Engineering Structures*, 257, 114096.
- [16] Daniels, S., Castro, I., & Xie, Z., 2013. Peak loading and surface pressure fluctuations of a tall model building. *Journal of wind engineering and industrial aerodynamics*, 120, 19-28.
- [17] Case, J., Sarkar, P., & Sritharan, S., 2014. Effect of low-rise building geometry on tornado-induced loads. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 133, 124-134.
- [18] Mara, T. G., et al. 2014. Aerodynamic and peak response interference factors for an upstream square building of identical height. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 133, 200-210.
- [19] Zhou, L., Tse, K., & Hu, G., 2022. Experimental investigation on the aerodynamic characteristics of a tall building subjected to twisted wind. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 224, 104976.
- [20] Marsland, L., et al. 2022. Improving aerodynamic performance of tall buildings using façade openings at service floors. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 225, 104997.
- [21] Yan, B., et al. 2022. Modeling of downburst outflows and wind pressures on a high-rise building under different terrain conditions. *Journal of Building Engineering*, 48, 103738.
- [22] Franke, J., et al. 2007. Best practice guideline for the CFD simulation of flows in the urban environment-a summary. 11th Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes.
- [23] Genc, M., Lock, G., & Kaynak, U. 2008. An experimental and computational study of low Re number transitional flows over an aerofoil with leading edge slat. The 26th Congress of ICAS and 8th AIAA ATIO p. 8877.
- [24] Gu, M., Wang, X., & Quan, Y. 2020. Wind tunnel test study on effects of chamfered corners on the aerodynamic characteristics of 2D rectangular prisms. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 204, 104305.

Sağdan Kesilmiş Lomax Dağılımının İstatistiksel Özellikleri ve Bir Uygulama

Ceren Ünal¹, Gamze Özel²,

*^{1,2} Hacettepe Üniversitesi Fen Fakültesi İstatistik, ANKARA

(Alınış / Received: 29.05.2022, Kabul / Accepted: 20.07.2022, Online Yayınlanma / Published Online: 23.08.2022)

Anahtar Kelimeler
Lomax Dağılımı,
Kesilmiş Dağılım,
Parametre Tahmini.

Öz: Bu çalışmada yeni bir dağılım olan kesilmiş Lomax dağılımı tanıtılmıştır. Dağılımın elde edilmesinde, Lomax dağılımı kullanılmıştır. Elde edilen dağılımın temel istatistiksel özellikleri açıklanmış ve olasılık yoğunluk fonksiyonu, birikimli dağılım fonksiyonu, hazard fonksiyonu, yaşam fonksiyonu ve kantil fonksiyonu verilmiştir. Ayrıca momentlerine ulaşılmış, çarpıklık ve basıklık katsayıları elde edilmiştir. En çok olabilirlik tahmin yöntemi ile dağılımın parametre tahmini bulunmuştur. Daha sonra bir uygulama çalışması ile kesilmiş Lomax dağılımının literatürde var olan dağılımlardan ilgilenilen veri kümesine daha iyi uyum gösterdiği sonucuna ulaşılmıştır.

Statistical Properties of Right-Truncated Lomax Distribution and an Application

Keywords
Lomax Distribution,
Truncated Distribution,
Parameter Estimation.

Abstract: In this study, a new distribution, truncated Lomax distribution, is introduced. The Lomax distribution was used to obtain the distribution. The basic statistical properties of the obtained distribution are explained and probability density function, cumulative distribution function, hazard function, survival function, and quantile function are given. In addition, moments of skewness and kurtosis coefficients were obtained. The parameter estimation of the distribution was found using the maximum likelihood estimation method. Then, with an application study, it was concluded that the truncated Lomax distribution fits the data set of interest better than the distributions available in the literature.

*İlgili Yazar, email: cerenunal91@gmail.com

1. Giriş

Olasılık dağılımları zamana karşı arızalanma ya da bozulma modelleri biçiminde sistemler veya bileşenleri için yaygın olarak kullanılırlar [1, 2]. Sistemlerin yaşam süreleri, üretim için kullanılan madde, miktar ya da çevresel koşullarda meydana gelen değişim gibi birçok farklı nedenlere bağlıdır. Süre, rastgele değişken olarak alınarak sistem, alt sistem veya bir bileşeni için zamana karşı arızalanma yada bozulma için uygun bir olasılık modeli oluşturulur. Devamında, oluşturulan bu olasılık modelinde yer alan parametreler tahmin edilir ve risk (hazard) fonksiyonu, sağ kalım (survival) fonksiyonu gibi özellikler incelenir [3].

Gerçek yaşamda karşılaşılan birçok farklı karakteristiğe sahip veri setlerini tanımlamak ve hakkında tahminler yapmak için olasılık dağılımları kullanılmaktadır. Son yıllarda yapılan çalışmalardan yola çıkarak, iyi bililen dağılımlara göre daha esnek olup bu dağılımların özelliklerini taşıyan, modelleme uygulamalarında çok yönlü olan, farklı yapıya sahip verileri modelleyebilecek yeni dağılımlara yönelme olduğu görülmektedir. Çalışmalarda yeni dağılımların tanımlanmasında temel dağılım, üretici dağılım ve bağ fonksiyonu yöntemleri kullanılmaktadır. Bu tanımlamada kullanılan ek parametre ya da parametreler, üretici olasılık dağılım ailesinin uyum iyiliğini iyileştirmek ve kuyruk özelliklerini temsil edebilmek için kullanılmaktadır. Aynı zamanda, dağılımın kesilmesi ile yeni bir dağılım elde edilmektedir [4].

Kesilmiş dağılımlar özellikle yaşam analizinde, yaşam süresinin farklı dağılımları için kesilmiş yaşam testine dayalı tek katlı kabul örnekleme planlarında kullanılmaktadır. Kesilmiş yaşam testi ile alakalı olarak ilk çalışma üstel dağılım için Epstein [5] tarafından yapılmıştır. İki parametrelili Pareto dağılımı Baklizi [6] tarafından; Birnbaum-Saunders dağılımı Balakrishnan, Leiva ve Lopez [7] tarafından; ters Rayleigh dağılımı Rosaiah ve Kantam [8] tarafından; log-logistic dağılımı Srinivasa-Rao ve Kantam [9] tarafından; ters Weibull dağılımı ise Singh ve Tripathi [10] tarafından önerilmiş olup kabul örnekleme planları incelenmiştir. Al-Omari [11] tarafından Sushila dağılımı varsayımı ile yaşam süresinin kesilmiş yaşam testine dayalı tek katlı kabul örnekleme planı üzerinde çalışması bulunmaktadır. Benzer olarak, Aslam, Kundu ve Ahmad [12] yine tek katlı kabul örnekleme planı için genelleştirilmiş üstel dağılım için yaşam süresinin medyanına ilişkin kesilmiş yaşam testine dayalı olarak minimum örneklem büyüklüğünü elde etmişler ve Aslam ve Jun [13] ise Gamma, Weibull ve genelleştirilmiş Rayleigh dağılımı için hem tüketici hem de üretici faydasını dikkate almışlardır. Gompertz dağılımı için ürünün ortalamasını Gui, ve Shangli Zhang [14]; ürünün ömrünün medyanı ve yüzdelerini ise Malathi ve Muthulakshmi [15] dikkate almıştır. Çakmakçıyan ve Özel [16, 17] çalışmalarında sırasıyla Lindley-Lomax ve Genelleştirilmiş Lindley-Weibull dağılımlarının özelliklerini incelemişlerdir.

Lomax dağılımı ilk kez Lomax [18] tarafından iş hatalarına ait verileri modellemek için tanımlanmıştır. Bu dağılım ayrıca Pareto 2. tip dağılımı olarak da bilinmektedir. Lomax dağılımı başta ekonomi ve aktüeryal modellemelerde olmak üzere birçok alanda kullanılmaktadır. Lomax dağılımından yola çıkarak çeşitli dağılımlar literatüre kazandırılmıştır. Ghitany vd. [19] Marshall-Olkin genişletilmiş Lomax; Lemonte and Cordeiro [20] McDonald Lomax; Khaleel vd. [21] Gompertz Lomax; Cordeiro vd. [22] Gamma-Lomax; Rady vd. [23] Power-Lomax; Hassan ve Nassr [24] Power-Lomax-Poisson; Hassan ve Abd-Allah [25] üstelleştirilmiş Weibull-Lomax ve Hassan vd. [26] Type II Yarı Lojistik Lomax dağılımlarını çeşitli uygulamalarla incelemişlerdir.

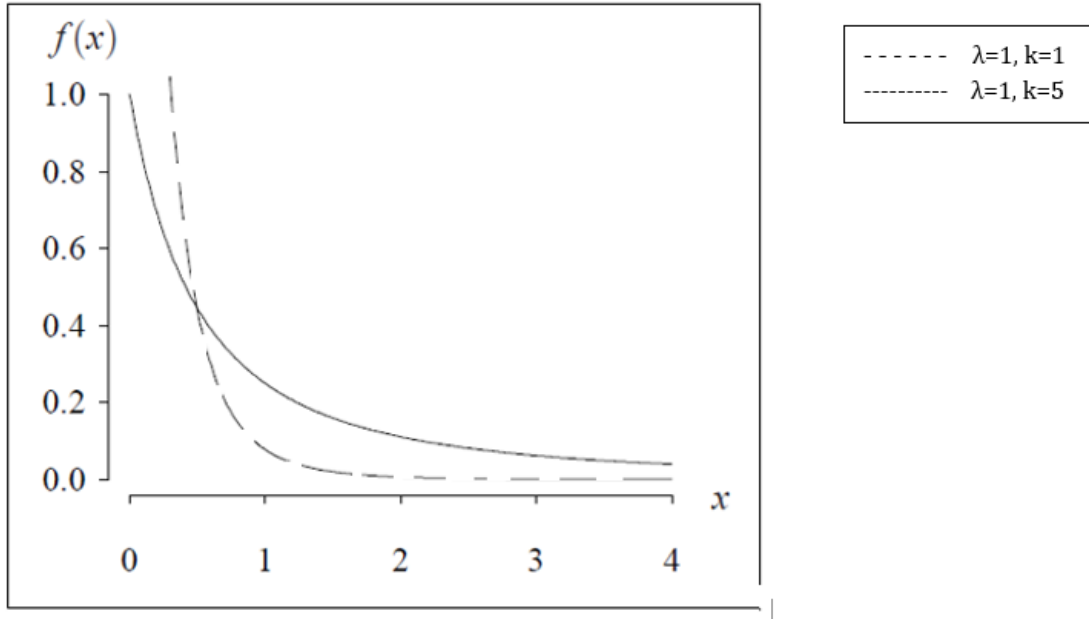
Lomax dağılımı biyoloji, aktüerya bilimi, ekonomi, kuyruk problemleri ve dayanıklılık ve ömür modellemesinde yaygın olarak kullanılır. Aynı zamanda, Lomax Dağılımından yararlanan çalışmalar arasında, kararlılık ve yaşam kontrolü alanındaki verileri firma ölçeği, gelir ve kaynaklar ve sunuculardaki makine dosyalarının boyut dağılımı modelleme yer almaktadır. Bu çalışmada Lomax dağılımının sağdan kesilmesi ile elde edilen yeni olasılık dağılımı üzerinde durulmuştur.

2. Sağdan Kesilmiş İki Parametrelili Lomax Dağılımı

X raslantı değişkeni λ konum parametresi, k şekil parametresi ile Lomax dağılımlı olsun. Buna göre olasılık yoğunluk fonksiyonu

$$f(x) = \frac{\lambda k}{(1+\lambda x)^{k+1}}, \quad x > 0, k > 0, \lambda > 0, \quad (1)$$

biçimindedir. Olasılık yoğunluk fonksiyonunun farklı parametre değerlerine ait grafiği Şekil 1'de verilmiştir:



Şekil 1. Lomax dağılımı $\lambda=1, k=1$ ve $\lambda=1, k=5$ parametre değerlerine ait grafikleri

Şekil 1’de, olasılık yoğunluk fonksiyonunun farklı parametre değerleri için incelendiğinde özellikle şekil parametresinin değerini azaldığında azalışın daha ani olduğu görülmektedir. Grafikte yer alan her iki durum içinde ilk azalış daha sonra da yatay bir durum gözlenmiştir.

Lomax dağılımlı X raslantı değişkenin dağılım fonksiyonu ise

$$F(x) = P(X \leq x) = 1 - (1 + \lambda x)^{-k}, \quad x > 0, \quad (2)$$

biçiminde elde edilmektedir. Bu çalışmada Lomax dağılımının sağdan 1 noktasında kesilmiş yani, 0 ile 1 Aralığında kesilmiş hali araştırılmıştır. Bu dağılımın 0 ile 1 sınırları arasında kesilebilmesi için ilgili sınırlarda

$$f(t) = \frac{g(t)}{G(B)-G(A)}, \quad F(t) = \frac{G(t)-G(a)}{G(b)-G(a)}, \quad (3)$$

a, b>0 ve 0<t<1 olmak üzere biçiminde verilen formüllerden yararlanılmıştır. Buradan sağdan kesilmiş Lomax dağılımına ait olasılık yoğunluk fonksiyonu Eşitlik (4)’de ki gibi elde edilmektedir.

$$f(t) = \frac{g(t)}{G(1)-G(0)} = \frac{\lambda k / (1+\lambda t)^{k+1}}{[(1-(1+\lambda*1)^{-k}) - ((1-(1+\lambda*0)^{-k})]}. \quad (4)$$

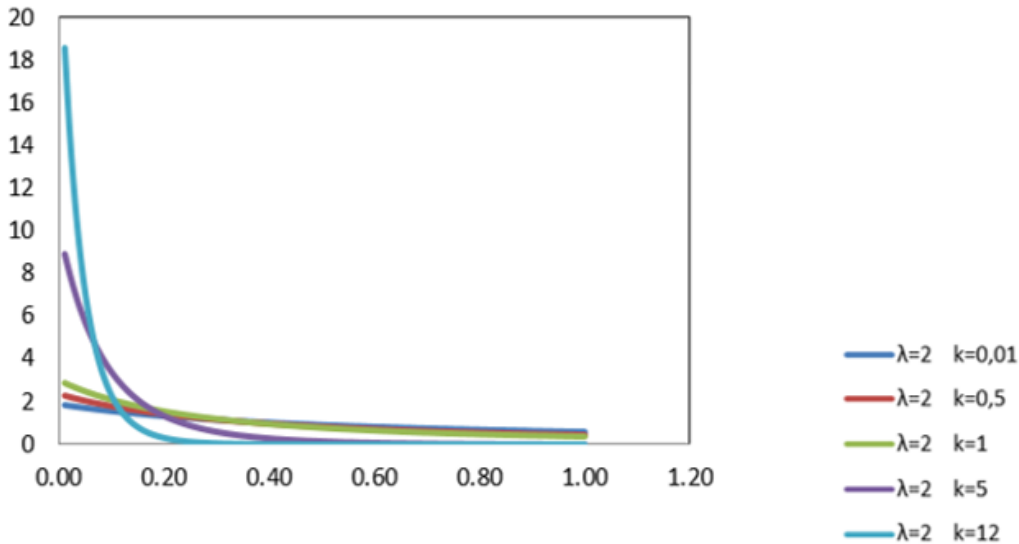
Buna göre, matematiksel düzenlemelerden sonra sağdan 1 noktasında kesilmiş Lomax dağılımının olasılık yoğunluk fonksiyonu ve dağılım fonksiyonu sırasıyla,

$$f(t) = \frac{\lambda k}{(1+\lambda t)^{k+1} [1-(1+\lambda)^{-k}]}, \quad 0 < t < 1, k > 0, \lambda > 0, \quad (5)$$

$$F(t) = \frac{G(t)-G(0)}{G(1)-G(0)} = \frac{[1-(1+\lambda t)^{-k}]}{1-(1+\lambda)^{-k}}, \quad 0 < t < 1, \quad (6)$$

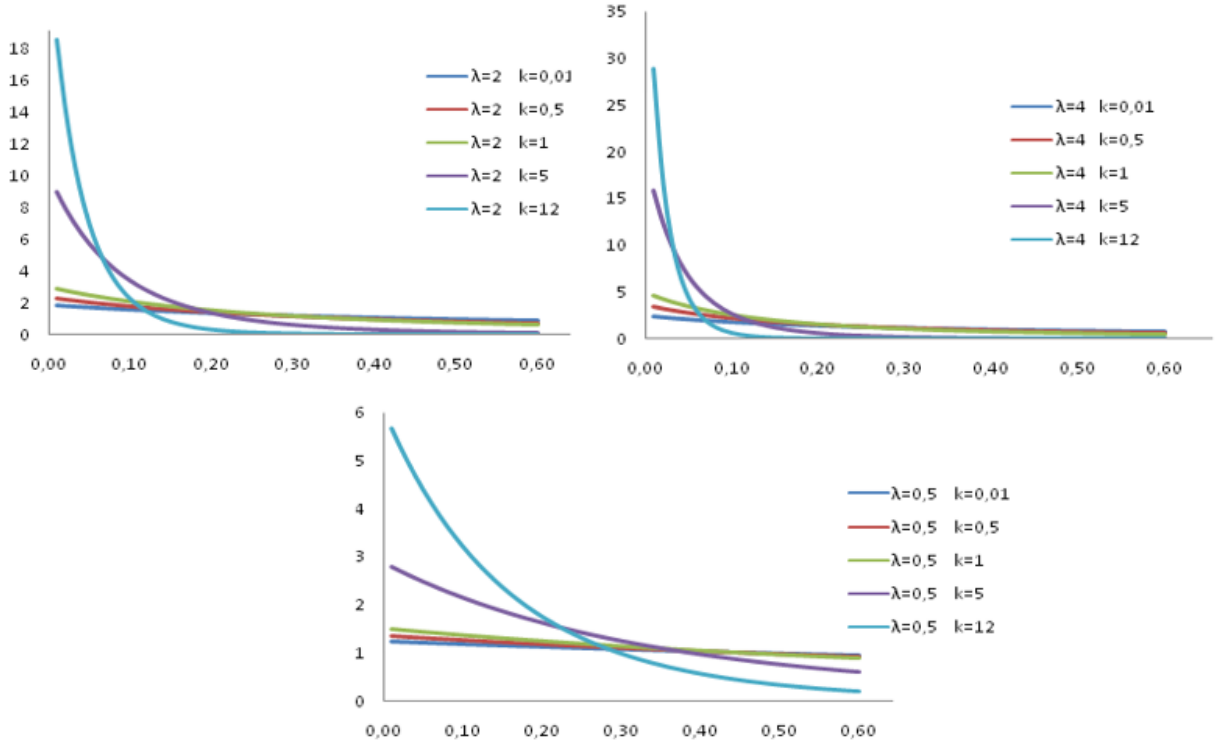
biçiminde elde edilmektedir.

X raslantı değişkeni için 0 ile 1 Aralığında 100 tane değer (0.01, 0.02, ..., 0.99, 1) verilerek olasılık yoğunluk fonksiyonu grafiği Şekil 2’de gösterilmiştir. Ancak grafikleri daha ayrıntılı inceleyebilmek için olasılık yoğunluk fonksiyonu veri seti 0,6 noktasından sonra kesilerek, 60 adet x değeri üzerinden grafikler çizilmiştir.



Şekil 2. $\lambda=2$, $k=0,01;0,5;1;5;12$ için $0 < t < 1$ Aralığında Lomax olasılık yoğunluk fonksiyonu

Farklı parametre değerleri için elde edilen olasılık yoğunluk fonksiyonu grafikleri Şekil 3’te verilmiştir. Şekil 3 incelendiğinde, dağılımın şekil parametresi k’nın küçük değerlerinde doğrusala yakınsayan dağılımlar elde edilirken, k büyüdükçe dağılımın şeklinin değiştiği görülmektedir.



Şekil 3. Farklı parametre değerleri için olasılık yoğunluk fonksiyonu grafikleri

3. Diğer İstatistiksel Özellikleri

Bu bölümde elde edilen yeni dağılıma olan sağdan kesilmiş Lomax dağılımına ait diğer özellikler incelenmiştir.

3.1. Yaşam fonksiyonu

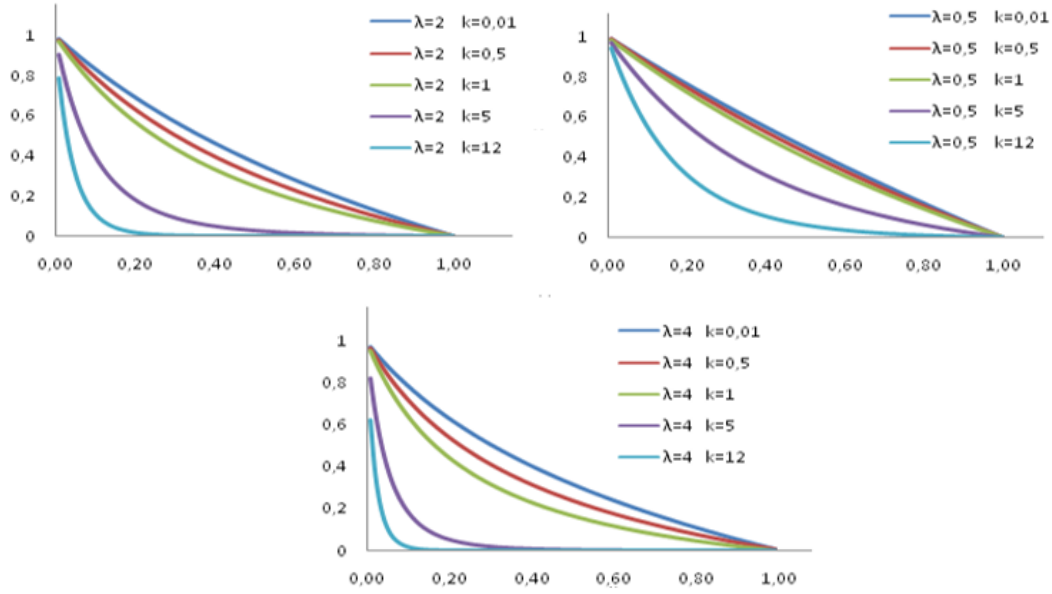
Yaşam sürelerinin olasılık dağılımını gösteren fonksiyonlara yaşam fonksiyonu denir ve dağılım fonksiyonu yardımıyla $S(x)=1-F(x)$ biçiminde hesaplanmaktadır. Buna göre, sağdan kesilmiş Lomax dağılımının yaşam fonksiyonu

$$S(X) = 1 - \frac{[1 - (1+\lambda x)^{-k}]}{1 - (1+\lambda)^{-k}} = 1 - \frac{[1 - (1+\lambda x)^{-k}](1+\lambda)^k}{(1+\lambda)^k - 1} = \frac{[(1+\lambda)^k - 1] - [1 - (1+\lambda x)^{-k}](1+\lambda)^k}{(1+\lambda)^k - 1}. \quad (7)$$

biçimindedir. Eşitlik (7)'de yer alan eşitlikte matematiksel düzenlemeler yapıldıktan sonra sağdan kesilmiş Lomax dağılımlı X raslantı değişkenine yaşam fonksiyonu Eşitlik (8)'de ki gibi elde edilmektedir.

$$S(x) = \frac{(1+\lambda)^k(1+\lambda x)^{-k} - 1}{(1+\lambda)^k - 1}, \quad 0 < x < 1. \quad (8)$$

0 ile 1 Aralığında kesilmiş Lomax dağılımında çeşitli parametre değerleri için yaşam fonksiyonu grafikleri Şekil 4'de verilmektedir.



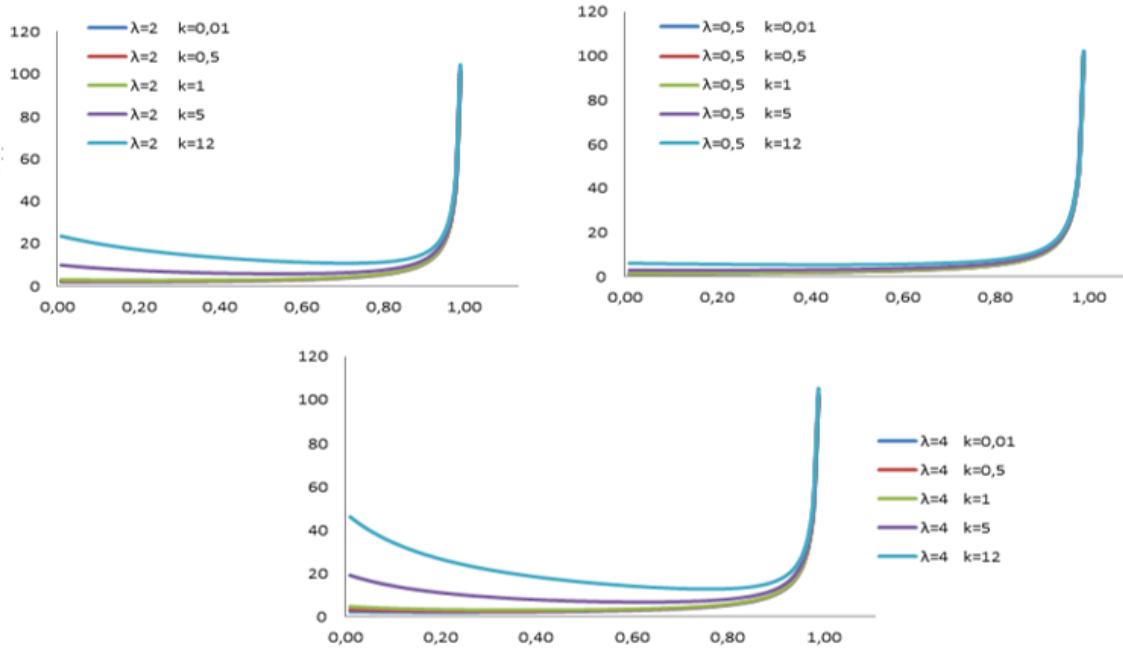
Şekil 4. Çeşitli parametre değerleri için sağdan kesilmiş Lomax dağılımına ait yaşam fonksiyonu grafikleri

3.2. Hazard fonksiyonu

Belirli bir zamandaki ölüm olasılığı veya taşınan ölüm riski, hazard fonksiyonu olarak ifade edilmektedir. Hazard (Tehlike) fonksiyonu,

$$H(x) = \frac{f(x)}{1-F(x)} = \frac{\lambda k((1+\lambda)^k - 1)}{(1+\lambda x)^{k+1} [1 - (1+\lambda)^{-k}] [(1+\lambda)^k (1+\lambda x)^{-k} - 1]}, \quad 0 < x < 1. \quad (9)$$

şeklinde elde edilmektedir. 0 ile 1 Aralığında kesilmiş Lomax dağılımında çeşitli parametre değerleri için hazard fonksiyonu grafikleri Şekil 5'de verilmiştir. Buna göre, kesilmiş Lomax dağılımının hazard fonksiyonunun parametrelere göre artan veya λ 'nın büyük değerleri için önce azalan sonra artan yapısının olduğu görülmektedir.



Şekil 5. Çeşitli parametre değerleri için hazard fonksiyonu grafikleri

3.3. Kantil fonksiyonu

Kantil fonksiyonu, $\theta(p) = F^{-1}(p)$ işlemi yapıp bulunan eşitlikten x çekilmesi ile

$$\theta(p) = \frac{[1-p(1-(1+\lambda)^{-k})]^{1/k}-1}{\lambda}, \quad (10)$$

$0 < p < 1$ olmak üzere, Eşitlik (10)'da ki gibi elde edilir.

Kantil fonksiyonunda $p=0,5$ yazılması ile medyan değeri bulunmaktadır. Çeşitli parametre değerleri için medyan sonuçları Tablo 1'de verilmektedir.

Tablo 1. Sağdan kesilmiş Lomax dağılımına ait farklı parametre değerleri için medyan değerleri

λ	k	Medyan
2	0,01	-3,5632E+195
	0,5	-1,400
	1	-0,375
	5	-0,250
	12	-0,250
0,5	0,01	-1,9619E+239
	0,5	-29,697
	1	-3,000
	5	-1,029
	12	-1,001
4	0,01	-6,0049E+178
	0,5	-0,409
	1	-0,156
	5	-0,125
	12	-0,125

Tablo 1'e göre, çeşitli λ (0,5, 2, 4) değeri için k (0,01, 0,5, 1, 5, 12) parametre değeri arttıkça önerilen sağdan kesilmiş Lomax dağılımına ait medyan değerlerinin büyüdüğü gözlenmektedir.

3.4. Basıklık ve çarpıklık katsayıları

Kantil fonksiyonundan yararlanarak hesaplanan basıklık katsayısı (BK) ve çarpıklık katsayısı (ÇK) formülü sırasıyla,

$$BK = -\frac{\theta(\frac{3}{4})-2\theta(\frac{1}{2})+\theta(\frac{1}{4})}{\theta(\frac{3}{4})-\theta(\frac{1}{4})},$$

ve

$$\text{ÇK} = -\frac{\theta(\frac{7}{8})-\theta(\frac{5}{8})-\theta(\frac{3}{8})+\theta(\frac{1}{8})}{\theta(\frac{6}{8})-\theta(\frac{2}{8})},$$

biçimindedirler.

Çeşitli parametre değerleri için hesaplanan basıklık katsayıları Tablo 2'de verilmiştir. Formülden yararlanarak, farklı parametre değerleri için hesaplanan çarpıklık katsayıları ise Tablo 3'te verilmiştir.

Tablo 2. Sağdan kesilmiş Lomax dağılımına ait farklı parametre değerleri için basıklık katsayısı değerleri

λ	k	Q(3/4)	Q(1/2)	Q(1/4)	Basıklık
2	0,01	-5,3448E+195	-3,56E+195	-1,7816E+195	0,00
	0,5	-2,0993	-1,3995	-0,6998	0,00
	1	-0,5625	-0,3750	-0,1875	0,00
	5	-0,3753	-0,2502	-0,1251	0,00
	12	-0,3750	-0,2500	-0,1250	0,00
0,5	0,01	-2,9428E+239	-1,96E+239	-9,8093E+238	0,00
	0,5	-44,5454	-29,6969	-14,8485	0,00
	1	-4,5000	-3,0000	-1,5000	0,00
	5	-1,5430	-1,0286	-0,5143	0,00
	12	-1,5010	-1,0006	-0,5003	0,00
4	0,01	-9,0073E+178	-6E+178	-3,0024E+178	0,00
	0,5	-0,6136	-0,4091	-0,2045	0,00
	1	-0,2344	-0,1563	-0,0781	0,00
	5	-1,5430	-1,0286	-0,0625	0,3052
	12	-0,1875	-0,125	-0,0625	0,00

Tablo 3. Sağdan kesilmiş Lomax dağılımına ait farklı parametre değerleri için çarpıklık katsayısı değerleri

λ	k	Q(1/8)	Q(2/8)	Q(3/8)	Q(5/8)	Q(6/8)	Q(7/8)	Çarpıklık
2	0,01	-8,908E+194	-1,782E+195	-2,67E+195	-4,45E+195	-5E+195	-6E+195	0,00
	0,5	-0,3499	-0,6998	-1,0496	-1,7494	-2,0993	-2,4492	0,00
	1	-0,0938	-0,1875	-0,2813	-0,4688	-0,5625	-0,6563	0,00
	5	-0,0626	-0,1251	-0,18765	-0,3128	-0,3753	-0,4379	0,00
	12	-0,0625	-0,1250	-0,1875	-0,3125	-0,3750	-0,4375	0,00
0,5	0,01	-4,9E+238	-9,809E+238	-1,47E+239	-2,45E+239	-3E+239	-3E+239	0,00
	0,5	-7,4242	-14,8485	-22,2727	-37,1212	-44,5450	-51,9696	0,00
	1	-0,7500	-1,5000	-2,2500	-3,7500	-4,5000	-5,2500	0,00
	5	-0,2572	-0,5143	-0,7715	-1,2858	-1,5430	-1,8001	0,00
	12	-0,2502	-0,5003	-0,7505	-1,2508	-1,5010	-1,7511	0,00
4	0,01	-1,5E+178	-3,002E+178	-4,5E+178	-7,51E+178	-9E+178	-1E+179	0,00
	0,5	-0,1023	-0,2045	-0,3068	-0,5113	-0,6136	-0,7159	0,00
	1	-0,0391	-0,0781	-0,1172	-0,1953	-0,2344	-0,2734	0,00
	5	-0,0313	-0,0625	-0,0938	-0,1563	-1,5430	-0,2188	0,00
	12	-0,0313	-0,0625	-0,0938	-0,1563	-0,1875	-0,2188	0,00

Normal dağılım için basıklık katsayısı 3 değerine eşittir. Buna göre, normal dağılıma göre karşılaştırsak, basıklık katsayısı 3'den küçük ise dağılım basık, 3'den büyük ise sivri bir dağılım söz konusudur. Elde edilen basıklık katsayısı sonuçlarına göre, dağılımın basık olduğu söylenebilir. Çarpıklık katsayısı sıfıra eşit ise dağılım simetrik, sıfırdan büyük ise sağa çarpık ve sıfırdan küçük ise sola çarpık bir dağılım söz konusudur. Tablo 3'e göre, çeşitli parametreler için çarpıklık katsayısı değeri 0 olarak elde edilmiştir, simetrik olduğu söylenebilir.

3.5. Momentler

Dağılım hakkında bilgi elde etmek için momentler kullanılan önemli bir değerlerdendir. Varyansın, çarpıklık ve basıklık katsayılarının hesaplanmasında dağılımın momentleri kullanılmaktadır. Sağdan kesilmiş Lomax dağılımı için beklenen değer ve diğer merkezsiz momentleri aşağıdaki gibi elde edilmektedir.

$$E(X) = \frac{\lambda k}{[1-(1+\lambda)^{-k}]} \int_0^1 x \frac{1}{(1+\lambda x)^{k+1}} dx.$$

Burada, $1 + \lambda x = u$ ve $\lambda dx = du$ dönüşümleri yapılırsa, beklenen değer aşağıdaki Eşitlik (11)'deki gibi bulunur:

$$E(X) = \frac{k}{[1-(1+\lambda)^{-k}]} \frac{1}{\lambda} \left[\frac{(1+\lambda)^{-k+1} - 1}{-k+1} - \frac{(1+\lambda)^{-k} - 1}{-k} \right]. \quad (11)$$

İkinci merkezsiz olmayan moment ise benzer olarak aşağıdaki gibi elde edilir:

$$E(X^2) = \frac{\lambda k}{[1-(1+\lambda)^{-k}]} \int_0^1 x^2 \frac{1}{(1+\lambda x)^{k+1}} dx.$$

Benzer şekilde, $1 + \lambda x = u$ ve $\lambda dx = du$ dönüşümleri yapılırsa, ikinci merkezsiz olmayan moment Eşitlik (12)'deki gibi elde edilir:

$$E(X^2) = \frac{k}{[1-(1+\lambda)^{-k}]} \frac{1}{\lambda^2} \left[\frac{(1+\lambda)^{-k+2} - 1}{-k+2} - 2 \frac{(1+\lambda)^{-k+1} - 1}{-k+1} + \frac{(1+\lambda)^{-k} - 1}{-k} \right] \quad (12)$$

Üçüncü merkezsiz olmayan moment ise, aşağıdaki gibi bulunur:

$$E(X^3) = \int_0^1 x^3 \frac{\lambda k}{[1-(1+\lambda)^{-k}]} \int_0^1 x^3 \frac{1}{(1+\lambda x)^{k+1}} dx.$$

Burada da, $1 + \lambda x = u$ ve $\lambda dx = du$ dönüşümleri yapılırsa, üçüncü merkezsiz olmayan moment aşağıdaki biçimde yazılabilir:

$$E(X^3) = \frac{\lambda k}{[1-(1+\lambda)^{-k}]} \frac{1}{\lambda^4} \int \frac{(u-1)^3}{u^{k+1}}. \quad (13)$$

$(a - b)^3 = a^3 - 3a^2b + 3ab^2 - b^3$ Açılımından yararlanarak gerekli işlemler yapıldığında üçüncü merkezsiz olmayan moment Eşitlik (14)'deki gibi elde edilmektedir.

$$E(X^3) = \frac{k}{[1-(1+\lambda)^{-k}]} \frac{1}{\lambda^3} \left[\frac{(1+\lambda)^{-k+3} - 1}{-k+3} - 3 \frac{(1+\lambda)^{-k+2} - 1}{-k+2} + 3 \frac{(1+\lambda)^{-k+1} - 1}{-k+1} - \frac{(1+\lambda)^{-k} - 1}{-k} \right]. \quad (14)$$

Dördüncü merkezsiz olmayan moment ise

$$E(X^4) = \int_0^1 x^4 \frac{\lambda k}{[1-(1+\lambda)^{-k}]} \int_0^1 x^4 \frac{1}{(1+\lambda x)^{k+1}} dx,$$

biçiminde elde edilmektedir. Burada, $1 + \lambda x = u$, $\lambda dx = du$ dönüşümü ve $(a - b)^4 = a^4 - 4a^3b + 6a^2b^2 - 4a^2b + b^4$ açılımından gerekli işlemler yapıldığında dördüncü merkezsiz olmayan moment,

$$E(X^4) = \frac{k}{[1-(1+\lambda)^{-k}]} \frac{1}{\lambda^4} \left[\frac{(1+\lambda)^{-k+4} - 1}{-k+4} - 4 \frac{(1+\lambda)^{-k+3} - 1}{-k+3} + 6 \frac{(1+\lambda)^{-k+2} - 1}{-k+2} - 4 \frac{(1+\lambda)^{-k+1} - 1}{-k+1} + \frac{(1+\lambda)^{-k} - 1}{-k} \right], \quad (15)$$

Eşitlik (15)'de ki gibi elde edilir. İlk dört merkezsiz olmayan moment yardımıyla bir genellemeye gidilebilir. Merkezsiz olmayan momentler için $\frac{k}{[1-(1+\lambda)^{-k}]} = A$ olarak alınsın. Bu durumda bütün momentlerde μ'_n , $\frac{1}{\lambda^n}$ çarpanı ve binom dağılımının açılımından yararlanarak $(1 + \lambda)^n - 1$ ifadesinde $(1 + \lambda)$ 'nın n üstüne bölünmesi ile standart bir form elde edilmektedir. Tek üstlerde son ifade $\frac{(1+\lambda)^{-k-1}}{-k}$ eksi, çift üstlerde de artı işaret almaktadır.

Sağdan kesilmiş Lomax dağılımının varyansı ise,

$$V(X) = E(X^2) - [E(X)]^2,$$

olmak üzere, ikinci merkezsel olmayan moment ve ortalama yardımıyla

$$V(X) = \frac{k}{[1-(1+\lambda)^{-k}] \lambda^2} \left\{ \left[\frac{(1+\lambda)^{-k+2}-1}{-k+2} - 2 \frac{(1+\lambda)^{-k+1}-1}{-k+1} - \frac{(1+\lambda)^{-k}-1}{-k} \right] - \left[\frac{k}{[1-(1+\lambda)^{-k}] \left(\frac{(1+\lambda)^{-k+1}-1}{-k+1} + \frac{(1+\lambda)^{-k}-1}{k} \right)^2 \right] \right\}. \quad (16)$$

biçiminde elde edilmiştir.

4. Parametrelerin Tahmini

Bu bölümde sağdan kesilmiş Lomax dağılımına ait parametre tahmini en çok olabilirlik tahmini yardımıyla yapılmıştır. Öncelikle dağılımın olasılık yoğunluk fonksiyonu Eşitlik (5)'de verilmişti. Bu fonksiyon yardımıyla olabilirlik fonksiyonu

$$L(\lambda, k, X_1, X_2, \dots, X_n) = \frac{(\lambda k)^n}{\sum_{i=1}^n (1+\lambda x_i)^{k+1} (1-(1+\lambda)^{-k})^n},$$

biçimde elde edilmektedir. Bu olabilirlik fonksiyonunun logaritması

$$\ln L = n \ln(\lambda) + n \ln(k) - (k+1) \sum_{i=1}^n \ln(1 + \lambda x_i) - n \ln(1 - (1 + \lambda)^{-k}),$$

eşitliği biçimindedir ve bu eşitliğin λ ve k parametrelerine göre sırasıyla türevleri alınırsa aşağıdaki denklemlere ulaşılmaktadır.

$$\frac{\partial L}{\partial \lambda} = \frac{n}{\lambda} - (k+1) \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{1+\lambda x_i} + nk \frac{(1+\lambda)^{-k-1}}{1-(1+\lambda)^{-k}},$$

$$\frac{\partial L}{\partial k} = \frac{n}{k} - \sum_{i=1}^n \ln(1 + \lambda x_i) + n \frac{(1+\lambda)^{-k} \ln(1+\lambda)}{1-(1+\lambda)^{-k}}.$$

Her iki parametreye göre ikinci türevleri alarak bilgi matrisi elemanları sırasıyla aşağıdaki gibi elde edilmektedir.

$$\frac{\partial^2 L}{\partial \lambda^2} = -\frac{n}{\lambda^2} + (k+1) \sum_{i=1}^n \frac{x_i^2}{(1+\lambda x_i)^2} + nk \frac{(1+\lambda)^{-k} + [-k-1+(1+\lambda)^{-k}]}{[1-(1+\lambda)^{-k}]^2 (1+\lambda)^{-2}},$$

$$\frac{\partial^2 L}{\partial k^2} = -\frac{n}{k^2} + n \left[\frac{\ln(1+\lambda)^2 (1+\lambda)^{-k}}{[1-(1+\lambda)^{-k}]^2} \right],$$

$$\frac{\partial^2 L}{\partial \lambda \partial k} = -\sum_{i=1}^n \frac{x_i}{1+\lambda x_i} + \left(nk \frac{(1+\lambda)^{-k-1}}{1-(1+\lambda)^{-k}} \right)'$$

Bu çalışma kapsamında parametre tahmini açık kodlu R yazılımı ile yapılmıştır. R paket programında tahmin için "optimize, nlm ve adequacymodel" paketleri mevcuttur. "Adequacy Model" paketi ile birlikte paketin yapısında yer alan PSO algoritması parametre tahmininde kullanılmıştır [27,28,29].

5. Uygulama

Bu çalışmada kullanılan veriler, 137 ülkedeki HIV bulaşmış kişilerin oranlarına dayanmaktadır [30]. Çalışmada alternatif diğer dağılımlarda denenmiş ve modellerin bilinmeyen parametrelerinin en çok olabilirlik tahminleri Tablo 3'te verilmiştir. Tabloda parantez içinde yer alan değerler standart hatalar belirtmektedir. Ayrıca AIC (Akaike Information Criterion) istatistiklerine ait değerler, AICC (Akaike Information Criterion with Correction) ve BIC (Bayes Information Criterion) değerleri sağdan kesilmiş Lomax (SK-L), Kumaraswamy-Lomax (Kw-L), Beta-Lomax (B-L), Üstel-Lomax (Üstel-L) ve Lomax dağılımları için hesaplanmıştır. Bunun yanı sıra, Cramer-von Mises (W) ve Anderson-Darling (A) istatistikleri de elde edilmiştir. Hesaplamalar, R programında Adequacy Model paketi kullanılarak gerçekleştirilmiştir.

Tablo 4. Modellere ait parametre tahmin değerleri ve uyum iyiliği istatistikleri

Model	a	b	k	λ	AIC	AICC	BIC	W	A
SK-L	0.342 (0.032)	5.754 (0.212)	0.023 (0.009)	0.0002 (0.002)	271.672	272.872	275.302	2.029	5.283
Kw-L	0.479 (0.045)	6.892 (2.098)	0.021 (0.007)	0.001 (0.027)	274.892	273.209	283.867	2.245	6.892
Beta-L	0.445 (0.037)	4.093 (3.210)	0.0027 (0.032)	0.002 (0.003)	279.232	279.873	284.692	2.502	7.234
Üstel-L	0.362 (0.048)	1.000 -	0.176 (0.045)	0.0002 (0.0003)	280.473	281.901	289.364	2.524	8.245
Lomax	1.000 -	1.00 -	0.034 (0.028)	0.0010 (0.0012)	302.485	302.356	324.290	2.459	8.892

Tablo 4’de verilen uyum iyiliği ölçüt değerlerine göre, küçük değerlerin daha iyi uyumu ifade etmesi sebebiyle SK-L modelinin diğerlerinden daha iyi olduğu sonucuna varılmıştır. Ayrıca, tabloda parantez içinde yer alan değerler ise parametre tahminleri için standart hataları belirtmektedir.

6. Sonuç

Farklı bilimsel alanlarda, birçok istatistiksel dağılım gerçek yaşam verilerinin modellenmesinde ve devamında analizinde kullanılmaktadır. Ancak ilgilenilen veri setine yönelik kullanılan istatistiksel dağılımların çoğu tam olarak uyum sağlayamamaktadır. Dolayısıyla, karşılaşılan bu tür durumlarla birlikte gerçek yaşam verilerini daha iyi modellemek amacıyla yeni dağılımlar önerilmektedir. Bu çalışmada Lomax dağılımının sağdan kesilmesi ile elde edilen yeni olasılık dağılımı üzerinde durulmuş ve çeşitli istatistiksel özellikleri ortaya çıkarılmıştır. Uygulama kısmında ise, 137 ülkedeki HIV bulaşmış kişilerin oranlarından yararlanılmıştır. Uygulama kısmında elde edilen sonuca göre, sağdan kesilmiş Lomax (SK-L) dağılımı karşılaştırılan diğer dağılımlara göre daha iyi bir sonuç verdiği görülmektedir.

Kaynakça

- [1]. Hahn, G. J., Shapiro, S. S. 1967. Statistical models in engineering (No. TA340 H3).
- [2]. Bentley, J. L., McIlroy, M. D. 1993. Engineering a sort function. Software: Practice and Experience, 23(11), 1249-1265.
- [3]. Escobar, L. A., Meeker, W. Q. 1998. Fisher information matrices with censoring, truncation, and explanatory variables. Statistica Sinica, 221-237.
- [4]. Çakmakyapan, S. 2017. Genelleştirilmiş olasılık dağılımları üzerine bir çalışma, Hacettepe Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, İstatistik Anabilim Dalı Doktora Tezi.
- [5]. Epstein, B. 1954. Truncated life tests in the exponential case. The Annals of Mathematical Statistics, 555-564.
- [6]. Baklizi, A. 2020. Interval estimation of quantiles and reliability in the two-parameter exponential distribution based on records. Mathematical Population Studies, 27(3), 175-183.
- [7]. Balakrishnan, N., Leiva, V., Lopez, J. 2007. Acceptance sampling plans from truncated life tests based on the generalized Birnbaum-Saunders distribution. Communications in Statistics — Simulation and Computation, 36(3), 643-656.
- [8]. Rosaiah, K., Kantam, R. R. L. 2005. Acceptance sampling based on the inverse Rayleigh distribution. Economic Quality Control, 20(2), 277-286.
- [9]. Srinivasa Rao, G., Kantam, R. R. L. 2012. Two-Stage Estimation in Log-Logistic Model. Pakistan Journal of Statistics, 28(3), 331-339.
- [10]. Singh, S., Tripathi, Y. M. 2018. Estimating the parameters of an inverse Weibull distribution under progressive type-I interval censoring. Statistical Papers, 59(1), 21-56.
- [11]. Al-Omari, A. I. 2018. Acceptance sampling plans based on truncated life tests for Sushila distribution. J. Math. Fundam. Sci., 50(1), 72-83.

- [12]. Aslam, M., Kundu, D., Jun, C. H., Ahmad, M. 2011. Time truncated group acceptance sampling plans for generalized exponential distribution. *Journal of Testing and Evaluation*, 39(4), 671-677.
- [13]. Aslam, M., Jun, C. H. 2009. A group acceptance sampling plan for truncated life test having Weibull distribution. *Journal of Applied Statistics*, 36(9), 1021-1027.
- [14]. Gui, W., Zhang, S. 2014. Acceptance sampling plans based on truncated life tests for Gompertz distribution. *Journal of Industrial Mathematics*, 1-7.
- [15]. Malathi, D., Muthulakshmi, S. 2016. Truncated life test acceptance sampling plans assuring percentile life under Gompertz distribution. *IOSR-Journal of Mathematics*, 12(2), 27-32.
- [16]. Çakmakyapan, S., Özel, G. 2021. Sağkalım ve Güvenilirlik Analizlerinde Yeni Bir Olasılık Dağılımı. *International Journal of Advances in Engineering and Pure Sciences*, 33(4), 651-659.
- [17]. Çakmakyapan, S., Özel, G. 2021. Generalized lindley family with application on wind speed data. *Pakistan Journal of Statistics and Operation Research*, 17(2), 387-397.
- [18]. Lomax, K. S. 1954. Business failures: Another example of the analysis of failure data, *Journal of the American Statistical Association*, 49, 847-852.
- [19]. Ghitany ME, Al-Awadhi FA, and Alkhalfan L (2007). Marshall–Olkin extended Lomax distribution and its application to censored data. *Communications in Statistics—Theory and Methods*, 36(10): 1855-1866. <https://doi.org/10.1080/0361092060>
- [20]. Artur J. Lemonte and Gauss M. Cordeiro. An extended lomax distribution. *Statistics*, 47(4):800—816, 2013.
- [21]. Mundher A. Khaleel, Mohammed T. Ahmed, Adebowale O. Adejumo, and Oluwole A. Odetunmbi. A new generalization of the lomax distribution with increasing, decreasing, and constant failure rate. *Modelling and Simulation in Engineering*, 2017:1—6, 2017.
- [22]. Cordeiro GM, Ortega EM, and Popović BV (2015). The Gamma Lomax distribution. *Journal of Statistical Computation and Simulation*, 85(2): 305-319. <https://doi.org/10.1080/00949655.2013.822869>.
- [23]. Rady EHA, Hassanein WA, and Elhaddad TA (2016). The power Lomax distribution with an application to bladder cancer data. *SpringerPlus*, 5: 1838. <https://doi.org/10.1186/s40064-016-3464-y>
- [24]. Hassan AS and Nassr SG (2018). Power Lomax poisson distribution: Properties and estimation. *Journal of Data Science*, 18(1): 105-128. [https://doi.org/10.6339/JDS.201801_16\(1\).0007](https://doi.org/10.6339/JDS.201801_16(1).0007)
- [25]. Hassan AS and Abd-Allah M (2018). Exponentiated Weibull Lomax distribution: Properties and estimation. *Journal of Data Science*, 16(2): 277-298. [https://doi.org/10.6339/JDS.201804_16\(2\).0004](https://doi.org/10.6339/JDS.201804_16(2).0004)
- [26]. Hassan A, Elgarhy M, and Mohamed R (2020). Statistical properties and estimation of type II half logistic Lomax distribution. *Thailand Statistician*, 18(3): 290-305.
- [27]. Ben-Israel, A., 1966. A Newton-Raphson method for the solution of systems of equations. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 15(2), 243-252.
- [28]. Marinho P.R.D, Silva R.B., Bourguignon M., Cordeiro G.M. and Nadarajah S. 2019. AdequacyModel: An R package for probability distributions and general purpose optimization. *PLoS ONE* 14(8): e0221487. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0221487>.
- [29]. <https://www.R-project.org/> (19.04.2022)
- [30]. Rushton, J. P., Templer, D. I. 2009. National differences in intelligence, crime, income, and skin color. *Intelligence*, 37(4), 341-346.

Bicomplex Numbers with respect to the Geometric Calculus and Some Inequalities

Nilay Değirmen¹, Birsen Sağır^{2*}

*¹ Ondokuz Mayıs University, Faculty of Art and Sciences, Department of Mathematics, SAMSUN

² Ondokuz Mayıs University, Faculty of Art and Sciences, Department of Mathematics, SAMSUN

(Alınış / Received: 22.03.2022, Kabul / Accepted: 03.06.2022, Online Yayınlanma / Published Online: 23.08.2022)

Keywords

Geometric Calculus,
Non-Newtonian Bicomplex
Number,
Non-Newtonian Complex
Number,
Inequalities

Abstract: In this paper, we deal with complex and bicomplex numbers with respect to the geometric calculus, and we obtain the set of complex numbers with respect to the geometric calculus $\mathbb{C}(GC)$ is a field and the set of bicomplex numbers with respect to the geometric calculus $\mathbb{BC}(GC)$ is a vector space on the field $\mathbb{C}(GC)$ by defining addition and multiplication operations on the sets of such numbers. Also, we give the concepts of norm, metric, sequence, convergence of a sequence, Cauchy sequence and completeness in the settings $\mathbb{C}(GC)$ and $\mathbb{BC}(GC)$. Moreover, we discuss bicomplex versions with respect to geometric calculus of some well-known inequalities. This paper is a new and important addition to the current literature thanks to its applications in different areas and the obtained results unify, private and complement the corresponding results.

Geometrik Kalkülüse göre Bikompleks Sayılar ve Bazı Eşitsizlikler

Anahtar Kelimeler

Geometrik Kalkülüs,
Non-Newtonian Bikompleks
Sayı,
Non-Newtonian Kompleks
Sayı,
Eşitsizlikler

Öz: Bu makalede, geometrik kalkülüse göre kompleks sayıları ve bikompleks sayıları ele aldık ve böyle sayılardan oluşan kümeler üzerinde toplama ve çarpma işlemlerini tanımlayarak geometrik kalkülüse göre $\mathbb{C}(GC)$ kompleks sayılar kümesinin bir cisim olduğunu ve geometrik kalkülüse göre $\mathbb{BC}(GC)$ bikompleks sayılar kümesinin $\mathbb{C}(GC)$ cismi üzerinde bir vektör uzayı olduğunu elde ettik. Ayrıca $\mathbb{C}(GC)$ ve $\mathbb{BC}(GC)$ kurulumlarında norm, metrik, dizi, dizinin yakınsaklığı, Cauchy dizisi ve tamlık kavramlarını verdik. Diğer yandan, bazı iyi bilinen eşitsizliklerin geometrik kalkülüse göre bikompleks versiyonlarını tartıştık. Bu makale, farklı alanlardaki uygulamaları ve elde edilen sonuçların birleştirilmesi, özelleştirilmesi ve ilgili sonuçları tamamlaması sayesinde mevcut literatüre yeni ve önemli bir katkıdır.

*Corresponding Author, email: bduyar@omu.edu.tr

1. Introduction

Corrado Segre [1] presented the concept of a bicomplex number in 1892. After that, Price [2] published a book on bicomplex numbers and bicomplex functions. Hereupon, Alpay et al. in [3] gave a clear and general survey of bicomplex functional analysis and additionally put forward some new ideas and results.

In 1972, Grossman and Katz [4] laid the foundations of non-newtonian calculus which modify the calculi initiated by Gottfried Wilhelm Leibnitz and Isaac Newton in the 17th century. A generator is a one-to-one function $\alpha: \mathbb{R} \rightarrow A \subset \mathbb{R}$. The set $\alpha(\mathbb{R})$ is denoted by $\mathbb{R}(N)$ or \mathbb{R}_α and is called non-Newtonian real line. For example, the identity function I generates classical arithmetic and the exponential function \exp generates

geometric arithmetic. So, the results obtained with respect to non-Newtonian calculus are stronger than those of classical calculus.

Each choice of specific isomorphisms for the generators α and β creates a $*$ -calculus [5]. Geometric calculus obtained by choosing I instead of the generator α and \exp instead of the generator β ; that is, $\alpha(u) = u$ and $\beta(u) = e^u$ for all $u \in \mathbb{R}$ is one of the most popular $*$ -calculi and has some attractive applications. In this situation, \mathbb{R}_α turns into \mathbb{R} and \mathbb{R}_β turns into $\mathbb{R}_{\exp} = \{e^u : u \in \mathbb{R}\}$. Geometric calculus has huge applications in problems related growth, price elasticity, economy and numerical approximations problems.

Many investigators have published some papers on extensions and generalizations in different ways on non-Newtonian calculus. In the literature, there are great contributions to non-Newtonian calculus and their applications some of which can be seen in Stanley [6], C'ordova-Lepe [7], Bashirov et al. [8,9], Uzer [10], Bashirov and Rıza [11], Mısırlı and Gurefe [12], Çakmak and Başar [13,14], Tekin and Başar [15], Kadak and Efe [16], Duyar et al. [17], Boruah and Hazarika [18,19,20], Güngör [21] etc.

Our first study on non-Newtonian bicomplex analysis is [22] in which we discussed non-Newtonian bicomplex numbers and non-Newtonian bicomplex versions of some well-known inequalities. Also, Sager and Sağır [23] constructed vector spaces $L_p(\mathbb{BC}(N))$ and showed that these vector spaces are Banach with the $*$ -norm $\|\cdot\|_{2,p(\mathbb{BC}(N))}$. Besides, in [24], we derived some elementary topological and geometric properties of $L_p(\mathbb{BC}(N))$.

Motivated by above studies, the focus of this study is giving complex and bicomplex numbers with respect to geometric calculus and examining some inequalities for such numbers. In Section 2, we give some required definitions and fundamental facts. In Section 3, we introduce the notion of a complex number with respect to the geometric calculus and then obtain that the set of these numbers is a Banach space according to the norm $\|\cdot\|_1^{GC}$. Also, we investigate some properties and inequalities by defining bicomplex numbers according to the geometric calculus.

2. Material and Method

Now, we briefly mention several known concepts on non-Newtonian calculus. The details can be found in [4,5,25]. Let α and β be arbitrarily determined generators which map the set \mathbb{R} to A and B respectively and $*$ -calculus also be the ordered pair of arithmetics (α -arithmetic, β -arithmetic). We will use the following symbols and operations:

	α -arithmetic	β -arithmetic
Realm	$A (= \mathbb{R}_\alpha = \mathbb{R}(N)_\alpha = \{\alpha(s) : s \in \mathbb{R}\})$	$B (= \mathbb{R}_\beta = \mathbb{R}(N)_\beta)$
Summation	$s \dot{+} t = \alpha \{ \alpha^{-1}(s) + \alpha^{-1}(t) \}$	$\ddot{+}$
Subtraction	$s \dot{-} t = \alpha \{ \alpha^{-1}(s) - \alpha^{-1}(t) \}$	$\ddot{-}$
Multiplication	$s \dot{\times} t = \alpha \{ \alpha^{-1}(s) \times \alpha^{-1}(t) \}$	$\ddot{\times}$
Division	$s \dot{/} t = \frac{s}{t} \alpha = \alpha \left\{ \frac{\alpha^{-1}(s)}{\alpha^{-1}(t)} \right\} \left(t \neq \dot{0} \right)$	$\ddot{/}$
Ordering	$s \dot{\leq} t \Leftrightarrow \alpha^{-1}(s) \leq \alpha^{-1}(t)$	$\ddot{\leq}$

α -absolute value of $s \in \mathbb{R}(N)_\alpha$ is characterized by

$$|s|_{\alpha} = \alpha(|\alpha^{-1}(s)|) = \begin{cases} s & \text{if } s \dot{>} \dot{0} \\ \dot{0} & \text{if } s = \dot{0} \\ \dot{0} \dot{-} s & \text{if } s \dot{<} \dot{0} \end{cases} .$$

If α and β are chosen as one of I and \exp , the following special calculuses are obtained.

Calculus	α (arguments)	β (values)
Classic	I	I
Geometric	I	\exp
Anageometric	\exp	I
Bigeometric	\exp	\exp

In geometric calculus, the operations in $\mathbb{R}_{\beta} = \mathbb{R}_{\exp}$ are as follows:

Geometric addition	$e^x +_{\exp} e^y = e^{\ln e^x + \ln e^y} = e^{x+y}$
Geometric subtraction	$e^x -_{\exp} e^y = e^{\ln e^x - \ln e^y} = e^{x-y}$
Geometric multiplicaiton	$e^x \times_{\exp} e^y = e^{\ln e^x \cdot \ln e^y} = e^{xy}$
Geometric division ($y \neq e^0$)	$\frac{e^x}{e^y}_{\exp} = e^{\frac{\ln e^x}{\ln e^y}} = e^{\frac{x}{y}}$
Geometric ordering	$e^x <_{\exp} e^y \Leftrightarrow \ln e^x < \ln e^y \Leftrightarrow x < y$

Also, \exp - absolute value of a number $x \in \mathbb{R}_{\exp}$ is as follows:

$$|x|_{\exp} = e^{|\ln x|} = \begin{cases} x & \text{if } x >_{\exp} e^0 \\ e^0 & \text{if } x = e^0 \\ e^0 -_{\exp} x & \text{if } x <_{\exp} e^0 \end{cases} = \begin{cases} x & \text{if } x > 1 \\ 1 & \text{if } x = 1. \\ \frac{1}{x} & \text{if } x < 1 \end{cases}$$

The isomorphism from α -arithmetic to β -arithmetic is the unique function ι (iota) and $\iota: A \rightarrow B$ has the following three properties:

1. ι is injective,
2. ι is surjective,
3. For all $s, t \in A$,

$$\begin{aligned} \iota(s \dot{+} t) &= \iota(s) \ddot{+} \iota(t), \\ \iota(s \dot{-} t) &= \iota(s) \ddot{-} \iota(t), \\ \iota(s \dot{\times} t) &= \iota(s) \ddot{\times} \iota(t), \\ \iota(s \dot{/} t) &= \iota(s) \ddot{/} \iota(t), \quad t \neq \dot{0} \\ s \dot{<} t &\Leftrightarrow \iota(s) \ddot{<} \iota(t). \end{aligned}$$

It turns out that $\iota(s) = \beta\{\alpha^{-1}(s)\}$ for every number $s \in A$.

Based on the definitions above, the concept of a non-Newtonian complex number is defined by Tekin and Başar in [15] as follows:

Let $\dot{a} \in \left(A, \dot{+}, \dot{-}, \dot{\times}, \dot{/}, \dot{\leq} \right)$ and $\ddot{b} \in \left(B, \ddot{+}, \ddot{-}, \ddot{\times}, \ddot{/}, \ddot{\leq} \right)$ be arbitrarily chosen elements from corresponding

arithmetics. Then, the ordered pair $\left(\overset{\cdot}{a}, \overset{\cdot\cdot}{b}\right)$ is called as a \ast - complex numbers (non-Newtonian complex numbers) and is denoted by \mathbb{C}^* or $\mathbb{C}(N)$.

In the rest of the study, when necessary we will use the abbreviations “w.r.t.” and “w.r.t.g.c.” for the statements “with respect to” and “with respect to the geometric calculus”, respectively.

The set $\mathbb{C}(N)$ forms a field w.r.t. \oplus_1 and \otimes_1 for all $z_1^* = \left(\overset{\cdot}{a}_1, \overset{\cdot\cdot}{b}_1\right)$, $z_2^* = \left(\overset{\cdot}{a}_2, \overset{\cdot\cdot}{b}_2\right) \in \mathbb{C}(N)$ defined as

$$\begin{aligned} \oplus_1 : \mathbb{C}(N) \times \mathbb{C}(N) &\rightarrow \mathbb{C}(N), \\ (z_1^*, z_2^*) &\rightarrow z_1^* \oplus_1 z_2^* = \left(\overset{\cdot}{a}_1, \overset{\cdot\cdot}{b}_1\right) \oplus_1 \left(\overset{\cdot}{a}_2, \overset{\cdot\cdot}{b}_2\right) = \left(\overset{\cdot}{a}_1 + \overset{\cdot}{a}_2, \overset{\cdot\cdot}{b}_1 + \overset{\cdot\cdot}{b}_2\right), \\ \otimes_1 : \mathbb{C}(N) \times \mathbb{C}(N) &\rightarrow \mathbb{C}(N), \\ (z_1^*, z_2^*) &\rightarrow z_1^* \otimes_1 z_2^* = \left(\overset{\cdot}{a}_1, \overset{\cdot\cdot}{b}_1\right) \otimes_1 \left(\overset{\cdot}{a}_2, \overset{\cdot\cdot}{b}_2\right) = \left(\alpha(a_1 a_2 - b_1 b_2), \beta(a_1 b_2 + b_1 a_2)\right). \end{aligned}$$

On the other hand, a bicomplex number is defined as $z = z_1 + jz_2$ where $j^2 = -1$, $ij = ji$, z_1 and z_2 are complex numbers, and i and j are independent imaginary units. Also, the set of bicomplex numbers is denoted by \mathbb{BC} and the set forms a Banach space with the following operations $+$, \cdot and the norm $|\cdot|$

$$\begin{aligned} z + w &= (z_1 + jz_2) + (w_1 + jw_2) = (z_1 + w_1) + j(z_2 + w_2), \\ \lambda.z &= \lambda.(z_1 + jz_2) = \lambda z_1 + j\lambda z_2, \end{aligned}$$

$$|\cdot| : \mathbb{BC} \rightarrow \mathbb{R}, \quad z \rightarrow |z| = \sqrt{|z_1|^2 + |z_2|^2}$$

for all $z = z_1 + jz_2, w = w_1 + jw_2 \in \mathbb{BC}$ and for all $\lambda \in \mathbb{R}$ [2].

In [22], we defined the concept of a non-Newtonian bicomplex number which forms the basis of this study, as follows:

Let $\overset{\cdot}{a}, \overset{\cdot}{c} \in \left(A, +, -, \times, /, \leq\right)$ and $\overset{\cdot\cdot}{b}, \overset{\cdot\cdot}{d} \in \left(B, +, -, \times, /, \leq\right)$. Then, $\left(\overset{\cdot}{a}, \overset{\cdot\cdot}{b}, \overset{\cdot}{c}, \overset{\cdot\cdot}{d}\right)$ is called as a \ast -bicomplex number (non-Newtonian bicomplex number). The set of these numbers is denoted by \mathbb{BC}^* or $\mathbb{BC}(N)$; that is,

$$\begin{aligned} \mathbb{BC}(N) &= \left\{ \left(\overset{\cdot}{a}, \overset{\cdot\cdot}{b}, \overset{\cdot}{c}, \overset{\cdot\cdot}{d}\right) : \overset{\cdot}{a}, \overset{\cdot}{c} \in A \subseteq \mathbb{R}, \overset{\cdot\cdot}{b}, \overset{\cdot\cdot}{d} \in B \subseteq \mathbb{R} \right\} \\ &= \left\{ (z^*, w^*) : z^* = \left(\overset{\cdot}{a}, \overset{\cdot\cdot}{b}\right), w^* = \left(\overset{\cdot}{c}, \overset{\cdot\cdot}{d}\right), \overset{\cdot}{a}, \overset{\cdot}{c} \in A \subseteq \mathbb{R}, \overset{\cdot\cdot}{b}, \overset{\cdot\cdot}{d} \in B \subseteq \mathbb{R} \right\}. \end{aligned}$$

Also, $\mathbb{BC}(N)$ forms a vector space over the field $\mathbb{C}(N)$ and a ring w.r.t. the algebraic operations addition \oplus_2 , multiplication \otimes_2 and scalar multiplication \odot_2 defined on $\mathbb{BC}(N)$ as follows:

$$\begin{aligned} \oplus_2 : \mathbb{BC}(N) \times \mathbb{BC}(N) &\rightarrow \mathbb{BC}(N), \\ (\zeta_1^*, \zeta_2^*) &\rightarrow \zeta_1^* \oplus_2 \zeta_2^* = (z_1^*, w_1^*) \oplus_2 (z_2^*, w_2^*) = (z_1^* \oplus_1 z_2^*, w_1^* \oplus_1 w_2^*), \\ \otimes_2 : \mathbb{BC}(N) \times \mathbb{BC}(N) &\rightarrow \mathbb{BC}(N), \\ (\zeta_1^*, \zeta_2^*) &\rightarrow \zeta_1^* \otimes_2 \zeta_2^* = (z_1^*, w_1^*) \otimes_2 (z_2^*, w_2^*) = \left((z_1^* \otimes_1 z_2^*) \otimes_1 (w_1^* \otimes_1 w_2^*), (z_1^* \otimes_1 w_2^*) \oplus_1 (z_2^* \otimes_1 w_1^*) \right), \\ \odot_2 : \mathbb{C}(N) \times \mathbb{BC}(N) &\rightarrow \mathbb{BC}(N), \\ (z^*, \zeta_1^*) &\rightarrow z^* \odot_2 \zeta_1^* = z^* \odot_2 (z_1^*, w_1^*) = (z^* \otimes_1 z_1^*, z^* \otimes_1 w_1^*) \end{aligned}$$

where $\zeta_1^* = (z_1^*, w_1^*)$, $\zeta_2^* = (z_2^*, w_2^*) \in \mathbb{BC}(N)$ and $z^* \in \mathbb{C}(N)$.

3. Results

In this part, we obtain new concepts and results by rewriting some definitions and concepts given in the second part w.r.t.g.c.

3.1. Complex numbers with respect the geometric calculus

In this section, we examine the concept of a non-Newtonian complex number and some related properties given by Tekin and Başar w.r.t.g.c.

Definition 3.1.1. The ordered pair $(a, e^b) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}_{\exp}$ is called as a complex number w.r.t.g.c. The set of all complex numbers w.r.t.g.c. is denoted by $\mathbb{C}(GC)$ that is,

$$\mathbb{C}(GC) = \{(a, e^b) : a, b \in \mathbb{R}\}.$$

Theorem 3.1.2. The set of complex numbers w.r.t.g.c. $\mathbb{C}(GC)$ forms a field w.r.t. addition $\oplus_{1,GC}$ and multiplication $\otimes_{1,GC}$ for all $z_1^{GC} = (a_1, e^{b_1}), z_2^{GC} = (a_2, e^{b_2}) \in \mathbb{C}(GC)$ defined as

$$\begin{aligned} \oplus_{1,GC} : \mathbb{C}(GC) \times \mathbb{C}(GC) &\rightarrow \mathbb{C}(GC), \\ (z_1^{GC}, z_2^{GC}) &\rightarrow z_1^{GC} \oplus_{1,GC} z_2^{GC} = (a_1, e^{b_1}) \oplus_{1,GC} (a_2, e^{b_2}) = (a_1 + a_2, e^{b_1+b_2}) \\ \otimes_{1,GC} : \mathbb{C}(GC) \times \mathbb{C}(GC) &\rightarrow \mathbb{C}(GC), \\ (z_1^{GC}, z_2^{GC}) &\rightarrow z_1^{GC} \otimes_{1,GC} z_2^{GC} = (a_1, e^{b_1}) \otimes_{1,GC} (a_2, e^{b_2}) = (a_1 a_2 - b_1 b_2, e^{a_1 b_2 + b_1 a_2}). \end{aligned}$$

Proof. The proof depends on definitions of algebraic operations $\oplus_{1,GC}$ and $\otimes_{1,GC}$.

Definition 3.1.3. The distance d_1^{GC} between two elements $z_1^{GC} = (a_1, e^{b_1}), z_2^{GC} = (a_2, e^{b_2}) \in \mathbb{C}(GC)$ of the set $\mathbb{C}(GC)$ is defined by

$$\begin{aligned} d_1^{GC} : \mathbb{C}(GC) \times \mathbb{C}(GC) &\rightarrow \mathbb{R}_{\exp}, \\ (z_1^{GC}, z_2^{GC}) &\rightarrow d_1^{GC}(z_1^{GC}, z_2^{GC}) = d_1^{GC}((a_1, e^{b_1}), (a_2, e^{b_2})) = e^{\sqrt{(a_1-a_2)^2 + (b_1-b_2)^2}}. \end{aligned}$$

Definition 3.1.4. The number $d_1^{GC}(z^{GC}, 0^{GC})$ is called norm of $z^{GC} = (a, e^b)$, denoted by $\|z^{GC}\|_1^{GC}$, that is,

$$\|z^{GC}\|_1^{GC} = d_1^{GC}(z^{GC}, 0^{GC}) = d_1^{GC}((a, e^b), (0, e^0)) = e^{\sqrt{a^2 + b^2}}.$$

Definition 3.1.5. A sequence (s_n^{GC}) in $\mathbb{C}(GC)$ is a function defined by $s : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{C}(GC)$. This sequence is called a complex sequence w.r.t.g.c. It converges to a limit $s^{GC} \in \mathbb{C}(GC)$ w.r.t. the metric d_1^{GC} if and only if for every $\varepsilon >_{GC} e^0$ there is a $n_0 \in \mathbb{N}$ such that $d_1^{GC}(s_n^{GC}, s^{GC}) <_{GC} \varepsilon$ for all $n \geq n_0$. It is denoted by $\lim_{n \rightarrow \infty}^{1,GC} s_n^{GC} = s^{GC}$. The sequence (s_n^{GC}) is Cauchy w.r.t. d_1^{GC} if and only if for every $\varepsilon >_{GC} e^0$ there is a $n_0 \in \mathbb{N}$ such that $d_1^{GC}(s_n^{GC}, s_m^{GC}) <_{GC} \varepsilon$ for all $n, m \geq n_0$.

Theorem 3.1.6. Let $(s_n^{GC}) = ((a_n, e^{b_n}))$ be a complex sequence w.r.t.g.c. and $s^{GC} = (a, e^b)$. Then, $\lim_{n \rightarrow \infty}^{1,GC} s_n^{GC} = s^{GC}$ if and only if $\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = a$ and $\lim_{n \rightarrow \infty} b_n = b$.

Proof. The proof follows from definitions of complex sequences w.r.t.g.c.

Definition 3.1.7. Let (s_n^{GC}) be a complex sequence w.r.t.g.c. Then, the infinite sum

$$\sum_{\oplus_{1,GC}}^{\infty} s_k^{GC} = s_1^{GC} \oplus_{1,GC} s_2^{GC} \oplus_{1,GC} \dots \oplus_{1,GC} s_n^{GC} \oplus_{1,GC} \dots \quad (1)$$

is called a complex series w.r.t.g.c. Define the complex sequence w.r.t.g.c.

$S : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{C}(GC)$, $n \rightarrow S_n^{GC} = \sum_{\oplus_{1,GC}}^n s_k^{GC}$. The infinite series (1) converges to a limit $S^{GC} \in \mathbb{C}(GC)$ w.r.t. the

metric d_1^{GC} if and only if (S_n^{GC}) converges to $S^{GC} \in \mathbb{C}(GC)$ w.r.t. the metric d_1^{GC} . Then, S^{GC} is called the sum

of bicomplex series w.r.t.g.c., and $\sum_{\oplus_{1,GC}}^{\infty} s_k^{GC} = S^{GC}$.

Theorem 3.1.8. Let $(s_n^{GC}) = ((a_n, e^{b_n}))$ be a complex sequence w.r.t.g.c., $S^{GC} = (a, e^b) \in \mathbb{C}(GC)$. Then,

$$\sum_{\oplus_{1,GC}}^{\infty} s_k^{GC} = S^{GC} \text{ if and only if } \sum_{k=1}^{\infty} a_k = a \text{ and } \sum_{k=1}^{\infty} b_k = b.$$

Proof. The proof of this theorem is directly seen from the definitions of convergence for complex series w.r.t.g.c.

Theorem 3.1.9. $\mathbb{C}(GC)$ is complete w.r.t. the metric d_1^{GC} .

Proof. Let $(s_n^{GC}) = ((a_n, e^{b_n}))$ be a bicomplex Cauchy sequence w.r.t.g.c. Then, to each $\varepsilon >_{\text{exp}} e^0$ there

corresponds a natural number $n_0 \in \mathbb{N}$ such that $d_1^{GC}(s_n^{GC}, s_m^{GC}) <_{\text{exp}} \varepsilon$ for all $n, m \geq n_0$. So,

$d_1^{GC}(s_n^{GC}, s_m^{GC}) = e^{\sqrt{(a_n - a_m)^2 + (b_n - b_m)^2}} <_{\text{exp}} \varepsilon$. This implies that $\sqrt{(a_n - a_m)^2 + (b_n - b_m)^2} < \ln \varepsilon$ and so

$|a_n - a_m| < \ln \varepsilon$, $|b_n - b_m| < \ln \varepsilon$. Then, since (a_n) and (b_n) are Cauchy sequences in \mathbb{R} and \mathbb{R} is Banach,

there exist $a, b \in \mathbb{R}$ such that $\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = a$ and $\lim_{n \rightarrow \infty} b_n = b$. So, we obtain

$$d_1^{GC}(s_n^{GC}, s_m^{GC}) = e^{\sqrt{(a_n - a)^2 + (b_n - b)^2}} \leq_{\text{exp}} e^{\sqrt{(a_n - a)^2} + \sqrt{(b_n - b)^2}} = e^{|a_n - a| + |b_n - b|} < e^{\ln \varepsilon} = \varepsilon,$$

This means that $\lim_{n \rightarrow \infty} s_n^{GC} = s^{GC}$. Then, $\mathbb{C}(GC)$ is complete w.r.t. the metric d_1^{GC} .

Corollary 3.1.10. $\mathbb{C}(GC)$ is Banach w.r.t. the norm $\|\cdot\|_1^{GC}$.

Proof. The proof is based on Theorem 3.1.9.

3.2. Bicomplex numbers with respect to geometric calculus and some inequalities

In this section, we consider the concept of a non-Newtonian bicomplex number w.r.t.g.c. and give some definitions

about it. Also, we obtain that $\mathbb{BC}(GC)$ is a Banach space w.r.t. the norm $\|\cdot\|_2^{GC}$ by proving some inequalities

w.r.t. the norm $\|\cdot\|_2^{GC}$.

Definition 3.2.1. The point (a, e^b, c, e^d) is called as a bicomplex number w.r.t.g.c. The set of all bicomplex numbers w.r.t.g.c. is denoted by $\mathbb{BC}(GC)$ that is,

$$\mathbb{BC}(GC) = \left\{ (a, e^b, c, e^d) : a, b, c, d \in \mathbb{R} \right\} = \left\{ (z^{GC}, w^{GC}) : z^{GC} = (a, e^b), w^{GC} = (c, e^d) \in \mathbb{C}(GC) \right\}.$$

Theorem 3.2.2. The set $\mathbb{BC}(GC)$ forms a vector space over the field $\mathbb{C}(GC)$ and a ring w.r.t. addition $\oplus_{2,GC}$, multiplication $\otimes_{2,GC}$ and scalar multiplication $\odot_{2,GC}$ for all $\zeta_1^{GC} = (z_1^{GC}, w_1^{GC}), \zeta_2^{GC} = (z_2^{GC}, w_2^{GC}) \in \mathbb{BC}(GC)$ and $z^{GC} \in \mathbb{C}(GC)$ defined as

$$\begin{aligned} \oplus_{2,GC} : \mathbb{BC}(GC) \times \mathbb{BC}(GC) &\rightarrow \mathbb{BC}(GC), \\ (\zeta_1^{GC}, \zeta_2^{GC}) &\rightarrow \zeta_1^{GC} \oplus_{2,GC} \zeta_2^{GC} = (z_1^{GC}, w_1^{GC}) \oplus_{2,GC} (z_2^{GC}, w_2^{GC}) = (z_1^{GC} \oplus_{1,GC} z_2^{GC}, w_1^{GC} \oplus_{1,GC} w_2^{GC}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \otimes_{2,GC} : \mathbb{BC}(GC) \times \mathbb{BC}(GC) &\rightarrow \mathbb{BC}(GC), \\ (\zeta_1^{GC}, \zeta_2^{GC}) &\rightarrow \zeta_1^{GC} \otimes_{2,GC} \zeta_2^{GC} = (z_1^{GC}, w_1^{GC}) \otimes_{2,GC} (z_2^{GC}, w_2^{GC}) \\ &= \left((z_1^{GC} \otimes_{1,GC} z_2^{GC}) \Theta_{1,GC} (w_1^{GC} \otimes_{1,GC} w_2^{GC}), (z_1^{GC} \otimes_{1,GC} w_2^{GC}) \oplus_{1,GC} (z_2^{GC} \otimes_{1,GC} w_1^{GC}) \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \odot_{2,GC} : \mathbb{C}(GC) \times \mathbb{BC}(GC) &\rightarrow \mathbb{BC}(GC), \\ (z^{GC}, \zeta_1^{GC}) &\rightarrow z^{GC} \odot_{2,GC} \zeta_1^{GC} = z^{GC} \odot_{2,GC} (z_1^{GC}, w_1^{GC}) = (z^{GC} \otimes_{1,GC} z_1^{GC}, z^{GC} \otimes_{1,GC} w_1^{GC}). \end{aligned}$$

Proof. The proof of Theorem 3.2.2 follows from definitions of algebraic operations $\oplus_{2,GC}$, $\otimes_{2,GC}$ and $\odot_{2,GC}$.

Definition 3.2.3. The distance d_2^{GC} between two elements $\zeta_1^{GC} = (z_1^{GC}, w_1^{GC}), \zeta_2^{GC} = (z_2^{GC}, w_2^{GC}) \in \mathbb{BC}(GC)$ is defined by

$$\begin{aligned} d_2^{GC} : \mathbb{BC}(GC) \times \mathbb{BC}(GC) &\rightarrow \mathbb{R}_{\exp}, \\ (\zeta_1^{GC}, \zeta_2^{GC}) &\rightarrow d_2^{GC}(\zeta_1^{GC}, \zeta_2^{GC}) = e^{\sqrt{\ln \left[\left(\|z_1^{GC} \Theta_{1,GC} z_2^{GC}\|_1^{GC} \right)^{2\exp} + \exp \left(\|w_1^{GC} \Theta_{1,GC} w_2^{GC}\|_1^{GC} \right)^{2\exp} \right]}}. \end{aligned}$$

Theorem 3.2.4. The function d_2^{GC} is a metric on $\mathbb{BC}(GC)$.

Proof. It is clear that $d_2^{GC}(\zeta_1^{GC}, \zeta_2^{GC}) \geq_{\exp} e^0$, $d_2^{GC}(\zeta_1^{GC}, \zeta_2^{GC}) = d_2^{GC}(\zeta_2^{GC}, \zeta_1^{GC})$ for all $\zeta_1^{GC}, \zeta_2^{GC} \in \mathbb{BC}(GC)$ and $d_2^{GC}(\zeta_1^{GC}, \zeta_2^{GC}) = e^0 \Leftrightarrow \zeta_1^{GC} = \zeta_2^{GC}$. On the other hand,

$$\begin{aligned} d_2^{GC}(\zeta_1^{GC}, \zeta_2^{GC}) &= e^{\sqrt{\ln \left[\left(\|z_1^{GC} \Theta_{1,GC} z_2^{GC}\|_1^{GC} \right)^{2\exp} + \exp \left(\|w_1^{GC} \Theta_{1,GC} w_2^{GC}\|_1^{GC} \right)^{2\exp} \right]}} \\ &= e^{\sqrt{\ln \left[\left(\|z_1^{GC} \Theta_{1,GC} z_3^{GC}\|_1^{GC} \right) \Theta_{1,GC} \left(\|z_3^{GC} \Theta_{1,GC} z_2^{GC}\|_1^{GC} \right)^{2\exp} + \exp \left(\|w_1^{GC} \Theta_{1,GC} w_3^{GC}\|_1^{GC} \right) \Theta_{1,GC} \left(\|w_3^{GC} \Theta_{1,GC} w_2^{GC}\|_1^{GC} \right)^{2\exp} \right]}} \\ &\leq_{\exp} e^{\sqrt{\ln \left[\left(\|z_1^{GC} \Theta_{1,GC} z_3^{GC}\|_1^{GC} + \exp \left(\|z_3^{GC} \Theta_{1,GC} z_2^{GC}\|_1^{GC} \right)^{2\exp} \right) + \exp \left(\|w_1^{GC} \Theta_{1,GC} w_3^{GC}\|_1^{GC} + \exp \left(\|w_3^{GC} \Theta_{1,GC} w_2^{GC}\|_1^{GC} \right)^{2\exp} \right) \right]}} \\ &\leq_{\exp} e^{\sqrt{\ln \left[\left(\|z_1^{GC} \Theta_{1,GC} z_3^{GC}\|_1^{GC} \right)^{2\exp} + \exp \left(\|w_1^{GC} \Theta_{1,GC} w_3^{GC}\|_1^{GC} \right)^{2\exp} \right]} + \sqrt{\ln \left[\left(\|z_3^{GC} \Theta_{1,GC} z_2^{GC}\|_1^{GC} \right)^{2\exp} + \exp \left(\|w_3^{GC} \Theta_{1,GC} w_2^{GC}\|_1^{GC} \right)^{2\exp} \right]}} \\ &= d_2^{GC}(\zeta_1^{GC}, \zeta_3^{GC}) +_{\exp} d_2^{GC}(\zeta_3^{GC}, \zeta_2^{GC}) \end{aligned}$$

for all $\zeta_1^{GC} = (z_1^{GC}, w_1^{GC})$, $\zeta_2^{GC} = (z_2^{GC}, w_2^{GC}) \in \mathbb{BC}(GC)$. Then, d_2^{GC} is a metric on $\mathbb{BC}(GC)$.

Definition 3.2.5. A sequence (s_n^{GC}) in $\mathbb{BC}(GC)$ is a function defined by $s : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{BC}(GC)$. This sequence is called a bicomplex sequence w.r.t.g.c. It is convergent to a limit $s^{GC} \in \mathbb{BC}(GC)$ w.r.t. the metric d_2^{GC} if and only if for every $\varepsilon >_{\text{exp}} e^0$ there is a $n_0 \in \mathbb{N}$ such that $d_2^{GC}(s_n^{GC}, s^{GC}) <_{\text{exp}} \varepsilon$ for all $n \geq n_0$. It is denoted by $\lim_{n \rightarrow \infty}^{2,GC} s_n^{GC} = s^{GC}$. The sequence (s_n^{GC}) is Cauchy w.r.t. d_2^{GC} if and only if for every $\varepsilon >_{\text{exp}} e^0$ there is a $n_0 \in \mathbb{N}$ such that $d_2^{GC}(s_n^{GC}, s_m^{GC}) <_{\text{exp}} \varepsilon$ for all $n, m \geq n_0$.

Theorem 3.2.6. Let $(s_n^{GC}) = ((z_n^{GC}, w_n^{GC}))$ be a bicomplex sequence w.r.t.g.c. and $s^{GC} = (z^{GC}, w^{GC})$. Then, $\lim_{n \rightarrow \infty}^{2,GC} s_n^{GC} = s^{GC}$ if and only if $\lim_{n \rightarrow \infty}^{1,GC} z_n^{GC} = z^{GC}$ and $\lim_{n \rightarrow \infty}^{1,GC} w_n^{GC} = w^{GC}$.

Proof. The proof follows directly from the definitions of convergence for bicomplex sequences w.r.t.g.c.

Definition 3.2.7. Let (s_n^{GC}) be a bicomplex sequence w.r.t.g.c. Then, the infinite sum

$$\sum_{\oplus_{2,GC} k=1}^{\infty} s_k^{GC} = s_1^{GC} \oplus_{2,GC} s_2^{GC} \oplus_{2,GC} \dots \oplus_{2,GC} s_n^{GC} \oplus_{2,GC} \dots \quad (2)$$

is called a bicomplex series w.r.t.g.c. Define the bicomplex sequence w.r.t.g.c.

$S : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{BC}(GC)$, $n \rightarrow S_n^{GC} = \sum_{\oplus_{2,GC} k=1}^n s_k^{GC}$. (2) converges to a limit $S^{GC} \in \mathbb{BC}(GC)$ w.r.t. the metric d_2^{GC} if and only if (S_n^{GC}) converges to a limit $S^{GC} \in \mathbb{BC}(GC)$ w.r.t. the metric d_2^{GC} . Then, S^{GC} is called the sum of

bicomplex series w.r.t.g.c., and we $\sum_{\oplus_{2,GC} k=1}^{\infty} s_k^{GC} = S^{GC}$.

Theorem 3.2.8. Let $(s_n^{GC}) = ((z_n^{GC}, w_n^{GC}))$ be a bicomplex sequence w.r.t.g.c., $S^{GC} = (z^{GC}, w^{GC}) \in \mathbb{BC}(GC)$.

Then, $\sum_{\oplus_{2,GC} k=1}^{\infty} s_k^{GC} = S^{GC}$ if and only if $\sum_{\oplus_{1,GC} k=1}^{\infty} z_k^{GC} = z^{GC}$ and $\sum_{\oplus_{1,GC} k=1}^{\infty} w_k^{GC} = w^{GC}$.

Proof. The proof depends on definitions of convergence of bicomplex series w.r.t.g.c.

Theorem 3.2.9. $\mathbb{BC}(GC)$ is complete w.r.t. the metric d_2^{GC} .

Proof. Let $(s_n^{GC}) = ((z_n^{GC}, w_n^{GC}))$ be a bicomplex Cauchy sequence w.r.t.g.c. Then, for every $\varepsilon >_{\text{exp}} e^0$ there is a $n_0 \in \mathbb{N}$ such that $d_2^{GC}(s_n^{GC}, s_m^{GC}) <_{\text{exp}} \varepsilon$ for all $n, m \geq n_0$. So,

$d_2^{GC}(s_n^{GC}, s_m^{GC}) = e^{\sqrt{\ln \left[\left(\left\| z_n^{GC} \Theta_{1,GC} z_m^{GC} \right\|^{GC} \right)^{2_{\text{exp}}} + \left(\left\| w_n^{GC} \Theta_{1,GC} w_m^{GC} \right\|^{GC} \right)^{2_{\text{exp}}} \right]}} <_{\text{exp}} \varepsilon$. This implies that

$\sqrt{\ln \left[\left(\left\| z_n^{GC} \Theta_{1,GC} z_m^{GC} \right\|^{GC} \right)^{2_{\text{exp}}} + \left(\left\| w_n^{GC} \Theta_{1,GC} w_m^{GC} \right\|^{GC} \right)^{2_{\text{exp}}} \right]} < \ln \varepsilon$ and so $\left\| z_n^{GC} \Theta_{1,GC} z_m^{GC} \right\|^{GC} < e^{\frac{\ln \varepsilon}{\sqrt{2}}}$,

$\left\| w_n^{GC} \Theta_{1,GC} w_m^{GC} \right\|^{GC} < e^{\frac{\ln \varepsilon}{\sqrt{2}}}$. Then, (z_n^{GC}) and (w_n^{GC}) are Cauchy sequences w.r.t. the norm $\left\| \cdot \right\|^{GC}$. Since $\mathbb{C}(GC)$

is Banach, there exist $z^{GC}, w^{GC} \in \mathbb{C}(GC)$ such that $\lim_{n \rightarrow \infty}^{1,GC} z_n^{GC} = z^{GC}$ and $\lim_{n \rightarrow \infty}^{1,GC} w_n^{GC} = w^{GC}$. This implies that to each $\varepsilon >_{GC} e^0$ there corresponds a natural number $n_1 \in \mathbb{N}$ such that $d_1^{GC}(z_n^{GC}, z^{GC}) <_{GC} e^{\frac{\ln \varepsilon}{\sqrt{2}}}$ for all $n \geq n_1$ and there corresponds a natural number $n_2 \in \mathbb{N}$ such that $d_1^{GC}(w_n^{GC}, w^{GC}) <_{GC} e^{\frac{\ln \varepsilon}{\sqrt{2}}}$ for all $n \geq n_2$.

Then, we obtain

$$d_2^{GC}(s_n^{GC}, s^{GC}) = e^{\sqrt{\ln \left[\left(\|z_n^{GC} \Theta_{1,GC} z^{GC}\|_1^{GC} \right)^{2\exp} +_{\exp} \left(\|w_n^{GC} \Theta_{1,GC} w^{GC}\|_1^{GC} \right)^{2\exp} \right]}} <_{\exp} e^{\ln \varepsilon} = \varepsilon$$

for all $n \geq n_0 = \max\{n_1, n_2\}$. This means that $\lim_{n \rightarrow \infty}^{GC} s_n^{GC} = s^{GC}$. Then, $\mathbb{B}\mathbb{C}(GC)$ is complete w.r.t. the metric d_2^{GC} .

Definition 3.2.10. The number $d_2^{GC}(\zeta^{GC}, 0^{GC})$ is called norm of $\zeta^{GC} = (z^{GC}, w^{GC})$, denoted by $\|\cdot\|_2^{GC}$, that is,

$$\|\zeta^{GC}\|_2^{GC} = d_2^{GC}(\zeta^{GC}, 0^{GC}) = d_2^{GC}((z^{GC}, w^{GC}), (0, e^0, 0, e^0)) = e^{\sqrt{\ln \left[\left(\|z^{GC}\|_1^{GC} \right)^{2\exp} +_{\exp} \left(\|w^{GC}\|_1^{GC} \right)^{2\exp} \right]}}.$$

Corollary 3.2.11. $\mathbb{B}\mathbb{C}(GC)$ is Banach w.r.t. the norm $\|\cdot\|_2^{GC}$.

Proof. The proof is easily derived from Theorem 3.2.9.

Lemma 3.2.12. The following inequalities are satisfied:

- i. $\|\zeta_1^{GC} \Theta_{2,GC} \zeta_2^{GC}\|_2^{GC} \leq_{\exp} \|\zeta_1^{GC}\|_2^{GC} +_{\exp} \|\zeta_2^{GC}\|_2^{GC}$ for all $\zeta_1^{GC}, \zeta_2^{GC} \in \mathbb{B}\mathbb{C}(GC)$.
- ii. $\left| \|\zeta_1^{GC}\|_2^{GC} -_{\exp} \|\zeta_2^{GC}\|_2^{GC} \right|_{\exp} \leq_{\exp} \|\zeta_1^{GC} \Theta_{2,GC} \zeta_2^{GC}\|_2^{GC}$ for all $\zeta_1^{GC}, \zeta_2^{GC} \in \mathbb{B}\mathbb{C}(GC)$.
- iii. $\left| \|\zeta_1^{GC}\|_2^{GC} -_{\exp} \|\zeta_2^{GC}\|_2^{GC} \right|_{\exp} \leq_{\exp} \|\zeta_1^{GC} \oplus_{2,GC} \zeta_2^{GC}\|_2^{GC}$ for all $\zeta_1^{GC}, \zeta_2^{GC} \in \mathbb{B}\mathbb{C}(GC)$.
- iv. $\frac{\|\zeta_1^{GC} \oplus_{2,GC} \zeta_2^{GC}\|_2^{GC}}{1_{\exp} +_{\exp} \|\zeta_1^{GC} \oplus_{2,GC} \zeta_2^{GC}\|_2^{GC}} \leq_{\exp} \frac{\|\zeta_1^{GC}\|_2^{GC}}{1_{\exp} +_{\exp} \|\zeta_1^{GC}\|_2^{GC}} +_{\exp} \frac{\|\zeta_2^{GC}\|_2^{GC}}{1_{\exp} +_{\exp} \|\zeta_2^{GC}\|_2^{GC}}$ for all $\zeta_1^{GC}, \zeta_2^{GC} \in \mathbb{B}\mathbb{C}(GC)$.
- v. $\left(\sum_{\exp k=1}^n \left(\|s_k^{GC} \oplus_{2,GC} t_k^{GC}\|_2^{GC} \right)^p \right)^{\frac{1}{p} \exp} \leq_{\exp} \left(\sum_{\exp k=1}^n \left(\|s_k^{GC}\|_2^{GC} \right)^p \right)^{\frac{1}{p} \exp} +_{\exp} \left(\sum_{\exp k=1}^n \left(\|t_k^{GC}\|_2^{GC} \right)^p \right)^{\frac{1}{p} \exp}$ for $p \in \mathbb{R}_{\exp}$ with $1_{\exp} <_{\exp} p <_{\exp} \infty_{\exp} = \lim_{x \rightarrow \infty} e^x = \infty$ and $s_k^{GC}, t_k^{GC} \in \mathbb{B}\mathbb{C}(GC)$ where $k \in \{1, 2, \dots, n\}$.
(Minkowski's inequality in $\mathbb{B}\mathbb{C}(GC)$ with respect to $\|\cdot\|_2^{GC}$)

Proof.

- i. Let $\zeta_1^{GC} = (z_1^{GC}, w_1^{GC})$, $\zeta_2^{GC} = (z_2^{GC}, w_2^{GC}) \in \mathbb{B}\mathbb{C}(GC)$. Then, we have

$$\begin{aligned}
 \left\| \zeta_1^{GC} \Theta_{2,GC} \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC} &= e^{\sqrt{\ln \left[\left(\left\| \zeta_1^{GC} \Theta_{1,GC} \zeta_2^{GC} \right\|_1^{GC} \right)^{2\exp} + \exp \left(\left\| w_1^{GC} \Theta_{1,GC} w_2^{GC} \right\|_1^{GC} \right)^{2\exp} \right]}} \\
 &\leq_{\exp} e^{\sqrt{\ln \left[\left(\left\| \zeta_1^{GC} \right\|_1^{GC} \right)^{2\exp} + \exp \left(\left\| \zeta_2^{GC} \right\|_1^{GC} \right)^{2\exp} + \exp \left(\left\| w_1^{GC} \right\|_1^{GC} \right)^{2\exp} + \exp \left(\left\| w_2^{GC} \right\|_1^{GC} \right)^{2\exp} \right]}} \\
 &\leq_{\exp} e^{\sqrt{\ln \left[\left(\left\| \zeta_1^{GC} \right\|_1^{GC} \right)^{2\exp} + \exp \left(\left\| w_1^{GC} \right\|_1^{GC} \right)^{2\exp} \right]}} +_{\exp} e^{\sqrt{\ln \left[\left(\left\| \zeta_2^{GC} \right\|_1^{GC} \right)^{2\exp} + \exp \left(\left\| w_2^{GC} \right\|_1^{GC} \right)^{2\exp} \right]}} \\
 &\leq_{\exp} \left\| \zeta_1^{GC} \right\|_2^{GC} +_{\exp} \left\| \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC}.
 \end{aligned}$$

This completes the proof.

ii. Since

$$\begin{aligned}
 \left\| \zeta_1^{GC} \right\|_2^{GC} &= \left\| \zeta_1^{GC} \oplus_{2,GC} \left(\zeta_2^{GC} \Theta_{2,GC} \zeta_2^{GC} \right) \right\|_2^{GC} \\
 &= \left\| \left(\zeta_1^{GC} \Theta_{2,GC} \zeta_2^{GC} \right) \oplus_{2,GC} \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC} \\
 &\leq_{\exp} \left\| \zeta_1^{GC} \Theta_{2,GC} \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC} +_{\exp} \left\| \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC}
 \end{aligned}$$

we have

$$\left\| \zeta_1^{GC} \right\|_2^{GC} -_{\exp} \left\| \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC} \leq_{\exp} \left\| \zeta_1^{GC} \Theta_{2,GC} \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC}$$

and similarly

$$-_{\exp} \left\| \zeta_1^{GC} \Theta_{2,GC} \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC} \leq_{\exp} \left\| \zeta_1^{GC} \right\|_2^{GC} -_{\exp} \left\| \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC}.$$

This implies that $\left| \left\| \zeta_1^{GC} \right\|_2^{GC} -_{\exp} \left\| \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC} \right|_{\exp} \leq_{\exp} \left\| \zeta_1^{GC} \Theta_{2,GC} \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC}$ for all $\zeta_1^{GC}, \zeta_2^{GC} \in \mathbb{BC}(GC)$.

iii. Since

$$\begin{aligned}
 \left\| \zeta_1^{GC} \right\|_2^{GC} &= \left\| \zeta_1^{GC} \oplus_{2,GC} \left(\zeta_2^{GC} \Theta_{2,GC} \zeta_2^{GC} \right) \right\|_2^{GC} \\
 &= \left\| \left(\zeta_1^{GC} \oplus_{2,GC} \zeta_2^{GC} \right) \Theta_{2,GC} \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC} \\
 &\leq_{\exp} \left\| \zeta_1^{GC} \oplus_{2,GC} \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC} +_{\exp} \left\| \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC}
 \end{aligned}$$

from (i), we have

$$\left\| \zeta_1^{GC} \right\|_2^{GC} -_{\exp} \left\| \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC} \leq_{\exp} \left\| \zeta_1^{GC} \oplus_{2,GC} \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC}$$

and similarly

$$-_{\exp} \left\| \zeta_1^{GC} \oplus_{2,GC} \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC} \leq_{\exp} \left\| \zeta_1^{GC} \right\|_2^{GC} -_{\exp} \left\| \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC}.$$

This implies that $\left| \left\| \zeta_1^{GC} \right\|_2^{GC} -_{\exp} \left\| \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC} \right|_{\exp} \leq_{\exp} \left\| \zeta_1^{GC} \oplus_{2,GC} \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC}$ for all $\zeta_1^{GC}, \zeta_2^{GC} \in \mathbb{BC}(GC)$.

iv. We have

$$\begin{aligned}
 & \frac{\left\| \zeta_1^{GC} \oplus_{2,GC} \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC}}{1_{\exp} +_{\exp} \left\| \zeta_1^{GC} \oplus_{2,GC} \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC}} \exp = \frac{\left\| (a_1, e^{b_1}, c_1, e^{d_1}) \oplus_{2,GC} (a_2, e^{b_2}, c_2, e^{d_2}) \right\|_2^{GC}}{1_{\exp} +_{\exp} \left\| (a_1, e^{b_1}, c_1, e^{d_1}) \oplus_{2,GC} (a_2, e^{b_2}, c_2, e^{d_2}) \right\|_2^{GC}} \exp \\
 & = \frac{e^{\sqrt{(a_1+a_2)^2 + (b_1+b_2)^2 + (c_1+c_2)^2 + (d_1+d_2)^2}}}{1_{\exp} +_{\exp} e^{\sqrt{(a_1+a_2)^2 + (b_1+b_2)^2 + (c_1+c_2)^2 + (d_1+d_2)^2}}} \exp \\
 & = e^{\ln e^{\frac{\ln e^{\sqrt{(a_1+a_2)^2 + (b_1+b_2)^2 + (c_1+c_2)^2 + (d_1+d_2)^2}}}{\ln 1_{\exp} + \ln e^{\sqrt{(a_1+a_2)^2 + (b_1+b_2)^2 + (c_1+c_2)^2 + (d_1+d_2)^2}}}}} \\
 & = e^{1 + \frac{\sqrt{(a_1+a_2)^2 + (b_1+b_2)^2 + (c_1+c_2)^2 + (d_1+d_2)^2}}{\sqrt{(a_1+a_2)^2 + (b_1+b_2)^2 + (c_1+c_2)^2 + (d_1+d_2)^2}}} \\
 & \leq_{\exp} e^{\left[\frac{\sqrt{a_1^2 + b_1^2 + c_1^2 + d_1^2}}{1 + \sqrt{a_1^2 + b_1^2 + c_1^2 + d_1^2}} + \frac{\sqrt{a_2^2 + b_2^2 + c_2^2 + d_2^2}}{1 + \sqrt{a_2^2 + b_2^2 + c_2^2 + d_2^2}} \right]} \\
 & = e^{\left[\frac{\ln e^{\sqrt{a_1^2 + b_1^2 + c_1^2 + d_1^2}}}{\ln 1_{\exp} + \ln e^{\sqrt{a_1^2 + b_1^2 + c_1^2 + d_1^2}}} + \frac{\ln e^{\sqrt{a_2^2 + b_2^2 + c_2^2 + d_2^2}}}{\ln 1_{\exp} + \ln e^{\sqrt{a_2^2 + b_2^2 + c_2^2 + d_2^2}}} \right]} \\
 & = e^{\left[\frac{\ln \left\| \zeta_1^{GC} \right\|_2^{GC}}{\ln 1_{\exp} + \ln \left\| \zeta_1^{GC} \right\|_2^{GC}} + \frac{\ln \left\| \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC}}{\ln 1_{\exp} + \ln \left\| \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC}} \right]} \\
 & = e^{\ln e^{\left[\frac{\ln \left\| \zeta_1^{GC} \right\|_2^{GC}}{\left(\ln 1_{\exp} + \ln \left\| \zeta_1^{GC} \right\|_2^{GC} \right)} + \frac{\ln \left\| \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC}}{\left(\ln 1_{\exp} + \ln \left\| \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC} \right)} \right]}} \\
 & = e^{\ln e^{\frac{\ln \left\| \zeta_1^{GC} \right\|_2^{GC}}{\ln \left(1_{\exp} +_{\exp} \left\| \zeta_1^{GC} \right\|_2^{GC} \right)} + \ln e^{\frac{\ln \left\| \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC}}{\ln \left(1_{\exp} +_{\exp} \left\| \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC} \right)}}} \\
 & = e^{\left[\ln \frac{\left\| \zeta_1^{GC} \right\|_2^{GC}}{\left(1_{\exp} +_{\exp} \left\| \zeta_1^{GC} \right\|_2^{GC} \right)} \exp + \ln \frac{\left\| \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC}}{\left(1_{\exp} +_{\exp} \left\| \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC} \right)} \exp \right]} \\
 & = \frac{\left\| \zeta_1^{GC} \right\|_2^{GC}}{1_{\exp} +_{\exp} \left\| \zeta_1^{GC} \right\|_2^{GC}} \exp +_{\exp} \frac{\left\| \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC}}{1_{\exp} +_{\exp} \left\| \zeta_2^{GC} \right\|_2^{GC}} \exp.
 \end{aligned}$$

This completes the proof.

v. Since

$$\begin{aligned}
 \sum_{\exp k=1}^n \left(\left\| s_k^{GC} \oplus_{2,GC} t_k^{GC} \right\|_2^{GC} \right)^P & = \sum_{\exp k=1}^n \left(\left\| s_k^{GC} \oplus_{2,GC} t_k^{GC} \right\|_2^{GC} \right)^{P-\exp 1_{\exp}} \times_{\exp} \left\| s_k^{GC} \oplus_{2,GC} t_k^{GC} \right\|_2^{GC} \\
 & \leq_{\exp} \sum_{\exp k=1}^n \left(\left\| s_k^{GC} \oplus_{2,GC} t_k^{GC} \right\|_2^{GC} \right)^{P-\exp 1_{\exp}} \times_{\exp} \left(\left\| s_k^{GC} \right\|_2^{GC} +_{\exp} \left\| t_k^{GC} \right\|_2^{GC} \right)
 \end{aligned}$$

$$= \sum_{\text{exp}} \sum_{k=1}^n \left(\|s_k^{GC} \oplus_{2,GC} t_k^{GC}\|_2^{GC} \right)^{p-\text{exp}1_{\text{exp}}} \times_{\text{exp}} \|s_k^{GC}\|_2^{GC} +_{\text{exp}} \sum_{\text{exp}} \sum_{k=1}^n \left(\|s_k^{GC} \oplus_{2,GC} t_k^{GC}\|_2^{GC} \right)^{p-\text{exp}1_{\text{exp}}} \times_{\text{exp}} \|t_k^{GC}\|_2^{GC},$$

if we choose $q = \frac{p}{p-\text{exp}1_{\text{exp}}}$, we obtain the inequalities

$$\sum_{\text{exp}} \sum_{k=1}^n \|s_k^{GC}\|_2^{GC} \times_{\text{exp}} \left(\|s_k^{GC} \oplus_{2,GC} t_k^{GC}\|_2^{GC} \right)^{p-\text{exp}1_{\text{exp}}} \leq_{\text{exp}} \left(\sum_{\text{exp}} \sum_{k=1}^n \left(\|s_k^{GC}\|_2^{GC} \right)^p \right)^{\frac{1_{\text{exp}}}{p}} \times_{\text{exp}} \left(\sum_{\text{exp}} \sum_{k=1}^n \left(\|s_k^{GC} \oplus_{2,GC} t_k^{GC}\|_2^{GC} \right)^{(p-\text{exp}1_{\text{exp}}) \times_{\text{exp}} q} \right)^{\frac{1_{\text{exp}}}{q}}$$

and

$$\sum_{\text{exp}} \sum_{k=1}^n \|t_k^{GC}\|_2^{GC} \times_{\text{exp}} \left(\|s_k^{GC} \oplus_{2,GC} t_k^{GC}\|_2^{GC} \right)^{p-\text{exp}1_{\text{exp}}} \leq_{\text{exp}} \left(\sum_{\text{exp}} \sum_{k=1}^n \left(\|t_k^{GC}\|_2^{GC} \right)^p \right)^{\frac{1_{\text{exp}}}{p}} \times_{\text{exp}} \left(\sum_{\text{exp}} \sum_{k=1}^n \left(\|s_k^{GC} \oplus_{2,GC} t_k^{GC}\|_2^{GC} \right)^{(p-\text{exp}1_{\text{exp}}) \times_{\text{exp}} q} \right)^{\frac{1_{\text{exp}}}{q}}.$$

It follows that

$$\begin{aligned} & \sum_{\text{exp}} \sum_{k=1}^n \left(\|s_k^{GC} \oplus_{2,GC} t_k^{GC}\|_2^{GC} \right)^p \\ & \leq_{\text{exp}} \left[\left(\sum_{\text{exp}} \sum_{k=1}^n \left(\|s_k^{GC}\|_2^{GC} \right)^p \right)^{\frac{1_{\text{exp}}}{p}} +_{\text{exp}} \left(\sum_{\text{exp}} \sum_{k=1}^n \left(\|t_k^{GC}\|_2^{GC} \right)^p \right)^{\frac{1_{\text{exp}}}{p}} \right] \times_{\text{exp}} \left(\sum_{\text{exp}} \sum_{k=1}^n \left(\|s_k^{GC} \oplus_{2,GC} t_k^{GC}\|_2^{GC} \right)^{(p-\text{exp}1_{\text{exp}}) \times_{\text{exp}} q} \right)^{\frac{1_{\text{exp}}}{q}} \\ & = \left[\left(\sum_{\text{exp}} \sum_{k=1}^n \left(\|s_k^{GC}\|_2^{GC} \right)^p \right)^{\frac{1_{\text{exp}}}{p}} +_{\text{exp}} \left(\sum_{\text{exp}} \sum_{k=1}^n \left(\|t_k^{GC}\|_2^{GC} \right)^p \right)^{\frac{1_{\text{exp}}}{p}} \right] \times_{\text{exp}} \left(\sum_{\text{exp}} \sum_{k=1}^n \left(\|s_k^{GC} \oplus_{2,GC} t_k^{GC}\|_2^{GC} \right)^p \right)^{\frac{1_{\text{exp}}}{q}} \end{aligned}$$

and so

$$\left(\sum_{\text{exp}} \sum_{k=1}^n \left(\|s_k^{GC} \oplus_{2,GC} t_k^{GC}\|_2^{GC} \right)^p \right)^{\frac{1_{\text{exp}}}{p}} \leq_{\text{exp}} \left(\sum_{\text{exp}} \sum_{k=1}^n \left(\|s_k^{GC}\|_2^{GC} \right)^p \right)^{\frac{1_{\text{exp}}}{p}} +_{\text{exp}} \left(\sum_{\text{exp}} \sum_{k=1}^n \left(\|t_k^{GC}\|_2^{GC} \right)^p \right)^{\frac{1_{\text{exp}}}{p}}.$$

4. Discussion and Conclusion

In the present study, inspired by the ideas of non-Newtonian bicomplex numbers and geometric calculus, we give bicomplex numbers with respect to the geometric calculus, and we state and prove some inequalities for use in future studies. Also, our findings carry some concepts and results from the recent literature to $\mathbb{BC}(GC)$.

References

- [1] Segre, C. 1892. Le rappresentazioni reali delle forme complesse e gli enti iperalgebrici. *Mathematische Annalen*, 40(3), 413-467.
- [2] Price, G. B. 1991. *An introduction to multicomplex spaces and functions*. New York, M. Dekker, 410p.
- [3] Alpay, D., Luna-Elizarraras, M. E., Shapiro, M., Struppa, D. C. 2014. *Basics of functional analysis with bicomplex scalars, and bicomplex Schur analysis*. Springer Science & Business Media, 107p.
- [4] Grossman, M., Katz, R. 1972. *Non-Newtonian calculus*. Lee Press, Pigeon Cove, MA, 118p.
- [5] Grossman, M. 1979. An introduction to non-Newtonian calculus. *International Journal of Mathematical Educational in Science and Technology*, 10(4), 525-528.
- [6] Stanley, D. 1999. A multiplicative calculus. *Primus IX* 4, 310-326.

- [7] C'ordova-Lepe, F. 2006. The multiplicative derivative as a measure of elasticity in economics. *TMAT Revista Latinoamericana de Ciencias e Ingeniería*, 2(3).
- [8] Bashirov, A. E., Kurpinar, E. M., Özyapıcı, A. 2008. Multiplicative calculus and its applications. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 337(1), 36-48.
- [9] Bashirov, A. E., Mısırlı, E., Tandoğdu, Y., Özyapıcı, A. 2011. On modeling with multiplicative differential equations. *Applied Mathematics-A Journal of Chinese Universities*, 26(4), 425-438.
- [10] Uzer, A. 2010. Multiplicative type complex calculus as an alternative to the classical calculus. *Computers & Mathematics with Applications*, 60(10), 2725-2737.
- [11] Bashirov, A. E., Riza M. 2011. On complex multiplicative differentiation. *TWMS Journal of Applied and Engineering Mathematics*, 1(1), 75-85.
- [12] Mısırlı, E., Gürefe, Y. 2011. Multiplicative Adams Bashforth-Moulton methods. *Numerical Algorithms*, 57(4), 425-439.
- [13] Çakmak, A. F., Başar, F. 2012. Some new results on sequence spaces with respect to non-Newtonian calculus. *Journal of Inequalities and Applications*, 2012(1), 228.
- [14] Çakmak, A. F., Başar, F. 2014. Certain spaces of functions over the field of non-Newtonian complex numbers. In *Abstract and Applied Analysis (Vol. 2014)*. Hindawi, Article ID 236124, 12 pages.
- [15] Tekin, S., Başar, F. 2013. Certain sequence spaces over the non-Newtonian complex field. In *Abstract and Applied Analysis (Vol. 2013)*. Hindawi, Article ID 739319, 11 pages.
- [16] Kadak, U., Efe, H. 2014. The construction of Hilbert spaces over the Non-Newtonian field. *International Journal of Analysis*, (Vol. 2014). Hindawi, Article ID 746059, 10 pages.
- [17] Duyar, C., Sağır, B., Oğur, O. 2015. Some basic topological properties on non-newtonian real line. *British Journal of Mathematics & Computer Science*, 9(4), 300-307.
- [18] Boruah, K., Hazarika, B. 2017. Application of geometric calculus in numerical analysis and difference sequence spaces, *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 449(2), 1265-1285.
- [19] Boruah, K., Hazarika, B. 2018. G – Calculus. *TWMS Journal of Applied and Engineering Mathematics*, 8(1), 94-105.
- [20] Boruah, K., Hazarika, B. 2018. Bigeometric integral calculus. *TWMS Journal of Applied and Engineering Mathematics*, 8(2), 374-385.
- [21] Güngör, N. 2020. Some geometric properties of the non-Newtonian sequence spaces $l_p(N)$. *Mathematica Slovaca*, 70(3), 689-696.
- [22] Sager, N., Sağır, B. 2021. Some inequalities in quasi-Banach algebra of non-Newtonian bicomplex numbers. *Filomat*, 35(7), 2231-2243.
- [23] Sager, N., Sağır, B. 2021. Banach spaces $l_p(\mathbb{BC}(N))$ with the $*$ – norm $\|\cdot\|_{2,l_p(\mathbb{BC}(N))}$ and some properties. *Tbilisi Mathematical Journal*, 14(2), 65-81.

- [24] Değirmen, N., Sağır, B. 2022. Some fundamental properties of Banach spaces $l_p(\mathbb{BC}(N))$ with the $*$ -norm $\|\cdot\|_{2,l_p(\mathbb{BC}(N))}$, Transactions of A. Razmadze Mathematical Institute, 176(2), 183-195.
- [25] Grossman M. 1983. Bigeometric calculus: A system with a scale free derivative, Archimedes Foundation, Rockport Massachusetts, 1st ed., 110p.

Determinants and Inverses of Circulant Matrices with Gaussian Pell Numbers

Meral YAŞAR KARTAL *1

¹ Niğde Ömer Halisdemir University, Science and Art Faculty, Department of Mathematics, NIGDE

(Alınış / Received: 28.03.2022, Kabul / Accepted: 20.07.2022, Online Yayınlanma / Published Online: 23.08.2022)

Keywords

Circulant matrix,
Determinant,
Inverse,
Gaussian Pell numbers

Abstract: In this paper, by considering the circulant matrix $M_n = \text{circ}(GP_1, GP_2, \dots, GP_n)$ whose entries are the Gaussian Pell numbers, we calculate the determinants and inverses of M_n in terms of Gaussian Pell numbers.

Elemanları Gaussian Pell Sayıları Olan Sirkülant Matrislerin Determinantları ve Tersleri

Anahtar Kelimeler

Sirkülant matris,
Determinant,
Matris tersi,
Gauss Pell sayıları

Öz: Bu çalışmada, elemanları Gauss Pell sayıları olan $M_n = \text{circ}(GP_1, GP_2, \dots, GP_n)$ sirkülant matrisinin determinantı ve tersi yine Gauss Pell sayıları cinsinden hesaplanmıştır.

*Corresponding Author, email: myasar@ohu.edu.tr

1. Introduction and Preliminaries

Circulant matrices have a wide range of applications, for example in image processing, coding theory, signal processing, numerical computation, self-regress design, etc. For detail one can see [1], [2].

There are many studies in the literature which is about circulant matrices and their properties such as their determinants and inverses involving some famous numbers.

Lind studied on the determinant $D_{n,r}$ of the circulant matrix $\text{circ}(F_r, F_{r+1}, \dots, F_{r+n-1})$ in 1970 [3]. In [4], the author gave the bounds for the spectral and Euclidean norms of the circulant matrices involving Fibonacci and Lucas numbers. In [5], [6] the authors defined generalized k-Horadam sequence and investigated some its properties. In addition, a new generalization to compute determinants and inverses of the circulant matrix $C_n(H) = \text{circ}(H_{k,1}, H_{k,2}, \dots, H_{k,n})$ where $H_{k,n}$ is the generalized k –Horadam numbers was presented. Also, in another study of the same authors, a new upper and lower bounds for the spectral norm of an r –circulant matrix H whose entries are generalized k –Horadam numbers were presented. Furthermore, they obtained new formulas to calculate the eigenvalues and determinant of the matrix H [7]. Shen et al. obtained the determinants of the circulant matrix with classical Fibonacci and Lucas numbers. In addition, the inverses of these matrices were derived in [8]. In [9], the determinants and inverses of the circulant matrix involving Jacobsthal and Jacobsthal-Lucas numbers were obtained in terms of these numbers. In another study, the same authors studied on the r –circulant matrix $W_n = (W_1, W_2, \dots, W_n)$ associated with the numbers defined by the recurrence relation $W_n = pW_{n-1} + qW_{n-2}$ with initial conditions $W_0 = a$ and $W_1 = b$. They obtained determinants, inverses and some bounds for spectral norms of r –circulant matrix W_n [10]. Jiang et al. studied on some types of circulant matrices. They proved that these matrices with Gaussian Fibonacci numbers were invertible matrices for $n > 2$ and they gave the determinants and inverses of these matrices in [11]. In [12], the authors calculated the determinant of the circulant matrix $F_n = \text{circ}(F_1^*, F_2^*, \dots, F_n^*)$ where F_n^* is the complex Fibonacci numbers. In addition, they showed that this matrix is invertible and inverse matrix can be obtained in terms of complex Fibonacci numbers. In [13], the author used the

algebra methods, the properties of the r-circulant matrix and the geometric circulant matrix to study the upper and lower bound estimate problems for the spectral norms of a geometric circulant matrix involving the generalized k-Horadam numbers and some estimations were obtained.

Horadam and Mahon introduced Pell and Pell–Lucas polynomials. Moreover, some properties related with these sequences were studied in [14]. In [15], sum formulas for squares of terms of complex Pell and Pell-Lucas number sequences were studied and certain products of terms of the Pell and Pell-Lucas sequences were determined. In [16], the gell numbers were defined as the generalization of Pell numbers. Moreover, the authors derived Binet-like formula, generating function and exponential generating function for this sequence. The authors, introduced the quadra Fibona-Pell, Fibona-Jacobsthal and Pell-Jacobsthal and the hexa Fibona-Pell-Jacobsthal sequences. These sequences are the compound sequences of Fibonacci, Pell and Jacobsthal sequences. They derived the Binet-like formulas, the generating functions and the exponential generating functions of these sequences. Also, some binomial identities were obtained for them [17]. In [18], the authors considered the Pell, Pell-Lucas and Modified Pell sequences, and they defined some new 2×2 matrices, then showed that the identities presented before can be produced by using them. In [19], the authors defined the Gaussian Pell and Gaussian Pell-Lucas sequences. They obtained some identities for these numbers.

In this paper, we consider the circulant matrix $M_n = (GP_1, GP_2, \dots, GP_n)$, where GP_n is the Gaussian Pell numbers. Firstly, we obtained the determinant of this matrix in terms of Gaussian Pell numbers. Then we calculate the inverse of the circulant matrix M_n .

We conclude this section with some preliminaries related our study.

The $n \times n$ circulant matrix $C_n = circ(c_0, c_1, \dots, c_{n-1})$, associated with the numbers c_0, c_1, \dots, c_{n-1} is defined as

$$C_n = \begin{bmatrix} c_0 & c_1 & \dots & c_{n-1} \\ c_{n-1} & c_0 & \dots & c_{n-2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_1 & c_2 & \dots & c_0 \end{bmatrix}.$$

Determinant and inverse of nonsingular circulant matrix C_n are given as in the following

$$\det C_n = \prod_{r=0}^{n-1} g(w^r), \quad C_n^{-1} = circ(a_0, a_1, \dots, a_{n-1})$$

where $a_s = \frac{1}{n} \sum_{r=0}^{n-1} g(w^r)^{-1} w^{-rs}$ ($s = 0, 1, \dots, n - 1$), $g(x) = \sum_{i=0}^{n-1} c_i x^i$ and $w = \exp\left(\frac{2\pi i}{n}\right)$ [2].

Lemma 1.1. [2] Let $C_n = circ(c_0, c_1, \dots, c_{n-1})$ be a circulant matrix. Then we have the following

- i. C_n is invertible if and only if $f(w^k) \neq 0$ ($k = 0, 1, \dots, n - 1$), where $f(x) = \sum_{j=0}^{n-1} c_j x^j$ and $w = \exp\left(\frac{2\pi i}{n}\right)$
- ii. If C_n is invertible then its inverse is also a circulant matrix.

2. Main Results

In this section, we consider the circulant matrix M_n with Gaussian Pell numbers. Firstly, we give the determinant of the matrix M_n . Then we prove that M_n is an invertible matrix and we formulate the inverse matrix in terms of Gaussian Pell numbers.

Definition 2.1. The Gaussian Pell numbers are defined as

$$GP_n = 2GP_{n-1} + GP_{n-2}, \quad n \geq 2$$

with the initial conditions $GP_0 = i, GP_1 = 1$ [19].

Theorem 2.2. Let M_n be a circulant matrix with Gaussian Pell numbers as $M_n = circ(GP_1, GP_2, \dots, GP_n)$. Then we have

$$\det M_n = (1 - GP_{n+1})^{n-2} (1 - 2GP_n - iGP_n) + \sum_{k=1}^{n-2} (GP_k - iGP_{k+1}) (1 - GP_{n+1})^{k-1} (GP_n - i)^{n-k-1}$$

for $n \geq 3$.

Proof. For $n \geq 3$, set

$$K = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -2 & -1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 1 & -2 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & -1 & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

and

$$L_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \left(\frac{GP_n - i}{1 - GP_{n+1}}\right)^{n-2} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 0 & \left(\frac{GP_n - i}{1 - GP_{n+1}}\right)^{n-3} & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \\ 0 & \left(\frac{GP_n - i}{1 - GP_{n+1}}\right)^{n-4} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & \left(\frac{GP_n - i}{1 - GP_{n+1}}\right) & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Then we have the following matrix

$$KM_n L_1 = \begin{bmatrix} 1 & f_n & GP_{n-1} & GP_{n-2} & GP_{n-3} & \cdots & GP_3 & GP_2 \\ i & g_n & GP_{n-2} & GP_{n-3} & GP_{n-4} & \cdots & GP_2 & GP_1 \\ 0 & 0 & GP_1 - GP_{n+1} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & GP_0 - GP_n & GP_1 - GP_{n+1} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & GP_0 - GP_n & GP_1 - GP_{n+1} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & GP_0 - GP_n & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & GP_0 - GP_n & GP_1 - GP_{n+1} \end{bmatrix}$$

where

$$f_n = \sum_{k=1}^{n-1} GP_{k+1} \left(\frac{GP_n - i}{1 - GP_{n+1}}\right)^{n-k-1}$$

and

$$g_n = 1 - 2GP_n + \sum_{k=1}^{n-2} GP_k \left(\frac{GP_n - i}{1 - GP_{n+1}}\right)^{n-k-1}.$$

So, we obtain

$$\det K \det M_n \det L_1 = \left[1 - 2GP_n + \sum_{k=1}^{n-2} GP_k \left(\frac{GP_n - i}{1 - GP_{n+1}}\right)^{n-k-1} - i \sum_{k=1}^{n-1} GP_{k+1} \left(\frac{GP_n - i}{1 - GP_{n+1}}\right)^{n-k-1} \right] (1 - GP_{n+1})^{n-2}$$

while

$$\det K = \det L_1 = \begin{cases} 1, & n \equiv 1, 2 \pmod{4} \\ -1, & n \equiv 0, 3 \pmod{4} \end{cases}$$

Hence, we get

$$\det M_n = (1 - GP_{n+1})^{n-2}(1 - 2GP_n - iGP_n) + \sum_{k=1}^{n-2} (GP_k - iGP_{k+1})(1 - GP_{n+1})^{k-1}(GP_n - i)^{n-k-1}.$$

Thus, the proof is completed.

Theorem 2.3. Let $M_n = \text{circ}(GP_1, GP_2, \dots, GP_n)$ be a circulant matrix. For $n \geq 3$, M_n is invertible.

Proof. Let $n \geq 3$. The Binet formula for Gaussian Pell number is

$$GP_n = c\alpha^n + d\beta^n$$

where $c = \frac{1+(\sqrt{2}-1)i}{2\sqrt{2}}$ and $d = \frac{-1+(\sqrt{2}+1)i}{2\sqrt{2}}$. It is clear that $\alpha + \beta = 2$ and $\alpha\beta = -1$. Hence we have

$$\begin{aligned} f(w^k) &= \sum_{j=1}^n GP_j(w^k)^{j-1} \\ &= c\alpha \left(\frac{1 - \alpha^n}{1 - \alpha w^k} \right) + d\beta \left(\frac{1 - \beta^n}{1 - \beta w^k} \right) \\ &= \frac{c\alpha(1 - \alpha^n)(1 - \beta w^k) + d\beta(1 - \beta^n)(1 - \alpha w^k)}{1 - 2w^k - w^{2k}} \\ &= \frac{1 - GP_{n+1} + w^k(i - GP_n)}{1 - 2w^k - w^{2k}} \end{aligned}$$

Since $GP_n = P_n + iP_{n-1}$, $n > 1$, $w^k = \cos\theta + i\sin\theta$ where $\theta = \frac{2k\pi}{n}$ and $0 < \theta < 2\pi$. Then

$$\begin{aligned} x &= 1 - GP_{n+1} + w^k(i - GP_n) \\ &= [1 - P_{n+1} - P_n \cos\theta + (P_{n-1} - 1)\sin\theta] + i[-P_n + (1 - P_{n-1})\cos\theta - P_n \sin\theta]. \end{aligned}$$

We assume that

$$\text{Re}(x) = 1 - P_{n+1} - P_n \cos\theta + (P_{n-1} - 1)\sin\theta$$

and

$$\text{Im}(x) = -P_n + (1 - P_{n-1})\cos\theta - P_n \sin\theta.$$

We prove that $\text{Re}(x) \neq 0$ or $\text{Im}(x) \neq 0$ for $1 - 2w^k - w^{2k} \neq 0$. For the reason that Pell sequence is an increasing sequence, we have the followings.

- If $\sin\theta > 0$ and $\cos\theta > 0$, $\text{Re}(x) < 0$.
- If $\sin\theta < 0$ and $\cos\theta < 0$, $\text{Im}(x) > 0$.
- If $\sin\theta > 0$ and $\cos\theta < 0$, $\text{Re}(x) < 0$.
- If $\sin\theta < 0$ and $\cos\theta > 0$, $\text{Im}(x) < 0$.

It is verified that when $\sin\theta = 0$ or $\cos\theta = 0$, $x \neq 0$.

Hence, $1 - GP_{n+1} + w^k(i - GP_n) \neq 0$ for any w^k ($k = 1, 2, \dots, n - 1$), that is $f(w^k) \neq 0$. By Lemma 1.1 the proof is completed.

Lemma 2.4. Let $B = (b_{ij})$ be an $(n - 2) \times (n - 2)$ matrix of the form

$$b_{ij} = \begin{cases} GP_1 - GP_{n+1}, & i = j \\ GP_0 - GP_n, & i = j + 1 \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

then the inverse $B^{-1} = (b'_{ij})$ is given by

$$b'_{ij} = \begin{cases} (GP_n - GP_0)^{i-j}, & i \geq j \\ (GP_1 - GP_{n+1})^{i-j+1}, & i < j \\ 0, & \end{cases}$$

Proof. Let $c_{ij} = \sum_{k=1}^{n-2} b_{ik}b'_{kj}$. It is clear that $c_{ij} = 0$ for $i < j$. For $i = j$, we get

$$c_{ii} = b_{ii}b'_{ii} = (GP_1 - GP_{n+1}) \frac{1}{(GP_1 - GP_{n+1})} = 1.$$

For $i \geq j + 1$, we obtain

$$\begin{aligned} c_{ij} &= \sum_{k=1}^{n-2} b_{ik}b'_{kj} = b_{i,i-1}b'_{i-1,j} + b_{ii}b'_{ij} \\ &= (GP_0 - GP_n) \frac{(GP_n - GP_0)^{i-j-1}}{(GP_1 - GP_{n+1})^{i-j}} + (GP_1 + GP_{n+1}) \frac{(GP_n - GP_0)^{i-j}}{(GP_1 - GP_{n+1})^{i-j+1}} \\ &= 0. \end{aligned}$$

So, we see that $BB^{-1} = I_{n-2}$, where I_{n-2} is $(n - 2) \times (n - 2)$ identity matrix. Similarly, it can be shown that $B^{-1}B = I_{n-2}$. Hence, the proof is completed.

Theorem 2.5. Let $n \geq 3$, then the inverse of M_n is

$$M_n^{-1} = \text{circ}(m_1, m_2, \dots, m_n)$$

where

$$m_1 = \frac{i}{f_n} - \frac{2(1-i)}{GP_0f_n - GP_1g_n} \sum_{k=1}^{n-2} (-1)^{k+1} \frac{(GP_0 - GP_n)^{k-1}}{(GP_1 - GP_{n+1})^k} P_{n-k}$$

$$m_2 = \frac{1-2i}{f_n} + \frac{2(1-i)}{GP_0f_n - GP_1g_n} \sum_{k=1}^{n-2} (-1)^k \frac{(GP_0 - GP_n)^{k-1}}{(GP_1 - GP_{n+1})^k} P_{n-k-1}$$

$$m_3 = \frac{2(1-i)}{GP_0f_n - GP_1g_n} \frac{1}{(GP_1 - GP_{n+1})}$$

$$m_4 = \frac{-2(1-i)}{GP_0f_n - GP_1g_n} \frac{GP_0 - GP_n}{(GP_1 - GP_{n+1})^2}$$

and

$$m_j = \frac{(-1)^{j-1} 2(1-i)}{GP_0f_n - GP_1g_n} \frac{(GP_0 - GP_n)^{j-3}}{(GP_1 - GP_{n+1})^{j-2}}, \quad j = 5, 6, \dots, n.$$

Proof. Let

$$L_2 = \begin{bmatrix} 1 & -\frac{f_n}{GP_1} & \frac{f_nGP_{n-2} - g_nGP_{n-1}}{GP_1g_n - GP_0f_n} & \frac{f_nGP_{n-3} - g_nGP_{n-2}}{GP_1g_n - GP_0f_n} & \dots & \frac{f_nGP_1 - g_nGP_2}{GP_1g_n - GP_0f_n} \\ 0 & 1 & \frac{GP_{n-1}GP_0 - GP_{n-2}GP_1}{GP_1g_n - GP_0f_n} & \frac{GP_{n-2}GP_0 - GP_{n-3}GP_1}{GP_1g_n - GP_0f_n} & \dots & \frac{GP_2GP_0 - GP_1GP_1}{GP_1g_n - GP_0f_n} \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

where

$$f_n = \sum_{k=1}^{n-1} GP_{k+1} \left(\frac{GP_n - i}{1 - GP_{n+1}} \right)^{n-k-1}$$

and

$$g_n = 1 - 2GP_n + \sum_{k=1}^{n-2} GP_k \left(\frac{GP_n - i}{1 - GP_{n+1}} \right)^{n-k-1}.$$

Then we can write

$$KM_nL_1L_2 = U \oplus B,$$

where $U = \begin{bmatrix} GP_1 & 0 \\ GP_0 & -\frac{f_n GP_0}{GP_1} \end{bmatrix}$ is 2×2 matrix, B is as in Lemma 2.4 and $U \oplus B$ is the direct sum of the matrices U and B . Let $L = L_1L_2$, then we obtain

$$M_n^{-1} = L(U^{-1} \oplus B^{-1})K.$$

By Lemma 1.1., the inverse of the matrix M_n is circulant. Let

$$M_n^{-1} = circ(m_1, m_2, \dots, m_n).$$

Since the last row of the matrix L are

$$0, 1, -\frac{(GP_0GP_{n-1} - GP_1GP_{n-2})}{GP_0f_n - GP_1g_n}, -\frac{(GP_0GP_{n-2} - GP_1GP_{n-3})}{GP_0f_n - GP_1g_n}, \dots, -\frac{(GP_0GP_2 - GP_1GP_1)}{GP_0f_n - GP_1g_n}$$

and Y_{nj} be the nj -th entry of the product $L(U^{-1} \oplus B^{-1})$ for $1 \leq j \leq n$, we have

$$Y_{n1} = \frac{1}{f_n}, Y_{n2} = \frac{i}{f_n}$$

and for $3 \leq j \leq n$

$$Y_{nj} = \frac{2(1-i)}{GP_0f_n - GP_1g_n} \sum_{k=1}^{n-j+1} (-1)^{k-1} \frac{(GP_0 - GP_n)^{k-1}}{(GP_1 - GP_{n+1})^k} P_{n-k-j+2}.$$

If the row matrix $(Y_{n1}, Y_{n2}, \dots, Y_{nn})$ and the matrix K is multiplied, the last row of M_n^{-1} is obtained. Namely,

$$\begin{aligned} m_1 &= Y_{n2} - 2Y_{n3} - Y_{n4} \\ &= \frac{i}{f_n} - \frac{4(1-i)}{GP_0f_n - GP_1g_n} \sum_{k=1}^{n-2} (-1)^{k-1} \frac{(GP_0 - GP_n)^{k-1}}{(GP_1 - GP_{n+1})^k} P_{n-k-1} - \frac{2(1-i)}{GP_0f_n - GP_1g_n} \sum_{k=1}^{n-3} (-1)^{k-1} \frac{(GP_0 - GP_n)^{k-1}}{(GP_1 - GP_{n+1})^k} P_{n-k-2} \\ &= \frac{i}{f_n} - \frac{2(1-i)}{GP_0f_n - GP_1g_n} \sum_{k=1}^{n-2} (-1)^{k+1} \frac{(GP_0 - GP_n)^{k-1}}{(GP_1 - GP_{n+1})^k} P_{n-k} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} m_2 &= Y_{n1} - 2Y_{n2} - Y_{n3} \\ &= \frac{1}{f_n} - \frac{2i}{f_n} - \frac{2(1-i)}{GP_0f_n - GP_1g_n} \sum_{k=1}^{n-2} (-1)^{k-1} \frac{(GP_0 - GP_n)^{k-1}}{(GP_1 - GP_{n+1})^k} P_{n-k-1} \\ &= \frac{1-2i}{f_n} - \frac{2(1-i)}{GP_0f_n - GP_1g_n} \sum_{k=1}^{n-2} (-1)^{k-1} \frac{(GP_0 - GP_n)^{k-1}}{(GP_1 - GP_{n+1})^k} P_{n-k-1} \end{aligned}$$

$$m_3 = Y_{nn} = \frac{2(1-i)}{GP_0f_n - GP_1g_n} \frac{1}{GP_1 - GP_{n+1}}$$

$$\begin{aligned} m_4 &= Y_{n,n-1} - 2Y_{nn} \\ &= \frac{2(1-i)}{GP_0f_n - GP_1g_n} \sum_{k=1}^2 (-1)^{k-1} \frac{(GP_0 - GP_n)^{k-1}}{(GP_1 - GP_{n+1})^k} P_{3-k} - \frac{4(1-i)}{GP_0f_n - GP_1g_n} \frac{1}{GP_1 - GP_{n+1}} P_{2-k} \\ &= -\frac{2(1-i)}{GP_0f_n - GP_1g_n} \frac{GP_0 - GP_n}{(GP_1 - GP_{n+1})^2} \end{aligned}$$

and for $5 \leq j \leq n$

$$\begin{aligned} m_j &= Y_{n,n-j+3} - 2Y_{n,n-j+4} - Y_{n,n-j+5} \\ &= \frac{2(1-i)}{GP_0f_n - GP_1g_n} \sum_{k=1}^{j-2} (-1)^{k-1} \frac{(GP_0 - GP_n)^{k-1}}{(GP_1 - GP_{n+1})^k} P_{j-k-1} - \frac{4(1-i)}{GP_0f_n - GP_1g_n} \sum_{k=1}^{j-3} (-1)^{k-1} \frac{(GP_0 - GP_n)^{k-1}}{(GP_1 - GP_{n+1})^k} P_{j-k-2} \\ &\quad - \frac{2(1-i)}{GP_0f_n - GP_1g_n} \sum_{k=1}^{j-4} (-1)^{k-1} \frac{(GP_0 - GP_n)^{k-1}}{(GP_1 - GP_{n+1})^k} P_{j-k-3} \\ &= \frac{(-1)^{j-1} 2(1-i)}{GP_0f_n - GP_1g_n} \frac{(GP_0 - GP_n)^{j-3}}{(GP_1 - GP_{n+1})^{j-2}}. \end{aligned}$$

3. Conclusion

In conclusion, we obtain formulas for the determinant and inverse of circulant matrices whose entries are Gaussian Pell numbers.

References

- [1] Gray, R. M. 2005. Toeplitz and Circulant matrices: A review. Now Publisher Inc., Hanover.
- [2] Davis, P. J. 1979. Circulant Matrices. Wiley, New York.
- [3] Lind, D. A. 1970. A Fibonacci Circulant. Fibonacci Quarterly, 8:5 (1970), 449-455.
- [4] Solak, S. 2005. On the Norms of Circulant Matrices with the Fibonacci and Lucas Numbers. Applied Mathematics and Computation, 160 (2005) 125-132.
- [5] Yazlik, Y., Taskara, N. 2013. On the Inverse of Circulant Matrix via Generalized k-Horadam Numbers. Applied Mathematics and Computation, 223 (2013), 191-196.
- [6] Yazlik Y., Taskara N. 2012. Spectral norm, eigenvalues and determinant of circulant matrix involving generalized k-Horadam numbers. Ars Comb., 104 (2012) 505-512.
- [7] Yazlik, Y., Taskara, N. 2013. On the Norms of an r-circulant Matrix with the Generalized k-Horadam Numbers. J. Inequal. Appl., Article ID.394 (2013).
- [8] Shen, S. Q., Cen, J. M., Hao, Y. 2011. On the Determinants and Inverses of Circulant Matrices with Fibonacci and Lucas Numbers. Applied Mathematics and Computation, 217 (2011), 9790-9797.
- [9] Bozkurt, D., Tam, T. Y. 2012. Determinants and Inverses of Circulant Matrices with Jacobsthal and Jacobsthal-Lucas Numbers. Applied Mathematics and Computation, 219 (2012), 544-551.
- [10] Bozkurt, D., Tam, T. Y. 2015. Determinants and Inverses of r-circulant Matrices associated with a number sequence. Linear and Multilinear Algebra, 63:10 (2015), 2079-2088.
- [11] Jiang, Z., Xin, H., Lu, F. 2014. Gaussian Fibonacci Circulant Type Matrices. Abstract and Applied Analysis, Article ID 592782, (2014), 10 pages.
- [12] Altınışık, E., Yalçın, N. F., Büyükköse, Ş. 2015. Determinants and Inverses of Circulant Matrices with Complex Fibonacci Numbers. Special Matrices, 3:1 (2015), 82-90.

- [13] Shi, B. 2018. The Spectral Norms of Geometric Circulant Matrices with the Generalized k-Horadam Numbers. *Journal of Inequalities and Applications*, 14 (2018).
- [14] Horadam, A. F., Mahon, J. M. 1985. Pell and Pell-Lucas Polynomials. *Fibonacci Quarterly*, 23:1 (1985) 7-20.
- [15] Gökbas, H., Köse, H. (2017). Some sum formulas for products of Pell and Pell-Lucas numbers. *Int. J. Adv. Appl. Math. and Mech*, 4:4 (2017) 1-4.
- [16] Dişkaya, O., Menken, H. 2020. On the Sequence of Gell Numbers, *Journal of Universal Mathematics*, 3:1 (2020), 77-82.
- [17] Dişkaya, O., Menken, H. 2019. On the Quadra Fibona-Pell and Hexa Fibona-Pell-Jacobsthal Sequences. *Mathematical Sciences and Applications E-Notes*, 7:2 (2019) 149-160.
- [18] Dasdemir, A. 2011. On the Pell, Pell-Lucas and Modified Pell Numbers By Matrix Method. *Applied Mathematical Sciences*, 5:64 (2011), 3173-3181.
- [19] Halıcı, S., Öz, S. 2016. On some Gaussian Pell and Pell-Lucas Numbers. *Ordu Üniv. Bil Tek. Derg.*, 6:1, (2016), 8-18.

W-Ir Alaşım Schottky Engel Diyotların Performansının Sonlu Elemanlar Metoduyla İncelenmesi

Osman KAHVECİ^{1*}, Mehmet Fatih KAYA²

¹Erciyes Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Kayseri, Türkiye

²Erciyes Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Enerji Sistemleri Mühendisliği Bölümü, Isı Tekniği Anabilim Dalı, Kayseri, Türkiye

(Alınış / Received: 06.06.2022, Kabul / Accepted: 01.08.2022, Online Yayınlanma / Published Online: 23.08.2022)

Anahtar Kelimeler

Schottky Engel Diyot,
Sonlu Elemanlar Metodu,
COMSOL Multiphysics,
W-Ir alaşımı.

Öz: Bu çalışmada elektronik devrelerde yüksek hızlı anahtarlama özellikleriyle ön plana çıkan Schottky engel diyotlar, sonlu elemanlar metoduyla incelenmiştir. Schottky kontak modelleme çalışması için W-at.%10Ir, W-at.%20Ir, W-at.%30Ir, W-at.%50Ir ve W-at.%70Ir olmak üzere beş farklı oranda alaşım ile saf W ve saf Ir metalleri kullanılmıştır. Sonlu elemanlar yöntemi kullanılarak oluşturulan sayısal modelin literatürdeki deneysel çalışmalarla uyumu gösterilerek doğrulanmıştır. Schottky engel diyotların engel yüksekliği, idealite faktörü ve seri direnç değerleri, ileri beslem yarı logaritmik akım-gerilim karakteristikleri, Cheung fonksiyonları ve Norde metodu kullanılarak hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlara göre, alaşımdaki Ir oranı arttıkça iş fonksiyonunun ve engel yüksekliğinin arttığı belirlenmiştir. Alaşım diyotlar içinde en büyük engel yüksekliği, 4.951 eV iş fonksiyonuna sahip W-at.%70Ir alaşımıyla modellenen, W70Ir/n-Si diyot için yaklaşık 1.02 eV olarak elde edilmiştir. Ayrıca ileri beslem altında diyotların yüzey elektriksel potansiyeli, elektron ve hol konsantrasyonlarının dağılımı simule edilerek görsel grafikler oluşturulmuştur. Diyotların akım iletimi gerçekleşirken özellikle hollerin dağılımında önemli değişiklikler olmuştur. Bu çalışma ile olası bir üretim sürecinden sonra diyotların sahip olabileceği parametreler elde edilerek farklı alaşımların Schottky diyotun çalışma şartlarına etkileri belirlenmiştir.

Investigation the W-Ir Alloy Schottky Barrier Diodes Performance Using Finite Element Method

Keywords

Schottky Barrier Diode,
Finite Element Method,
COMSOL Multiphysics,
W-Ir alloy.

Abstract: In this study, Schottky barrier diodes, which stand out with their high-speed switching properties in electronic circuits, were investigated using the finite element method. For Schottky contact modeling study, five different alloy ratios were used like W-at.10%Ir, W-at.20%Ir, W-at.30%Ir, W-at.50%Ir and W-at.70%Ir, pure W and pure Ir metals. The numerical model studied using the finite element method has been verified by showing its compatibility with the experimental studies in the literature. Barrier height, ideality factor and series resistance values of Schottky barrier diodes were calculated using forward-bias semi-logarithmic current-voltage characteristics by using Cheung functions and Norde method. According to the obtained results, it was determined that the work function and barrier height increased by the Ir ratio in the alloying samples. The largest barrier height among alloy diodes was obtained as approximately 1.02 eV for W70Ir/n-Si diode, which has aW-at.70%Ir alloy with a work function of 4.951 eV. In addition, visual plots were created by simulating the surface electrical potential of the diodes, the distribution of electron and hole concentrations under forward-bias situation. While the diodes conduct current, significant changes in the distribution of the halls were observed. In this study, the effects of different alloys on the working conditions of the Schottky diode were determined by obtaining the parameters that the diodes can have at the end of a possible production process.

*İlgili Yazar, email: kahveci@erciyes.edu.tr

1. Giriş

Güç elektroniğinde önemli bir yere sahip olan Schottky kontakların, engel oluşum mekanizmaları, bu kontakların ilk keşfinden bu yana önemli bir araştırma konusu olmuştur [1-3]. Schottky engel diyot olarak ta isimlendirilen metal/yarıiletken kantağın temel parametrelerinden birisi olan, engel yüksekliği (Φ_b)'dir. Diyot üzerinden geçen akımın doğru bir şekilde belirlenebilmesi ve cihazların çalışma koşullarının tespit edilmesi için Φ_b 'nin hatasız olarak tanımlanması gerekmektedir. Bu anlamda metal/yarıiletken kontakların doğrultma davranışını tanımlamak için ilk çalışmalar Schottky tarafından gerçekleştirilmiş ve geliştirilmiştir [4, 5]. Schottky ve Mott engelin oluşumunu tanımlamak ve engel yüksekliğini hesaplamak için bir model önermişlerdir [4, 6]. Schottky-Mott kuralına [7] göre, engel yüksekliği Eş.1 ile aşağıdaki gibi ifade edilir:

$$\Phi_b = \Phi_m - \chi_s \quad (1)$$

Eş. 1'e göre, engel yüksekliğini, idealde, yarıiletkenin elektron ilgisi (χ_s) ve metalin iş fonksiyonu (Φ_m) belirlemektedir. Metalin iş fonksiyonu, yüzey yük dağılımı ve yüzey durumlarıyla ilişkili olan iki bileşene bağlıdır. Bu bileşenlerden biri hacim diğeri de yüzey dipolüdür [8]. Ancak, metal ve yarı iletken arayüzey tabakası olmadan birbirine temas ettirilirse, atomik bölgelerin ve yük dağılımlarının değiştiği ve böylece de yüzey dipolünün katkısının değiştiği bilinmektedir. Ayrıca, metal ile yarıiletken kontaklarda arayüzey tabakasının olması da engel yüksekliğinin oluşumunu etkilemektedir [7, 9, 10]. Farklı yarıiletkenler ve farklı metaller kullanılarak kontak yapılarının oluşturulduğu, engel yüksekliklerinin araştırıldığı birçok bilimsel çalışma gerçekleştirilmiştir [11-16] ve hali hazırda araştırmalar devam etmektedir. Ancak metal/yarıiletken kontak oluşumunda arayüzey tabakasının engel yüksekliği üzerindeki etkisi, arayüzey tabakasız olarak oluşan kantağın etkisinden daha az olduğu da bilinmektedir [17]. Bu bağlamda kontakların engel yüksekliği metal ve yarıiletken seçiminden oldukça etkilenmektedir. Bu etkilerin incelenmesi amacıyla araştırmacılar Schottky diyot konusunda, yarıiletkenlerle metallerin kontak özelliklerinin yanı sıra alaşımların kontak özelliklerini de araştırmaktadır [18-20]. Zaten arayüzey tabakasının varlığında engel yüksekliğinin açıklanması için farklı modeller [10, 21, 22] önerilse de, önerilen tüm modeller henüz metal/yarı iletken kontakların özelliklerini tam olarak açıklayamamaktadır ve engel yüksekliği metalin türü, temizleme yöntemi, metal biriktirme yöntemi gibi farklı parametrelerle değişebilmektedir [8]. Elektronik uygulamalarda belirli bir amaç için üretilecek diyotların diyot parametrelerinin belirlenmesi, genellikle farklı iş fonksiyonlarına sahip metallerin veya elektron ilgisi farklı olan yarı iletkenlerin kullanılmasıyla mümkün ve yeterli olmaktadır [8, 23, 24].

Schottky diyot konusunda deneysel çalışmalar için, yüksek vakum, birçok kimyasal işlem ve hassas ölçümler gibi gereklilikler sağlanmalıdır. Ayrıca literatürde deneysel çalışmalar sırasında karşılaşılan güçlüklerden ve sorunlardan bahsedilmektedir. Bu sorunlardan bazıları şu şekildedir; alttaş üzerine büyütülen filmin deney bitiminde yüzeyden hemen ayrılması sorunu [25], kontaklar için alaşım ince film oluştururken makul stokiometrik oranda alaşımların hazırlanmasında yaşanan güçlük [26], düzlemsel diyotların desenlerinin oluşumunda kullanılan maskelerde yaşanan sıkıntılar, geometrinin zorluğu ve kısa devre sorunları [27], yüksek kaliteli ve geniş alanlı Schottky kontakları geliştirmede büyük miktarda yüzey kusuru nedeniyle yaşanan olumsuzluklar [28]. Böylesi zorluklar içeren deneysel çalışmalar gerçekleştirilmeden, sonuçları hakkında ön bilgi sahibi olmak ve deneylerin sonucu hakkında yaklaşık tahminde bulunabilmek önemlidir. Bu imkân deneysel uyumu kanıtlanabilen modelleme çalışmaları ile sağlanabilir. Schottky diyotların akım iletim mekanizmalarını anlamak ve engel oluşumunu açıklamak amacıyla modelleme çalışmaları gerçekleştirilmektedir [29-32]. Diyotların modelleme çalışmalarında Termiyonik Emisyon Teorisi (TE) yaygın olarak kullanılmaktadır [33-35] ve modelleme sonuçları özellikle donör konsantrasyonu (N_d) $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ mertebesine kadar olan yarıiletkenler için başarılı ve geçerli olduğu kanıtlanmıştır [36].

Yarı iletken özelliklerinin aynı kalması, ara yüzeyin durumlarının değişmediği düşünülerek, Schottky diyot metalindeki bileşimin değişmesi yani alaşım işlemi, engel yüksekliğini değiştirmesi beklenmektedir. Tungsten (W) malzemesi, Schottky diyot araştırmalarında önemli bir yere sahiptir, bu türden yansıtıcı metaller Schottky diyotların, ısıl işlem aşamasında daha esnek ve sıcaklıklar arttıkça daha güvenilir olmaları nedeniyle [37] birçok kez tercih edilmiştir [38-40] ve güncel çalışmalarda da araştırma konusu olmaya devam etmektedir [41, 42]. Ayrıca, farklı metaller kullanılarak örneğin; Titanyum (Ti) [43], Silisyum (Si) ile [44], Paladyum (Pd) ve Platin (Pt) [45] gibi W alaşımları metal/yarıiletken kontak araştırmalarının konusu olmuştur. Özellikle alaşım yapılırken iş fonksiyonu daha yüksek olan metal ile katkılama yapmak kaçak akımı azaltarak [46] diyot performansını olumlu etkileyebilir. İridyum (Ir)'un iş fonksiyonunun W ile kıyaslandığında daha yüksek olması, termal olarak kararlı Schottky kontak oluşturabilmesi [47], kimyasal kararlılığı, mekanik mukavemetinin yüksek olması, oksitlenmeye karşı dirençli, yüksek elektrik iletkenliği [48] ve Ir/Pt alaşımı gibi Ir alaşımlarının kararlı, korozyona karşı dirençli ve dayanıklı kontak oluşturması [46] gibi özelliklerinden dolayı ikinci metal olarak Ir tercih edilmiştir. Ayrıca Ir'nin yüksek ergime noktası nedeniyle deneysel çalışmalarda güçlükleri tespit

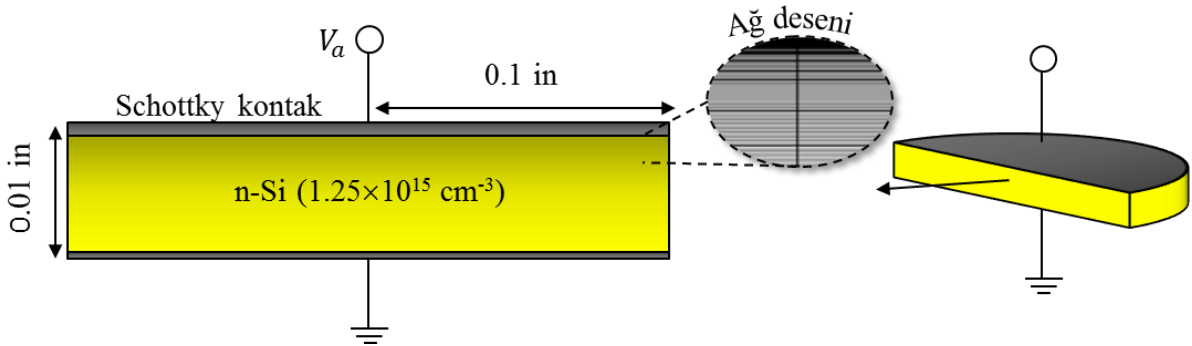
edebilmek için modelleme çalışmalarının yapılması bu malzeme ile oluşturulan çeşitli alaşımların farklı koşullardaki davranışlarını incelemek için oldukça önemlidir. Bunun yanında, yazarların bilgisi dahilinde W-İr ikili alaşımının Schottky diyot özellikleri konusunda yapılan incelemelerde herhangi bir bilimsel çalışmaya da rastlanamamıştır. Bu yüzden, bu konuda hem deneysel hem de modelleme çalışmalarına ihtiyaç olduğu görülmektedir.

Bu çalışmada, alaşımların bileşimine bağlı olarak Schottky diyot için kullanılan metalin ϕ_m değerindeki değişimin etkisi sayısal modelleme çalışması ile araştırılmıştır. Schottky diyotun doğrultma özelliği, W, İr metalleri ve W-İr alaşımları için n tipi Si yarıiletkeni üzerine kontak modeli için sayısal modelleme çalışmaları yapılmıştır. Akım iletiminde TE mekanizması temel alınarak analizler gerçekleştirilmiştir. Modellenen Schottky diyotların idealite faktörü (n), engel yüksekliği (Φ_b), seri direnç değeri (R_s) gibi karakteristik parametreleri belirlenmiş ve birbirleriyle karşılaştırılmıştır. Ayrıca ileri beslem altında diyotların elektriksel potansiyel dağılımı, hol ve elektron konsantrasyonlarının dağılımı da simule edilerek görsel olarak sonuçlara eklenmiştir.

2. Materyal ve Metot

2.1. Schottky Diyot Modelinin Yapısı

Bu çalışmada önerilen Schottky diyotun enine kesit görüntüsü şematik olarak Şekil 1'de gösterilmektedir. Yarıiletken olarak, $1.25 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ katkılama konsantrasyonuna sahip olan n tipi Si modellenmiştir. Diyot, 298 K oda sıcaklığında, V_a uygulama voltajı altında çalışacak şekilde tasarlanmıştır. Schottky diyotun önerilen boyutları ve katkılama miktarı optimize edilerek belirlenmiştir. Diyotlar, kalınlığı 0.01 in (254 μm) ve yarıçapı ise 0.1 in ölçülerinde dairesel olarak şekillendirilmiştir.



Şekil 1. Schottky diyot modelin şematik görünümü.

COMSOL Multiphysics yazılımı kullanılarak, cihaz yapısı ince bir şekilde hacimsel ağlara bölünerek yakınsak çözümler uygulanmıştır. Ağ desenleri oluştururken üç farklı ağ deseni dağılımı olacak şekilde belirlenmiştir. Birincisi, metal ile yarıiletkenin birleştiği kontak bölgesi (Schottky kontak) $1 \mu\text{m}$ yüksekliğinde aritmetik sıra olacak şekilde ve ters yönde 50 yatay elemente ayrılmıştır. İkincisi, geriye kalan $253 \mu\text{m}$ 'lik kısım, aritmetik sıralı ve simetrik dağılım olacak şekilde 200 yatay elemente ayrılmıştır. Son olarak diyot yapısının tamamı sabit aralıklı olarak 50 adet düşey elemente ayrılmıştır. Böylece Schottky diyotun model yapısı içerisinde toplam 5×10^5 adet sonlu hacimsel eleman ile oluşturulmuştur.

2.2. Matematiksel Model

- Alaşımların İş Fonksiyonu

İş fonksiyonu, malzeme yüzeylerinin en temel özelliklerinden biridir ve metal-yarı iletken kontakların elektriksel özelliklerini doğrudan etkiler. Metallerin iş fonksiyonları bazı elementler için iyi belirlenmiş olsa da, alaşımlara ait iş fonksiyonları ve alaşımdaki elementlerin bileşimine bağımlılığı hakkındaki bilgiler sınırlıdır [49]. Alaşımlara ait iş fonksiyonunu belirlemek için çalışmalarda genellikle Gelatt ve Ehrenreich'in önermiş olduğu model kullanılmaktadır [18, 50-52]. W metaline farklı yüzdelik oranlarda (x) İr katkısı için, $W_x\text{Ir}_{1-x}$ formundaki alaşıma ait iş fonksiyonu Eş. 2'deki gibi belirlenir [18].

$$\phi_m = x\phi_{m,W} + (1-x)\phi_{m,İr} + x(1-x) \left[\frac{(\phi_{m,W} - \phi_{m,İr})(\rho_W/\rho_{İr}) - 1}{x(\rho_W/\rho_{İr}) + (1-x)} \right] \quad (2)$$

Burada, ρ_W , tungsten için, ρ_{Ir} ise iridyum için durum yoğunluklarıdır. $\phi_{m,W}$ ve $\phi_{m,Ir}$ sırasıyla tungsten ve iridyum için iş fonksiyonlarıdır. Fermi seviyesinde durum yoğunluğu, elektronik spesifik ısı sabitine (C_e) bağlıdır. C_e 'nin formülü, T , sıcaklık ve k_B , Boltzmann sabiti olmak üzere Eş. 3'teki gibi ifade edilebilir:

$$C_e = (1/3)\pi^2\rho k_B^2 T \quad (3)$$

Buradan hesaplanan C_e değerleri, W için $1.3 \text{ mJ mol}^{-1} \text{ K}^{-2}$ ve Ir için $3.1 \text{ mJ mol}^{-1} \text{ K}^{-2}$ şeklindedir [52]. İkili alaşımdaki metallerin C_e değerleri birbirlerine yakın değerler olmadığı için alaşımın iş fonksiyonundaki değişimin katkılama oranıyla lineer bir şekilde değişmesi beklenmemektedir. Bundan dolayı iş fonksiyonunun hesaplamalarında yukarıda verilen Eş. 2'den yararlanılmıştır.

- Diyotların Akım İletim Mekanizması

Temel Schottky diyot özelliklerini incelemek için, metal-yarıiletken kontakların elektrik iletimini tanımlayan, yarı iletken cihazlar için akım-iletim denklemlerinden J-V eğrileri simule edilmiştir. Nispeten düşük katkılama seviyelerine ($< 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$) sahip bir Schottky engel diyotu için akımın termiyonik emisyonundan kaynaklandığı varsayılabilir, yani iletim bandındaki elektronların potansiyel engelin üzerinden geçerek akım iletimini sağladığı, ancak engelin içerisinden geçmediği durumu göz önüne alarak, uygulama voltajına (V_a) bağlı olarak akım yoğunluğu (J), Eş. 4'teki gibi ifade edilebilir [53]:

$$J = J_0 \left(e^{qV_a/nk_B T} \right) \left\{ 1 - e^{-qV_a/k_B T} \right\} \quad (4)$$

Burada q , elektronun yükü, n , idealite faktörüdür değeri genellikle 1'den büyüktür ve pratikte diyotların ideal TE'den sapmasını belirtmek için kullanılır. J_0 ise sıfır beslem altında doyma akım yoğunluğudur ve $\ln(J)$ 'nin lineer kısmının sıfır voltajdaki eksenin kesim noktasından belirlenir. Schottky diyot için, J_0 Eş. 5'teki gibidir:

$$J_0 = A^* T^2 e^{-q\Phi_b/k_B T} \quad (5)$$

Burada, A^* , etkin Richardson sabiti ve Φ_b , engel yüksekliğidir. TE'ye göre, ileri besleme bölgesinde ($V_a \geq 3k_B T/q$ için) diyotun kontak bölgesinden geçen akım yoğunluğu (J), Eş. 6'daki gibi hesaplanır [7]:

$$J = J_0 \left(e^{qV_a/nk_B T} \right) \quad (6)$$

Modellenen Schottky diyotların, uygulama voltajı 0V değerinden 0.6V sınır değerine kadar artırıldığında, bu aralıkta yarı logaritmik ileri beslem J-V karakteristiği simule edilebilmektedir.

- Karakteristik Diyot Parametrelerinin Hesaplanması

Yarı logaritmik J-V grafiğinin eğiminden ise diyotların idealite faktörü, n , Eş. 7'deki gibi hesaplanabilir:

$$n = \left(q / k_B T \right) \left(\partial V_a / \partial \ln J \right) \quad (7)$$

Schottky diyotların engel yüksekliği Φ_b ise Eş. 8'deki gibi hesaplanabilir:

$$q\Phi_b = (k_B T) \ln \left(A^* T^2 / J_0 \right) \quad (8)$$

Diyotların J-V karakteristiği incelenirken, ileri besleme gerilimi nispeten arttığında akım değerlerindeki artış miktarında bir azalma eğilimi görülebilir. Bu durum, tükenme bölgesi ile yarıiletken arasında ve ohmik kontakta kaynaklanan seri direncin etkisinden (R_s) kaynaklanır. Schottky diyotlar için R_s değerleri Cheung'ler [54] veya Norde [55] tarafından, ileri yönlü akım denklemlerinden geliştirilen yöntemlerle belirlenebilmektedir. Cheung ve Cheung teorisine göre Φ_b , n ve R_s gibi diyot parametreleri Cheung fonksiyonları kullanılarak Eş. 9.a ve 9.b'deki eşitliklerle belirlenebilir [54].

$$dV_a / d \ln(I) = nk_B T / q + IR_s \quad (9.a)$$

$$H(I) = IR_s + n\Phi_b \quad (9.b)$$

Burada I , diyottan geçen toplam akımdır ve akım yoğunluğunun diyot alanıyla (A) çarpılmasıyla elde edilir ($I = J \times A$). Norde metoduyla hesaplamalarda ise Eş. 10a'daki gibi ifade edilen Norde fonksiyonu kullanılmaktadır [55].

$$F(V_a) = V_a/\gamma - k_B T/q \ln \left(I(V_a)/AA^*T^2 \right) \quad (10.a)$$

Burada, $I(V_a)$, I-V grafiğinden elde edilir ve uygulama voltajına bağlı akım değeridir. γ ise idealite faktöründen daha büyük boyutsuz bir tam sayıdır. Diyot parametrelerinden olan R_S , Eş. 10.b'den ve Φ_b , Eş.10.c'den elde edilmektedir.

$$R_S = \frac{k_B T(\gamma - n)}{qI_{min}} \quad (10.b)$$

$$\Phi_b = F(V_{min}) + V_{min}/2 + k_B T/q \quad (10.c)$$

Burada $F(V_{min})$, $F(V_a)$ fonksiyonunun minimum noktasıdır. I_{min} , akım değerinin minimumu ve V_{min} ise voltaj değerinin minimumudur.

2.3 Modelleme Parametreleri ve Sabitler

Model geometrisi oluşturulan diyotların matematiksel temelleri tanımlandıktan sonra, matematiksel model için gerekli olan malzemeye ait parametrelerin, sabitlerin ve çözümleme yönteminin seçilmesi gibi işlemlerin programa kaydedilmesi gerekmektedir. Alaşımların hesaplanan iş fonksiyonları, dairesel olarak modellenen diyotlara ait geometrik veriler ve sabitler Tablo 1'de yer almaktadır.

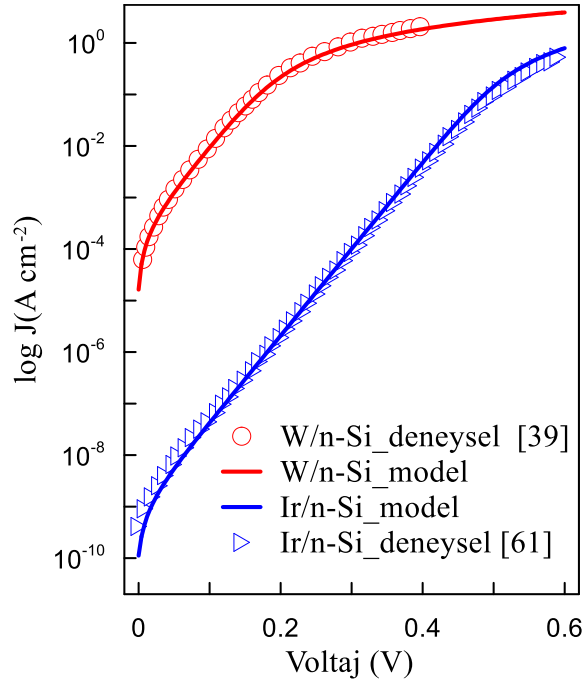
Tablo 1. Metal alaşım-Schottky diyot modeli için giriş parametreleri, sabitler ve açıklamaları.

Parametre	Değeri	Birimi	Açıklama
V_a	0-0.6	V	Uygulama voltajı:0 V'den 4×10^{-3} V adımlar ile 0.6V'ye kadar
ρ_w	1.3	mJ mol ⁻¹ K ⁻²	Elektronik spesifik ısı sabitine bağlı durum yoğunlukları, ρ_w : W için ρ_{Ir} : Ir için
ρ_{Ir}	3.1		
χ_s	4.05 [56]	eV	Si yarıiletkenin elektron ilgisi
ϕ_m	W	4.680 [57]	Metallerin iş fonksiyonları ve Eş.2'den hesaplanan alaşımların iş fonksiyonları. W10Ir: W-at.%10Ir alaşımı W20Ir: W-at.%20Ir alaşımı W30Ir: W-at.%30Ir alaşımı W50Ir: W-at.%50Ir alaşımı W70Ir: W-at.%70Ir alaşımı
	W10Ir	4.747	
	W20Ir	4.800	
	W30Ir	4.842	
	W50Ir	4.905	
	W70Ir	4.951	
	Ir	5.000 [58]	
A	20.26	cm ²	Modellenen diyotların yüzey alanı
T	298	K	Sıcaklık
N_d	1.25×10^{15}	cm ⁻³	Modelleme için seçilen n tipi Si donör konsantrasyonu
A^*	110 [59]	Acm ⁻² K ⁻²	n tipi Si için etkin Richardson sabiti
E_g	1.12 [60]	V	Si yarıiletken bant aralığı
q	1.6×10^{-19}	C	Elektron yükü

2.4. Deneysel Doğrulama

Metal alaşım/n-Si Schottky modelleme çalışması için W ve Ir metalleri önerilmiştir. Hem W hem de Ir için Schottky diyot çalışmaları literatürde bulunmaktadır. Modelleme çalışmasının içeriğine uygun olarak, n-Si üzerine yapılan deneysel çalışmalardan W metalinin kullanıldığı çalışma ile [39] Ir metalinin kullanıldığı çalışma [61] deneysel doğrulama için referans alınmıştır. Modelleme parametrelerine ait veriler daha önce Tablo 1'de

verilmişti. Modellenen diyotlar ile deneysel olarak üretilen diyotlara ait ileri beslem altında yarı logaritmik J-V grafiği Şekil 2'de görülmektedir.



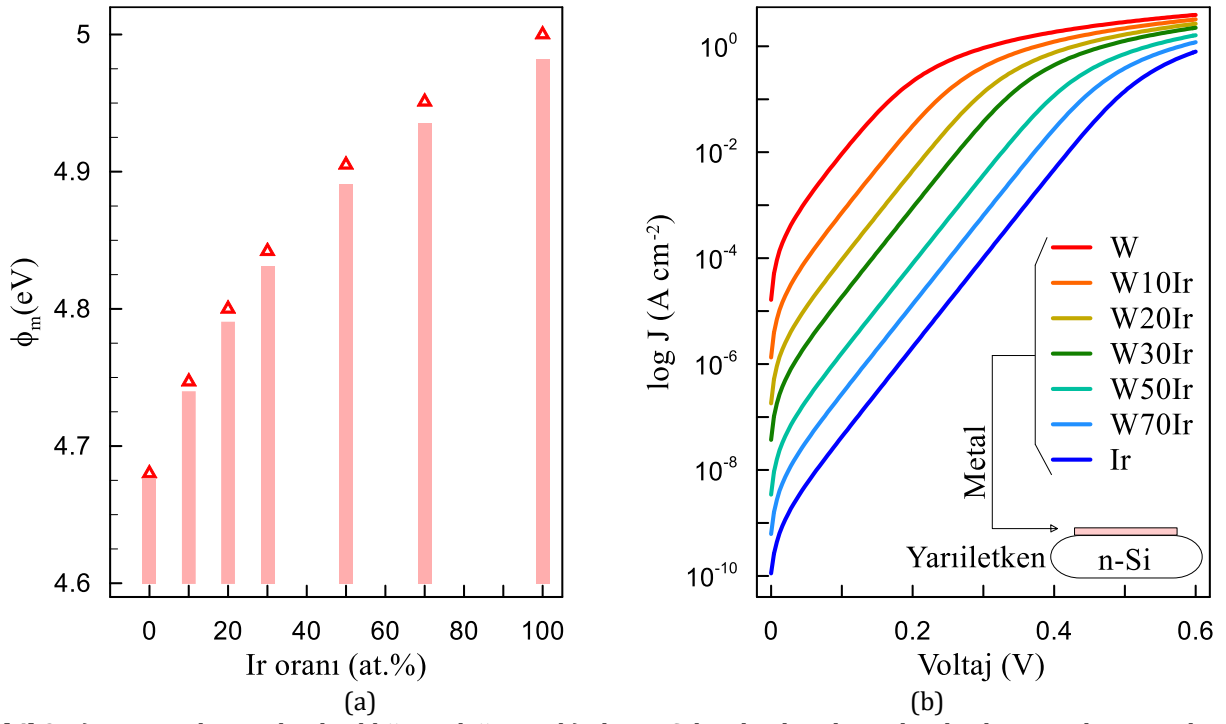
Şekil 2. Schottky diyot modellerin J-V grafiğinin deneysel verilerle karşılaştırılması.

Modellenen her iki diyot için de deneysel verilerle uyumlu grafikler elde edilmiştir. W/n-Si ve Ir/n-Si Schottky diyotların uygulama gerilimi iki diyotun deneysel uygulama aralığını kapsayacak şekilde 0V ile 0.6V aralığında alınmıştır. Her iki metal içinde $1.25 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ taşıyıcı yoğunluğuna sahip n-Si yarıiletkeni seçilerek modellenmiştir. Alaşımlarının modelleme çalışmaları için kullanılacak olan metallerin deneysel verilerle uyumlu olduğu ve bu açıdan oluşturulan modelleme çalışmasının da başarılı olduğu görülmektedir. Her iki metal için elde edilen bu sonuçlar incelenerek, Comsol Multiphysics yazılımında farklı alaşım oranlarında modelleme çalışmaları yapılarak alaşıma bağlı olarak diyot parametreleri belirlenmiştir.

3. Bulgular

3.1. Akım-Gerilim Karakteristiği

Alaşımlar için W ve Ir metalleri tercih edilerek W-at.% 10 Ir, W-at.% 20 Ir, W-at.% 30 Ir, W-at.% 50 Ir, W-at.% 70 Ir şeklinde beş farklı oranda alaşım ve iki adet de W ve Ir olmak üzere saf metalden elde edilen diyotlar olmak üzere toplam yedi farklı Schottky diyot için çözümler yapılmıştır. Alaşımların yüzdeleriyle ilgili açıklamalara Tablo 1'den ulaşılabilir. W-Ir ikili alaşımındaki Ir oranına bağlı olarak iş fonksiyonunun değişiminin lineer olmadığı Şekil 3.a'da da görülebilmektedir. Matematiksel modelde yer alan Eş.2'nin iş fonksiyonlarının hesaplanması için uygun olduğunu, katkılama oranına bağlı iş fonksiyonunun değişim grafiği desteklemektedir. Belirlenen iş fonksiyonları yardımı ile Schottky diyot için karakteristik I-V grafiği simüle edilmiştir. Uygulama voltajının değeri, 0 V'den başlayarak 4×10^{-3} V adımlar ile 0.6 V maksimum değerine kadar değiştiğinde, Şekil 3.b'de yer alan model diyotların ileri beslem altında yarı logaritmik J-V grafiği elde edilmiştir.



Şekil 3. a) Ir oranıyla engel yüksekliğinin değişimi, b) alaşım Schottky diyotların ileri beslem yarı logaritmik J-V grafiği.

Alaşım/n-Si Schottky diyotlar için modelleme ile elde edilen I-V karakteristiğinden hesaplanan diyot parametreleri, Eş. 9'daki Cheung fonksiyonlarından elde edilen ve Eş.10'dan Norde metoduyla elde edilen diyot parametrelerinin sonuçları Tablo 2'de yer almaktadır. Diyot parametrelerinin hesaplamaları SeCLaS-PC programı [62] kullanılarak gerçekleştirilmiştir.

Tablo 2. W-Ir alaşım/n-Si Schottky diyotların 298K sıcaklık değerinde elde edilen karakteristik parametreleri

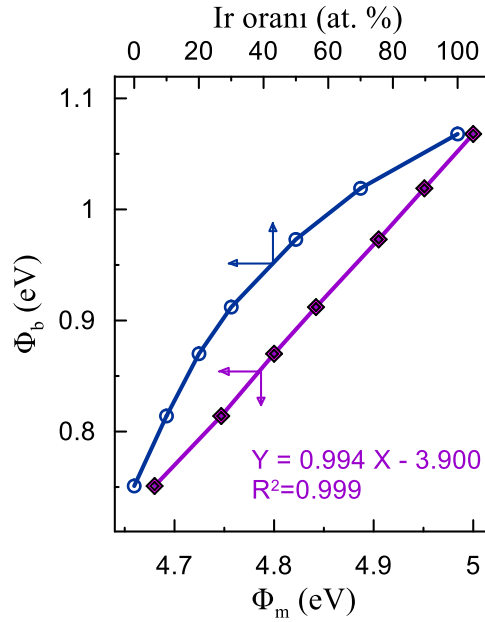
Alaşım	n	Φ_b (eV)	I_0 (A)	Cheung			Norde	
				n	Φ_b (eV)	R_s (Ω)	Φ_b (eV)	R_s (Ω)
W	1.015	0.751	4.03×10^{-4}	1.017	0.75	43.359	0.692	44.268
W10Ir	1.031	0.814	3.49×10^{-5}	1.015	0.816	43.472	0.737	43.330
W20Ir	1.008	0.87	4.06×10^{-6}	1.014	0.868	43.510	0.871	44.984
W30Ir	1.005	0.912	7.87×10^{-7}	1.012	0.91	43.888	0.914	43.419
W50Ir	1.012	0.973	7.31×10^{-8}	1.016	0.971	43.378	0.978	42.225
W70Ir	1.008	1.019	1.21×10^{-8}	1.012	1.018	43.412	1.023	43.680
Ir	1.005	1.068	1.84×10^{-9}	1.032	1.055	41.222	1.070	42.894

Modellenen diyotlar içerisinde en düşük engel yüksekliği W/n-Si diyot için elde edilirken en büyük engel yüksekliği Ir/n-Si diyottan elde edilmiştir. Alaşım Schottky diyotların engel yüksekliği ise Ir oranının değişimiyle farklılık göstermektedir. Engel yüksekliklerinin hesaplanması için kullanılan iç yöntemin sonuçlarına bakıldığında tüm çözümlerde artan Ir oranıyla diyotların engel yüksekliği değerlerinin arttığı görülmektedir. Diyotların R_s değerleri alaşım işlemi ile önemli bir değişim göstermese de W/n-Si model diyota göre Ir/n-Si model diyotun R_s değeri biraz daha düşük elde edilmektedir. Cheung fonksiyonlarından elde edilen seri direnç değerleri ele alındığında W/n-Si model diyotun R_s değeri 43.36 Ω iken, Ir/n-Si için elde edilen R_s değeri yaklaşık 41.22 Ω olmaktadır.

Engel yüksekliklerinin literatürdeki deneysel çalışmalarla uyumu ele alındığında, Bouziane ve ark. [39] Magnetron saçtırma yöntemiyle ürettikleri W/Si diyotlar için, maksimum engel yüksekliği değerini 0.613 eV elde etmişlerdir. Bu değer W/n-Si model için, Norde metoduyla elde edilen 0.692 eV değerine oldukça yakın bir değerdir. Başka bir çalışmada Durcan ve ark. [63] n-Si üzerine electron beam evaporation metoduyla W kontak yaparak ürettikleri Schottky diyot için ortalama engel yüksekliği değerini 0.76 eV elde etmişlerdir. Modelleme ile elde edilen diyotların engel yüksekliği değeri ise hem ileri beslem I-V grafiğinden elde edilen hem de Cheung fonksiyonlarından elde edilen 0.75 eV engel yüksekliği değeri literatürdeki bu deneysel sonuca oldukça yakın

değerlerdedir. Ir/n-Si kontaklar için Jime'nez-Leube ve ark. [61] yaptıkları deneysel çalışmada ise ileri beslem I-V grafiğinden elde ettikleri engel yüksekliği değeri, yaklaşık olarak 0.9 eV mertebesindedir. Yine bu değer de Ir/n-Si model diyot için, bu çalışmada üç ayrı metotla hesaplanan yaklaşık 1 eV mertebesinde elde edilen engel yüksekliği değerinden uzak değildir. Böylece hem W hem de Ir için literatürdeki deneysel çalışmalardan elde edilen engel yüksekliği değerleri bu çalışmadaki modelleme ile elde edilen engel yüksekliği değerleriyle uyum içerisindedir. Alaşımlar ile yapılan modelleme sonuçlarına göre diyotların engel yüksekliklerinin ise bu değerler arasında olduğu belirlenmiştir.

Bu sonuçlar göz önüne alındığında model Schottky diyotların engel yüksekliğinin alaşımın etkisiyle değiştiği görülmektedir. Dolayısıyla metalin iş fonksiyonu da alaşımın etkisiyle değişmektedir. Şekil 4'te engel yüksekliğinin alaşımdaki Ir oranına bağlı olarak değişimi ve iş fonksiyonuna bağlı olarak engel yüksekliğinin değişimi görülmektedir. Engel yüksekliği iş fonksiyonuyla lineer olarak değişirken, Ir oranıyla Şekil 3.a'dakine benzer şekilde %30 Ir katkısına kadar hızlı bir artış gösterirken, %30 Ir katkısından sonra artış miktarı giderek azalmaktadır. Dolayısıyla engel yüksekliği Ir oranıyla lineer olmayan bir değişim göstermektedir. İş fonksiyonuyla engel yüksekliğinin değişimi literatürde deneysel çalışmalarda da araştırılmıştır. Sonuçlar engel yüksekliği ile iş fonksiyonu arasındaki lineer ilişkiyi desteklemektedir [18].



Şekil 4. Schottky diyotların engel yüksekliğinin iş fonksiyonu ve Ir oranına bağlı değişimi.

Engel yüksekliği ile iş fonksiyonu ilişkisinde eğriye uydurulan lineer doğrunun eğimi 1'e yakınsa Schottky limiti olarak adlandırılmaktadır ve bu durum arayüzey hallerinin yoğunluğunun düşük bir değerde olduğu anlamına gelmektedir [64]. Şekil 4'teki fit denklemlerinden görüldüğü gibi eğim 0.994 olarak hesaplanmıştır ve 1'e oldukça yakın bir değerdedir. Bu durum model diyotların arayüzey hallerinin yoğunluğunun çok düşük olduğunu göstermektedir.

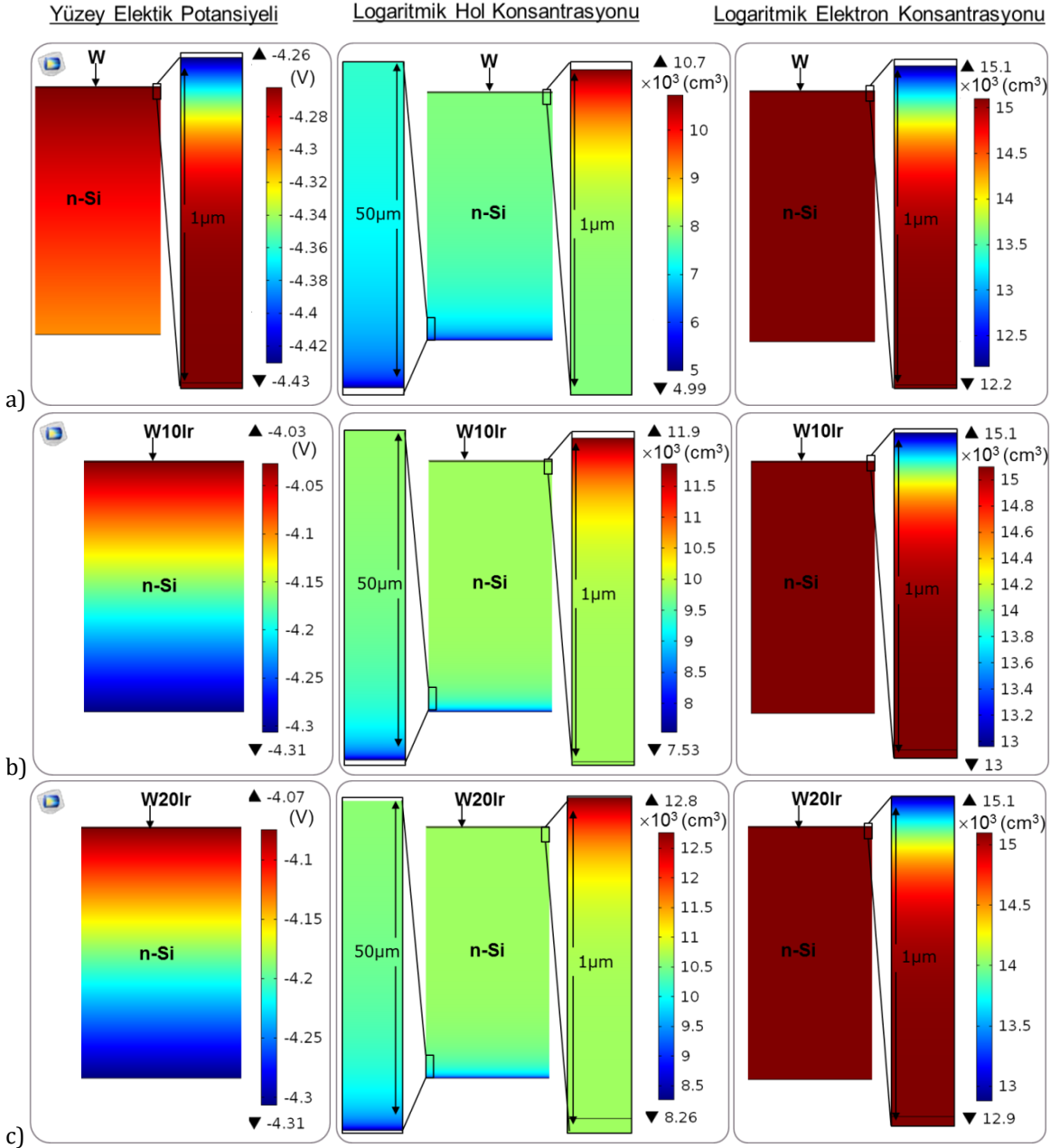
3.1. Elektriksel Potansiyel, Elektron ve Hol Konsantrasyonlarının Dağılımı

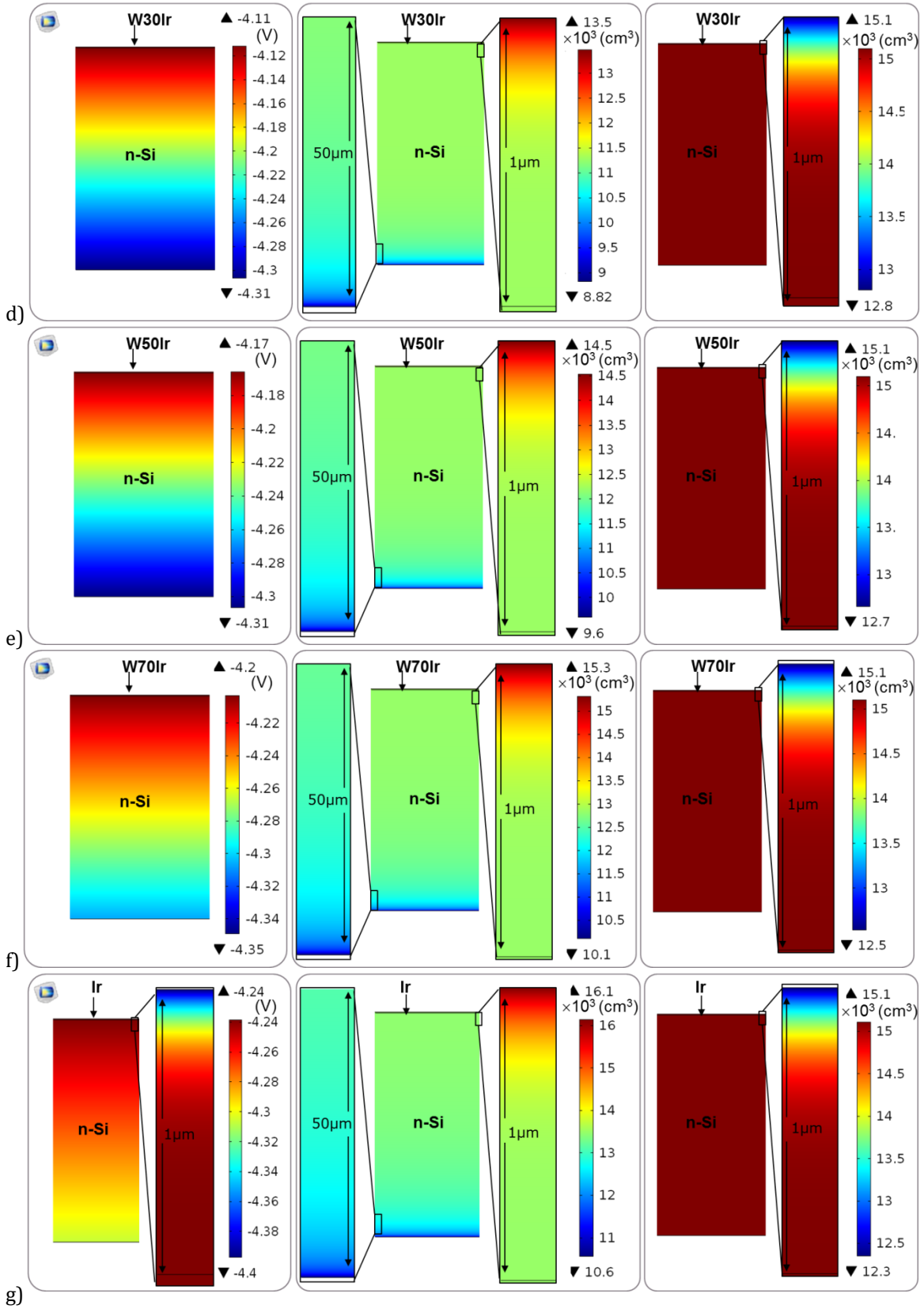
Modellenen Schottky alaşım diyotların TE'ye göre sayısal analizi yapıldığında elde edilen akım-gerilim karakteristiği ele alınmıştır. Modellenen diyotların engel yüksekliği ve idealite faktörü gibi karakteristik parametreleri belirlenmiştir. Akım iletim mekanizmasını daha iyi gözlemlemek amacıyla, ileri beslem altında model geometrisi ele alındığında yarıiletken boyunca elektriksel potansiyelin dağılımı, hol ve elektron konsantrasyonlarının dağılımı simüle edilerek elde edilen sonuçlar Şekil 5'te verilmiştir.

Yüzey elektriksel potansiyelin dağılımı ele alındığında W/n-Si diyot için -4.43 V ile -4.26 V aralığında dağılırken Ir/n-Si kontakta -4.4 V ile -4.24 V aralığında dağılmaktadır. Her iki diyot için Schottky kontak tarafındaki 1µm'lik kısmı yakından incelendiğinde elektriksel potansiyel hızlıca değişim göstermektedir ancak yarıiletkenin kalan kısmında, W/n-si diyot için yaklaşık -4.3 V ile -4.26 V aralığında, Ir/n-Si diyotta -4.31 V ile -4.24V aralığında küçük bir değişim gözlenmektedir. Alaşım diyotlar incelendiğinde ise maksimum elektriksel potansiyel, alaşımı oluşturan metallerin potansiyeline göre daha pozitif değerlerde ve potansiyel dağılımı yarıiletken yapının tamamına yayılmış olarak görülmektedir.

Diyotların hol konsantrasyonları incelendiğinde hem Schottky kontak tarafı hem de ohmik kontak tarafında bütün diyotlar için hızlı bir değişim görülmektedir. Alaşımdaki Ir oranı arttıkça maksimum hol konsantrasyonu da artmaktadır. Örneğin W/n-Si diyot için maksimum hol konsantrasyonu değeri $10.7 \times 10^3 \text{ cm}^3$, %50 Ir katkılı W50Ir/n-Si diyotta $14.5 \times 10^3 \text{ cm}^3$ ve Ir/n-Si diyotta ise $16.1 \times 10^3 \text{ cm}^3$ değerindedir.

Model diyotların tamamında elektron konsantrasyonları Schottky diyot bölgesinin özellikle $1 \mu\text{m}$ 'lik kısmında hızlı bir değişim sergilemektedir. Elektron konsantrasyonlarının en geniş aralığı W/n-Si diyot' ta 12.2×10^3 - $15.1 \times 10^3 \text{ cm}^3$ değerindedir. Ir oranına bağlı olarak elektron konsantrasyonunun dağılımı incelendiğinde ise Ir oranı arttıkça maksimum elektron konsantrasyonu değişmezken yarıiletken yapının tamamındaki dağılım aralığı genişlemektedir. Örneğin, %10 Ir katkılı W10Ir/n-Si diyotta elektron konsantrasyonunun dağılım aralığı 13×10^3 - $15.1 \times 10^3 \text{ cm}^3$ değerinde iken, %70 Ir katkılı W70Ir/n-Si diyotta elektron konsantrasyonunun dağılım aralığı 12.5×10^3 - $15.1 \times 10^3 \text{ cm}^3$ değerinde hesaplanmıştır.





Şekil 5. Diyotların yüzey elektrik potansiyel dağılımı, logaritmik hol ve elektron konsantrasyonlarının dağılımları, a) W/n-Si için, b) W10Ir/n-Si için, c) W20Ir/n-Si için, d) W30Ir/n-Si için, e) W50Ir/n-Si için, f) W70Ir/n-Si için ve g) Ir/n-Si için.

Sonuçlar alaşımın etkisi ile ileri beslem altında diyotların akım iletimi gerçekleşirken özellikle hollerin dağılımında önemli değişiklikler meydana geldiğini hem yüzey elektriksel potansiyeli hem de elektron konsantrasyonlarında da değişiklikler olduğunu göstermektedir. Böylece diyotların ileri beslem altında çalışma şartları simüle edildiğinde görsel olarak elektrik potansiyeli, hol konsantrasyonu ve elektron konsantrasyonu

gibi parametrelerin dağılımlarını da gözlemlemek ve Schottky kontak tasarımlarını bu parametrelere göre oluşturmak mümkün olmaktadır.

4. Tartışma ve Sonuç

Bu çalışmada W ve Ir metalleri, W-at.% 10 Ir, W-at.% 20 Ir, W-at.% 30 Ir, W-at.% 50 Ir, W at.% 70 Ir olarak beş farklı oranda alaşım diyot modellenmiştir. Ayrıca iki adet te alaşımda kullanılan saf metalden elde edilen diyotlar olmak üzere toplamda yedi farklı Schottky diyot başarılı bir şekilde modellenmiştir. Comsol Multiphysics yazılımı yardımıyla sonlu elemanlar metodu kullanılarak diyotların karakteristik parametreleri elde edilmiştir. Ayrıca yüzey elektrik potansiyeli, hol ve elektron konsantrasyonlarının dağılımı görsel grafikler şeklinde verilmiştir.

Schottky kontak için kullanılan metallerin iş fonksiyonu alaşım oranına bağlı olarak hesaplanmıştır. En düşük iş fonksiyonu W-at.% 10 Ir alaşımı için 4.747 eV olarak hesaplanırken, en yüksek iş fonksiyonu W-at.% 70 Ir alaşımı için 4.951 eV olarak hesaplanmıştır. Alaşımdaki Ir oranı yükseldikçe Schottky diyotların engel yüksekliği artmaktadır. Bütün model diyotlar içinde, en büyük engel yüksekliği Saf Ir için Norde metoduyla 1.07 eV olarak hesaplanırken, alaşım diyotlar içinde en büyük engel yüksekliği ise W70Ir/n-Si diyot için yaklaşık 1.02 eV olarak hesaplanmıştır. Yapılan modelleme çalışmasında Schottky diyot bölgesinin özellikle 1 μ m'lik kısmında elektron konsantrasyonunda hızlı bir değişim olduğu gözlemlenmiş olup ve en geniş aralık değeri de W/n-Si diyot modelinde $12.2 \times 10^3 - 15.1 \times 10^3 \text{ cm}^3$ olarak hesaplanmıştır. Ir'ın etkisi de bu çalışma ile ortaya çıkarılmış olup, Ir artışı ile elektron konsantrasyonunun değişmediği ancak yarı iletken yapıdaki dağılım aralığının değişiklik gösterdiği ortaya çıkarılmıştır. Bu da bu alanda çalışmalar yürüten araştırmacılar için çok faydalı bir veri olarak sonlu elemanlar metodunun, alaşım Schottky diyotların olası bir üretim sonucunda karakteristik parametrelerinin belirlenmesi için kullanılabileceğini göstermektedir. Böylece deneysel süreci planlarken yol gösterici bilgiler modelleme ile elde edilebilmektedir.

İlerleyen araştırmalarda metal yarıiletken kontakların farklı sıcaklıklardaki çalışma şartlarının araştırılması amacıyla, Schottky diyotların sıcaklığa bağlı akım-gerilim karakteristiklerini incelemek amacıyla modelleme çalışmaları yapılarak literatüre daha farklı katkılar yapılması planlanmaktadır.

Kaynakça

1. Bardeen, J. 1947. "Surface States and Rectification at a Metal Semi-Conductor Contact", Physical Review, 71(10), 717.
2. Cowley, A., Sze, S. 1965. "Surface States and Barrier Height of Metal-Semiconductor Systems", Journal of Applied Physics, 36(10), 3212-3220.
3. Spitzer, W., Mead, C. 1963. "Barrier Height Studies on Metal-Semiconductor Systems", Journal of Applied Physics, 34(10), 3061-3069.
4. Schottky, W., Stormer, R., Waibel, F. 1931. "Rectifying Action at the Boundary between Cuprous Oxide and Applied Metal Electrodes", Z. Hoch Frequenztechnik, 37, 162.
5. Schottky, W. 1991. Semiconductor Theory of the Blocking Layer: World Scientific
6. Mott, N. F., Note on the Contact between a Metal and an Insulator or Semi-Conductor, Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. 568-572, 1938.
7. Rhoderick, E. H., Williams, R. H. 1988. Metal-Semiconductor Contacts Oxford: Clarendon Press
8. Myburg, G., Auret, F., Meyer, W., Louw, C., Van Staden, M. 1998. "Summary of Schottky Barrier Height Data on Epitaxially Grown N-and P-Gaas", Thin solid films, 325(1-2), 181-186.
9. Tung, R. T. 2014. "The Physics and Chemistry of the Schottky Barrier Height", Applied Physics Reviews, 1(1), 011304.
10. Tung, R. T. 2001. "Formation of an Electric Dipole at Metal-Semiconductor Interfaces", Physical review B, 64(20), 205310.
11. Ayyıldız, E., Türüt, A., Efeoğlu, H., Tüzemen, S., Sağlam, M., Yoğurtçu, Y. K. 1996. "Effect of Series Resistance on the Forward Current-Voltage Characteristics of Schottky Diodes in the Presence of Interfacial Layer", Solid-State Electronics, 39(1), 83-87.
12. Ayyıldız, E., Türüt, A. 1999. "The Effect of Thermal Treatment on the Characteristic Parameters of Ni/-, Ti/- and Niti Alloy/N-Gaas Schottky Diodes", Solid-State Electronics, 43(3), 521-527.

13. Kahveci, O., Akkaya, A., Ayyildiz, E., Türüt, A. 2017. "Comparison of the Ti/N-Gaas Schottky Contacts' parameters Fabricated Using Dc Magnetron Sputtering and Thermal Evaporation", *Surface Review and Letters*, 24(04), 1750047.
14. Akkaya, A. 2018. "The Current-Voltage and Capacitance-Voltage Characterization of the Au/Methylene Blue/N-Gaas Organic-Modified Schottky Diodes", *Eskişehir Technical University Journal of Science and Technology A-Applied Sciences and Engineering*, 19(3), 756-767.
15. Grillo, A., Di Bartolomeo, A. 2021. "A Current-Voltage Model for Double Schottky Barrier Devices", *Advanced Electronic Materials*, 7(2), 2000979.
16. Çaldıran, Z. 2021. "Modification of Schottky Barrier Height Using an Inorganic Compound Interface Layer for Various Contact Metals in the Metal/P-Si Device Structure", *Journal of Alloys and Compounds*, 865, 158856.
17. Aboelfotoh, M. 1987. "Schottky-Barrier Behavior of a Ti-W Alloy on Si (100)", *Journal of applied physics*, 61(7), 2558-2565.
18. Akkaya, A. 2021. "Au-Ag Binary Alloys on N-Gaas Substrates and Effect of Work Functions on Schottky Barrier Height", *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 32(13), 17448-17461.
19. Beştaş, A., Yazıcı, S., Aktaş, F., Abay, B. 2014. "Double Gaussian Distribution of Barrier Height for Fecrnic Alloy Schottky Contacts on P-Si Substrates", *Applied surface science*, 318, 280-284.
20. Aboelfotoh, M., Tu, K.-N. 1986. "Schottky-Barrier Height of a Ti-W Alloy on N-Type and P-Type Si", *Physical Review B*, 33(10), 6572.
21. Hasegawa, H., Ohno, H. 1986. "Unified Disorder Induced Gap State Model for Insulator-Semiconductor and Metal-Semiconductor Interfaces", *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics Processing and Phenomena*, 4(4), 1130-1138.
22. Spicer, W., Chye, P., Skeath, P. R., Su, C. Y., Lindau, I. 1979. "New and Unified Model for Schottky Barrier and Iii-V Insulator Interface States Formation", *Journal of Vacuum Science and Technology*, 16(5), 1422-1433.
23. Tsukamoto, D., Shiro, A., Shiraishi, Y., Sugano, Y., Ichikawa, S., Tanaka, S., Hirai, T. 2012. "Photocatalytic H₂O₂ Production from Ethanol/O₂ System Using TiO₂ Loaded with Au-Ag Bimetallic Alloy Nanoparticles", *ACS catalysis*, 2(4), 599-603.
24. Küp, S., Taşer, A., Kanmaz, İ., Güzeldir, B., Sağlam, M. 2019. "Effects of Au-Ag and Au-Cu Alloy Ratios on the Temperature Dependent Current-Voltage Characteristics of Au-Ag/N-Gaas/in and Au-Cu/N-Gaas/in Schottky Diodes", *Materials Today: Proceedings*, 18, 1936-1945.
25. Glesener, J., Morrish, A., Snail, K. 1991. "A Thin-Film Schottky Diode Fabricated from Flame-Grown Diamond", *Journal of applied physics*, 70(9), 5144-5146.
26. Cai, L., Wang, L., Huang, J., Yao, B., Tang, K., Zhang, J., Qin, K., Min, J., Xia, Y. 2013. "Preparation of Polycrystalline Cdznte Thick Film Schottky Diode for Ultraviolet Detectors", *Vacuum*, 88, 28-31.
27. Bishop, W. L., Crowe, T. W., Mattauch, R. J., Planar Gaas Schottky Diode Fabrication: Progress and Challenges, *Proc. 4th Int. Space THz Tech. Symp.*, Los Angeles, CA. 1993.
28. Chen, D., Huang, Y., Liu, B., Xie, Z., Zhang, R., Zheng, Y., Wei, Y., Narayanamurti, V. 2009. "High-Quality Schottky Contacts to N-in Ga N Alloys Prepared for Photovoltaic Devices", *Journal of Applied Physics*, 105(6), 063714.
29. Bouzid, F., Pezzimenti, F., Dehimi, L., Megherbi, M. L., Della Corte, F. G. 2017. "Numerical Simulations of the Electrical Transport Characteristics of a Pt/N-Gan Schottky Diode", *Japanese Journal of Applied Physics*, 56(9), 094301.
30. Kaushal, P., Chand, S., Osvald, J. 2013. "Current-Voltage Characteristics of Schottky Diode Simulated Using Semiconductor Device Equations", *International Journal of Electronics*, 100(5), 686-698.
31. Rabehi, A., Amrani, M., Benamara, Z., Akkal, B., Ziane, A., Guermoui, M., Hatem-Kacha, A., Monier, G., Gruzza, B., Bideux, L. 2018. "Simulation and Experimental Studies of Illumination Effects on the Current Transport of Nitridated Gaas Schottky Diode", *Semiconductors*, 52(16), 1998-2006.
32. Chand, S., Kaushal, P., Osvald, J. 2013. "Numerical Simulation Study of Current-Voltage Characteristics of a Schottky Diode with Inverse Doped Surface Layer", *Materials science in semiconductor processing*, 16(2), 454-460.

33. Husain, M. K., Li, X. V., de Groot, C. H. 2009. "Observation of Negative Differential Conductance in a Reverse-Biased Ni/Ge Schottky Diode", IEEE electron device letters, 30(9), 966-968.
34. Donoval, D., Snowden, C. M., Barus, M., Racko, J., Bedlek, M. 1994. "Critical Analysis of the Schottky Boundary Condition for Numerical Simulation of Schottky and Mesfet Structure", Physica Scripta, 50(4), 432.
35. Li, W., Nomoto, K., Jena, D., Xing, H. G. 2020. "Thermionic Emission or Tunneling? The Universal Transition Electric Field for Ideal Schottky Reverse Leakage Current: A Case Study in B-Ga₂O₃", Applied Physics Letters, 117(22), 222104.
36. Osvald, J. 2007. "Numerical Simulation of Tunneling Current in Gan Schottky Diodes", Journal of applied physics, 101(10), 103701.
37. Takano, H., Kimura, M., Ando, T., Niemcharoen, S., Yasumura, Y., Sato, K. 2000. "Optical Response of Planar Mo/N-Si/Mo Structures with Long Neutral Region and Schottky Barriers at Both Ends", Solid-State Electronics, 44(12), 2161-2164.
38. Mamor, M., Dufour-Gergam, E., Finkman, L., Tremblay, G., Meyer, F., Bouziane, K. 1995. "Wsi Schottky Diodes: Effect of Sputtering Deposition Conditions on the Barrier Height", Applied surface science, 91(1-4), 342-346.
39. Bouziane, K., Mamor, M., Meyer, F. 2005. "Dc Magnetron Sputtered Tungsten: W Film Properties and Electrical Properties of W/Si Schottky Diodes", Applied Physics A, 81(1), 209-215.
40. Mamor, M., Finkman, E., Meyer, F., Bouziane, K. 1994. "W/Si Schottky Diodes: Effect of Metal Deposition Conditions on the Barrier Height", MRS Online Proceedings Library (OPL), 356.
41. Baltakesmez, A., Tekmen, S., Güzeldir, B. 2020. "Temperature Dependent Current-and Capacitance-Voltage Characteristics of W/N-Si Structures with Two-Dimensional Ws₂ and Three-Dimensional Wo₃ Interfaces Deposited by Rf Sputtering Technique", Materials Science in Semiconductor Processing, 118, 105204.
42. Kumari, P., Rao, V. R., High Performance W/N-Si Schottky Diode Using Black Phosphorus as an Interlayer, 2019 IEEE International Conference on Electron Devices and Solid-State Circuits (EDSSC). 1-3, 2019.
43. Bauza, D. 1993. "Effect of Deep Traps on the Capacitance-Voltage Plots of Schottky Barrier Diodes: Application to the Study of Sputter-Etched Ti-W/N-Si Diodes", Journal of applied physics, 73(4), 1858-1865.
44. Okada, N., Uchida, N., Ogawa, S., Endo, K., Kanayama, T., Cluster-Preforming-Deposited Amorphous Wsi N (N= 12) Insertion Film of Low Sbh and High Diffusion Barrier for Direct Cu Contact, 2017 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM). 22.25. 21-22.25. 24, 2017.
45. Eizenberg, M., Tu, K.-N. 1982. "Formation of Shallow Silicide Contacts of High Schottky Barrier on Si: Alloying Pd and Pt with W Versus Alloying Pd and Pt with Si", Journal of Applied Physics, 53(3), 1577-1585.
46. Chang, P., Su, Y., Lee, K., Yu, C., Chang, S., Liu, C. 2010. "Improved Performance of Gan-Based Schottky Barrier Photodetectors by Annealing Ir/Pt Schottky Contact in O₂", Journal of Alloys and Compounds, 504, S429-S431.
47. Jeon, C. M., Jang, H. W., Lee, J.-L. 2003. "Thermally Stable Ir Schottky Contact on Algan/Gan Heterostructure", Applied physics letters, 82(3), 391-393.
48. Kohli, S., Niles, D., Rithner, C. D., Dorhout, P. K. 2002. "Structural and Optical Properties of Iridium Films Annealed in Air", JCPDS-International Centre for Diffraction Data, Advances in X-ray Analysis, 45, 352-358.
49. Fain Jr, S., McDavid, J. 1974. "Work-Function Variation with Alloy Composition: Ag-Au", Physical Review B, 9(12), 5099.
50. Turut, A., Yıldız, D., Karabulut, A., Orak, İ. 2020. "Electrical Characteristics of Atomic Layer Deposited Au/Ti/Hfo₂/N-Gaas Mis Diodes in the Wide Temperature Range", Journal of Materials Science: Materials in Electronics, 31(10), 7839-7849.
51. Akkaya, A., Esmer, L., Kantar, B. B., Çetin, H., Ayyıldız, E. 2014. "Effect of Thermal Annealing on Electrical and Structural Properties of Ni/Au/N-Gan Schottky Contacts", Microelectronic engineering, 130, 62-68.
52. Kittel, C. 2021. "Introduction to Solid State Physics Eighth Edition".
53. Sze, S. M., Li, Y., Ng, K. K. 2021. Physics of Semiconductor Devices John wiley & sons.
54. Cheung, S., Cheung, N. 1986. "Extraction of Schottky Diode Parameters from Forward Current-Voltage Characteristics", Applied physics letters, 49(2), 85-87.

55. Norde, H. 1979. "A Modified Forward I-V Plot for Schottky Diodes with High Series Resistance", *Journal of applied physics*, 50(7), 5052-5053.
56. Baik, D., Cho, S. 1999. "Application of Sol-Gel Derived Films for ZnO/N-Si Junction Solar Cells", *Thin Solid Films*, 354(1-2), 227-231.
57. Zafar, S., Cabral Jr, C., Amos, R., Callegari, A. 2002. "A Method for Measuring Barrier Heights, Metal Work Functions and Fixed Charge Densities in Metal/SiO₂/Si Capacitors", *Applied physics letters*, 80(25), 4858-4860.
58. Rankin, D. W., *Crc Handbook of Chemistry and Physics*, Edited by David R. Lide. 2009, Taylor & Francis.
59. Tōyama, N. 1988. "Variation in the Effective Richardson Constant of a Metal-Silicon Contact Due to Metal-Film Thickness", *Journal of applied physics*, 63(8), 2720-2724.
60. Wang, Q., Xu, B., Sun, J., Liu, H., Zhao, Z., Yu, D., Fan, C., He, J. 2014. "Direct Band Gap Silicon Allotropes", *Journal of the American Chemical Society*, 136(28), 9826-9829.
61. Jiménez-Leube, F., Clement, M., Sanz Maudes, J., Rodríguez, T. 1997. "Electrical Characterization of Iridium Schottky Contacts to Silicon: Early Stages of Silicidation", *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena*, 15(4), 903-907.
62. Akkaya, A., Ayyıldız, E. 2020. "Automation Software for Semiconductor Research Laboratories: Electrical Parameter Calculation Program (Seclas-Pc)", *Journal of Circuits, Systems and Computers*, 29(13), 2050215.
63. Durcan, C. A., Balsano, R., LaBella, V. P. 2015. "Time Dependent Changes in Schottky Barrier Mapping of the W/Si (001) Interface Utilizing Ballistic Electron Emission Microscopy", *Journal of Applied Physics*, 117(24), 245306.
64. Cohen, M. L. 1979. "Schottky and Bardeen Limits for Schottky Barriers", *Journal of Vacuum Science and Technology*, 16(5), 1135-1136.

Elektrikli Araç Şarj İstasyon Yerlerinin Akış Yakıt İkmal Yer Modeli Kullanılarak Belirlenmesi

Sena Dörtköşe^{ID*1}, Harun Reşit Yazgan^{ID*2}, Serap Ercan Cömert^{ID*3}

*1,2,3 Sakarya Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Endüstri Mühendisliği, SAKARYA

(Alınış / Received: 08.05.2022, Kabul / Accepted: 26.07.2022, Online Yayınlanma / Published Online: 23.08.2022)

Anahtar Kelimeler

Çok Amaçlı Programlama,
Elektrikli Araçlar,
Yer Belirleme Problemi.

Öz: Dünyada elektrikli araçlara olan talebin artması ve elektrikli araçların gelişmekte olan bir pazar olması nedeniyle şarj istasyon konumlarının planlanmasını optimize etmek büyük önem arz etmektedir. Elektrikli araçların kullanımının yaygınlaştırılması için ihtiyaç duyulan şarj istasyonları, özellikle Türkiye gibi gelişmekte olan ülkelerde bir sorun haline gelmektedir. Elektrikli araç şarj istasyonlarının en az maliyet ile en çok hizmeti sağlayacak şekilde konumlandırılması gerekmektedir. Bu çalışmada Sakarya ili için elektrikli araçların şarj istasyon yerlerinin belirlenmesi problemi üzerinde durulmuştur. Probleme şarj istasyon kurulum maliyetleri en az, ilçeler arası tüm yolların akışı ise en çok olacak şekilde akış yakıt ikmal yer modeline dayanan çok amaçlı karışık tamsayılı doğrusal programlama modeli geliştirilmiştir. Çok amaçlı modelin çözümünde literatürde sıkça kullanılan ağırlıklı toplam metodu kullanılmıştır.

Determination of Electric Vehicle Charging Station Locations Using the Flow Refueling Location Model

Keywords

Multi-objective
programming,
Electric vehicles,
Locating problem.

Abstract: It is important to optimize the planning of charging station locations due to the increasing demand for electric vehicles globally and the fact that electric vehicles are an emerging market. Charging stations, which are needed to expand electric vehicles, are becoming a problem, especially in developing countries such as Turkey. Electric vehicle charging stations should be positioned to provide the most service with the least cost. In this study, the problem of determining the charging station locations of electric vehicles for Sakarya province is emphasized. In the problem, a multi-purpose mixed-integer linear programming model based on the flow refueling location model is developed so that the charging station installation costs are the least and the flow of all roads between the districts is the highest. The weighted sum method, which is frequently used in the literature, solved the multi-objective model.

*İlgili Yazar, email: senadrts@gmail.com

1. Giriş

Şehirlerdeki nüfus artışı ve bununla birlikte araç sayısındaki önemli artış, çok sayıda şehir içi ve şehirlerarası seyahati beraberinde getirmektedir. Bu artışın sonuçları olarak trafik sorunu ve buna bağlı atmosferik kirlilik karşımıza çıkmaktadır. Fosil yakıt kullanımı atmosferik kirliliğin ana nedenlerinden biridir. Fosil yakıtların ürettiği zehirli gazların çevreye verdiği zarar, elektrikli araçların kullanımı ile yönetilebilir. Artan nüfus ile birlikte ulaşımda kullanılan petrol ve türevleri, kentsel hava kirliliğinin yanında küresel ısınmayla birlikte ciddi çevresel problemlere yol açmıştır. Bu durum alternatif yakıtlı araçlar arasında, özellikle elektrikli araçların kullanımının yaygınlaşmasına bağlı olarak istasyon yerlerinin belirlenmesi konusu araştırma konuları içinde popülerlik kazanmıştır.

Dünyada özellikle son 10 yılda elektrikli araçların pazar payı 41 kat artarak %8,3 e ulaşmıştır. 2021 yılında elektrikli araçlarda son 10 yılın en büyük yıllık büyümesi görülmüştür. Küresel elektrikli araç satışları 2021'de bir önceki yıla göre %108 artışla 6,75 milyona ulaşarak tüm zamanların en yüksek seviyesini görmüştür [1].

Elektrikli araçlara olan talebin artmasıyla ihtiyaç duyulan şarj istasyonlarına da talebin artacağı öngörülmektedir. Bu nedenle yeterli şarj istasyonu altyapısına sahip olmak, bu teknolojinin piyasada tutulmasını gerekli kılmıştır. Yeterli şarj altyapısı sağlanırsa elektrikli araç sahiplerinin kilometre aralığı konusundaki mevcut endişeleri azaltılarak sürücülerin bu teknolojiye adaptasyonu artabilir. Şarj istasyonlarına erişim kolaylaştığında, elektrikli araçların benimsenme oranları, petrol talebi ve günün belirli saatlerinde elektrik tüketimi etkilenecektir [2].

Elektrikli araçların popülerlik kazanmasıyla şarj istasyon yerlerinin belirlenmesi ile ilgili literatürde çeşitli çalışmalar geliştirilmiştir. Bu çalışmalardan bahsedecek olursak: You ve Hsieh [3], elektrikli araçların menzili, şarj istasyonlarının yüksek altyapı maliyeti gibi sorunlarına işaret etmek için KTDP dayalı bir model önermişlerdir. Bu problemi çözmek için genetik algoritma ve hibrit sezgisel yaklaşım kullanmışlardır. Çalışmalarının sonucunda ise, hibrit sezgisel yaklaşımın, diğer çözüm yöntemlerine kıyasla daha verimli olduğunu iddia etmişlerdir. Bouguerra ve Layeb [4], Tunus şehrini ele alarak, şarj istasyonlarının yerleşimi ve boyutlandırılması için 5 farklı tamsayılı doğrusal programlama modelleri önermişlerdir. Guo ve diğerleri [5], elektrikli taksilere batarya sağlayan altyapıların yerini belirlemeye yönelik, şarj ve batarya değişim istasyonlarının konum optimizasyonlarından oluşan iki alt problemi çözmek için minimum maliyetli model ve bir çözüm algoritması önermişlerdir. Önerilen model Çin'in Dalian şehrinde uygulanmıştır. Dinç ve diğerleri [6], şarj istasyonu sayısını ve her bölgenin en az bir şarj istasyonuna olan mesafesini ve şarj istasyonları arasındaki mesafeyi en aza indirmek için şarj istasyon yerlerinin belirlenmesine yönelik çok amaçlı matematiksel model geliştirmişlerdir. Model Eskişehir ilinde uygulanarak ağırlıklı toplam skalerleştirme yöntemi ile çözmüşlerdir.

Elektrikli araç şarj istasyon yerlerinin belirlenmesi ile ilgili yapılan çalışmalarda literatürde optimizasyon ile ilgili çeşitli yaklaşımlar mevcuttur. Optimizasyon tabanlı yaklaşımlar, talebin geometrik temsiline bağlı olarak nokta ve akış tabanlı olarak iki gruba ayrılır [7]. Nokta temelli yaklaşım noktalarla ifade edilen talebi karşılar. Nokta tabanlı yaklaşıma yönelik modellere P-medyan ve maksimum kapsama modelleri örnek olarak verilebilir. Akış tabanlı yaklaşım ise trafik akışları tarafından ifade edilen talebi karşılar. Akış yakalama konum modeli (AYKM) ilk olarak 1990 yılında, trafik akışı taleplerini karşılamak için marketler ve reklam panoları gibi tesisleri yol boyunca yerleştirmeye çalışan M. John Hodgson tarafından önerildi [8]. AYKM, yolda bir yakıt ikmali tesisi olduğunda, tüm trafik akışının yakalanabileceğini ve hedefe başarılı bir şekilde varılabileceğini varsaymaktadır. Ancak bu varsayımda, araçların maksimum sürüş mesafesi göz ardı edilmiştir. Akış yakalama konum tahsis modeline dayanarak, Kuby ve Lim [9], araçların en uzun seyahat mesafesini dikkate almış ve akış yakıt ikmal yer modelini geliştirmişlerdir.

Lim ve Kuby [10], hidrojen, etanol, biyodizel, doğal gaz veya elektrik gibi alternatif yakıtlı araçların istasyon yerlerini belirlemek için akış yakıt-ikmal yer modelini kullanmışlardır. Modelin çözümünde KTDP ek olarak açgözlü toplama, ikameli açgözlü toplama ve genetik algoritma olmak üzere üç sezgisel algoritma geliştirmişlerdir. Florida eyaletinde hidrojen yakıt ikmali istasyonlarını bulmak için geliştirdikleri algoritmaları uygulamışlardır. Bu algoritmaların karmaşık akış yakıt ikmal problemlerini çözmede etkili ve verimli olduğunu göstermişlerdir. Xylia ve diğerleri [11], elektrikli otobüslerin şarj istasyonlarının yerlerinin belirlenmesi için Stockholm'un önerdiği otobüs ağını ele almışlardır. Yazarlar, sorunu çözmek için bir karışık tamsayılı programlama modeli geliştirmişlerdir. Model, otobüs ağının ulaşım maliyetini en aza indirmeyi amaçlamıştır. He ve diğerleri [12], elektrikli araçların şarj istasyonlarının en uygun yerlerini bulmak için akış yakıt ikmali konum modeline dayalı iki seviyeli bir programlama modeli kullanmışlardır. Model, trafik akışının en çok olması amaçlanmıştır. Daha büyük problemler için sezgisel bir model oluşturularak her iki modelin sonuçları test edilmiştir. Honma ve Kuby [13], toplam seyahat süresini en aza indiren ve talepleri karşılayan iki farklı şarj istasyonu konum modellerini karşılaştırmışlardır. Bu amaçla, yol tabanlı akış yakıt-ikmal yer modelini ve düğüm tabanlı p-medyan modelini kullanmışlardır. Her iki modeli de Florida eyaletindeki hidrojen yakıt ikmal istasyonlarının bulunmasında da uygulamışlardır.

Yukarıda verilen literatür araştırmasının özeti Tablo 1'de verilmiştir.

Tablo 1 Literatür Araştırmasının Çözüm Yöntemleri Açısından Sınıflandırılması

Yazar	Kesin Çözüm Yöntemleri				Sezgisel Çözüm Yöntemleri			
	Karışık Tamsayı Programlama	Çok Amaçlı Model	Akış Yakıt İkmal Modeli	P-Medyan Problemi	Genetik Algoritma	Açgözlü İkame Algoritma	İkameli Açgözlü Toplam Algoritma	Açgözlü Toplam Algoritma
Hodgson (1990)			✓			✓		
Kuby ve Kim (2005)	✓		✓					
Lim ve Kuby (2010)	✓		✓		✓		✓	✓
You ve Hsieh (2014)					✓			
Xylia vd. (2017)	✓							
He vd. (2018)			✓					
Bouguerra ve Layeb (2019)	✓							
Honma ve Kuby (2019)	✓		✓	✓				
Guo vd. (2020)	✓							
Dinç vd. (2021)	✓	✓						

Bu çalışmada elektrikli araçların şarj istasyon yerlerinin belirlenmesi problemi incelenmiştir. Problem, istasyon kurulum maliyetleri en az, ilçeler arasındaki tüm yolların akışı en çok olacak şekilde çok amaçlı olarak ele alınmıştır. Akış yakıt ikmal modeline dayanan modelin çok amaçlı çözümünde ağırlıklı toplam metodu kullanılmıştır. Çalışmanın ikinci kısmında çok amaçlı optimizasyon ve kullanılan çözüm metodu kısaca ele alınmıştır. Üçüncü bölümde çalışma kapsamında geliştirilen model açıklanmıştır. Dördüncü bölümde modelde kullanılan verilerin elde edilmesi ve probleme uygulanması açıklanmıştır. Son bölümde ise sonuç ve çıkarımlar sunulmuştur.

2. Çok Amaçlı Optimizasyon

Optimum değer veya en iyi çözüm, optimizasyon süreci ile bulunabilir. Optimizasyon problemleri, bir veya birden çok amaçlı olarak en çok veya en az değer aramayı içerir. Birden fazla amacı olan problemlere çok amaçlı optimizasyon adı verilir. Çok amaçlı optimizasyon, istenen birden fazla hedefin optimal çözüm değerlerini bulmayı ifade eder. Çok amaçlı optimizasyonda birçok modelin seçim ve uygunluk fonksiyonlarında kullandığı pareto kavramı ilk defa 1906 yılında Vilfred Pareto tarafından tanıtılmıştır [14]. Çok amaçlı optimizasyonda amaç fonksiyonunun bir vektörü vardır. Amaç fonksiyonunun her vektörü, çözüm vektörünün bir fonksiyonudur. Çok amaçlı optimizasyonda tüm amaçlar için tek bir en iyi çözüm yoktur, bunun yerine birkaç çözüm vardır.

Denklem (1)'de çok amaçlı bir optimizasyon probleminin genel gösterimi verilmiştir.

$$\text{Enk } [f_1(S), f_2(S), \dots, f_k(S)] \quad (1)$$

$$g_i(S) \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (2)$$

$$h_i(S) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, p \quad (3)$$

Denklem (2) m eşitsizlik, denklem (3) p eşitlik kısıtlarını göstermektedir.

$$\begin{cases} f_i(S) \leq f_i(S^*), & \forall i = 1, 2, \dots, k \\ f_j(S) \leq f_j(S^*), & \exists j \text{ için} \end{cases} \quad (4)$$

Karar değişkenleri S^* vektörü eğer 4'te belirtilen herhangi bir S mevcut değilse Pareto optimaldir. Başka bir deyişle, bu tanım, en az bir kriterde eşzamanlı bir artışa neden olmadan bazı kriterleri azaltacak uygun bir S karar değişkeni vektörü yoksa S^* 'nin Pareto optimal olduğunu söyler [15].

2.1. Ağırlıklı toplam skalerleştirme yöntemi

Ağırlıklı toplam yöntemi, çok amaçlı optimizasyon probleminin tek amaçlı bir matematiksel optimizasyon problemi olarak oluşturulmasına izin verir. Bu yöntemde karar vericiler, hedefleri kendi tercihlerine göre önceliklendirme özgürlüğüne sahiptir. Çok amaçlı fonksiyonlar aşağıda gösterildiği gibi her amaç için belirlenen ağırlık katsayılarıyla tek amaçlı fonksiyona dönüştürülür.

Denklem (5)'te f_i amaç fonksiyonunu, w_i i. amaç fonksiyonunun ağırlığını ifade etmektedir.

$$Enb \sum_{i=1}^k w_i \cdot f_i \quad w_i \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, k \quad (5)$$

$$\sum_{i=1}^k w_i = 1 \quad (6)$$

Her bir amaç fonksiyonu (f_i) problemin kısıtları altında ayrı ayrı çözülür ve pozitif ideal çözümler (en iyi çözüm) bulunur. Daha sonra her bir çözümün karar değişkenleri girdi olarak girilir ve kalan amaç fonksiyonları dikkate alınarak model çözülür. Prosedür, tüm amaç fonksiyonları çözümlene kadar tekrarlanır. Tüm çözümler arasında, her bir amaç fonksiyonu için negatif ideal çözüm (en kötü) bulunur. Amaç fonksiyonları farklı ölçeklerde değişiklik gösterdiğinden, her bir amaç fonksiyonunu aynı ölçekte sunmak için normalleştirme süreci uygulanır. Denklem (7), hem en küçük hem de en büyük amaç fonksiyonları için normalleştirmeyi göstermektedir.

$$f'_i = \begin{cases} \frac{WS_{f_i} - f_i}{WS_{f_i} - BS_{f_i}'} & \text{en küçük amaç fonksiyonu için} \\ \frac{f_i - WS_{f_i}}{BS_{f_i} - WS_{f_i}'} & \text{en büyük amaç fonksiyonu için} \end{cases} \quad (7)$$

Denklem (7)'de f'_i , i. amaç fonksiyonunun normalleştirilmiş değerini, WS_{f_i} f_i amaç fonksiyonunun en kötü çözümünü, BS_{f_i} f_i amaç fonksiyonunun en iyi çözümünü ifade etmektedir.

3. Elektrikli Araç Şarj İstasyon Yerlerinin Belirlenmesi Problemi

Bu çalışmada elektrikli araçların şarj istasyon yerlerinin belirlenmesi problemi ele alınmıştır. Çalışma da optimum istasyon sayısının belirlenebilmesi için Kuby ve Lim [9] tarafından geliştirilmiş akış yakıt ikmal yer modeli geliştirilerek kullanılmıştır. Bu modele şarj istasyonu maliyetlerini en aza indirgeyen amaç fonksiyonu eklenmiştir. Bu sebeple problemimiz trafik akışını en çok, istasyon maliyeti en az olacak şekilde çok amaçlı modelle çözümlenmeye çalışılmıştır.

Akış Yakıt İkmal Yer Modeli, belirli bir ağ alanı üzerinde optimum yakıt ikmal istasyonu miktarını belirlemek için kullanılan modeldir. Model araçların izleyeceği sürüş menzili üzerinde yakıt ikmal yapılabilen başlangıç-hedef (O-D) çiftleri arasındaki trafik akışını dikkate alır. Hesaplamalarda kullanılacak olan modelin formülleri aşağıda verilmektedir:

$$Enb f_1 = \sum_{q \in Q} f_q y_q \quad (8)$$

$$Enk f_2 = \sum_{k \in K} c_k x_k \quad (9)$$

$$\sum_{h \in H} b_{qh} v_h \geq y_q \quad \forall q \in Q \quad (10)$$

$$a_{hk} x_k \geq v_h \quad \forall h \in H ; k | a_{hk} = 1 \quad (11)$$

$$\sum_{k \in K} x_k = p \quad (12)$$

$$x_k, v_h, y_q \in \{0,1\} \quad \forall k, q, h \quad (13)$$

$q = 0 - D$ çiftlerinin indeksi (ve dolaylı olarak, her çift için en kısa yollar)

$Q =$ Tüm $0 - D$ çiftlerinin kümesi

$f_q = 0 - D$ çifti ile q arasındaki en kısa yoldaki akış hacmi

$k =$ Potansiyel tesis yeri

$c_k =$ İstasyon maliyetleri

$K =$ Tüm potansiyel tesis konumlarının kümesi

$p =$ Yerleştirilecek tesis sayısı

$$y_q = \begin{cases} 1, & \text{eğer } f_q \text{ kapsanırsa} \\ 0, & \text{aksi halde} \end{cases}$$

$$x_k = \begin{cases} 1, & \text{eğer tesis } k \text{ konumunda bulunuyorsa} \\ 0, & \text{aksi halde} \end{cases}$$

$h =$ Tesis kombinasyonlarının indeksi

$H =$ Tüm potansiyel tesis kombinasyonlarının kümesi

$$a_{hk} = \begin{cases} 1, & \text{eğer } k \text{ tesisi } h \text{ kombinasyonundaysa} \\ 0, & \text{aksi halde} \end{cases}$$

$$b_{qh} = \begin{cases} 1, & \text{eğer tesis kombinasyonu } h, 0-D \text{ çifti } q \text{'da yakıt ikmali yapıyorsa} \\ 0, & \text{aksi halde} \end{cases}$$

$$v_h = \begin{cases} 1, & \text{h kombinasyonundaki tüm tesisler açıksa} \\ 0, & \text{aksi halde} \end{cases}$$

Amaç fonksiyonu (8), p tesisleri ile yakıt ikmali yapılabilecek toplam akışı en üst düzeye çıkarır. Amaç fonksiyonu (9), şarj istasyon kurulum maliyetlerini en aza indirger. Kısıt (10), uygun bir tesis kombinasyonu (h) seçilmedikçe q yolunun kapsanmasını önler. Kısıt (11), h kombinasyonundaki tüm tesisler açık olmadığı sürece v_h 'yi sıfırda tutar. Kısıt (12), açılan istasyon sayısının p 'ye eşitler. Kısıt (13), ikili kısıtlamaları sağlar.

4. Uygulama

Bu çalışmada Sakarya ili için elektrikli araçların şarj istasyon yerlerinin belirlenmesi problemi ele alınarak çözülmüştür. Ele alınan problem çok amaçlı olarak modellenmiştir. Problemin amaçları yakıt ikmali yapabilecek akış hacminin en çok, şarj istasyon kurulum maliyetlerinin en az olmasıdır.

Yakıt ikmali yapabilecek akış hacminin maksimum olmasını amaçlayan fonksiyonda kullanılmak üzere oluşturulan veriler aşağıdaki tablolarda sunulmuştur. Tablo 2'de sunulan tüm potansiyel istasyon konumları (K), Sakarya ilinin tüm ilçeleri olabileceği varsayımına göre belirlenmiştir.

Tablo 2. Tüm potansiyel tesis konumları

Numara	K : Tüm potansiyel istasyon konumları
1	Adapazarı
2	Serdivan
3	Akyazı
4	Erenler
5	Hendek
6	Karasu
7	Geyve
8	Arifiye
9	Sapanca
10	Pamukova
11	Ferizli
12	Kaynarca
13	Kocaeli

14	Söğütlü
15	Karapürçek
16	Taraklı

Tablo 3'te gösterilen tüm potansiyel tesis kombinasyonları (H) ilçeler arası ulaşımda kullanılabilen fiziki yollardan oluşmaktadır.

Tablo 3. Tüm potansiyel tesis kombinasyonları

Numara	H: Tüm potansiyel istasyon kombinasyonları
1	Adapazarı - Erenler - Arifiye - Sapanca
2	Serdivan - Sapanca
3	Adapazarı - Akyazı
4	Kaynarca - Karasu - Kocaali
5	Adapazarı - Hendek
6	Serdivan - Erenler
7	Akyazı - Hendek
8	Adapazarı - Erenler - Karapürçek
9	Akyazı - Erenler
10	Adapazarı - Söğütlü
11	Erenler - Arifiye
12	Adapazarı - Serdivan
13	Erenler - Arifiye - Sapanca
14	Erenler - Hendek
15	Adapazarı - Kaynarca
16	Karasu - Kocaali
17	Geyve - Pamukova
18	Adapazarı - Arifiye - Geyve - Taraklı
19	Adapazarı - Arifiye
20	Adapazarı - Erenler
21	Adapazarı - Arifiye - Serdivan
22	Adapazarı - Arifiye - Sapanca
23	Adapazarı - Arifiye - Geyve
24	Adapazarı - Erenler - Arifiye
25	Arifiye - Sapanca
26	Serdivan - Erenler - Arifiye
27	Adapazarı - Ferizli - Söğütlü
28	Adapazarı - Serdivan - Erenler - Arifiye
29	Adapazarı - Serdivan - Arifiye - Sapanca
30	Serdivan - Arifiye
31	Adapazarı - Arifiye - Geyve - Pamukova
32	Sapanca - Arifiye - Erenler - Karapürçek
33	Kocaali - Karasu - Ferizli - Söğütlü - Adapazarı - Akyazı - Hendek
34	Karasu - Ferizli - Söğütlü - Adapazarı - Erenler - Arifiye - Geyve - Taraklı
35	Erenler - Adapazarı - Söğütlü - Ferizli - Karasu

Tablo 4'te f_q değerinin belirlenmesinde kullanılmak üzere Sakarya'da bulunan tüm ilçelerin akaryakıt istasyon sayısı verileri sunulmuştur. Akaryakıt istasyon sayıları normalize edilerek ölçeklendirilmiştir.

Tablo 4. Akaryakıt istasyon sayısı verileri

İlçeler	Akaryakıt İstasyon Sayıları	Normalize edilmiş değerler
Adapazarı	33	0,160194
Serdivan	11	0,053398
Akyazı	23	0,11165
Erenler	18	0,087379
Hendek	14	0,067961
Karasu	15	0,072816
Geyve	21	0,101942
Arifiye	15	0,072816
Sapanca	4	0,019417
Pamukova	18	0,087379
Ferizli	5	0,024272

Kaynarca	7	0,033981
Kocaali	5	0,024272
Söğütlü	8	0,038835
Karapürçek	4	0,019417
Taraklı	5	0,024272
Toplam	206	1

Her bir istasyon için normalize edilmiş değerler hesaplanırken aşağıdaki formül kullanılmıştır:

$$ND_i = \frac{A_i}{\sum_{i=1}^n A_i} \quad (14)$$

A_i : i. ilçenin akaryakıt istasyon sayısı

ND_i : i. ilçenin normalize edilmiş akaryakıt istasyon değeri

Problemde Sakarya ilinin tüm ilçelerine ulaşımı sağlayan belediye ve özel halk otobüs güzergahları, O-D çifti olarak kullanılmıştır. O-D çiftinin akış değerleri, Tablo 4'te verilen akaryakıt istasyon sayıları kullanılarak hesaplanmıştır.

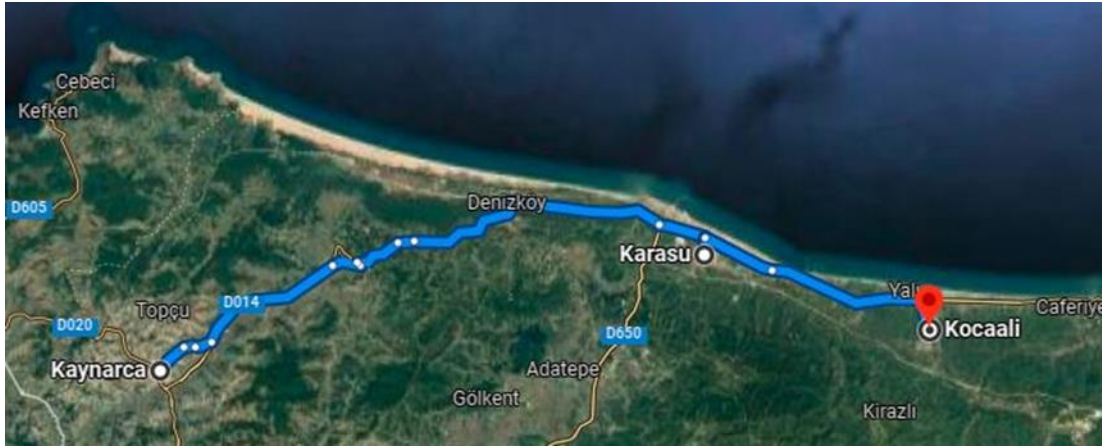
O-D çiftlerine ait akış değerleri hesaplanırken aşağıdaki formül kullanılmıştır:

$$f_i = \sum_{i=0}^D A_i \quad (15)$$

O: O-D çifti için başlangıç istasyonu

D: O-D çifti için son istasyon

f_i : i. istasyonun akış değeri



Şekil 1. q1 yolunun güzergahı

Örnek olarak Şekil 1. Kaynarca - Karasu - Kocaali güzergahını harita üzerinde göstermektedir. Kaynarca Karasu ve Kocaali için yolun akış değeri (f_q), Tablo 4'te Formül 14 ile hesaplanan normalize edilmiş değerler konularak aşağıdaki gibi hesaplanabilir:

$$\text{Kaynarca - Karasu - Kocaali} = 0,033981 + 0,072816 + 0,024272 = 0,13107$$

Tablo 5'te O-D çiftlerinin güzergahları ve güzergahların hesaplanan akış değerleri özetlenmiştir.

Tablo 5. O-D çiftleri ve akış değerleri

q	Yollar	Akış değerleri (f_q)
1	Kaynarca - Karasu - Kocaali	0,13107
2	Akyazı - Hendek	0,17961
3	Adapazarı - Söğütlü	0,19903
4	Adapazarı - Kaynarca	0,19417
5	Adapazarı - Serdivan	0,21359
6	Adapazarı - Söğütlü - Ferizli	0,2233
7	Adapazarı - Arifiye	0,23301
8	Adapazarı - Erenler	0,24757
9	Adapazarı - Arifiye - Sapanca	0,25243
10	Adapazarı - Arifiye - Serdivan	0,28641

11	Adapazarı - Erenler - Karapürçek	0,26699
12	Adapazarı - Söğütlü - Ferizli - Karasu - Kocaali	0,32039
13	Serdivan - Adapazarı - Erenler	0,30097
14	Adapazarı - Akyazı - Hendek	0,33981
15	Adapazarı - Arifiye - Geyve	0,33495
16	Adapazarı - Erenler - Arifiye	0,32039
17	Adapazarı - Erenler - Akyazı	0,35922
18	Adapazarı - Söğütlü - Ferizli - Karasu	0,29612
19	Adapazarı - Arifiye - Geyve - Taraklı	0,35922
20	Adapazarı - Erenler - Karapürçek - Akyazı	0,37864
21	Arifiye - Adapazarı - Söğütlü - Ferizli - Karasu - Kocaali	0,3932
22	Adapazarı - Arifiye - Geyve - Pamukova	0,42233
23	Adapazarı - Arifiye - Erenler - Akyazı - Hendek	0,5

Problemdede minimum olması hedeflenen elektrikli araçların şarj istasyon kurulum maliyetleri, şarj istasyonu açılacak ilçedeki arsaların metrekaresi birim fiyatlaması varsayımına dayandırılmıştır. Her bir ilçe için normalize edilmiş değerler hesaplanırken aşağıdaki formül kullanılmıştır:

$$ND_i = \frac{M_i}{\sum_{i=1}^n M_i} \quad (16)$$

M_i : i. ilçede akaryakıt istasyon kurulum maliyeti

ND_i : i. ilçede akaryakıt istasyon kurulum maliyetinin normalize edilmiş değeri

İlçe bazında hesaplanan şarj istasyon kurulum maliyetleri Tablo 6'da gösterilmiştir [16].

Tablo 6. İstasyon kurulum maliyetleri

İlçeler	Kurulum maliyetleri(TL/m ²)	Normalizasyon
Adapazarı	672	0,092651
Serdivan	1024	0,141183
Akyazı	382	0,052668
Erenler	485	0,066869
Hendek	337	0,046464
Karasu	393	0,054184
Geyve	178	0,024542
Arifiye	655	0,090307
Sapanca	769	0,106025
Pamukova	243	0,033503
Ferizli	300	0,041362
Kaynarca	210	0,028954
Kocaali	768	0,105887
Söğütlü	344	0,047429
Karapürçek	379	0,052254
Taraklı	114	0,015718
Toplam	7253	1

Çok amaçlı matematiksel modelin çözümünde ağırlıklı toplam metodu kullanılmıştır. Yakıt ikmali yapabilecek akış hacmini maksimum yapmayı amaçlayan f_1 ile şarj istasyon kurulum maliyetinin minimum olmasını amaçlayan f_2 amaç fonksiyonlarının, çok amaçlı matematiksel model çözümünde eşit derecede öneme sahip olduğu varsayılmıştır. Oluşturulan amaç fonksiyonların 16 ilçe için tek ve çok amaçlı optimum çözümleri Tablo 7'de sunulmuştur.

Tablo 7. İstasyon yeri seçimi için optimum çözümler

P (Yerleştirilecek tesis sayısı)	1. Amaç fonksiyonu	2. Amaç fonksiyonu	Çok amaçlı fonksiyon	
	Enb f_1 (akış hacmi)	Enk f_2 (kurulum maliyeti)	Enk = $f_1' + f_2'$ (ağırlıklı toplam)	
1	$f_1 = 0,35922$ (en iyi)	$f_2 = 0$ (en kötü)	$f_1 = 0,35922$	
	$f_2 = 0,09265$ (en kötü)	$f_2 = 0,01572$ (en iyi)	$f_2 = 0,01572$	
			$f_1' = 1$	$f_2' = 1$
			$f_{enk} = 1$	

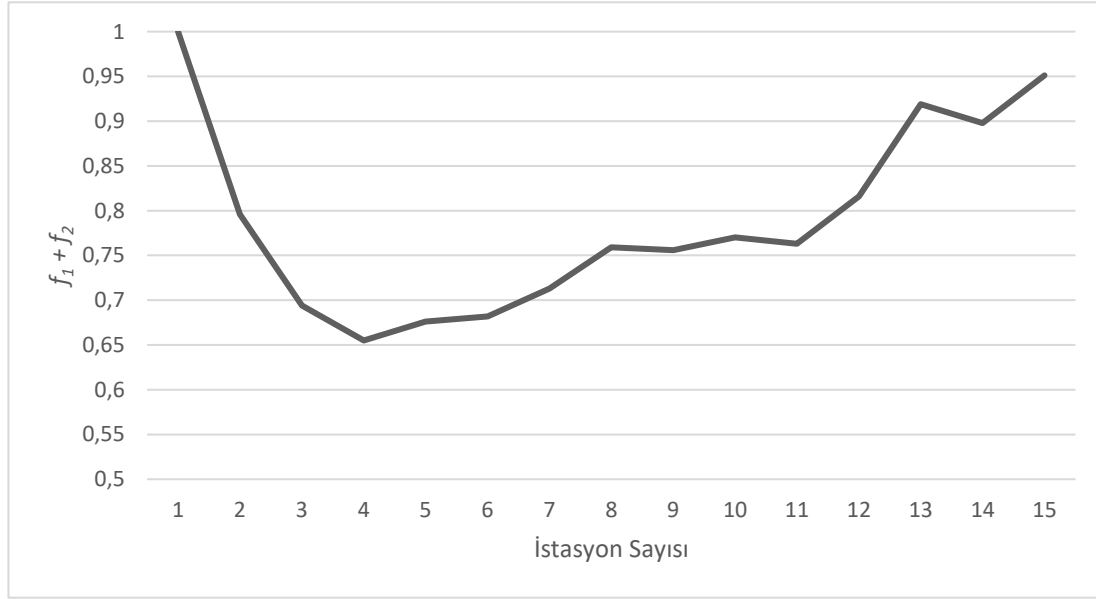
2	$f_1 = 0,60679$ (en iyi) $f_2 = 0,15952$ (en kötü)	$f_1 = 0$ (en kötü) $f_2 = 0,04026$ (en iyi)	$f_1 = 0,35922$ $f_2 = 0,0426$	$f_1' = 0,592$ $f_2' = 1$ $f_{enk} = 0,796$
3	$f_1 = 0,92718$ (en iyi) $f_2 = 0,24983$ (en kötü)	$f_1 = 0$ (en kötü) $f_2 = 0,06921$ (en iyi)	$f_1 = 0,35922$ $f_2 = 0,06921$	$f_1' = 0,387$ $f_2' = 1$ $f_{enk} = 0,694$
4	$f_1 = 1,42718$ (en iyi) $f_2 = 0,39101$ (en kötü)	$f_1 = 0$ (en kötü) $f_2 = 0,10272$ (en iyi)	$f_1 = 0,97573$ $f_2 = 0,2104$	$f_1' = 0,684$ $f_2' = 0,626$ $f_{enk} = 0,655$
5	$f_1 = 1,76213$ (en iyi) $f_2 = 0,41555$ (en kötü)	$f_1 = 0$ (en kötü) $f_2 = 0,14408$ (en iyi)	$f_1 = 1,684$ $f_2 = 0,308$	$f_1' = 0,956$ $f_2' = 0,397$ $f_{enk} = 0,676$
6	$f_1 = 2,18446$ (en iyi) $f_2 = 0,44906$ (en kötü)	$f_1 = 0$ (en kötü) $f_2 = 0,19054$ (en iyi)	$f_1 = 1,917$ $f_2 = 0,32359$	$f_1' = 0,878$ $f_2' = 0,485$ $f_{enk} = 0,682$
7	$f_1 = 2,45145$ (en iyi) $f_2 = 0,50131$ (en kötü)	$f_1 = 0$ (en kötü) $f_2 = 0,23797$ (en iyi)	$f_1 = 2,112$ $f_2 = 0,353$	$f_1' = 0,861$ $f_2' = 0,565$ $f_{enk} = 0,713$
8	$f_1 = 2,70388$ (en iyi) $f_2 = 0,60733$ (en kötü)	$f_1 = 0$ (en kötü) $f_2 = 0,29023$ (en iyi)	$f_1 = 2,379$ $f_2 = 0,405$	$f_1' = 0,88$ $f_2' = 0,639$ $f_{enk} = 0,759$
9	$f_1 = 2,93689$ (en iyi) $f_2 = 0,62305$ (en kötü)	$f_1 = 0$ (en kötü) $f_2 = 0,34289$ (en iyi)	$f_1 = 2,534$ $f_2 = 0,441$	$f_1' = 0,863$ $f_2' = 0,649$ $f_{enk} = 0,756$
10	$f_1 = 3,13592$ (en iyi) $f_2 = 0,67048$ (en kötü)	$f_1 = 0$ (en kötü) $f_2 = 0,39708$ (en iyi)	$f_1 = 2,8$ $f_2 = 0,494$	$f_1' = 0,893$ $f_2' = 0,647$ $f_{enk} = 0,77$
11	$f_1 = 3,35922$ (en iyi) $f_2 = 0,71184$ (en kötü)	$f_1 = 0$ (en kötü) $f_2 = 0,46395$ (en iyi)	$f_1 = 2,8$ $f_2 = 0,54$	$f_1' = 0,834$ $f_2' = 0,693$ $f_{enk} = 0,763$
12	$f_1 = 3,55339$ (en iyi) $f_2 = 0,7408$ (en kötü)	$f_1 = 0$ (en kötü) $f_2 = 0,55425$ (en iyi)	$f_1 = 2,98$ $f_2 = 0,593$	$f_1' = 0,839$ $f_2' = 0,794$ $f_{enk} = 0,816$
13	$f_1 = 3,55339$ (en iyi) $f_2 = 0,79346$ (en kötü)	$f_1 = 0$ (en kötü) $f_2 = 0,64691$ (en iyi)	$f_1 = 2,98$ $f_2 = 0,647$	$f_1' = 0,839$ $f_2' = 1$ $f_{enk} = 0,919$

14	$f_1 = 3,733$ (en iyi) $f_2 = 0,83993$ (en kötü)	$f_1 = 0$ (en kötü) $f_2 = 0,75279$ (en iyi)	$f_1 = 2,98$ $f_2 = 0,753$	$f_1' = 0,798$ $f_2' = 0,998$ $f_{enk} = 0,898$
15	$f_1 = 3,733$ (en iyi) $f_2 = 0,94582$ (en kötü)	$f_1 = 0$ (en kötü) $f_2 = 0,85882$ (en iyi)	$f_1 = 3,364$ $f_2 = 0,859$	$f_1' = 0,901$ $f_2' = 1$ $f_{enk} = 0,951$

Tablo 7'de optimum çözüm kümesini bulmak için öncelikle birinci amaç fonksiyonu en iyilenerek model çözülmüştür. Birinci modelin çözümüne gidilirken ikinci amaç fonksiyonun aldığı değerler hesaplanmıştır. Sonrasında ikinci amaç fonksiyonu en iyilenerek çözüm sağlandığında birinci amaç fonksiyonunun aldığı değerler bulunmuştur. Bu şekilde her bir amaç fonksiyonunun almış olduğu en iyi ve en kötü değerler hesaplanmıştır. Ağırlıklı toplam yöntemine göre normalleştirme prosedürü uygulanarak istasyon sayısına göre değişen optimum çözümler elde edilmiştir.

Tablo 7'ye göre toplam amaç fonksiyon değerinin açılacak istasyon sayısında en aza gidildiğinde istasyon kurulum maliyetinde en iyi değeri aldığı ancak toplam akış olarak en kötü değeri aldığı görülmüştür. İstasyon sayısının en çok olduğu durumda ise akış değerleri en iyilenmiş ancak istasyon kurulum maliyeti istasyon sayısının artmasıyla en kötü değeri almıştır.

Tablo 7'deki verilere göre istasyon sayısına bağlı olarak değişen normalize edilmiş ağırlıklı toplam grafiği Şekil 2'de sunulmuştur.



Şekil 2. İstasyon sayısına bağlı normalleştirilmiş ağırlıklı toplam değeri

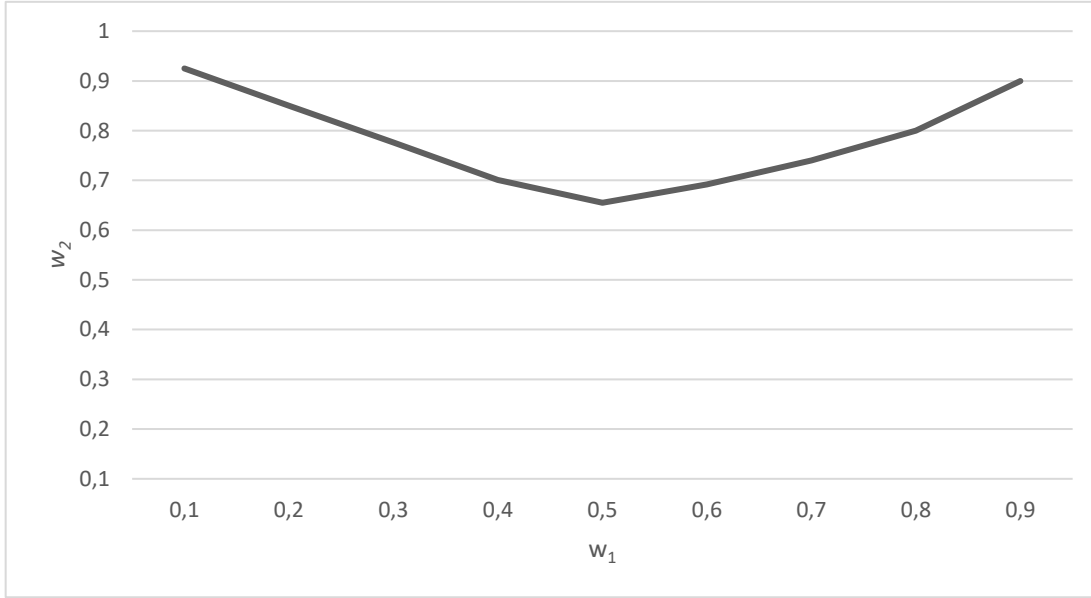
Şekil 2'ye göre Sakarya ilinde dört istasyondan daha az şarj istasyonu açılması durumunda model, maliyeti en aza indirgeyen amaç fonksiyonuna göre uygun çözümler bulmaktadır. Toplamda dört adet istasyon açılması durumunda, en düşük toplam istasyon maliyeti ile trafik akışını en çok yapacak şekilde en uygun çözüm elde edilmektedir. Dört istasyondan daha fazla açılması durumunda ise, istasyon sayısına bağlı olarak toplam maliyet ile trafik akışının da arttığı çözümler elde edilmektedir.

Tablo 8'de dört istasyon için farklı w_1 ve w_2 ağırlıklarına göre değişen amaç fonksiyon değerleri ve açılacak istasyon konumları yer almaktadır.

Tablo 8. Farklı ağırlık değerleri için optimum çözümler

w_1	w_2	f_{min}	Açılacak istasyon konumları
0,1	0,9	0,925	Geyve - Pamukova - Kaynarca - Taraklı
0,2	0,8	0,85	Geyve - Pamukova - Kaynarca - Taraklı
0,3	0,7	0,776	Geyve - Pamukova - Kaynarca - Taraklı
0,4	0,6	0,701	Geyve - Pamukova - Kaynarca - Taraklı
0,5	0,5	0,655	Adapazarı - Ferizli - Kaynarca - Söğütlü
0,6	0,4	0,692	Adapazarı - Erenler - Geyve - Arifiye
0,7	0,3	0,74	Adapazarı - Erenler - Geyve - Arifiye
0,8	0,2	0,8	Adapazarı - Serdivan - Erenler - Arifiye
0,9	0,1	0,9	Adapazarı - Serdivan - Erenler - Arifiye

Şekil 3'te Tablo 8'de de ifade edildiği gibi, farklı w_1 ve w_2 ağırlıklarına göre bulunan sonuçların Pareto optimal grafiği verilmiştir.

**Şekil 3.** Pareto optimal grafiği

4. Tartışma ve Sonuç

Gelişmekte olan ülkeler arasında Türkiye'de, çevre dostu elektrikli araçlara yapılan yatırımlar ile elektrikli araç kullanımının yaygınlaştırılması hedeflenmektedir. Elektrikli araç teknolojisine uyum sağlamak ve elektrikli araç kullanımını artırmak için erişilebilir ve yeterli sayıda şarj istasyonlarının konumlandırılması gerekmektedir. Yeterli şarj altyapısı sağlandığı takdirde elektrikli araç sahiplerinin kilometre aralığı konusundaki mevcut endişeleri azaltılarak sürücülerin bu teknolojiye adaptasyonunun artabileceği düşünülmektedir. Bu çalışmada Sakarya ilinde elektrikli araç kullanımını uygun hale getirebilmek adına yeterli şarj istasyon sayısının belirlenmesi ve şarj istasyonlarının konumlanması üzerine odaklandık. Bu doğrultuda istasyon kurulum maliyetleri en az, ilçeler arasındaki tüm yolların akışı ise en çok olacak şekilde akış yakıt ikmal yer modeline dayanan çok amaçlı karışık tamsayılı doğrusal programlama modeli geliştirilmiştir. Modelde kullanılan O-D verileri, belediye ve özel halk otobüslerinin kullandığı güzergâhlardan elde edilmiştir. İstasyon maliyetleri ise arsaların ilçelere göre değişen metrekaresine birim fiyatları üzerinden hesaplama yapılarak elde edilmiştir. Çok amaçlı modelin çözümünde literatürde sıkça kullanılan ağırlıklı toplam metodu kullanılmıştır. Elde edilen

optimum çözümlere göre, modelde belirlenen amaçların en iyilendiği Pareto optimali, dört adet şarj istasyonu açılması durumunda sağlanmıştır. En uygun çözümün sağlandığı şarj istasyon konumları Adapazarı, Ferizli, Kaynarca ve Söğütli olarak elde edilmiştir.

Bu çalışmada çok amaçlı matematiksel model trafik akışı en çok, şarj istasyon kurulum maliyeti en az olacak şekilde iki amaç fonksiyonu ile çözülmüştür. Daha sonra yapılacak çalışmalar için amaç fonksiyonlarının kapsamı genişletilerek, şarj esnasında harcanan süre, şarj kapasitesi vb. durumlar göz önünde bulundurularak daha geniş kapsamlı modeller elde edilebilir. Ayrıca çalışma Türkiye veya diğer ülkeler için genişletilerek sezgisel çözümler geliştirilebilir.

Kaynakça

- [1] www.trthaber.com (26.06.2022).
- [2] Gavranovic, H., A. Barut, G. Ertek, O.B. Yüzbaşıoğlu, O. Pekpostalcı & Ö. Tomuş (2014). Optimizing the electric charge station network of EŞARJ. *Procedia Computer Science* 31: 15-21.
- [3] You, P.-S., & Hsieh, Y.-C. (2014). A hybrid heuristic approach to the problem of the location of vehicle charging stations. *Computers & Industrial Engineering*, 195-204.
- [4] Bouguerra S., Layeb S.B. 2019. Determining optimal deployment of electric vehicles charging stations: Case of Tunis city, Tunisia. *Case Studies on Transport Policy* 7(3):628-642.
- [5] Guo Z., Yu B., Li K., Yang Y., Yao B., Lin Q. 2020. Locating battery supplying infrastructures for electric taxis. *Transportation Letters* 12(2), 77-86.
- [6] Dinç Yalçın, G., Özsoy, C. Y., & Taşkın, Y. (2021). A multi-objective mathematical model for the electric vehicle charging station placement problem in urban areas. *International Journal of Sustainable Energy*, 1-17.
- [7] Kim, J. G., & Kuby, M. (2012). The deviation-flow refueling location model for optimizing a network of refueling stations. *International Journal Of Hydrogen Energy*, 37(6), 5406-5420.
- [8] Hodgson M. J. (1990). "A flow capturing location-allocation model." *Geographical Analysis*, 22, 270-9.
- [9] Kuby, M., and Lim, S. (2005). "The flow-refueling location problem for alternative-fuel vehicles." *Socio-Economic Planning Sciences*, 39, 125-145.
- [10] Lim, S., & Kuby, M. (2010). Heuristic algorithms for siting alternative-fuel stations using the flow-refueling location model. *European Journal of Operational Research*, 204(1), 51-61.
- [11] Xylia, M., S. Leduc, P. Patrizio, F. Kraxner & S. Silveria (2017). Locating charging infrastructure for electric buses in Stockholm. *Transportation Research Part C* 78: 183-200.
- [12] He J., Yang H., Tang T.Q., Huang H.J. (2018) An Optimal Charging Station Location Model With The Consideration Of Electric Vehicle's Driving Range. *Transportation Research, Part C* (86), 641-654.
- [13] Honma Y., Kuby M. (2019). Node-based vs. Path-based location models for urban hydrogen refueling stations: comparing convenience and coverage abilities. *International Journal of Hydrogen Energy*, 44, 15246 - 15261.
- [14] Akçay, E. (2009). Akış tipi iş çizelgeleme problemlerinin yapay bağımsızlık sistemi ile çok amaçlı optimizasyonuna yönelik bir model önerisi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Endüstri Mühendisliği Bölümü, Doktor Tezi.
- [15] Belgasmi, N., Said, L.B. ve Ghedira, K., (2008). "Evolutionary Multiobjective Optimization of the Multi-Location Transshipment Problem ", *Operational Research*, 8:167-183.
- [16] www.endeksa.com.tr (26.06.2022).

Infrared Spectroscopic and Calorimetric Studies of the Interaction of Cholecalciferol with Sphingomyelin Model Membranes

Ipek Sahin *

*Department of Physics, Faculty of Science, Ege University, 35100, Bornova, Izmir, Turkey

(Alınış / Received: 26.05.2022, Kabul / Accepted: 29.07.2022, Online Yayınlanma / Published Online: 23.08.2022)

Keywords

Cholecalciferol,
Model Membrane,
FTIR,
DSC

Abstract: Cholecalciferol is a steroid hormone produced in the skin under sunlight and when obtained from dietary foods. In this study, Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy and differential scanning calorimetry (DSC) were used first time in order to investigate the interactions between cholecalciferol and sphingomyelin (SM) multilamellar vesicles (MLVs) depending on vitamin concentration and temperature. The present results showed the main phase transition temperature to decrease, the system was disordered, and the system's dynamics increased both in the gel and liquid crystal phases when cholecalciferol was added to pure SM MLVs. For the head group region, hydrogen bonding was also observed after treatment with cholecalciferol.

Kolekalsiferolün Sfingomyelin Model Membranları ile Etkileşiminin Kızılötesi Spektroskopik ve Kalorimetrik Çalışmaları

Anahtar Kelimeler

Kolekalsiferol,
Model Membran,
FTIR,
DSC

Öz: Bu çalışmada, kolekalsiferol ve sfingomyelin (SM) çok katmanlı veziküller (MLV'ler) arasındaki etkileşimleri, vitamin konsantrasyonuna ve sıcaklığa bağlı olarak araştırmak için ilk kez Fourier transform kızılötesi (FTIR) spektroskopisi ve diferansiyel taramalı kalorimetri (DSC) kullanılmıştır. Mevcut sonuçlar, saf SM MLV'lere kolekalsiferol eklendiğinde ana faz geçiş sıcaklığının düştüğünü, sistemin düzensiz olduğunu ve sistem dinamiğinin hem jel hem de sıvı kristal fazlarda arttığını göstermiştir. Baş grup bölgesi için, kolekalsiferol ile etkileşim sonrası hidrojen bağı da gözlenmiştir.

*Corresponding Author, email: ipek.sahin@ege.edu.tr

1. Introduction

As a precursor hormone, the skin produces cholecalciferol (vitamin D3) when exposed to sunlight, which is converted to calcitriol in the body [1]. This is critical for bone health and development as well as preserving calcium levels [2]. Vitamin D deficiency can be prevented or treated with dietary supplements containing cholecalciferol. Diabetes, heart disease, and chronic kidney disease (CKD) may all be exacerbated or even caused by a lack of adequate vitamin D in the body. Vitamin D intake and health outcomes such as cancer prevention and improved immunity have been linked by several researchers [3, 4]. Others have suggested that it may help prevent diabetes and pre-eclampsia during pregnancy, as well as reduce inflammation. [4-6]. Promoting the monoamine's synthesis, neuroprotection and neurotrophic effects [7-11, 12], as well as antioxidant and anti-inflammatory properties [13-15], are among cholecalciferol's primary effects. Vitamin D could effect the development or increase of chronic diseases by influencing oxidative stress [16]. Although cholecalciferol has been shown to have beneficial effects in clinical and preclinical studies, the mechanisms underlying this vitamin's effect are still a mystery. Sphingomyelin, one of the basic structural components of biological cell membranes, plays many important roles and it is a frequently used lipid in model membrane studies [17-19]. Therefore, this study may be important to contribute to the interaction of cholecalciferol with membranes.

Determining the effect of cholecalciferol on membranes may provide an understanding of underlying mechanisms that contribute to its positive benefits in this regard. Despite its significance, only few researches have been carried out to survey the molecular influence of cholecalciferol on membranes [20-24]. They have lately documented the inconsistent effects of cholecalciferol on phase behavior.

Cholecalciferol effect on the lipid order, lipid phase transition, and the polar group's hydration states of zwitterionic dipalmitoyl phosphatidylcholine (DPPC) MLVs's in relation to the temperature and various cholecalciferol concentrations was previously described in our study [25]. It was only this study to be able to thoroughly examine the model membranes's structural and functional parameters; such as lipid phase transitions, the head group's hydration states and membrane order and dynamics. Using FTIR and DSC techniques, SM MLVs including low and high concentrations of cholecalciferol were examined as a temperature and concentration functions compared to pure SM membranes. Contributing to the knowledge of cholecalciferol's action mechanism is significant since it may help interpret prior biological system research and lead to new treatment methods in the future.

2. Material and Method

Sigma (St. Louis, MO, USA) provided cholecalciferol and SM, which were utilized in the absence of any further purification.

According to Severcan et al. [26], pure SM MLVs were prepared for FTIR measurements. In a round-bottomed flask, 5 mg of phospholipid were dissolved in chloroform to make SM MLVs. It was possible to dry a lipid film using nitrogen flux evaporation and a Christ LT-105 spin vac for at least two hours. To hydrate the film, 25 μ l of pH 7.4 PBS buffer solution was added. Liposomes were created by whirling the mixture for about 20 minutes at a time above the gel-liquid phase transition. In order to make liposomes containing cholecalciferol, we first made a stock solution of the vitamin in ethanol and then transferred it to a round-bottomed flask. Nitrogen stream was used to eliminate the excess ethanol and the same round-bottomed flask was used to dissolve 5 mg of SM in chloroform. It was then followed by the same procedure used to make pure SM liposomes. FTIR studies were carried out using sample amounts of 20 μ l on a CaF₂ window with a cell thickness of 12 μ m. Infrared spectra were gathered using the PerkinElmer Frontier FTIR spectrometer. At a resolution of 2 cm⁻¹, 50 scans were taken to calculate the average interferogram. The digital controller (Specac) was used to regulate the temperature increase. Before beginning data collection, each temperature was held for five minutes. There were 2 °C gaps between 25 and 65 °C for the research.

Analysis of the spectra was provided using PerkinElmer Spectrum software. spectrum of the air was saved as the background spectrum and automatically subtracted from the sample spectra. Band positions were measured relative to the center of gravity and bandwidth measurements were calculated from eighty percent of the height of the respective bands. Specific FTIR analyzes were performed from the subtracted spectra.

Thin films for DSC measurements were made by hydrating 2 grams of phospholipid in 50 μ l of phosphate buffer, just as was done for the infrared investigation. 1°C/min heating rate was applied to a DSC instrument from TA Instruments Inc. (TA Instruments Inc is located in New Castle, Delaware in the United States).

3. Results

Two non-invasive methods, FTIR spectroscopy and DSC, were used to evaluate the interaction of cholecalciferol with SM vesicles for the first time in this investigation. These approaches, which have been frequently employed in model membrane research [26-28], enabled us to gather precise information about the effects of agents on phospholipid liposomes depending on the concentration and temperature.

First, the results obtained with the DSC technique were examined. This technique gave information about the calorimetric phase transitions of the system. The parameters considered were the temperature (T_m) of the main phase transition.

Fig. 1 shows DSC curves for SM MLVs in the absence and presence of cholecalciferol. The transition peak for pure SM MLVs is around ~40 °C, which represents to the well-known transition temperature (T_m) from gel to liquid crystal phase. As seen in the figure, the addition of different cholecalciferol concentrations caused T_m values to change to lower degrees. Furthermore, the main DSC curve widened and became less intense.

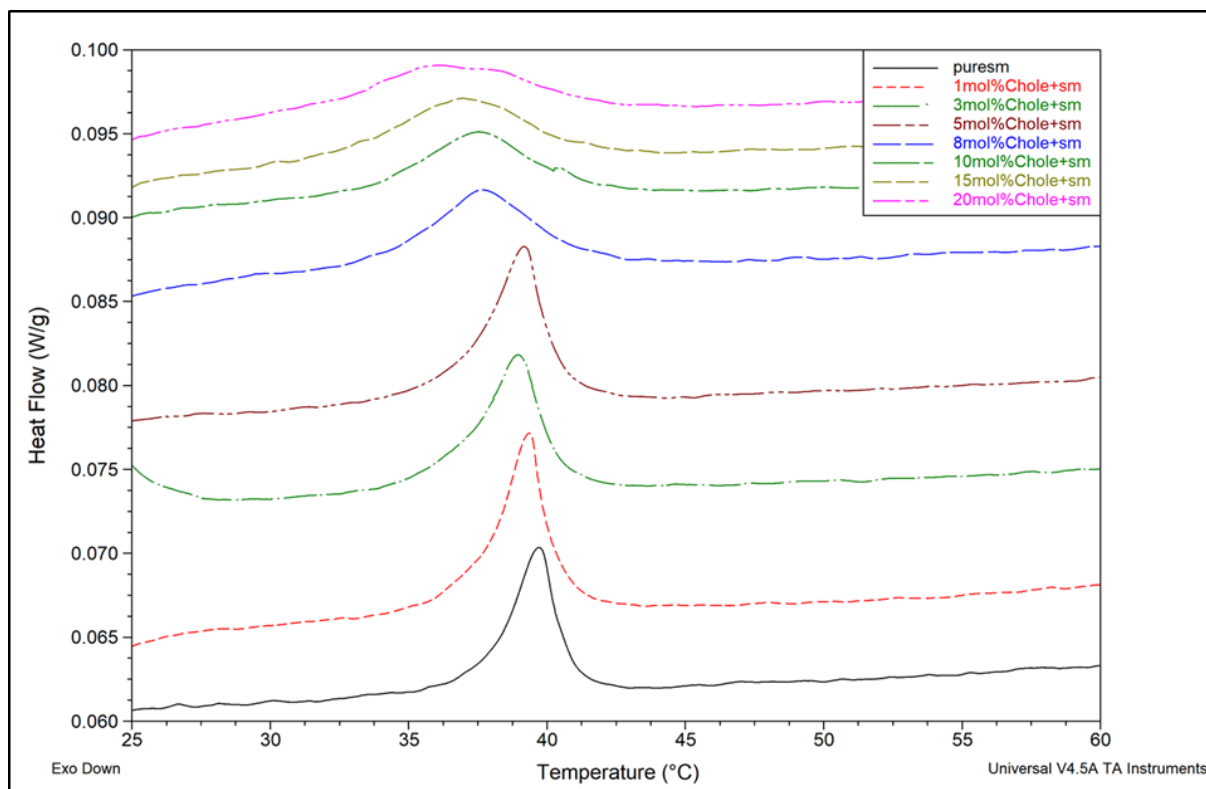


Fig. 1. DSC thermograms of SM MLVs with and without various cholecalciferol concentrations.

Another technique used in the study was FTIR. The results obtained with the FTIR technique provided information about the molecular arrangement and dynamics of the system, and the position of the molecule in the membrane. CH_2 antisymmetric stretching (at $\sim 2920\text{ cm}^{-1}$) and PO_2^- double antisymmetric stretching bands (at $\sim 1230\text{ cm}^{-1}$) were investigated in FTIR spectral analysis (Fig. 2).

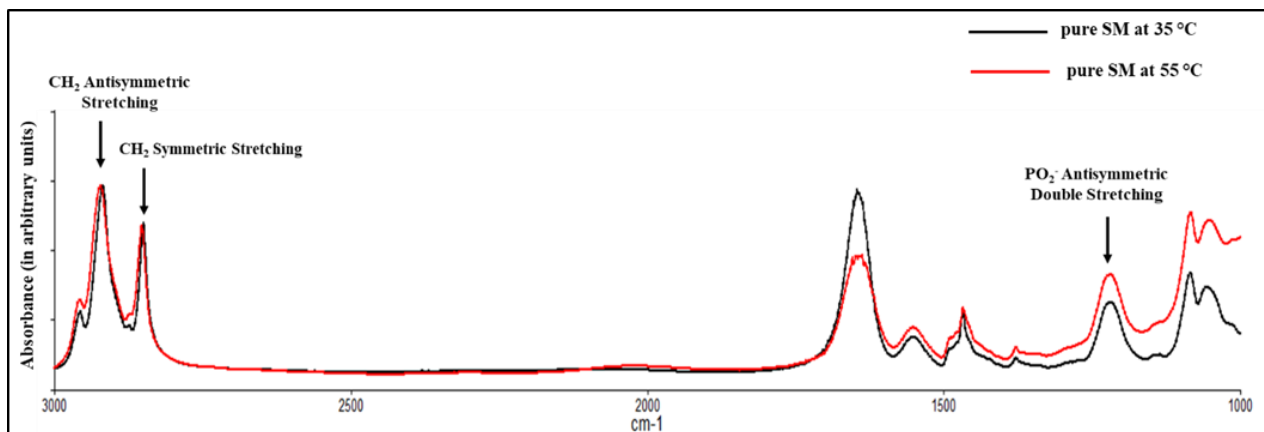


Fig. 2. Pure SM infrared spectra after representative Fourier transformations at 35 and 50 °C.

When the temperature-dependent values of the CH_2 antisymmetric stretching vibration wavenumbers in Fig. 3 were examined for pure SM liposome; it was observed that the transition from the gel phase to the liquid crystal phase occurred at about 40°C . The addition of low and high concentrations of cholecalciferol to pure SM liposomes caused the phase transition curve to become progressively broader. In addition, increasing concentrations of cholecalciferol caused a decrease in T_m values. These results obtained using the FTIR technique are in agreement with the DSC results. Addition of cholecalciferol to pure SM liposomes increased the wavenumber both in the gel (at temperatures below the phase transition) phase and in the liquid crystal (at temperatures above the phase transition) phase. An increment in peak positions (wavenumber) meant a raise in the number of gauche conformers in the system or a decrease in the acyl chain (hydrocarbon chain) order of the system [26, 28].

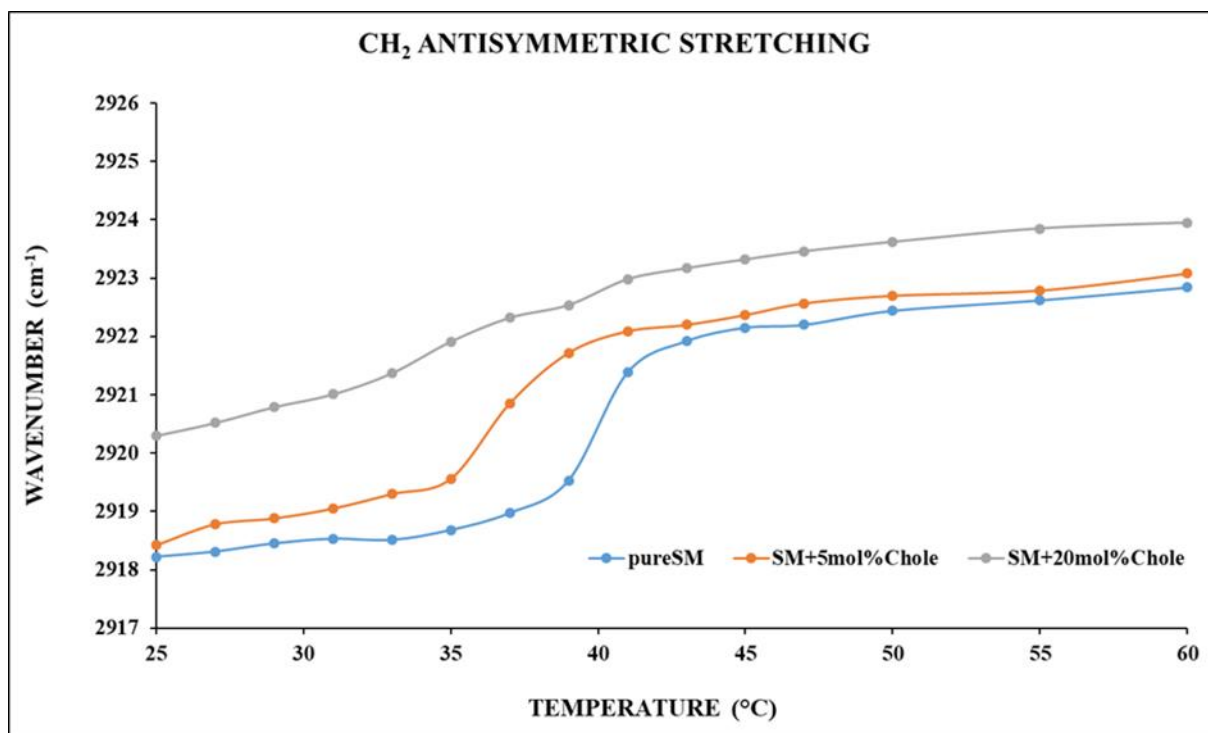


Fig. 3. The temperature and cholecalciferol concentration dependent changes in the wavenumber values of the CH₂ antisymmetric stretching band positions of SM MLVs.

When the temperature-dependent values of the bandwidth of the CH₂ antisymmetric stretching vibration in Fig. 4 were examined; in both gel and liquid crystal phase, addition of cholecalciferol to SM liposomes increased the bandwidth values. The increase in bandwidth values compared to those of pure SM meant that the membrane fluidity increased due to the increase in the freedom of motion of the lipid acyl chains [26, 28].

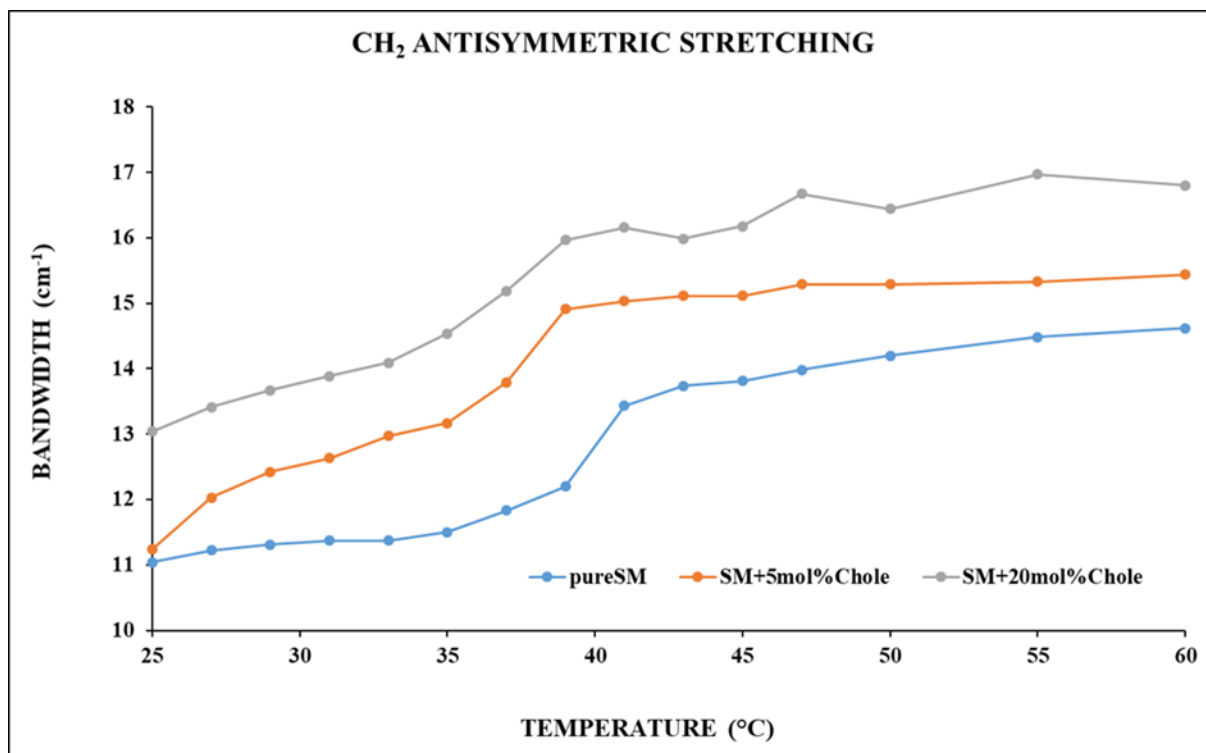


Fig. 4. The temperature and cholecalciferol concentration dependent changes in the bandwidth values of the CH₂ antisymmetric stretching band positions of SM MLVs.

When the temperature-dependent variation of PO_2^- antisymmetric stretching vibration wavenumber in Fig. 5 was examined, a decrease was observed in both phases compared to pure SM values with varying cholecalciferol concentrations. This change indicated strong hydrogen bonds between cholecalciferol and phosphate groups of phospholipids.

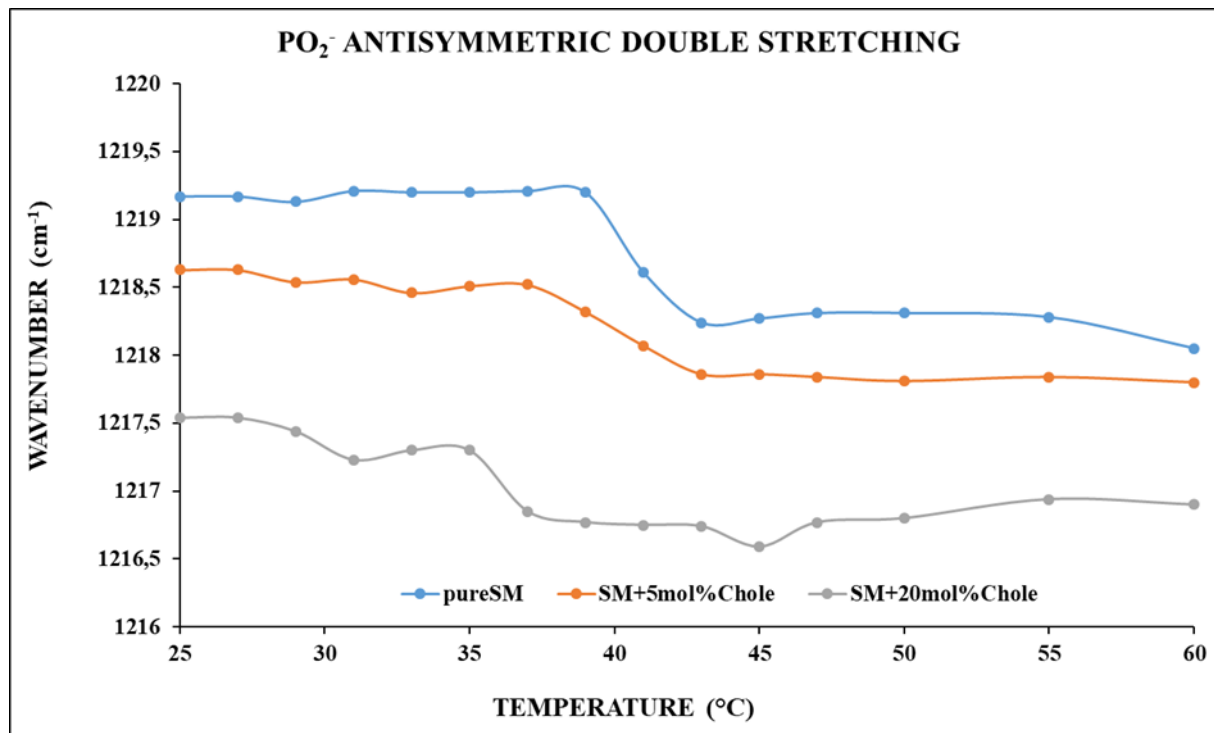


Fig. 5. The temperature and cholecalciferol concentration dependent changes in the wavenumber values of the PO_2^- antisymmetric double stretching band positions of SM MLVs.

4. Discussion and Conclusion

In this study, physical interactions of cholecalciferol with model membranes consisting of sphingolipids, namely its effects on membrane phase transition, membrane arrangement and membrane dynamics, and thermal changes, depending on temperature and concentration, were investigated for the first time using DSC and FTIR techniques.

Glycerophospholipids, sphingolipids, and cholesterol make up the vast majority of biological membranes. An important factor in agent-membrane interactions is the structural differences between the two types of phospholipids (sphingo- and glycerophospholipids), such as variations in the head group, acyl-chain composition, or unsaturation.

One of the most ubiquitous phospholipids, sphingomyelins (SMs) found in plasma membranes' external leaflet, generally include a combination of molecular species with various fatty acyl chain moieties [29,30]. Furthermore, it is, in certain situations, the predominant phospholipid. For instance, the phospholipid content of the outer layer in the intestinal brush border membrane is ~75% SM in and ~25% phosphatidylcholine (PC) [31]. Despite the fact that both DPPC used in our previous study [25] and SM have the same zwitterionic phosphocholine polar head group their hydrophobic backbones are distinct. SM includes both hydrogen bond accepting and donating groups, while PC solely comprises hydrogen bond accepting ones. All these differences change the interfacial characteristics and hydrogen bonding properties [29]. Both DPPC and SM are completely saturated lipids with a wide range of physical and chemical characteristics. Using liposomes as model cell membranes, we investigated the molecular interactions between cholecalciferol and SM in this research.

The effect of cholecalciferol on SM liposome phase transitions was studied using DSC in this work. DSC is a technique that measures heat capacity as a function of temperature at constant pressure and detects lipid phase transitions with peaks in the heat capacity profile. In the context of phase transitions in membrane bilayers, DSC is a thermodynamic approach for studying these in the presence and absence of agent molecules. It's been frequently employed to look into the thermal changes that occur when an agent is incorporated into membrane

bilayers. The major phase transition in DSC thermograms is the transition from gel to liquid crystalline form. The interaction between agents and acyl chains of phospholipids is shown by variations in phase transition behavior [32,33]. The transition from gel to liquid-crystalline phase is known to be "cooperative". In "cooperative" transitions, molecules become organized and have the ability to act together. That is, molecules cooperate with each other to move to another phase where they have better freedom of movement [33,34]. Furthermore, the bandwidths of the main transition thermograms provide information on the conversion's cooperativity [34,35].

According to Fig. 1, when the phase transition curve of the SM liposome was examined, it was seen that the pre transition was not observed. Many thermotropic studies, like present, found no pretransition in SM liposomes [36-38]. Cholecalciferol caused a decrease and widening of the intensity of the phase transition curve of the SM, as well as a shift of the phase transition temperature to lower values. This effect could be explained by cholecalciferol interacting with SM liposome hydrocarbon chains, reducing van der Waals interactions among lipid molecules and therefore cooperativity [39, 40]. The lack of cooperativity and broadening of the transition curve suggested that cholecalciferol was inserted into the C2-C8 part of the fatty acyl chains (cooperativity region) [41]. In the presence of the agent, a decrease in T_m values represents the instability in the phospholipid bilayer [42], which is consistent with the FTIR results. The present obtained result are consistent with our previous DPPC MLVs study [25], as well as other research examining the interaction between vitamin D2 or vitamin D3 and model membrane systems prepared using DPPC, DMPC, DSPC and DPPE phospholipids [43-45].

Most bioactive compounds have been shown to alter membrane lipid characteristics to achieve their desired effects. Flexibility (lipid acyl chain order) and dynamics properties of membrane can be altered by bioactive molecules. They can also modify the forces that exist between the head group and the hydrocarbon domain [46,47]. FTIR spectroscopy, a vibrational spectroscopic technique, can detect these types of molecular changes. The structure and organization of phospholipid bilayers can be studied using FTIR spectroscopy, a powerful but low-cost spectroscopic technique. All of the phospholipid molecule's regions can be analyzed simultaneously using this method without the need for extrinsic probes to be introduced.

Aspects of the head group, interfacial and acyl chains regions of lipid molecules were all studied using FTIR spectroscopy to detect even the smallest changes in their structure and function [25, 26, 32, 48]. Furthermore, in addition to contributing to the knowledge of membrane dynamics, the present study intended to look at the impact of cholecalciferol on membrane acyl chain order and head group hydration state, which have never been studied before.

Analyzing changes in peak position or peak width in different regions can reveal the knowledge of various physicochemical processes occurring in systems. Carbon-hydrogen vibrations produce the CH_2 antisymmetric stretching band, which is located at 2920 cm^{-1} and is highly sensitive to conformational changes. The *trans/gauche* acyl chain ratio is also a factor in its response [49]. Since the properties of the IR-active bands resulting from the fundamental vibrations of the hydrocarbon chain C-H groups depend on the *trans/gauche* rotamer content of the hydrocarbon chains, these spectral parameters can also be used to obtain structural information about the conformational arrangement of the lipid hydrocarbon chain [50]. C-H stretching band positions analysis was used to investigate the system's phase transition behaviour and order/disorder state. The rise in the quantity of *gauche* conformers corresponds to the shifts to higher wavenumbers [51]. In addition, the change in bandwidth values of the CH_2 stretching bands ensure information about the system's dynamics or fluidity [26, 43].

The position of the CH_2 antisymmetric stretching peaks of SM MLVs changes depending on cholecalciferol concentrations and temperature, as seen in Fig. 3. T_m for pure SM is shown in the figure, with a sharp increase at $\sim 40\text{ }^\circ\text{C}$. These substantial changes reveal a transition from gel phase to liquid crystalline, as well as a cooperative variance from *trans* to *gauche* conformation [52]. Any changes in the morphology of the main phase transition caused by cholecalciferol provide information on the molecule's location in the phospholipid liposomes [46]. When a molecule enters the hydrophobic section of the membrane, it disrupts densely packed hydrocarbon chains by reducing van der Waals forces between phospholipid chains, causing the phase transition curve to expand [26,46,48]. Cholecalciferol changed the form of the main phase transition curve and T_m values, as seen in Fig. 3. The wavenumber values of the CH_2 antisymmetric stretching band rose as cholecalciferol concentration increased, suggesting a reduction in the order of SM membranes or an increase in the number of *gauche* conformations in gel and liquid crystalline phases. [43, 46, 48]. In our previous study, we found that cholecalciferol and DPPC MLVs interacted in the same way [25].

Membrane dynamics are critical for the normal functioning of biological membranes, as well as various cellular activities and disease situations [53,54]. Moreover, fluidity is particularly crucial for bioactive agent activities especially in terms of their effects on membrane permeability. The temperature-dependent bandwidth alterations of the CH_2 antisymmetric stretching mode of SM MLVs, as a function of low and high cholecalciferol concentrations,

are shown in Fig. 4. As seen in Fig. 4, the increase in bandwidth values with increasing concentrations of cholecalciferol added to SM MLVs indicated that cholecalciferol also increased the membrane dynamics. Cholecalciferol molecules may disrupt the SM liposomes' tight packing of acyl chains and the strong hydrophobic interactions between lipid molecules, explaining the disordering and destabilizing effects. Even at high concentrations, the cholecalciferol molecules may interact more strongly with the phospholipid acyl chain than with each other. This could explain why the cooperative transition is lost. The membrane may become disordered and unstable as a result of the strong interaction between SM and cholecalciferol molecules.

The wavenumber alterations of the position of the PO_2^- antisymmetric stretching mode were analyzed to investigate the interaction of cholecalciferol with the head group of SM liposomes. SMs do not have a glycerol backbone, unlike triglycerides or other phospholipids, and instead have a fatty acid, a long chain sphingosine backbone and a phosphocholine head group [55]. As a result, the FTIR spectra do not show $\text{C}=\text{O}$ stretching bands ($\sim 1735 \text{ cm}^{-1}$) for SM MLVs. The phosphate (PO_2^-) band is extremely sensitive to hydration changes [56]. In the PO_2^- antisymmetric stretching mode, a decrease in wavenumber indicates increased hydrogen bonding strength, whereas an increase indicates dehydration [26]. Fig. 5 shows the shifts in this band's position as a function of temperature. In the gel and liquid crystalline phases, the location of this band shifted dramatically to lower wavenumber values, and decreased wavenumbers compared to pure SM in the presence of cholecalciferol resulted in an increment in hydrogen bond strength in the polar area of the lipids. Many of sphingomyelin's distinguishing structural and dynamic features in bilayers are due to its capacity to establish intramolecular and intermolecular hydrogen bonds. The OH group dominates hydrogen interactions, forming connections with water molecules or cholecalciferol's hydroxyl groups [57].

To summarize, the current research discovered that cholecalciferol absorbed into lipid liposomes interacted efficaciously with them and caused changes in their physico-chemical characteristics for the first time. Furthermore, by expanding our earlier analysis [25] to the interactions of cholecalciferol with SM, the present study aimed to provide a better understanding of the influence of cholecalciferol on the key components of biological lipid assemblies consisting of SM. Moreover, the information obtained at the molecular level about the interactions of membrane components and bioactive compounds such as cholecalciferol can give an idea about the construction of the structure of vitamin-based drugs and the prediction of the expected biological effects.

References

- [1] Coulston, A.M., Boushey, C., Ferruzzi, M., Nutrition in the Prevention and Treatment of Disease, Academic Press. p. 818. ISBN 9780123918840. Archived from the original on 30 December 2016. Retrieved 29 December 2016.
- [2] Norman, A.W., From vitamin D to hormone D: fundamentals of the vitamin D endocrine system essential for good health, *The American Journal of Clinical Nutrition*, 88(2)(2008), 491S–499S.
- [3] Plum, L.A., & DeLuca, H.F., Vitamin D, disease and therapeutic opportunities, *Nat Rev Drug Discov*, 9(2010), 941–955.
- [4] Hoeck, A.D., & Pall, M.L., Will vitamin D supplementation ameliorate diseases characterized by chronic inflammation and fatigue?, *Med Hypotheses*, 76(2011), 208–213.
- [5] Holick, M.F., Vitamin D: importance in the prevention of cancers, type 1 diabetes, heart disease, and osteoporosis, *Am J Clin Nutr*, 79(2004), 362–371.
- [6] Tagliaferri, S., Porri, D., De Giuseppe, R., Manuelli, M., Alessio, F., and Cena, H., The controversial role of vitamin D as an antioxidant: results from randomised controlled trials, *Nutrition Research Reviews*, 32(1)(2019), 99 – 105.
- [7] Chabas, J.F., Stephan, D., Marqueste, T., Garcia, S., Lavaut, M.N., Nguyen, C., Legre, R., Khrestchatsky, M., Decherchi, P., Feron, F., Cholecalciferol (vitamin D_3) improves myelination and recovery after nerve injury, *PLoS One*, 8(2013), e65034.
- [8] Hua, F., Reiss, J.I., Tang, H., Wang, J., Fowler, X., Sayeed, I., Stein, D.G., Progesterone and low-dose vitamin D hormone treatment enhances sparing of memory following traumatic brain injury, *Horm. Behav.*, 61(2012), 642–651.

- [9] Longoni, A., Kolling, J., dos Santos, T.M., dos Santos, J.P., da Silva, J.S., Pettenuzzo, L., Gonçalves, C.A., de Assis, A.M., Quincozes-Santos, A., Wyse, A.T.S., 1,25-Dihydroxyvitamin D3 exerts neuroprotective effects in an ex vivo model of mild hyperhomocysteinemia, *Int. J. Dev. Neurosci.*, 48(2016), 71-79.
- [10] Tang, H., Hua, F., Wang, J., Sayeed, I., Wang, X., Chen, Z., Yousuf, S., Atif, F., Stein, D.G., Progesterone and vitamin D: improvement after traumatic brain injury in middle-aged rats, *Horm. Behav.*, 64(2013), 527-538.
- [11] Tang, H., Hua, F., Wang, J., Yousuf, S., Atif, F., Sayeed, I., Stein, D.G., Progesterone and vitamin D combination therapy modulates inflammatory response after traumatic brain injury, *Brain Inj.*, 29(2015), 1165-1174.
- [12] Jiang, P., Zhang, L.H., Cai, H.L., De Li, H., Liu, Y.P., Tang, M.M., Dang, R.L., Zhu, W.Y., Xue, Y., He, X., Neurochemical effects of chronic administration of calcitriol in rats, *Nutrients*, 6(2014), 6048-6059.
- [13] Camargo, A., Dalmagro, A.P., Rikel, L., da Silva, E.B., Simão da Silva, K.A.B., Zeni, A.L.B., Cholecalciferol counteracts depressive-like behavior and oxidative stress induced by repeated corticosterone treatment in mice, *Eur. J. Pharmacol.*, 833(2018), 451-461.
- [14] Souza, S.V.S., da Rosa, P.B., Neis, V.B., Moreira, J.D., Rodrigues, A.L.S., Moretti, M., Effects of cholecalciferol on behavior and production of reactive oxygen species in female mice subjected to corticosterone-induced model of depression, *Naunyn Schmiedeberg's Arch. Pharmacol.*, 393(2020), 111-120.
- [15] Yamini, P., Ray, R.S., Chopra, K., Vitamin D3 attenuates cognitive deficits and neuroinflammatory responses in ICV-STZ induced sporadic Alzheimer's disease, *Inflammopharmacology*, 26(2018), 39-55.
- [16] Mokhtari, Z., Hekmatdoost, A., Nourian, M., Antioxidant efficacy of vitamin D, *Journal of Parathyroid Disease*, 5(1)(2017), 11-16.
- [17] Siani P., Donadoni E., Ferraro L., Re F., Di Valentin C., Molecular dynamics simulations of doxorubicin in sphingomyelin-based lipid membranes, *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) – Biomembranes*, 1864(1)(2022), 183763.
- [18] Leitea N. B., Martins D. B., Alvares D. S., dos Santos Cabrera M. P., Quercetin induces lipid domain-dependent permeability, *Chemistry and Physics of Lipids*, 242(2022), 105160.
- [19] Dahley C., Garessus E. D. G., Ebert A., Goss Kai-Uwe, Impact of cholesterol and sphingomyelin on intrinsic membrane permeability, *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) – Biomembranes*, 1864(9)(2022), 183953.
- [20] Castelli, F., Gurrieri, S., Raudino, A., Cambria, A., Effect of cholecalciferol on thermotropic behaviour of phosphatidylethanolamine and its N-methyl derivatives, *Chem. Phys. Lipids*, 48(1-2)(1988), 69-76.
- [21] Merz, K., Sternberg, B., Incorporation of vitamin D3-derivatives in liposomes of different lipid types, *J. Drug Target*, 2(5)(1994), 411-417.
- [22] Elgavish, A., Rifkind, J., Sacktor, B., In vitro effects of vitamin D3 on the phospholipids of isolated renal brush border membranes, *J. Membr. Biol.*, 72(1-2)(1983), 85-91.
- [23] Kamal, A., Pal, A., Raghunathan, V.A., Modulated phases of lipid membranes induced by sterol derivatives, *Soft Matter*, 8(2012), 11600-11603.
- [24] Bondar, O.P., Rowe, E.S., Differential scanning calorimetric study of the effect of vitamin D3 on the thermotropic phase behavior of lipids model systems, *Biochim. Biophys. Acta*, 1240(1995), 125-132.
- [25] Sahin, I., Cholecalciferol has strong effect on the order and dynamics of DPPC membranes: A combined Fourier transform infrared spectroscopy and differential scanning calorimetry study, *Vibrational Spectroscopy*, 113(2021), 103207.

- [26] Severcan, F., Sahin, I., Kazancı, N., Melatonin strongly interacts with zwitterionic model membranes—evidence from Fourier transform infrared spectroscopy and differential scanning calorimetry, *Biochim. Biophys. Acta*, 1668(2005), 215–222.
- [27] Biruss, B., Dietl, R., Valenta, C., The influence of selected steroid hormones on the physicochemical behaviour of DPPC liposomes, *Chem. Phys. Lipids*, 148(2007), 84–90.
- [28] Villalain, J., Arranda, F.J., Gomez-Fernandez, J.C., Calorimetric and infrared spectroscopic studies of the interaction of α -tocopherol and α -tocopheryl acetate with phospholipid vesicles, *Eur. J. Biochem.*, 158(1986), 141–147.
- [29] Nyholm, T., Nylund, M., Söderholm, A., and Slotte, J. P., Properties of Palmitoyl Phosphatidylcholine, Sphingomyelin, and Dihydrosphingomyelin Bilayer Membranes as Reported by Different Fluorescent Reporter Molecules, *Biophys J.*, 84(2)(2003), 987–997.
- [30] Niemelä, P.S., Hyvönen, M.T., Vattulainen, I., Influence of chain length and unsaturation on sphingomyelin bilayers, *Biophys J.*, 90(3)(2006), 851–63.
- [31] Vénien, C., and Le Grimellec, C., Phospholipid asymmetry in renal brush-border membranes, *Biochim. Biophys. Acta.*, 942(1988), 159–168.
- [32] Sariisik, E., Kocak, M., Kucuk Baloglu, F., Severcan, F., Interaction of the cholesterol reducing agent simvastatin with zwitterionic DPPC and charged DPPG phospholipid membranes, *Biochim. Biophys. Acta Biomembr.*, 1861(2019), 810–818.
- [33] Zhang, Y.P., Lewis, R.N., Hodges, R.S., McElhaney, R.N., Interaction of a peptide model of a hydrophobic transmembrane α -helical segment of a membrane protein with phosphatidylethanolamine bilayers: differential scanning calorimetric and Fourier transform infrared spectroscopic studies, *Biophys. J.*, 68(1995), 847–857.
- [34] Arouri, A., Dathe, M., Blume, A., Peptide induced demixing in PG/PE lipid mixtures: a mechanism for the specificity of antimicrobial peptides towards bacterial membranes, *Biochim. Biophys. Acta*, 1788(2009), 650–659.
- [35] Riske, K.A., Barroso, R.P., Vequi-Suplicy, C.C., Germano, R., Henriques, V.B., Lamy, M.T., Lipid bilayer pre-transition as the beginning of the melting process, *Biochim. Biophys. Acta*, 1788(2009), 954–963.
- [36] de Almeida, R.F.M., Fedorov, A., Prieto, M., Sphingomyelin/phosphatidylcholine/cholesterol phase diagram: boundaries and composition of lipid rafts, *Biophys. J.*, 85(2003), 2406–2416.
- [37] Maulik, P.R., Shipley, G.G., N-palmitoyl sphingomyelin bilayers: structure and interactions with cholesterol and dipalmitoylphosphatidylcholine, *Biochemistry*, 35(1996), 8025–8034.
- [38] Arsova, Z., González-Ramírez, E.J., M.Goñi, F., Tristram-Nagle, S., Nagle, J.F., Phase behavior of palmitoyl and egg sphingomyelin, *Chemistry and Physics of Lipids*, 213(2018), 102–110.
- [39] Wrobel, D., Appelhans, D., Signorelli, M., Wiesner, B., Fessas, D., Scheler, U., Voit, B., Maly, J., Interaction study between maltose-modified PPI dendrimers and lipidic model membranes, *Biochim. Biophys. Acta Biomembr.*, 1848(2015), 1490–1501.
- [40] Sanchez-Bueno, A., Watanabe, S., Maria Jose, S., Saito, T., Studies of confirmation and interaction of the cytohexenone and acetyl group of progesterone with liposomes, *J. Steroid Biochem. Mol. Biol.*, 38(1991), 173–179.
- [41] Custódio, J.A., Almeida, L.M., Madeira, V.M.C., The anticancer drug tamoxifen induces changes in the physical properties of model and native membranes, *Biochim. Biophys. Acta Biomembr.*, 1150(1993), 123–129.

- [42] Sarpietro, M.G., Accolla, M.L., Cova, A., Prezzavento, O., Castelli, F., Ronsisvalle, S., DSC investigation of the effect of the new sigma ligand PPCC on DMPC lipid membrane, *Int. J. Pharm.*, 469(2014), 88–93.
- [43] Toyran, N., Severcan, F., Competitive effect of vitamin D₂ and Ca²⁺ on phospholipid model membranes: an FTIR study, *Chem. Phys. Lipids*, 123(2003), 165–176.
- [44] Bondar, O.P., Rowe, E.S., Differential scanning calorimetric study of the effect of vitamin D₃ on the thermotropic phase behavior of lipids model systems, *Biochim. Biophys. Acta*, 1240(1995), 125–132.
- [45] Castelli, F., Gurrieri, S., Raudino, A., Cambria, A., Effect of cholecalciferol on thermotropic behaviour of phosphatidylethanolamine and its N-methyl derivatives, *Chem. Phys. Lipids*, 48(1–2)(1988), 69–76.
- [46] Turker, S., Wassall, S., Stillwell, W., Severcan, F., Convulsant agent pentylenetetrazol does not alter the structural and dynamical properties of dipalmitoylphosphatidylcholine model membranes, *J. Pharm. Biomed. Anal.*, 54(2011), 379–386.
- [47] Baber, J., Ellena, J.F., Cafiso, D.S., Distribution of general anesthetics in phospholipid bilayers determined using 2H NMR and 1H-1H NOE spectroscopy, *Biochemistry*, 34(1995), 6533–6539.
- [48] Aleskndrany, A., Sahin, I., The effects of Levothyroxine on the structure and dynamics of DPPC liposome: FTIR and DSC studies, *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) – Biomembranes*, 1862(6)(2020), 183245.
- [49] Do, T.T.T., Dao, U.P.N., Bui, H.T., Nguyen, T.T., Effect of electrostatic interaction between fluoxetine and lipid CrossMark membranes on the partitioning of fluoxetine investigated using second derivative spectrophotometry and FTIR, *Chem. Phys. Lipids*, 207(2017), 10–23.
- [50] Lewis, R. N. A. H., & McElhaney, R. N., Membrane lipid phase transitions and phase organization studied by Fourier transform infrared spectroscopy, *Biochimica et Biophysica Acta - Biomembranes*, 1828(10)(2013), 2347–2358 pp.
- [51] Ergun S., Demir, P., Uzbay, T., Severcan, F., Agomelatine strongly interacts with zwitterionic DPPC and charged DPPG membranes, *Biochim. Biophys. Acta Biomembr.*, 1838(2014), 2798–2806.
- [52] Casal, H.L., Mantsch, H.H., Polymorphic phase behaviour of phospholipid membranes studied by infrared spectroscopy, *Biochim. Biophys. Acta*, 779(1984), 381–401.
- [53] Harrison, J.E., Groundwater, P.W., Brain, K.R., Hadgraft, J., Azone® induced fluidity in human stratum corneum. A Fourier transform infrared spectroscopy investigation using the perdeuterated analogue, *J. Control. Release*, 41(1996), 283–290.
- [54] Chen, H., Mendelsohn, R., Rerek, M.E., Moore, D.J., Fourier transform infrared spectroscopy and differential scanning calorimetry studies of fatty acid homogeneous ceramide 2, *Biochim. Biophys. Acta*, 1468(2000), 293–303.
- [55] Fanani, M.L., Maggio, B., The many faces (and phases) of ceramide and sphingomyelin I - single lipids, *Biophys Rev.*, 9(5)(2017), 589–600.
- [56] Casal, H.L., Mantsch, H.H., Paltauf, F., Hauser, H., Infrared and 31P-NMR studies of the effect of Li⁺ and Ca²⁺ on phosphatidylserines, *Biochim. Biophys. Acta*, 919(1987), 275–286.
- [57] Niemelä, P.S., Hyvönen, M.T., Vattulainen, I., Influence of chain length and unsaturation on sphingomyelin bilayers, *Biophys J*, 90(3)(2006), 851–63.

Synthesis, Characterization and Catecholase Activities of Azo Containing Schiff Base Ligands and Their Transition Metal Complexes

Ayşe KAZANCI DAĞ *

*120th Reg Directorate State Hydraul Works, TR-46100, KAHRAMANMARAŞ

(Alınış / Received: 20.05.2022, Kabul / Accepted: 18.07.2022, Online Yayınlanma / Published Online: 23.08.2022)

Keywords

Schiff base, metal complexes, synthesis.

Abstract: Schiff bases are also known as a good nitrogen donor ligand ($>C=N-$). Since azo compounds containing two phenyl rings separated by the azo group ($-N=N-$) are versatile molecules, they are of great importance in both scientific and application fields. In this study, three types of azo-azomethine ligands have been synthesized from the reaction of (E)-2-hydroxy-5-((4-methoxyphenyl)diazonyl)benzaldehyde with aniline derivatives. Structures of the synthesized ligands (**2-4**) and complexes (**7-12**) were characterized with ^{13}C -NMR, 1H -NMR, UV-Visible spectroscopy, elemental analysis, and FT-IR. It was understood that metal is bound by N and O atoms in the ligands. The catalytic activities of complexes were investigated. The catecholase enzyme-like activity of the complexes was studied for $3,5$ -DTBC \rightarrow $3,5$ -DTBQ conversion in the presence of air oxygen.

Azo İçeren Schiff Bazı Ligandları ve Geçiş Metal Komplekslerinin Sentezi, Karakterizasyonu ve katekolaz aktiviteleri

Anahtar Kelimeler

Schiff bazı
Metal kompleksleri
sentez

Öz: Schiff bazları ayrıca iyi bir nitrojen donör ligandı olarak bilinir ($>C=N-$). Azo grubu ($-N=N-$) ile ayrılmış iki fenil halkası içeren azo bileşikler çok yönlü moleküller olduklarından hem bilimsel hem de uygulama alanlarında büyük önem taşırlar. Bu çalışmada, (E)-2-hidroksi-5-((4-metoksifenil)diazonyl)benzaldehitin anilin türevleri ile reaksiyonundan üç tip azo-azometin ligandı sentezlenmiştir. Sentezlenen ligandların (**2-4**) ve komplekslerin (**7-12**) yapıları ^{13}C -NMR, 1H -NMR, UV-Görünür spektroskopi, element analizi ve FT-IR ile karakterize edildi. Metalin ligandlarda N ve O atomları ile bağlı olduğu anlaşılmıştır. Komplekslerin katalitik aktiviteleri araştırılmıştır. Komplekslerin katekolaz enzim benzeri aktivitesi, hava oksijen varlığında $3,5$ -DTBC \rightarrow $3,5$ -DTBQ dönüşümü için incelenmiştir.

*Corresponding Author, email: a.kazanci3@hotmail.com

1. Introduction

Schiff base structures obtained from the condensation reactions of aldehydes or ketones with amines were first synthesized by Hugo Schiff in 1964. Schiff base is an organic compound containing an azomethine group and is a nitrogen analog of an aldehyde or ketone in structure [1].

Schiff base structures can be used in many applications thanks to the azomethine group and a wide variety of functional groups that can be added to the structure. Schiff base ligands are used in biological applications or inorganic and analytical chemistry experiments [2], optical and electrochemical fields [3], textile industry and as catalysts in catalytic applications [4]. Schiff base ligands can be coordinated to the metal atom, over the nitrogen of the azomethine group, and can also be attached to the metal through the presence of groups such as OH, which are close to the azomethine group in the ligand structure. In this way, a more stable complex can be formed [5].

These complexes can act as both heterogeneous and homogeneous catalysts in the reaction medium. The factors affecting these properties depend on the ligand type, metal type and coordination sites in the ligand. [6].

Among the complexes of Schiff base ligands with copper metal, especially tetradentate copper(II) complexes are preferred structures in biological systems due to their many properties.[7]. The copper and cobalt complexes of Schiff bases ligands have been used in many application areas such as; epoxidation of olefins [8], alkylation, and arylation [9].

In this study, Schiff base ligands containing azo groups derived from (E)-2-hydroxy-5-((4-methoxyphenyl)diazanyl)benzaldehyde and their copper and cobalt metal complexes were synthesized. The structures of the compounds have been characterized by various spectral and analytical methods. Also, the catecholase activity of the complexes was studied for 3,5-DTBC \rightarrow 3,5-DTBQ conversion in the presence of air oxygen.

2. Material and Method

The chemicals and the reagents were purchased from Sigma, Aldrich, Merck and Fluka. The solvents were dried using established procedures and immediately distilled under nitrogen atmosphere prior to use. Waters Synapt G1 was used for HRMS analyses performed in Middle East Technical University, Instrumental Analysis Laboratory. FT-IR spectra of the synthesized compounds were collected on a Perkin Elmer Spectrum 400 spectrophotometer (4000–400 cm^{-1}) using KBr discs. Perkin Elmer Lambda 45 spectrophotometer was used for UV-Vis. spectra in the range of 200–900 nm. Varian XL-300 NMR was used for the collection of NMR spectra. CDCl_3 was used as the solvent and TMS was an internal standard.

2.1. Synthesis of azo aldehyde 1

The azo aldehydes were synthesized according to the literature [10].

2.2. General procedure for the synthesis of ligands 2-4

The 25 mL methanolic solution of an azo aldehyde (**1**) (2.00 mmol) was added to 2 mmol aniline solution in methanol (5 mL) and refluxed for 3 h. The solution was concentrated on air for two days to give ligand (**2-4**) as a colorful solid.

Ligand 2: Yield: 0.296 g (58%). Color: Dark cherry. Elemental analysis: Calcd. for $\text{C}_{20}\text{H}_{17}\text{N}_3\text{O}_3$ C, 69.15; H, 4.93; N, 12.10. Found: C, 69.14; H, 4.41; N, 12.34. FT-IR (KBr, cm^{-1}): 3425, 2920, 1614 and 1593. UV-vis (λ_{max} , nm): 406, 372, 346. (in 10^{-4} M DMF). ^1H NMR (400 MHz, DMSO) δ 14.17 (s, 1H), 9.79 (s, 1H), 9.09 (s, 1H), 8.17 (d, $J = 2.2$ Hz, 1H), 7.92 (dd, $J = 8.8, 2.4$ Hz, 1H), 7.86 (d, $J = 8.9$ Hz, 2H), 7.39 (d, $J = 8.7$ Hz, 2H), 7.14 (s, 1H), 7.12 – 7.06 (m, 2H), 6.86 (d, $J = 8.7$ Hz, 2H), 3.86 (s, 3H). ^{13}C NMR (101 MHz, DMSO) δ 163.52, 161.96, 160.08, 157.75, 146.59, 145.16, 138.89, 127.45, 126.73, 124.60, 123.30, 119.77, 118.16, 116.48, 115.02, 56.03.

Ligand 3: Yield: 0.307 g (60%). Color: Dark Orange. Elemental analysis: Calcd. for $\text{C}_{20}\text{H}_{17}\text{N}_3\text{O}_2$ C, 72.49; H, 5.17; N, 12.68. Found: C, 72.45; H, 5.14; N, 12.70. FT-IR (KBr, cm^{-1}): 3434, 2959, 1615 and 1578. UV-vis (λ_{max} , nm): 411, 362, 347 (in 10^{-4} M DMF). ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 13.82 (s, 1H), 8.76 (s, 1H), 8.03 (dd, $J = 4.5, 2.3$ Hz, 2H), 7.92 (d, $J = 8.9$ Hz, 2H), 7.48 (t, $J = 7.7$ Hz, 2H), 7.36 – 7.32 (m, 3H), 7.18 – 7.13 (m, 1H), 7.04 (d, $J = 8.9$ Hz, 2H), 3.91 (s,

3H). ^{13}C NMR (101 MHz, CDCl_3) δ 163.46, 162.20, 161.69, 147.82, 146.85, 145.58, 129.49, 127.40, 127.27, 124.42, 121.21, 118.86, 118.03, 115.21, 55.55.

Ligand 4: Yield: 0.287 g (56%). Color: Dark red. Elemental analysis: Calcd. for $\text{C}_{20}\text{H}_{17}\text{N}_3\text{O}_3$ C, 69.15; H, 4.93; N, 12.10. Found: C, 69.12; H, 4.22; N, 12.25. FT-IR (KBr, cm^{-1}): 3444, 3034, 1615 and 1573. UV-vis (λ_{max} , nm): 405, 363, 340 (in 10^{-4} M DMF). ^1H NMR (400 MHz, DMSO) δ 13.83 (s, 1H), 9.74 (s, 1H), 9.09 (s, 1H), 8.24 (d, $J = 2.2$ Hz, 1H), 7.96 (dd, $J = 8.9, 2.3$ Hz, 1H), 7.86 (d, $J = 8.9$ Hz, 1H), 7.27 (t, $J = 8.0$ Hz, 1H), 7.16 – 7.12 (m, 2H), 7.11 (d, $J = 2.0$ Hz, 2H), 6.90 (d, $J = 7.9$ Hz, 1H), 6.84 (s, 1H), 6.76 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 3.86 (s, 3H). ^{13}C NMR (101 MHz, DMSO) δ 163.65, 163.07, 162.00, 158.82, 149.01, 146.57, 145.20, 130.73, 128.06, 127.10, 124.63, 119.60, 118.31, 115.02, 114.89, 112.60, 108.65, 56.03.

2.3. General procedure for the synthesis of complexes 11-15

Ligands (**2-4**) (20 mmol) dissolved in 25 cm^3 absolute EtOH were mixed with 10 mmol metal salts in 10 cm^3 EtOH. The stirred mixture was refluxed for 24 h, then evaporated to 15–20 cm^3 in a vacuum and left to cool to room temperature. The products were filtered in a vacuum and washed with a small amount of MeOH and water.

Complex 7: Yield: 0.38 g (55%). m.p. 250-252 °C. Color: Dark brown. Elemental analysis: Calcd. for $\text{C}_{40}\text{H}_{32}\text{CoN}_6\text{O}_6$ C, 63.35; H, 4.39; N, 11.43. Found: C, 65.33; H, 4.38; N, 11.44. FT-IR (cm^{-1} 15, KBr): 3062 (s), 1602 (s), 1576 (s), 610 (w), 420 (w). UV-Vis (λ , nm): 235, 280, 348, 366, 545, μ_{eff} (BM):4.6.

Complex 8: Yield: 0.42 g (61%). m.p. 196-198 °C. Color: Dark red. Elemental analysis: Calcd. for $\text{C}_{40}\text{H}_{32}\text{CuN}_6\text{O}_6$ C, 63.92; H, 4.29; N, 11.18. Found: C, 63.62; H, 4.19; N, 11.97. FT-IR (cm^{-1} 20, KBr): 3057 (s), 1592 (s), 1575 (s), 663 (w), 420 (w). UV-Vis (λ , nm): 237, 279, 346, 363, 401, 639, μ_{eff} (BM):1.8.

Complex 9: Yield: 0.36 g (55%). m.p. 250-252 °C. Color: Dark red. Elemental analysis: Calcd. for $\text{C}_{40}\text{H}_{32}\text{CoN}_6\text{O}_4$ C, 66.76; H, 4.48; N, 11.68; Found: C, 66.33; H, 4.38; N, 11.44. FT-IR (cm^{-1} , KBr): 3038 (s), 1613 (s), 1585 (s), 594 (w), 418 (w). UV-Vis (λ , nm): 237, 279, 348, 366, 458, 552, μ_{eff} (BM):4.5.

Complex 10: Yield: 0.37 g (56%). m.p. >250°C, decompose. Color: Brown. Elemental analysis: Calcd. for $\text{C}_{40}\text{H}_{32}\text{CuN}_6\text{O}_4$ C, 66.33; H, 4.45; N, 11.60. Found: C, 66.62; H, 4.19; N, 11.97. FT-IR (cm^{-1} , KBr): 3041 (s), 1602 (s), 1528 (s), 599 (w), 457 (w). UV-Vis (λ , nm): 236, 275, 335, 366, 425, 642, μ_{eff} (BM):1.8.

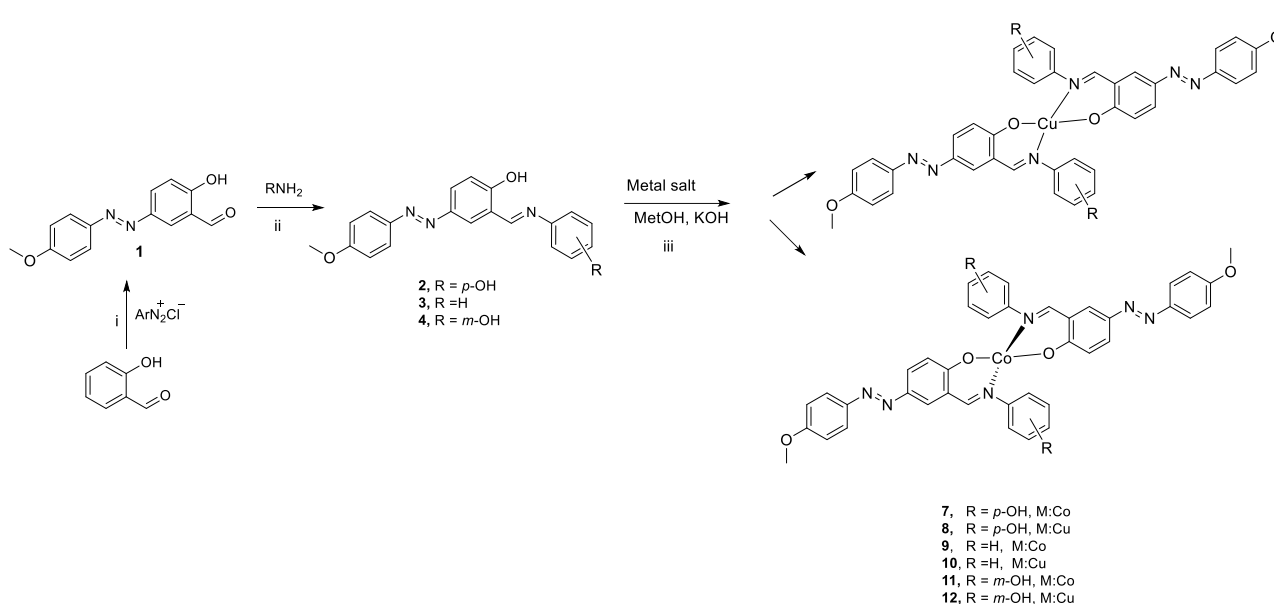
Complex 11: Yield: 0.38 g (55%). m.p. 250-252 °C. Color: Dark red. Elemental analysis: Calcd. for $\text{C}_{40}\text{H}_{32}\text{CoN}_6\text{O}_6$ C, 63.35; H, 4.39; N, 11.43. Found: C, 65.28; H, 4.21; N, 11.41. FT-IR (cm^{-1} 15, KBr): 3062 (s), 1601 (s), 1576 (s), 610 (w), 420 (w). UV-Vis (λ , nm): 235, 275, 348, 366, 541, μ_{eff} (BM):4.7.

Complex 12: Yield: 0.42 g (61%). m.p. 196-198 °C. Color: Dark red. Elemental analysis: Calcd. for $\text{C}_{40}\text{H}_{32}\text{CuN}_6\text{O}_6$ C, 63.92; H, 4.29; N, 11.18. Found: C, 63.83; H, 4.20; N, 11.87. FT-IR (cm^{-1} 20, KBr): 3058 (s), 1595 (s), 1575 (s), 663 (w), 420 (w). UV-Vis (λ , nm): 237, 280, 347, 363, 401, 629, μ_{eff} (BM):2.0.

3. Results and Discussion

The Schiff base ligands (**2-4**) have been synthesized in EtOH from synthetic azo aldehyde **1** and aniline derivatives. Also, their Cobalt and Copper (II) complexes (**7-12**) were prepared with the reaction of Schiff base ligands and transition metal salts in EtOH. All ligands are soluble in common organic solvents like as DMF, DMSO, EtOH and MeOH. Characterization of the ligands was done by FT-IR, UV-visible spectroscopies, ^1H - ^{13}C -NMR, elemental analysis, and melting point techniques. Due to paramagnetism, NMR analyses could not be done for the characterization of complexes. All the mentioned analyses were done to characterize the complexes too.

The data showed that the complexation ratio [Metal: Ligand] is 1:2 as shown in Scheme 1.



Scheme 1. Synthesis route of ligand and Co & Cu (II) complexes. Reagent and conditions: (i) NaNO_2 , NaOH , H_2O , $0-5^\circ\text{C}$; (ii) EtOH , reflux, 3 h; (iii) EtOH , reflux, 4 h.

When the ^1H -NMR spectra of the ligands are examined, it is seen that ligands (**2-4**) ^1H NMR spectra show singlets in the 14.17-13.83 ppm range can be referred to as the salicylidene phenolic proton (OH). Within ligands **2** and **4**, the signals of the OH groups originating from the amine structure were observed at 9.79 and 9.74 ppm, respectively [11]. In addition, the singlets in the 9.09-8.03 ppm range can be attributed to the proton resonance of the azomethine group (CH=N). In both ligand spectra, multiple signals corresponding to aromatic protons are seen in 8.24-6.76 ppm range [12]. The methoxy groups signals are seen as singlet signals at 3.91 for ligand **3** and -3.86 ppm for ligands **2** and **4**.

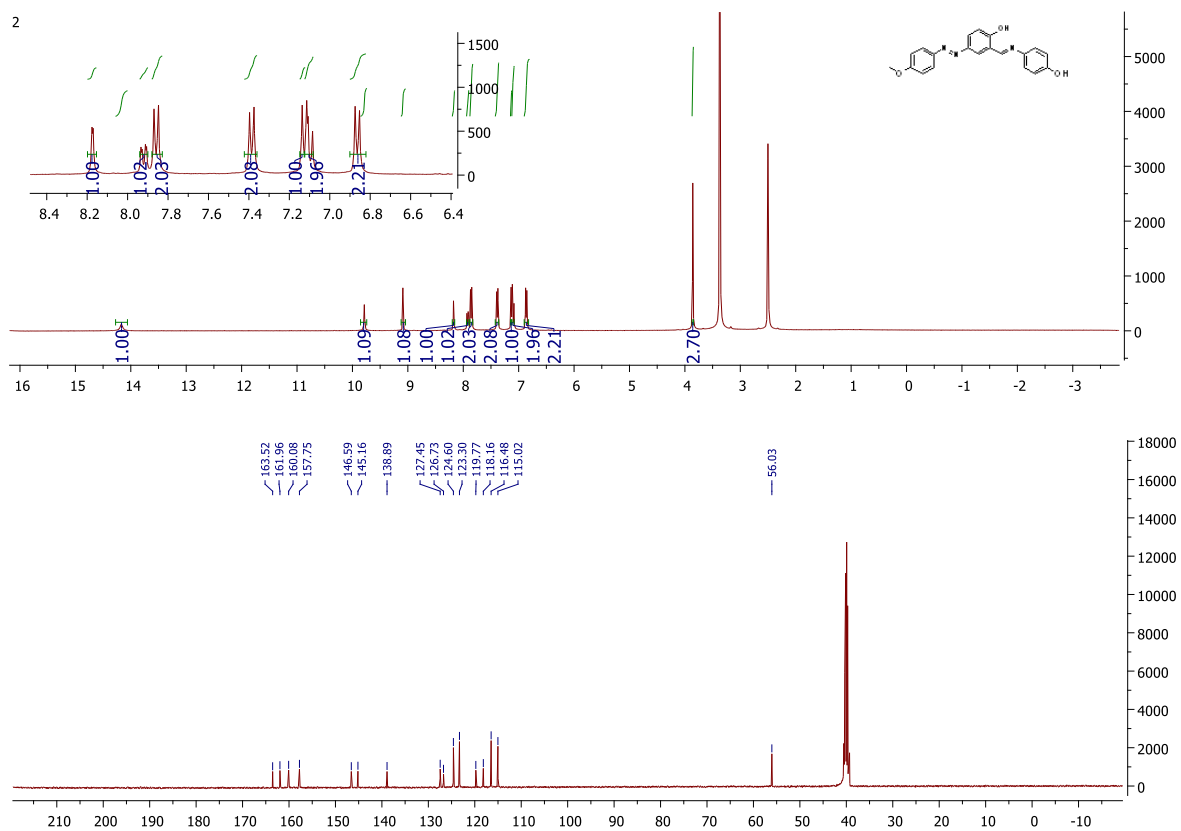


Figure 1. ¹H and ¹³C-NMR spectrum of 2

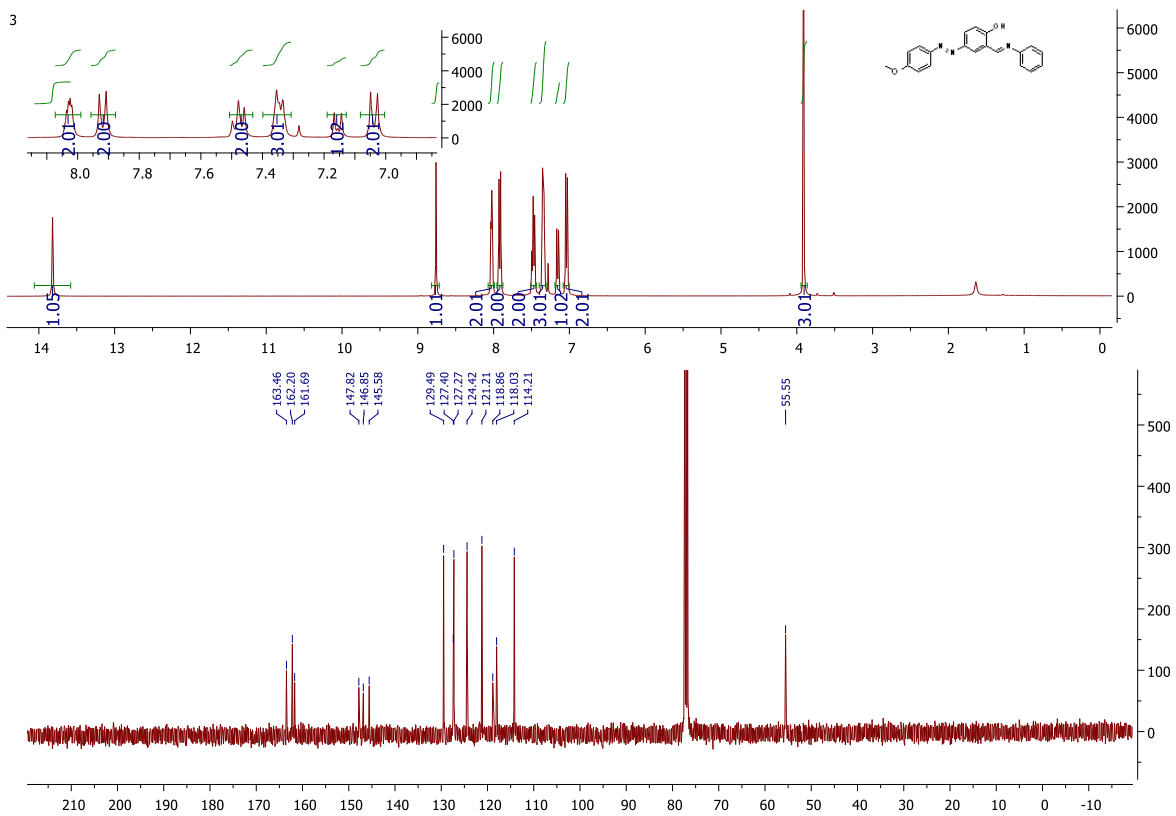


Figure 2. ¹H and ¹³C-NMR spectrum of 3

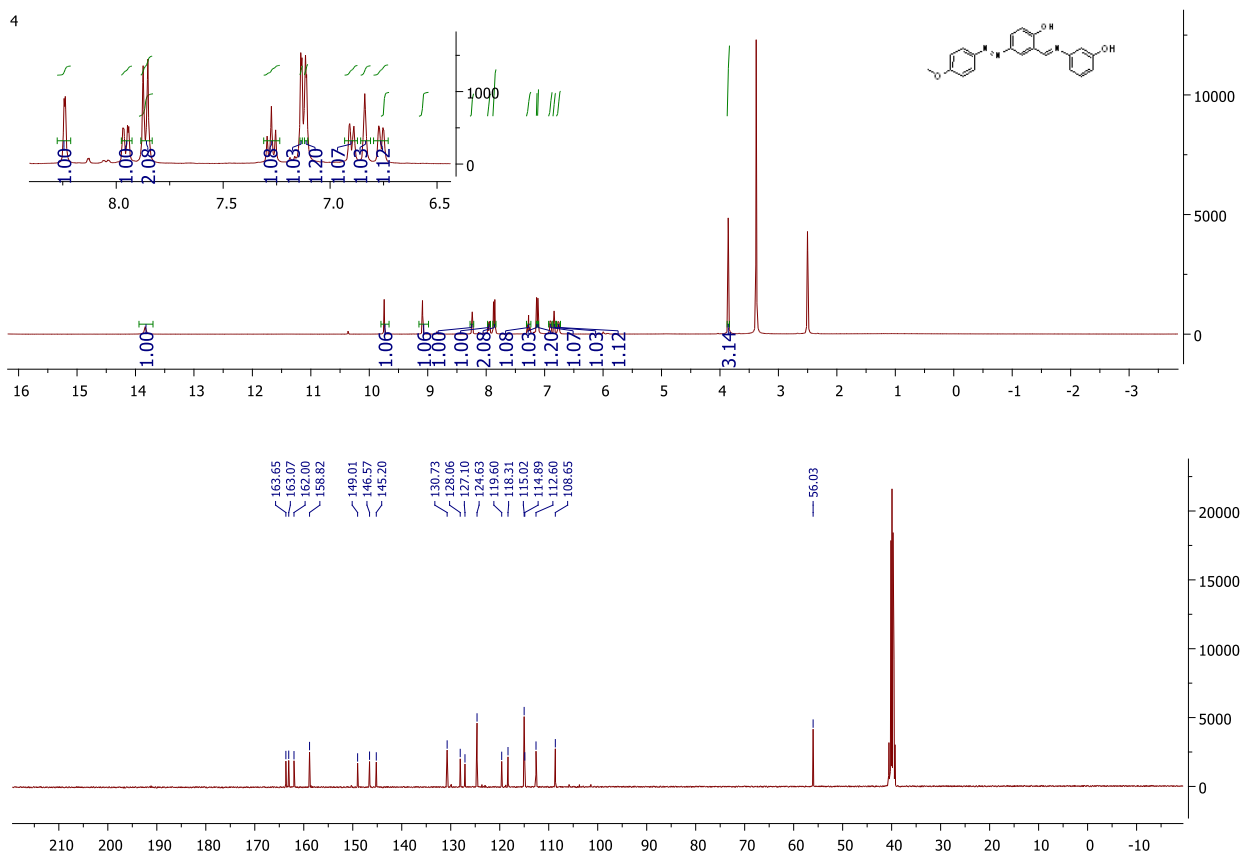


Figure 3. ^1H and ^{13}C -NMR spectrum of **4**

In the ^{13}C NMR spectra of Schiff base ligands, the carbon signal of the azomethine group was observed in the range of 163.46–114.21 ppm. [13]. The signals for the aliphatic carbons in the methoxy groups in ligands **3** and **4** were observed at 2, 55, 55 and 55.79 ppm, and the signal for the carbon in the methyl group was observed at 29.72 ppm.

The characteristic FTIR data of the azo-azomethine ligands and their complexes are listed in the experimental section. To explain the binding of Schiff base ligands to the metal in the complex structures, the FTIR spectra of the free ligands were compared with those of the transition metal complexes. In the complex spectra, the bands at 3425–3444 cm^{-1} which belong to $\nu(\text{OH})$ vibration for ligands, disappeared confirming the coordination of phenolic oxygen to the metal center. The complexes showed shifts of the bands assigned to $\nu(\text{C}=\text{N})$ stretching frequencies however, the $\nu(\text{C}=\text{N})$ stretching frequency shifted from around 1614–1615 cm^{-1} to the lower frequency of 1592–1613 cm^{-1} for the complexes. The shift in the $\nu(\text{C}=\text{N})$ may be attributed to the electron-withdrawing effects from the coordinated metal, which weakens the $(\text{C}=\text{N})$ bond and thus pushes the stretching frequency to a lower frequency [14]. The characteristic bands in the range of 1528–1593 cm^{-1} can be attributed to the $\text{N}=\text{N}$ group for the ligands and their metal complexes[15].

The electronic absorption spectral data for the compounds were obtained in 10^{-4} M DMF solutions at room temperature and data are given in the experimental section (Fig. S9-S16). The absorption bands between 235 and 642 nm are the measured bands for metal complexes at the UV-visible spectra in DMF. The shift in the absorption maxima (λ_{max}) was determined by taking the contrast between the absorption maxima of the metal complexes and ligands. The spectra of the complexes that show intense bands in the high-energy region can be assigned to the ligand-to-metal charge transition (LMCT) [16]. The Co(II) complexes **7**, **9**, and **11** show bands at 458–552 nm. This indicates tetrahedral geometry for the Co(II) complexes. Electronic spectra of the Cu(II) complexes display bands at 629 and 642 nm [17]. These values suggest square planar geometry for Cu(II) complex.

The magnetic moment values of the Cu(II) complexes are 1.8, 1.8, and 2.0 B.M., respectively. was measured. These values are close to the BM of 1.73 calculated for d^9 metal ions, which, as expected, corresponds to an unpaired electron. Here, the complex cannot be said to be square-plane or tetrahedral. However, it has been stated in the

literature that the Cu(II) complexes of Schiff bases are in a square planar structure. Likewise, the magnetic moment values of Co(II) complexes are 4.6, 4.5, and 4.7 B.M., respectively. was measured. This value is close to the BM of 3.87 calculated for d7 metal ions, which, as expected, corresponds to three unpaired electrons. This value shows that the Co(II) complex has sp^3 hybridization and is in tetrahedral geometry [18].

The enzyme catechol oxidase, which is a redox enzyme containing a pair of copper ions (connected by hydroxyl bridges) in its active site, is also known as O-diphenol oxidase. The enzyme structure could only be determined by X-ray diffraction in 1988 [19]. Catechol oxidase enzyme is commonly found in fruits, vegetables, shellfish, and the oxidation of phenols to quinones in the presence of molecular oxygen. Synthetic enzyme studies have focused on Cu(II) and Co(III) complexes due to the presence of binuclear Cu(II) in the active site of the natural enzyme [20]. For this reason, in this study, Cu(II) and Co(II) complexes' catecholase mimetic properties were investigated and 3,5-ditert-butyl catechol (3,5-DTBC) was chosen as the substrate. The catalytic performance of the complexes for the conversion of 3,5-ditert-butyl catechol (3,5-DTBC) to 3,5- di-test-butylbenzoquinone (3,5-DTBQ) in the presence of air oxygen was investigated (Figure 4).

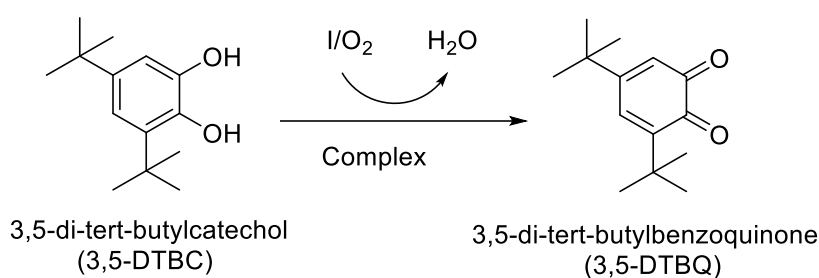


Figure 4. A schematic representation of catechol oxidation

The 3,5-DTBQ compound gives a characteristic absorption maximum at 400 nm in methanol and, this conversion can be followed by the absorbance change at 400 nm. Before performing the kinetic study, the ability of the complexes to mimic catechol oxidase enzyme was checked by reacting 1×10^{-5} M solutions (in MeOH) of the triazine-based complexes with 1×10^{-3} M (100 equivalents) of 3,5-DTBC in the presence of air. Before each experiment, 3,5-DTBC solutions were saturated with air for 30 min. Complex 12 was found to catalyze the oxidation of 3,5-DTBC to the 3,5-DTBQ in the presence of air oxygen (Figure 5).

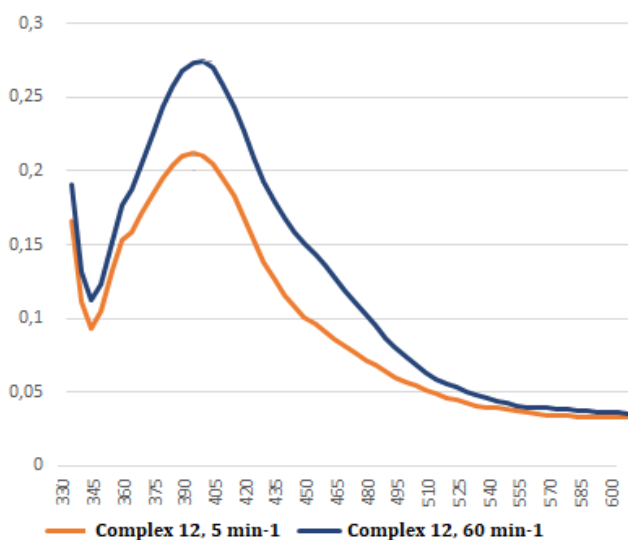


Figure 5. Increase of quinone band (3,5-DTBQ) at 400 nm after addition of 100-fold 3,5-DTBC (10^{-3} M) to complex (12) in MeOH.

In the light of the data obtained as a result of the experiments, it was determined that complex **12** showed the best catalytic efficiency. Other Cu(II) complexes (**8**, **10**) were observed to show relatively low activity. While complexes **7** and **11** showed even lower activity, it was determined that complex **9** did not show any activity.

4. Conclusion

In this study, three types of azo-azomethine ligands have been synthesized from the reaction of (E)-2-hydroxy-5-((4-methoxyphenyl)diazenyl)benzaldehyde with aniline derivatives. Structures of the synthesized ligands (**2-4**) and complexes (**7-12**) were characterized with ¹³C-NMR, ¹H-NMR, UV-Visible spectroscopy, elemental analysis and FT-IR. It was understood that metal is bound by N and O atoms in the ligands.

The catalytic activities of complexes were investigated. The catecholase enzyme-like activity of the complexes was studied for 3,5-DTBC → 3,5-DTBQ conversion in the presence of air oxygen. In the light of the data obtained as a result of the experiments, it was determined that complex **12** showed the best catalytic efficiency.

References

- [1] Ceyhan, G., Köse, M., Tümer M., Demirtaş, I., Şahin Yağlıoğlu, A., McKee V. 2013, *Lumin. J.*, 143(2013), 623–634.
- [2] J. Pratihari L., Mandal, P., Brandão, P., Mal, D., Felix, V. 2018. *Inorganica Chim. Acta*, 479(2018), 221–228.
- [3] Purtaş, F., Sayin, K., Ceyhan, G., Kose, M., Kurtoglu, M. 2017. *J. Mol. Struct.*, , 1137(2017), 461–475.
- [4] Agrahari, B., Layek, S., Anuradha, Ganguly, R., Pathak, D. D. 2018 *Inorganica Chim. Acta*, , 471(2018), 345–354.
- [5] Sarigul, M., Sari, A., Kose, M., McKee, V., Elmastas, M., Demirtas, I., Kurtoglu, M. 2016. *Inorganica Chim. Acta*, 444(2016), 166–175.
- [6] Zhang, W., Chen, Z., Han, X., Dong, W. 2021. *Spectrochim. Acta Part A Mol. Biomol. Spectrosc.*, 258(2021), 119815.
- [7] Banerjee, S. Chattopadhyaya, M. C. 2017. *Arab. J. Chem.*, 10(2017), S1629–S1638.
- [8] Lashanizadegan, M., Ashari, H. A., Sarkheil, M., Anafcheh, M., 2021. Jahangiry, S. *Polyhedron*, 200(2021), 115148.
- [9] Mittal, A., Kumari, S., Deepak, P. Appl. 2020. *Organometal Chem.* 34(2020), 1–12.
- [10] İnan, A. Sünbül, A. B., İkiz, M., Tayhan, S. E., Bilgin, S., Elmastaş, M., Sayın, K., Ceyhan, G., Köse, M., İspir, E. 2018. *J. Organomet. Chem.*, 870(2018), 76–89.
- [11] Sarigul, M., Deveci, P., Kose, M., Arslan, U., Türk Dagi, H., Kurtoglu, M. 2015. *J. Mol. Struct.*, 1096(2018), 64–73.
- [12] İnan, A., Sünbül, A. B., İkiz, M., Tayhan, S. E., Bilgin, S., Elmastaş, M., Sayın, K., Ceyhan, G., Köse, M., İspir, E. 2018. *J. Organomet. Chem.*, 870(2018), 76–89.
- [13] Köse, M., Ceyhan, G., Tümer, M., Demirtaş, İ., Gönül İ., McKee, V. 2015. *Spectrochim. Acta Part A Mol. Biomol. Spectrosc.*, , 137(2015). 477–485.
- [14] Sen, P., Nyokong, T. 2019. *Polyhedron*, 173 (2019). 114135.
- [15] Morgan, S. M., Hussien, M. A., El-ghettany A. A., 2021. *J. Mol. Struct.*, 1239(2021), 130481.
- [16] Lashanizadegan, M., Ashari, H. A., Sarkheil, M., Anafcheh, M., 2021. Jahangiry, S. *Polyhedron*, 200(2021), 115148.
- [17] Halder, S., Mukherjee, A., Ghosh, K., Dey, S., Nandi M., Roy, P. 2015. *J. Mol. Struct.*, 1101(2015). 1–7.
- [18] İspir, E. 2014. Phosphorus Sulfur and Silicon and the Related Elements, 189-11(2014). 1644-1655
- [19] Klabunde, T., Eicken, C., Sacchettini, J.C., Krebs, B. 1998. *Nat Struct Biol.*, 5-12(1998). 1084-90.
- [20] Publishers, K.A. Oxidase Model Reaction by Using An. 2004. 81 (2004) 143–151.

Determination of Expression Levels of *Fatty Acid Desaturase-2* Genes in Safflower (*Carthamus tinctorius* L.) Varieties Exposed to Copper

Ekrem Bolukbasi^{1,2}, E. Sumer Aras³

¹Amasya University, Suluova Vocational School, Department of Environmental Protection and Technologies, Amasya, TURKEY

²Amasya University, Central Research Laboratory, Amasya, TURKEY

³Ankara University, Science Faculty, Department of Biology, Ankara, TURKEY

(Alınış / Received: 09.06.2022, Kabul / Accepted: 15.08.2022, Online Yayınlanma / Published Online: 23.08.2022)

Keywords

Safflower,
Copper,
FAD2 gene,
Real Time-PCR

Abstract: Heavy metal pollution is an important environmental problem all over the world. It is known that high concentrations of heavy metals in soils and waters cause genotoxicity in living things and damage most of the functional biomolecules. For instance, while low concentration of copper, is essential for all organisms, high concentration of copper is toxic element that negatively affect every living organism from plants to humans. Safflower is an agricultural plant with high economic value grown for its seed oil. Safflower oil is source of Omega-9 and Omega-6 used in many food and industrial applications. In this study, it investigated the expression levels of *CtFAD2* (*FAD2-6*, *FAD2-7*, *FAD2-11*) genes responsible for conversion of Omega-9 to Omega-6 at root, cotyledon and leaf tissues of four different safflower varieties (Balci, Asol, Linas and Bdyas-04) subjected to copper heavy metals stress by qRT-PCR. RNA isolation, cDNA synthesis and qRT-PCR analysis were performed in root, cotyledon and leaf tissues exposed to copper stress for 24 hours after cultivation for 21 days. The increases were observed at concentrations of 40 and 80 mg L⁻¹. It was determined that the expression levels of *FAD2* genes decreased at increasing copper concentrations and increased again after 160 and 320 mg L⁻¹. The decrease firstly in the expression of *FAD2* genes at increasing copper concentrations and their re-increase after 160 and 320 mg L⁻¹, which can be considered as critical points, are accepted as an indication that the defense mechanism against stress is activated and *FAD2* genes play a role in the defense against stress.

In conclusion, it has been determined that *FAD2* genes, which are responsible for fatty acid desaturation in safflower cultivars exposed to copper stress, are also associated with the stress mechanism and play a role in defense.

Bakır Stresine Maruz Kalan Aspir (*Carthamus tinctorius* L.) Çeşitlerinde Yağ Asitleri Desaturaz-2 Genlerinin İfade Düzeylerinin Belirlenmesi

Anahtar Kelimeler

Aspir,
Bakır,
FAD2 gen,
Real Time-PCR

Öz: Ağır metal kirliliği tüm dünyada önemli bir çevre sorunudur. Ağır metallerin toprak ve sularındaki yüksek konsantrasyonlarının canlılarda genotoksisiteye neden olduğu ve fonksiyonel biyo-moleküllerin çoğuna zarar verdiği bilinmektedir. Örneğin, düşük bakır konsantrasyonu tüm organizmalar için gerekliyken, yüksek konsantrasyon bakır, bitkilerden insanlara kadar her canlı organizmayı olumsuz yönde etkileyen toksik bir elementtir. Aspir, tohum yağı için yetiştirilen, ekonomik değeri yüksek bir tarım bitkisidir. Aspir yağı, pek çok gıda ve endüstriyel uygulamalarda kullanılan Omega-9 ve Omega-6 kaynağıdır. Bu çalışmada, bakır ağır metal stresine maruz kalan dört farklı aspir çeşidinin (Balci, Asol, Linas and Bdyas-04) kök, kotiledon ve yaprak dokularında Omega-9'un Omega-6'ya dönüştürülmesinden sorumlu *CtFAD2* (*FAD2-6*, *FAD2-7*, *FAD2-11*) genlerinin qRT-PCR ile ekspresyon düzeyleri araştırılmıştır. 21 gün yetiştirildikten sonra, 24 saat

boyunca bakır stresine maruz bırakılan kök, kotiledon ve yaprak dokularında RNA izolasyonu, cDNA sentezi ve qRT-PCR analizi yapılmıştır. 40 ve 80 mg L⁻¹ konsantrasyonlarında artış gözlemlenmiştir. Artan bakır konsantrasyonlarında ise *FAD2* genlerinin ekspresyon düzeylerinin azaldığı, 160 ve 320 mg L⁻¹ 'den sonra tekrar arttığı tespit edilmiştir. *FAD2* genlerinin artan bakır konsantrasyonlarında ekspresyonunun önce azalması ve kritik nokta olarak kabul edilen 160 ve 320 mg L⁻¹ sonrasında yeniden artması, strese karşı savunma mekanizmasının devreye girdiğinin ve *FAD2* genlerinin strese karşı savunmada rol oynadığının bir göstergesi olarak kabul edilmiştir.

Sonuç olarak, bakır stresine maruz kalan aspir çeşitlerinde yağ desatürasyonundan sorumlu olan *FAD2* genlerinin aynı zamanda stres mekanizmasıyla da ilişkili olduğu ve savunmada rol oynadığı tespit edilmiştir.

*Corresponding Author, email: ekrem.bolukbasi@amasya.edu.tr

1. Introduction

Environment is the habitat in which all living things on earth can maintain their relations with each other throughout their lives. Environmental pollution, on the other hand, is the degradation of the environment by the human hand, which is not suitable for the natural structure of the environment. Although environmental pollution first emerges as a result of the necessity of creating spaces for urban life, these unnatural deteriorations are defined as the pollution of the ecosystem. Especially after the 1950s, the rapid increase in the population and the technologies developed to respond to the needs that developed in parallel with this caused the pollution of all our natural resources even faster. In today's world, pollution of the ecosystem has unfortunately become much more serious [1].

In order to survive, living things are constantly in contact with the physical elements of the ecosystem. They may encounter negative situations against any changes that may occur in their environment. While humans and animals can react more quickly to adversity or are easier to move away from, this is the opposite of plants. It is completely vulnerable to the negative effects that may occur around the plants. They are directly exposed to the negativities that occur. Since the most important natural food sources of people in the food chain are plants, people can also suffer indirectly from these problems [2].

Plants are the living element of the ecosystem that is most affected by their nature [3]. Due to their natural structure, plants face many different stress factors and have to live under stress conditions. According to many classifications, stress factors are divided into two groups as abiotic and biotic. Abiotic factors include water pollution, air pollution, soil pollution and organic or the synthetic chemicals, various wastes, pesticides, detergents, etc., which constitute the physical elements of ecosystem [4]. Various wastes, pesticides, detergents and heavy metals in the lower step of different chemicals are the most threatening and adversely affecting ecological balance. Heavy metals are an important stress factor not only for plants but also for animals and humans. Additionally, heavy metals are important disease agents for humans [5].

Heavy metals are the most important environmental pollutants published by the United States Environmental Protection Agency (EPA). They are among the priority pollutants causing environmental pollution [4]. The list published by the EPA contains about 70 elements. Among these elements, about 20 elements (Fe, Mn, Zn, Cu, V, Mo, Co, Ni, Cr, Pb, Be, Cd, Tl, Sb, Se, Sn, Ag, As, Hg, Al) draw attention with their importance and effects. Some elements (Fe, Cu, Zn, Mn, Mo, Ni) in this list are vital for plants and animals and need to be taken as micro nutrients. These elements do not have toxic effects unless accumulation in their environment or living being exceeds certain limits [3,5]. These elements, which are included in the group of heavy metals such as iron, copper, zinc, manganese, are essential elements that should be taken up by plants at certain levels [6].

Living things need varying amounts of so-called heavy metals. In humans, especially iron, is a very important element to be taken. There is also a need for metals such as cobalt, copper, manganese, molybdenum and zinc. However, excessive intake of all of these metals can damage the organism. Heavy metals, which begin to accumulate intensively in the ecosystem, pose a danger to almost any organism from plants to animals and humans, which are living elements of the ecosystem [7]. The development of technology in recent years has led to the rapid production of industrial materials. Agricultural pesticides used against many factors in agricultural areas, various artificial organic compounds used to increase yields also have an important share [1,4,5,7]. Heavy metal pollution leads to a decrease in product quality and yield in agricultural areas [6,8]. In general, plants are the most affected by heavy metal pollution in soil or water. Heavy metals cause oxidative stress by damaging many functional biomolecules in plants. It causes the formation of reactive oxygen species (ROS) such as superoxide

anion (O_2^-), hydrogen peroxide (H_2O_2) or hydroxyl radical ($OH\cdot$), causing damage to genotoxicity in plants as well as all living things [5,7,8].

Additionally, heavy metal stress in plants increases the formation of reactive oxygen species causing lipid peroxidation. Lipid peroxidation, the oxidation of the structural lipids in the cell and especially the lipids (unsaturated fatty acids in the composition) of the cell membrane with oxygen is the formation of structures such as aldehyde, ketone and hydroxy acids. Lipid peroxidation, oxygen oxidation of structural lipids in the cell, and in particular lipids found in the natural structure of the cell membrane. Lipid peroxidation, oxidation of the structural lipids in the cell, and in particular lipids in the natural structure of the cell membrane, with the formation of structures such as aldehyde, ketone, and hydroxy acids. Metals catalyze this formation. Lipid peroxidation in the cell membrane can lead to reduced membrane fluidity and membrane potential, deterioration of organelles and cell integrity. Additionally, malondialdehydes (MDA) formed by lipid peroxidation lead to degradation of DNA and most structural proteins [9].

Copper is free or compound in nature, has a very good conductivity and is a preferred metal for easy processing. Copper is an important metal and micro nutrient in maintaining normal metabolism in higher plants. In many studies on the importance of copper for plants, it was stated that copper acts as a controller in metabolic events by forming compounds with organic substances and vitamins. In particular, it is added to the enzyme structure as a cofactor. Heavy metals such as copper and zinc function as cofactors in many proteins and enzymes involved in metabolic pathways in plant growth and development. Photosynthesis, which is vital for plants, plays an important role in metabolic and physiological events such as respiration and cell wall. The transport of water in xylem pipes takes place under the control of copper heavy metal. Additionally, it controls the production of cellular hereditary materials such as DNA and RNA through the enzymes it serves. In the case of deficiency, DNA and RNA production may be hampered or may also stop [6,8,9].

Although copper is so important for plants, the mentioned above metabolic events fail in case of deficiency. Likewise, although it is involved in a wide variety of biochemical and physiological processes, the accumulation of excess Cu causes these metabolic events to stop functioning. Because copper is a highly toxic metal. It causes many tissue damages in plants, in case of excess. As a result of excessive accumulation in the roots, it negatively affects the exchange of water and ions and causes events such as growth disorder and regression in the roots. Reactive oxygen species (ROS) due to the toxic effect of excessive accumulation, cause damage to DNA and the death of plants in general [6-9].

Safflower (*Carthamus tinctorius* L.) is a member of the Asteraceae family. It is an important oil plant with economic value. There are many cultivated varieties of the safflower plant, which is represented by about 25 species around the world. Safflower is a broad leaved annual herb with yellow, red, orange, white and cream color flowers. This plant, resistant to arid climate, can be sized between 50-100 cm with its thorny and thornless forms [10-12]. (Figure 1).



Figure 1. General view of safflower plant, flower, field and seed [13]

Safflower seeds contain about 30-50% quality oil. The researchers showed that the quality of safflower oil much higher than different oil crops such as soybean, sunflower and corn [12]. Oleic acid (C18:1^{Δ9}) and linoleic acid (C18:2^{Δ9,12}) are the two main fatty acids found in safflower oil and make up about 90% of total fatty acids. Traditional safflower oil is characterized by a relatively high linoleic acid content of around 70% compared to other oilseed products [12,14]. Safflower flowers are used for medicinal purposes in the treatment of many diseases, as well as consumed as tea. Safflower flower is mainly preferred as tea because of some amino acids, minerals and especially vitamins B1, B2, B12, C and E in its essence [11,12,14]. Apart from the use of the safflower plant for tea and medicinal purposes, different parts of it are used as foodstuffs in Middle East and Asian countries [12]. Safflower plant is popular plant in the industry because it is used in many sectors such as paint, varnish, feed, medicine, cosmetics and margarine. Shells of safflower seeds are preferred in the paper industry, especially in packaging, brick and ceramic production [12,15]. It is known that the main raw material of biodiesel production is oilseed plants [16]. About 50 different plants can be used in the production of biodiesel. Among them, the most important ones are sugar cane, soybean, sorghum, canola and corn [15].

Safflower does not need as much water as other oil crops such as soybean, rapeseed, canola, sunflower and peanut, and is suitable for agriculture in many areas. One of the most important factors in safflower cultivation is the weed control in the field to be planted. This plant, which has relatively low competition with weeds, is very sensitive to weeds existing in the field during the 3-4 weeks period, which is the first stage of development. For this reason, it is recommended to apply herbicides with highly effective chemical formulas such as trifluralin, metolachlor, EPTC, barban, profluralin and paraquat to the soil before planting safflower. The disadvantages of the chemicals in the basal structure of these herbicides (copper ethylenediamine sulfate salts, copper triethanolamine complex, copper hydrazinium sulfate, copper sulfate, leadarsenite, copper arsenite, etc.) are that they adversely affect living things [17].

In high plants, polyunsaturated fatty acids are transformed in chloroplast and endoplasmic reticulum by a group of fatty acid desaturase enzymes. This transformation occurs by different desaturases in different organs of plants. For example, FAD3 (fatty acid desaturase-3) in safflower plant performs the conversion of fatty acids in the flower part. FAD7 and FAD8 desaturases are enzymes responsible for desaturation in leaves, roots and, to a lesser extent, flower parts [18,19]. FAD2 enzymes encoded by *FAD2* genes, are one of the fatty acid desaturases involved in the biosynthesis pathway of polyunsaturated fatty acids. All this information includes Cao et al. (2013) isolated eleven different *FAD2* genes belonging to the *FAD2* gene family coded at different levels in different organs of the safflower plant. Phylogenetic analysis of eleven different *FAD2* genes was performed and their genomic structural features were indicated. The expression of these *FAD2* genes in different organs of the safflower plant is given in figure 2 [20].

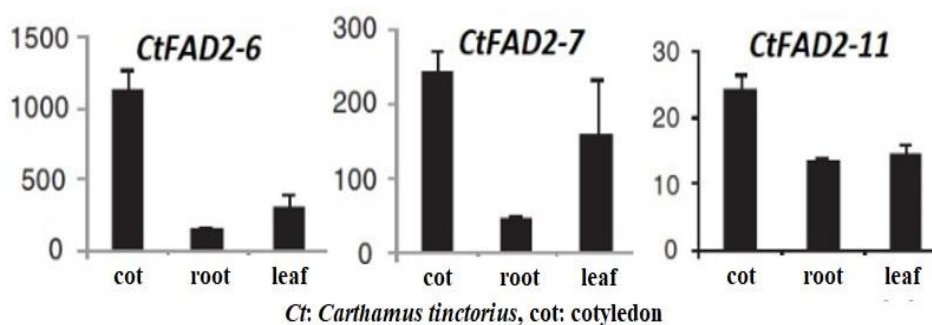


Figure 2. Comparative expression levels of the *FAD2* genes evaluated in different tissues of the safflower in the study [20]

In this current study, in experimental groups prepared at different copper concentrations, the possible positive and negative/genotoxic effects of copper on the mRNA expression levels of the *FAD2* (*FAD2-6*, *FAD2-7*, *FAD2-11*) genes, which is responsible for the conversion of oleic acid to linoleic acid in different safflower varieties (Balci, Asol, Linas and Bdyas-04) were determined by quantitative Real-Time PCR (qRT-PCR) method.

2.1 Materials and Methods

2.1 Plant materials and growth conditions

Safflower varieties used in this study are nationally registered cultivars (Balci, Asol, Linas and Bdyas-04) origin, were obtained from the "Bahri Dagdas International Agricultural Research Institute-Konya and Transitional Zone Agricultural Research Institute-Eskişehir", in Turkey. All of these selected cultivars have a spiny structure and their oil ratios ranging from 35-45%. The seeds of all safflower varieties were germinated, following the surface sterilization in a solution containing 5% (v/v) hypochlorite for 5 min, and were grown hydroponically in pots

containing 0.2 L of modified 1/10 Hoagland's solution. Macro and micro nutrients were used in the preparation of Hoagland medium. Macronutrients (K_2SO_4 , KH_2PO_4 , $MgSO_4 \cdot 7H_2O$, $Ca(NO_3)_2 \cdot 4H_2O$ and KCl) and micronutrients (H_3BO_3 , $MnSO_4$, $CuSO_4 \cdot 5H_2O$, NH_4Mo , $ZnSO_4 \cdot 7H_2O$) with a final concentration of ions as 2 mM Ca, 10^{-6} M Mn, 4 mM NO_3 , $2 \cdot 10^{-7}$ M Cu, 1 mM Mg, 10^{-8} M NH_4 , 2 mM K, 10^{-6} M Zn, 0.2 mM P, 10^{-4} M Fe and 10^{-6} M B. Safflower seedlings were incubated in a controlled environmental growth chamber in the light with 250 $\mu mol\ m^{-2}\ s^{-1}$ photosynthetic photon flux at 25 °C, 70% relative humidity. All safflower cultivars were grown in the climatic chamber for 21 days. Within a 24-hour period, 16 hours (25 °C, 70% humidity) day and 8 hours (22 °C, 60% humidity) night cycles were applied. After growing for 21 days, the seedlings were exposed to 40, 80, 160, 320, 640 $mg\ L^{-1}$ Copper (I) sulfate ($Cu_2SO_4 \cdot 5H_2O$) for 24 h. 1X Hoagland solution, which does not contain any copper, was used as the control group. At the end of 24 hours, the seedlings taken from copper stress were washed with distilled water and sampling was done. Sampling was carried out from 3 different tissues; root, cotyledon, leaf, and the samples were treated with liquid nitrogen and then stored in the -80 °C freezer until the RNA isolation stage.

2.2 RNA extraction, complementary DNA (cDNA) synthesis assay

Total RNA extraction of root, cotyledon and leaf samples taken from different safflower cultivars exposed to copper stress for 24 hours was performed according to Trizol (TRIGent) reagent according to suggested procedures by manufacturer. Afterwards the amount and purity of RNA were determined using the Nanodrop ND-Spectrometer 1000 device (NanoDrop Technologies, Wilmington, DE, USA) and 1.5% agarose gel electrophoresis. Next, cDNA synthesis was performed using the ProtoScript-II First Strand cDNA Synthesis Kit (BioLabs Inc.). Anchored-oligo(dT)18 primer was used because of the long *FAD2* and *actin* (*ACT*) gene regions.

2.3 The qRT-PCR analyses of *FAD2* genes

The primers of *Actin* (*ACT*) as housekeeping gene and *FAD2* genes used in this study were designed using the sequences of the safflower (*Carthamus tinctorius* L.) plant in the gene bank (NCBI; National Center for Biotechnology Information). *FAD2-6*, *FAD2-7* and *FAD2-11* genes were chosen because they are transcribed in three tissues (root, cotyledon and leaf) of all safflower cultivars (Figure 2). For the design of the primers used in the study, information on fatty acids desaturase-related genes (*FAD2*) was obtained from the gene bank (NCBI). Information about these genes and the most suitable primers sequences were designed are given in Table 1.

Table 1. Information *FAD2* genes in NCBI database and sequences and melting temperatures of primers used in qRT-PCR.

Genes/ Primers name	Length	Gene Bank Number	Sequence (5'-3')	Tm (°C)
<i>FAD2-6</i>	1148 bp	KC257452.1	F: ACCAATGCAGTCAAGCCCAT	58-60 °C
			R: TCTGCACCTTCATCTGGCTC	
<i>FAD2-7</i>	1210 bp	KC257453.1	F: CGCAAACCATTTCTACCGC	58-60 °C
			R: CGTCGATTTTCAGGCCTTGGA	
<i>FAD2-11</i>	1213 bp	KC257457.1	F: ACGCCTTATTTTCGCCTGGAA	58-60 °C
			R: TCGCGATCTTGGACTTACGT	
<i>ACTIN</i>	1678 bp	KJ634809.1	F: GGCCTGACCTTACAGATTC	58-60 °C
			R: CAAGCTCTTGCTCGTAGTC	

For quantification analysis of *FAD2* and *ACT* genes was carried out using SYBR Green I Master dye by Light Cycler Nano (Roche) device following cDNA synthesis in samples taken from root, cotyledon and leaf tissues of safflower cultivars exposed copper stress at different concentrations. PCR conditions consisted initial denaturation 10 min at 95 °C, (40 cycles) 95 °C for 15 s, 60 °C for 20 s, 72 °C for 20 s, and a melting analysis of 52 to 95 °C with an increasing temperature 0.5 °C min^{-1} . Real-Time PCR reactions were performed in three technical repetitions using the obtained optimal conditions.

2.4 Normalization and statistical analysis of qPCR results

Gene expression results determined as Ct (Cycle Threshold) value, *ACT* (*actin*) and control conditions used in the study were normalized by considering housekeeping gene. Transcript profiles of root, cotyledon and leaf samples of safflower cultivars exposed to copper were compared with *actin* (*ACT*) selected as housekeeping gene. The obtained data were normalized according to the $2^{-\Delta\Delta Ct}$ method of Livak and Schmittgen [21]. The mean, standard deviation, standard error and statistical significance of these data were calculated with the statistical program SPSS 25.0 for Windows (IBM SPSS, Inc., Chicago, IL). ANOVA, Tukey and Dunnett multiple comparison tests were performed to reveal the differences between the groups. The homogeneity of the variances was determined by the Levene test. In previous studies in the literature, Dunnett's test is recommended to be used if a control group is compared with more than one experimental group. For this purpose, post-hoc Tukey HSD and Dunnett test were

applied to the variables with homogeneous distribution of variances (to confirm the results), and Dunnett's T3 test was applied to the variables that did not show homogeneous distribution. $P < 0.05$ was considered to be statistically significant.

3. Results

Root, cotyledon and leaf tissue samples taken from safflower cultivars exposed to copper stress for 24 hours were stored in a deep freezer at -80°C until the RNA isolation process. RNA isolation from these preserved samples was made according to the Trizol (TRIGent) protocol, and then the amount and purity of RNA were determined using the Nanodrop ND-Spectrometer 1000 device. Isolated RNAs were checked by running on 1.2 % agarose gel for confirmation. Gel images of some samples are given in figure 3.

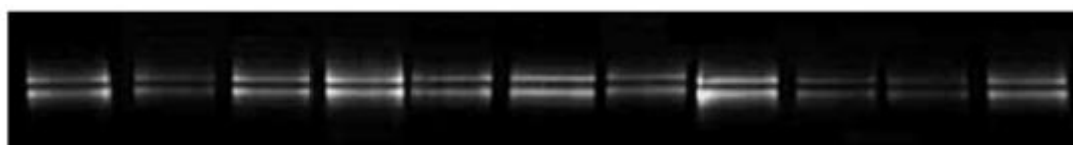


Figure 3. Agarose gel image of some RNAs isolated from samples after copper stress treatment

The mRNA expression profiles of *FAD2* (*FAD2-6*, *FAD2-7*, *FAD2-11*) genes of root, cotyledon and leaf samples of BALCI, BDYAS-04, LİNAS and ASOL cultivar with different concentrations of copper (Cu) stress were normalized according to the $2^{-\Delta\Delta\text{Ct}}$ method, taking into account *Actin* (*ACT*) used as a housekeeping gene and control conditions. The mean, standard error and standard deviation of the gene expression data obtained as a result of normalization were calculated (Appendix A-D). Normalized gene expression data were averaged and according to the results obtained, the changes in the concentration-dependent expression level of *FAD2* (*FAD2-6*, *FAD2-7*, *FAD2-11*) genes occurring in different tissues of each safflower cultivar were shown on the separate graphs.

Changes in the expression levels of concentration-dependent *FAD2* genes in leaf samples of Balci cultivar under copper stress; an approximately 15-fold increase in *FAD2-11* gene expression level was detected at 40 mg L^{-1} compared to the control group ($p < 0.05$). While this increase decreased up to 160 mg L^{-1} ($p < 0.01$), it started to increase again at 320 mg L^{-1} ($p < 0.001$) concentration, reaching the highest level with an approximately 18-fold increase at 640 mg L^{-1} ($p < 0.05$). The *FAD2-7* gene expression level reached a spike of about 10-fold at 40 mg L^{-1} ($p < 0.001$), and then showed an increasing and decreasing trend up to a concentration of 320 mg L^{-1} ($p < 0.05$). It reached the highest level at 640 mg L^{-1} ($p < 0.001$). While the *FAD2-6* gene expression level showed an increasing graph up to 160 mg L^{-1} concentration ($p < 0.05$), it decreased significantly with a sudden decrease at 320 mg L^{-1} ($p < 0.05$) compared to the control group and increased again at 640 mg L^{-1} ($p < 0.05$) (Figure 4 and Appendix A).

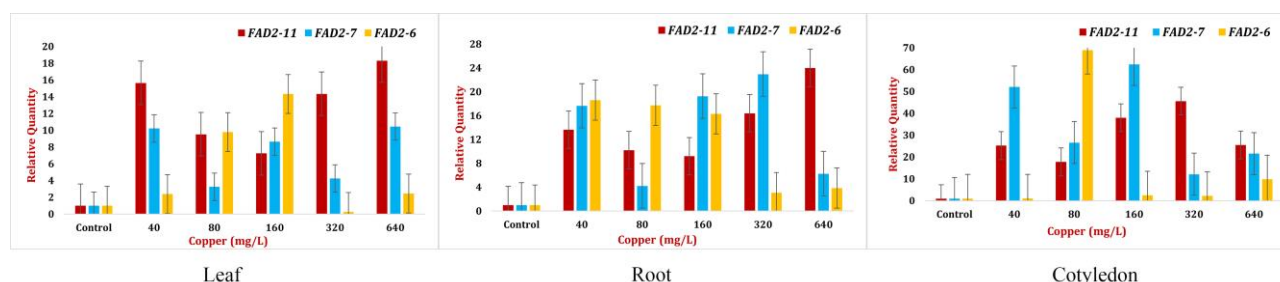


Figure 4. Changes in the expression levels of concentration-dependent *FAD2* genes in the leaf, root and cotyledon samples of BALCI cultivar under copper stress.

Concentration-dependent changes in the expression levels of *FAD2* genes in root samples of Balci cultivar under copper stress; an approximately 13-fold increase in *FAD2-11* gene expression level was detected at 40 mg L^{-1} compared to the control group ($p < 0.05$). While this increase decreased up to 160 mg L^{-1} ($p < 0.05$), it increased approximately 16 times at 320 mg L^{-1} concentration ($p < 0.001$) and reached the highest level with a 24-fold increase at 640 mg L^{-1} ($p < 0.05$). The *FAD2-7* gene expression level reached an approximately 18-fold spike at 40 mg L^{-1} ($p < 0.001$). It decreased again at 80 mg L^{-1} concentration. However, it increased up to 320 mg L^{-1} , reached approximately 23 times ($p < 0.001$), and decreased again at 640 mg L^{-1} . An approximately 19-fold increase in *FAD2-6* gene expression level was detected at 40 mg L^{-1} ($p < 0.05$), and this level gradually decreased with increasing concentrations (Figure 4 and Appendix A).

Changes in the expression levels of concentration-dependent *FAD2* genes in the cotyledon samples of the Balci variety applied to copper stress; compared to the control, the *FAD2-11* gene expression level was approximately 45-fold, with the highest expression at 320 mg L^{-1} ($p < 0.05$) and the lowest at 80 mg L^{-1} concentration,

approximately 18-fold. The *FAD2-7* gene is expressed highest at 160 mg L⁻¹ (p<0,001) and lowest at 320 mg L⁻¹, while the highest and lowest expression concentrations of the *FAD2-6* gene are 80 mg L⁻¹ and 320 mg L⁻¹, respectively (Figure 4 and Appendix A).

Similarly, the mRNA expression profiles of *FAD2* (*FAD2-6*, *FAD2-7*, *FAD2-11*) genes of root, cotyledon and leaf samples of Bdyas-04, Linas and Asol cultivars with different concentrations of copper (Cu) stress were normalized according to the 2^{-ΔΔCt} method, taking into account *Actin* (ACT) used as a housekeeping gene and control conditions. The mean, standard error and standard deviation of the gene expression data obtained as a result of normalization were calculated (Appendix B-D). Normalized gene expression data were averaged and according to the results obtained, the changes in the concentration-dependent expression level of *FAD2* (*FAD2-6*, *FAD2-7*, *FAD2-11*) genes occurring in different tissues of each safflower cultivar were shown in separate graphs (Figure 5-7).

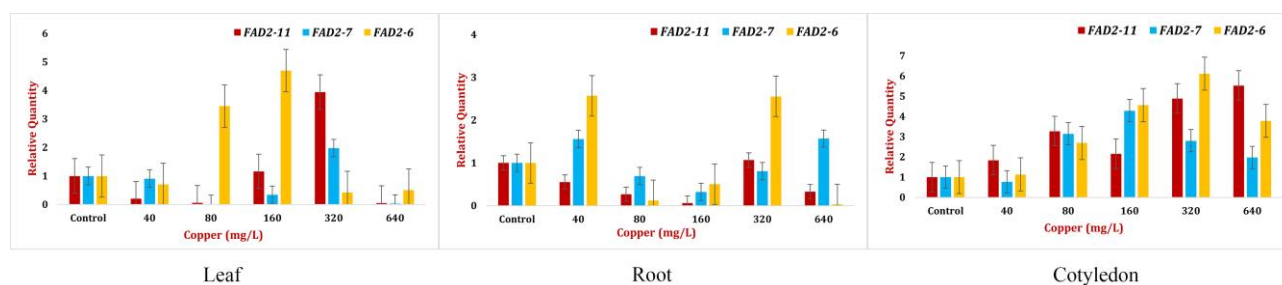


Figure 5. Changes in the expression levels of concentration-dependent *FAD2* genes in the leaf, root and cotyledon samples of BDIAS-04 cultivar under copper stress.

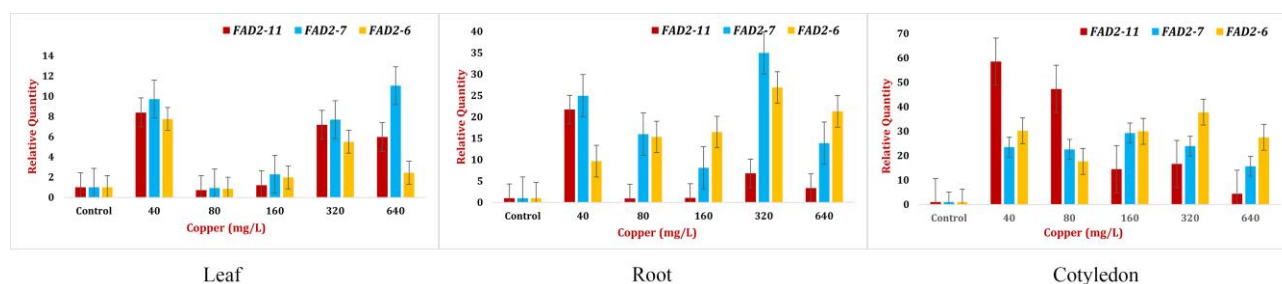


Figure 6. Changes in the expression levels of concentration-dependent *FAD2* genes in the leaf, root and cotyledon samples of LINAS cultivar under copper stress.

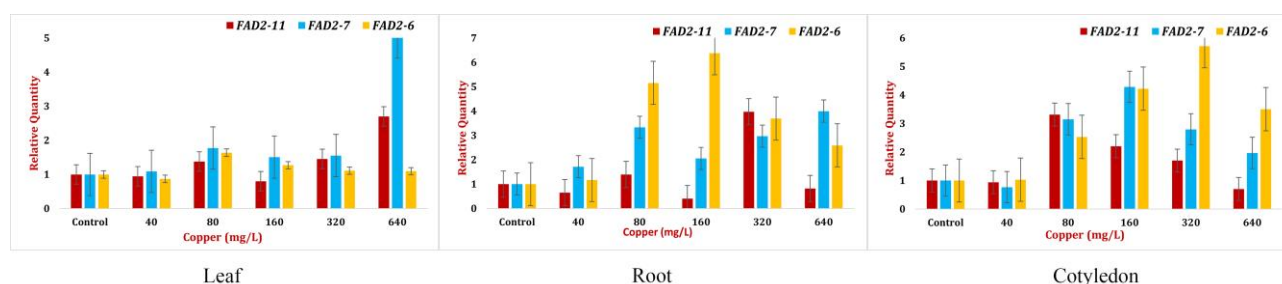


Figure 7. Changes in the expression levels of concentration-dependent *FAD2* genes in the leaf, root and cotyledon samples of ASOL cultivar under copper stress.

4. Discussion and Conclusion

In this current study; the mRNA expression levels of the *FAD2-6*, *FAD2-7* and *FAD2-11* genes belonging to the *FAD2* gene family, which encode the FAD enzymes responsible for the conversion of oleic acid (C18:1) to linoleic acid (C18:2), were determined in the samples taken from root, cotyledon and leaf tissues in safflower cultivars (Balci, Asol, Linas and Bdyas-04) exposed to different concentrations (40 mg L⁻¹, 80 mg L⁻¹, 160 mg L⁻¹, 320 mg L⁻¹ and 640 mg L⁻¹) of copper heavy metal stress.

The changes in the expression levels of the targeted genes under heavy metal stress conditions were determined by Real-Time PCR method in the study. The qPCR method is a very effective method for detecting genes, determining their functions, testing and determining their relationship with various stresses [2,5,22].

Although there are studies on other abiotic stresses related to *FAD2* genes in the literature, there is no study investigating the effects of heavy metal stress. Our study is the first of its kind on the subject, especially copper. Therefore, the data obtained from the study were evaluated based on the roles of the *FAD2* genes in the fatty acids mechanism. Studies have shown that *FAD* genes play critical roles in defense against salt and cold stress and take an active role in functions such as conversion, modification and restructuring of fatty acids. The data obtained as a result of the study support that *FAD2* genes give similar responses to heavy metal stress.

FAD2 genes are one of the genes encoding the most critical desaturase enzymes and are responsible for the conversion of oleic acid (C18:1) to linoleic acid (C18:2) in non-photosynthetic tissues as well as in all tissues [2]. It has been stated that the levels of polyunsaturated fatty acids in the cell membrane provide tolerance to plants against drought, salt and cold stress through the regulation of *FAD* genes [23,24].

In the studies in the literature; it has been stated that *FAD* genes play a role in defense by increasing their expression levels in adverse environmental conditions [25]. Overexpression of the *FAD3* gene in tomato plant increased the tolerance of tomato seedlings to salt stress [26] while overexpression of *FAD3*, *FAD8* and *FAD7* genes increased the tolerance of the tobacco plant to drought [24] and cold stress [27]. It has been determined that *FAD2* genes are involved in the defense mechanism against salt stress in sunflower [28].

In addition, it was reported that the expression levels of *FAD2* and *FAD6* genes increased against salt stress in *Arabidopsis* seedlings [29]. In another study, it was found that the *FAD2* gene is active and sensitive to stress factors such as darkness, heat and salt in *Arabidopsis* plant. It has been stated that the *FAD2* gene, which is expressed in various tissues of the *Arabidopsis* plant, functions during the growth and reproduction period of the plant and plays a role in defense against abiotic stresses [30].

In the literature, it has been stated that the *FAD2* gene in *Arabidopsis* plant [31,32] and soybean seed [25] provides adaptation to temperature change through the production of polyunsaturated fatty acids. It was determined that *FAD2* gene expression increased in response to cold stress in maize and flaxseed [33].

Feng et al. (2017) stated that the expression levels of *FAD2* genes increased in different tissues of cotton (*Gossypium hirsutum*) plant exposed to different salt and cold stress. They emphasized that the *FAD2-3* and *FAD2-4* genes, which are in the same gene family as the *FAD2* (*FAD2-6*, *FAD2-7* and *FAD2-11*) genes used in our study participate in the membrane adaptation against salt and cold stress and that the cell membrane is preserved in this way [34]. Similarly, overexpression of *FAD8* also reduces the damage of cold stress [35]. In the study on the *FAD2-3* gene in soybean, an increase in the unsaturated fatty acid composition and mRNA expression levels of the *FAD2-3* and *FAD2-4* genes were determined under cold stress [36].

Heavy metal stress; it directly affects many biological events such as the release of protein and lipid components required for photosynthesis from thylakoid membranes in plants and metal exchange in chlorophyll (Mg^{+2}) [34]. In addition, heavy metal stress triggers the increase of reactive oxygen species (ROS). As a result of heavy metal-induced ROS accumulation and lipid peroxidase activity, polyunsaturated fatty acids in plant membrane lipids undergo peroxidation, leading to damage and loss of membrane integrity [4].

Plants exposed to heavy metal stress try to cope with stress by making changes in the structure and amount of various lipids and fatty acids that participate in the lipid structure. In many studies; in plants, tolerance to e.g. copper (Cu) and cadmium (Cd) heavy metal stresses increases with increasing fatty acid unsaturation in cell membranes [4,23,24,30].

In this current study the increase in the expression levels of the *FAD2* genes is thought to increase the amount of fatty acids against heavy metal stress. Li et al. (2015) investigated the effects of copper (Cu) and lead (Pb) heavy metal stresses on seedling growth and development and glutathione (*GSH*) gene expression levels of safflower plant. It was stated that seedling growth and *GSH* expression levels increased at low concentrations of copper heavy metal. Seedling growth and *GSH* expression level decreased significantly with increasing Cu and Pb concentrations. As a result, short-term exposure of the safflower plant to low Cu concentrations caused an increase in *GSH* synthesis to maintain normal plant growth. Long-term exposure of the safflower plant to high Cu and Pb stresses negatively affected the *GSH* metabolic chain and created serious toxicity for the safflower plant. The change in the expression level of *GSH* detected in this study is similar to the change in the expression level of *FAD2* genes obtained in this study [37].

The results obtained from current study support each other with the literature studies mentioned above. Increases in expression levels of *FAD* genes have been detected against various abiotic stress factors used in studies. Thus, by providing re-regulation of fatty acid metabolism, tolerance to stress is increased. Considering that the stress

caused by heavy metals triggers similar mechanisms with other abiotic or biotic stress factors, the upward change in the expression levels of *FAD2* genes against the stress of heavy metals in the safflower plant shows parallelism with the studies mentioned.

As a result, when the data obtained from this study were evaluated as a whole, it was determined that the expression levels of *FAD2* genes increased at low concentrations in safflower cultivars subjected to copper stress. It is thought that this result, which is similar to the results of the studies in the literature, is due to the use of copper as a micronutrient by plants. Gautam et al. (2016) emphasized that although copper is used as a micronutrient by plants, its toxic effect depends on time and dose. The decrease in the expression of *FAD2* genes at increasing copper concentrations and their re-increase after 160 mg L⁻¹ and 320 mg L⁻¹, which can be considered as the critical point, is accepted as an indication that the defense mechanism against the stress is activated and *FAD2* genes play a role in the defense against stress [38].

In addition, some studies in the literature have reported that the expression profiles of various genes are tissue specific [2,5,39,40]. In this article, it was determined that *FAD2* genes had different expression levels in root, cotyledon and leaf tissues of 4 different safflower cultivars exposed to copper, lead and cadmium heavy metal stresses. When the data obtained from the study are evaluated, it has been shown that *FAD2* (*FAD2-6*, *FAD2-7* and *FAD2-11*) genes are structurally active in root, cotyledon and leaf tissues [20] and play an active role in tissue-specific stress response. Such a study on the *FAD2* genes, which are responsible for the conversion of oleic acid to linoleic acid in the safflower plant, which has strategic importance and is an important oil plant, has not been done before, and the genetic mechanism of the response of the safflower plant to heavy metal stresses has not yet been clarified. In this study, changes in the expression of *FAD2* genes were determined in the presence of heavy metal stress factors. In this way, data that will contribute to the revealing of defense mechanisms against stress have been obtained.

In conclusion, when evaluated in general, *FAD* genes improve plant tolerance against adverse conditions by regulating fatty acid mechanisms in membrane lipids. The regulation of *FAD2* genes is important in understanding plant growth and the response to different abiotic stresses. Further study of the *FAD2* gene will help improve oil quality and stress resistance in plants. The data obtained from this study; it has been shown that *FAD2* genes play a critical role in defense against heavy metal stress in safflower cultivars. With this study, it has been shown that the *FAD2* gene is a good candidate gene for future studies in the safflower plant.

Acknowledgment

The authors gratefully acknowledge the financial support of this work by Ankara University Scientific Research Unit (Project No: 16L0430009). Also, thanks to architect Alper Kaan KALKAN, who helped design the graphs.

Conflicts of interest

Authors have no any financial or personal relationships with other individuals or organizations that might inappropriately influence this work during the submission process.

Statement contribution of the authors

This study's experimentation, analysis and writing, etc. all steps were made by the authors.

Statement of ethics

There is no need for an ethics committee decision for the studies in the article.

References

- [1] Yarsan, E., Bilgili, A., Türel, I. 2000. Heavy metal levels in mussels (*Unio stevenianus* Krynicki) obtained from Van Lake. *Turk J. Vet. Animal Science*, 24, 93-96.
- [2] Buyuk, I., Bolukbasi, E., Aras, E.S. 2016. Expression of *CtFAD2* gene for early selection in safflower oleic linoleic oil content. *Journal of Animal and Plant Sciences*, 26(5); 1383-1388. <https://www.thejaps.org.pk/docs/v-26-05/27.pdf>
- [3] Bolukbasi, E., Aras, E.S. 2016. Determination of DNA Methylation Levels with CRED-RA Technique in the Genome of Sunflower Seedlings (*Helianthus annuus* L.) Subjected to Zinc Stress. *International Journal of Environment, Agriculture and Biotechnology*. 1(3), 438-444.

- [4] Mithofer, A., Schulze, B., Boland, W. 2004. Biotic and heavy metal stress response in plants: Evidence for Common Signals. *FEBS Lett*, 566, 1-5. doi: 10.1016/j.febslet.2004.04.011
- [5] Bolukbasi, E. 2021. Expression analysis of some stress-related genes induced by cadmium on tomato (*Solanum lycopersicum* L.) plants. *Hittite Journal of Science and Engineering*, 8(4), 339-345. doi.org/10.17350/HJSE19030000247
- [6] Upadhyay, R.K., Panda, S.K. 2009. Copper-induced growth inhibition, oxidative stress and ultrastructural alterations in freshly grown water lettuce (*Pistia stratiotes* L.). *C.R. Biol.* 332, 623-632.
- [7] Nzengue, Y., Candeias, S.M., Sauvaigo, S., Douki, T., Favier, A., Rachidi, W. and P. Guiraud. 2011. The toxicity redox mechanisms of cadmium alone or together with copper and zinc homeostasis alteration: its redox biomarkers. *J. Trace Elem. Med. Biol.* 25, 171-180.
- [8] Gautam, S., Anjani, K., Srivastava, N. 2016. In vitro evaluation of excess copper affecting seedlings and their biochemical characteristics in *Carthamus tinctorius* L. (variety PBNS-12). *Physiol Mol Biol Plants*, 22(1); 121-129.
- [9] Li, S., Zhang, G., Gao, W., Zhao, X., Deng, C., Lu, L. 2015. Plant Growth, Development and Change in Gsh Level in Safflower (*Carthamus tinctorius* L.) Exposed to Copper and Lead. *Arch. Biol. Sci.* 67(2); 385-396.
- [10] Davis, P.H. 1975. *Flora of Turkey and the East Aegeans Islands*. Vol: 5, The University Press. Edinburg, England.
- [11] Singh, V., Nimbkar, N. 2006. Safflower (*Carthamus tinctorius* L.). Chap. 6. In: Singh RJ (ed) *Genetic resource, chromosome engineering, and crop improvement*, Vol 4, 167-194, New York.
- [12] Babaoglu, M. 2007. *Safflower and its cultivation*. Trakya Agricultural Research Institute, Edirne.
- [13] Anonymous. 2013. Web sitesi: <https://www.agroscope.admin.ch/agroscope/en/home/topics/plantproduction/fieldcrops/kulturarten/alternative-kulturpflanzen/saflor.html>, Erişim tarihi: 26.07.2021.
- [14] Delshad, E., Yousefi, M., Sasannezhad, P., Rakhshandeh, H., Ayati, Z. 2018. Medical uses of *Carthamus tinctorius* L. (Safflower): A comprehensive review from traditional medicine to modern medicine. *Electronic Physician*, 10(9); 6672-6681. doi: 10.19082/6672
- [15] Sahin, G., Tasligil, N. 2016. Safflower (*Carthamus tinctorius* L.): An industrial plant with increasing strategical importance. *Turkish Journal of Geography*, 66, 51-62. doi: 10.17211/tcd.48394
- [16] Karabaş, H. 2013. Ülkemiz ıslahçı çeşitlerinden Remzibey-05 Aspir (*Carthamus tinctorius* L.) tohumlarından üretilen biyodizelin yakıt özelliklerinin incelenmesi. *Uludağ Üniversitesi Ziraat Fakültesi Dergisi*, 27(1); 9-17.
- [17] Mastin, B.J., Rodgers, J.H. 2014. Toxicity and bioavailability of copper herbicides (Clearigate, Cutrine-Plus, and Copper Sulfate) to freshwater animals. *Environmental Contamination and Toxicology*, 39(4), 445-51.
- [18] Guan, L.L., Wang, Y.B., Shen, H., Hou, K., Xu, Y. 2012a. Molecular cloning and expression analysis of genes encoding two microsomal oleate desaturases (*FAD2*) from safflower (*Carthamus tinctorius* L.). *Plant mol. Boil. Rep*, 30, 139-148. doi: 10.1007/s11105-011-0322-5
- [19] Guan, L.L., Xu, Y.W., Wang, Y.B., Chen, L., Shao, J. 2012b. Isolation and characterization of temperature-regulated microsomal oleate desaturase gene (*FAD2*) from normal type and high oleic safflower (*Carthamus tinctorius* L.). *Plant Mol. Biol. Rep.* 30, 391-402. doi: 10.1007/s11105-011-0349-7
- [20] Cao, S., Zhou, X.R., Wood, C.C., Green, A.G., Singh, S.P., Liu, L., Liu, Q. 2013. A large and functionally diverse family of *FAD2* genes in safflower (*Carthamus tinctorius* L.). *BMC Plant Biology*, 13(5); 1-18.
- [21] Livak, J.K., Schmittgen, D.T. 2001. Analysis of relative gene expression data using Real- Time Quantitative PCR and the 2^{-ΔΔCt} method. *Methods*, 25, 402-408. doi: 10.1006/meth.2001.1262
- [22] Kubista, M., Andrade, J.M., Bengtsson, M., Forootan, A., Jonak, J. 2006. The real-time polymerase chain reaction. *Mol. Aspects Med.*, 2(3); 95-125. doi: 10.1016/j.mam.2005.12.007
- [23] Bolukbasi, E. 2022. Analysis of Genetic and Epigenetic Effects of Sunflower (*Helianthus Annuus* L.) Seedlings in Response to Copper Stress. *Fresenius Environmental Bulletin*, 31(4), 4596-4602.
- [24] Zhang, M., Barg, R., Yin, M., Gueta-Dahan, Y., Leikin-Frenkel, A., Salts, Y., Shabtai, S., Ben-Hayyim, G. 2005. Modulated fatty acid desaturation via overexpression of two distinct ω⁻³ desaturases differentially alters tolerance to various abiotic stresses in transgenic tobacco cells and plants. *Plant J.*, 44, 361-371.
- [25] Tang, G.Q., Novitzky, W.P., Griffin, H.C., Huber, S.C., Dewey, R.E. 2005. Oleate desaturase enzymes of soybean: evidence of regulation through differential stability and phosphorylation. *The Plant Journal*, 44, 433-446. doi: 10.1111/j.1365-313X.2005.02535.x

- [26] Wang, H.S., Yu, C., Tang, X.F., Zhu, Z.J., Ma, N.N. 2014. A tomato endoplasmic reticulum (ER)-type omega-3 fatty acid desaturase (*LeFAD3*) functions in early seedling tolerance to salinity stress. *Plant Cell Rep.*, 33, 131-142. doi: 10.1007/s00299-013-1517-z
- [27] Khodakovskaya, M., McAvoy, R., Peters, J., Wu, H., Li, Y. 2006. Enhanced cold tolerance in transgenic tobacco expressing a chloroplast omega-3 fatty acid desaturase gene under the control of a cold-inducible promoter. *Planta*, 223, 1090-1100. doi: 10.1007/s00425-005-0161-4
- [28] Rodríguez-Vargas, S., Sánchez-García, A., Martínez-Rivas, J.M., Prieto, J.A., Rande-Gil, F. 2007. Fluidization of membrane lipids enhances the tolerance of *Saccharomyces cerevisiae* to freezing and salt. *Applied and Environmental Microbiology*, 73, 110-116. doi: 10.1128/AEM.01360-06
- [29] Zhang, Q.Y., Yu, R., Xie, L.H., Rahman, M.M., Kilaru, A., Niu, L.X., Zhang, Y.L. 2018. Fatty acid and associated gene expression analyses of three tree peony species reveal key genes for α -linolenic acid synthesis in seeds. *Frontiers in plant science*, 9, 106-117. doi: 10.3389/fpls.2018.00106
- [30] Yuan, S., Wu, X., Liu, Z., Luo, H., Huang, R. 2012. Abiotic stresses and phytohormones regulate expression of *FAD2* gene in *Arabidopsis thaliana*. *Journal of Integrative Agriculture*, 11(1); 62-72. doi: 10.1016/S1671-2927(12)60783-4
- [31] Kargiotidou, A., Deli, D., Galanopoulou, D., Tsaftaris, A., Farmaki, T. 2008. Low temperature and light regulate delta 12 fatty acid desaturases (*FAD2*) at a transcriptional level in cotton (*Gossypium hirsutum*). *The Journal of Experimental Botany*, 59, 2043-2056.
- [32] Maeda, H., Sage, T.L., Isaac, G., Welti, R., Dellapenna, D. 2008. Tocopherols modulate extraplastidic polyunsaturated fatty acid metabolism in *Arabidopsis* at low temperature. *The Plant Cell*, 20, 452-70.
- [33] Vrinten, P., Hu, Z., Munchinsky, M.A., Rowland, G., Qiu, X. 2005. Two *FAD3* desaturase genes control the level of linolenic acid in flax seed. *Plant Physiol.*, 139, 79-87.
- [34] Feng, J., Dong, Y., Liu, W., He, Q., Daud, M.K. 2017. Genome wide identification of membrane-bound fatty acid desaturase genes in *Gossypium hirsutum* and their expressions during abiotic stress. *Scientific Reports*, 7, 1-12. doi: 10.1038/srep45711
- [35] Wang, J.W., Ming, F., Pittman, J., Han, Y., Hu, J. 2006. Characterization of a rice (*Oryza sativa* L.) gene encoding a temperature-dependent chloroplast omega-3 fatty acid desaturase. *Biochem. Biophys. Res. Commun.*, 340, 1209-1216. doi: 10.1016/j.bbrc.2005.12.126
- [36] Li, L.Y., Wang, X.L., Gai, J.Y., Yu, D.Y. 2007. Molecular cloning and characterization of a novel *microsomal oleate desaturase* gene from soybean. *J Plant Physiol*, 164, 1516-1526. doi: 10.1016/j.jplph.2006.08.007
- [37] Li, D., Hu, B., Wang, Q., Liu, H., Pan, F. 2015. Identification and evaluation of reference genes for accurate transcription normalization in safflower under different experimental conditions. *PloS One*, 10(10); 1-16. doi: 10.1371/journal.pone.0140218
- [38] Gautam, S., Anjani, K., Srivastava, N. 2016. In vitro evaluation of excess copper affecting seedlings and their biochemical characteristics in *Carthamus tinctorius* L. (variety PBNS-12). *Physiol Mol Biol Plants*, 22(1); 121-129.
- [39] Yang, Q., Fan, C., Guo, Z., Qin, J., Wu, J. 2012. Identification of *FAD2* and *FAD3* genes in *Brassica napus* genome and development of allele-specific markers for high oleic and low linolenic acid contents. *Theor. Appl. Genet*, 125, 715-729. doi: 10.1007/s00122-012-1863-1
- [40] Xue, Y., Yin, N., Chen, B., Liao, F., Win, A.N. 2017. Molecular cloning and expression analysis of two *FAD2* genes from chia (*Salvia hispanica*). *Acta physiologiae plantarum*, 39(4); 82-95. doi: 10.1007/s11738-017-2390-0

Appendices

Appendix A. The mean, standard deviation and standard error values of expression data of normalized *FAD2* genes of different tissue samples of **Balci** variety under copper treatments

Copper (mg L ⁻¹)		Mean			Standard Deviation			Standard Error		
		<i>FAD2-11</i>	<i>FAD2-7</i>	<i>FAD2-6</i>	<i>FAD2-11</i>	<i>FAD2-7</i>	<i>FAD2-6</i>	<i>FAD2-11</i>	<i>FAD2-7</i>	<i>FAD2-6</i>
Leaf	C	1	1	1	-	-	-	-	-	-
	40	9,52709	3,25869	9,78642	1,22671	0,61054	3,12453	0,70824	0,35249	1,80395
	80	7,25209	8,64408	14,34087	1,13818	1,72735	2,08053	0,65713	0,99729	1,20119
	160	14,36040	4,26039	0,26121	2,11419	0,15802	0,05815	1,22063	0,09123	0,03357
	320	18,31624	10,45389	2,46048	4,52803	1,53114	0,37356	2,61426	0,88400	0,21568
	640	15,64965	10,22171	2,39775	5,05895	1,68295	0,42246	2,92079	0,97165	0,24391
Root	C	1	1	1	-	-	-	-	-	-
	40	10,21834	4,23551	17,75621	1,44590	0,24112	1,75852	0,83479	0,13921	1,01528
	80	9,19766	19,27982	16,32068	1,28658	1,33311	0,93925	0,74281	0,76967	0,54228
	160	16,41403	22,97337	3,08384	1,51342	5,65527	0,96597	0,87377	3,26507	0,55771
	320	24,00828	6,27329	3,86109	4,94038	0,92114	0,46993	2,85233	0,53182	0,27131
	640	13,63664	17,65678	18,59443	1,25539	2,12837	1,51181	0,72480	1,22882	0,87285
Cotyledon	C	1	1	1	-	-	-	-	-	-
	40	17,76059	26,60507	68,94573	7,51593	2,07409	1,96295	4,33933	1,19748	1,13331
	80	37,97217	62,40647	2,52341	0,78094	1,53874	0,68661	0,45087	0,88839	0,39641
	160	45,55923	12,12712	2,24263	2,06927	0,87661	0,89004	1,19469	0,50611	0,51386
	320	25,49977	21,60077	9,80563	1,39320	1,37903	5,03193	0,80436	0,79619	2,90519
	640	25,25063	52,05280	1,07139	3,66284	4,82043	0,33793	2,11474	2,78308	0,19511

Appendix B. The mean, standard deviation and standard error values of expression data of normalized *FAD2* genes of different tissue samples of **Bdyas-04** variety under copper treatments.

Copper (mg L ⁻¹)		Mean			Standard Deviation			Standard Error		
		<i>FAD2-11</i>	<i>FAD2-7</i>	<i>FAD2-6</i>	<i>FAD2-11</i>	<i>FAD2-7</i>	<i>FAD2-6</i>	<i>FAD2-11</i>	<i>FAD2-7</i>	<i>FAD2-6</i>
Leaf	C	1	1	1	-	-	-	-	-	-
	40	0,05922	0,01776	3,44860	0,00641	0,00264	0,60798	0,00370	0,00152	0,35102
	80	1,15899	0,34140	4,69802	0,16282	0,08823	1,05221	0,09400	0,05094	0,60749
	160	3,94107	1,98152	0,41915	0,46491	0,25692	0,11314	0,26842	0,14833	0,06532
	320	0,05169	0,03562	0,50805	0,00165	0,00297	0,13908	0,00095	0,00172	0,08030
	640	0,20602	0,90926	0,70442	0,02916	0,02739	0,18699	0,01684	0,01581	0,10796
Root	C	1	1	1	-	-	-	-	-	-
	40	0,26578	0,69412	0,12194	0,03492	0,26990	0,02906	0,02016	0,15583	0,01678
	80	0,06304	0,32170	0,50149	0,01676	0,01936	0,09590	0,00968	0,01118	0,05537
	160	1,06525	0,80694	2,55612	0,51007	0,26483	0,62659	0,29449	0,15290	0,36176
	320	0,32814	1,56911	0,02966	0,22424	0,58741	0,01384	0,12947	0,33914	0,00799
	640	0,55033	1,56057	2,57069	0,07128	0,45185	0,66367	0,04115	0,26088	0,38317
Cotyledon	C	1	1	1	-	-	-	-	-	-
	40	3,27540	3,14683	2,68838	0,79194	0,18088	0,38939	0,45722	0,10443	0,22482
	80	2,15452	4,28460	4,55956	0,77066	1,22941	0,79458	0,44494	0,70980	0,45875
	160	4,88732	2,79960	6,11191	0,58131	0,20280	0,21916	0,33562	0,11709	0,12653
	320	5,53135	1,96931	3,77943	0,43000	0,18402	0,74524	0,24826	0,10624	0,43026
	640	1,83898	0,76723	1,13290	0,44195	0,04145	0,52609	0,25516	0,02393	0,30374

Appendix C. The mean, standard deviation and standard error values of expression data of normalized *FAD2* genes of different tissue samples of **Linas** variety under copper treatments.

Copper (mg L ⁻¹)		Mean			Standard Deviation			Standard Error		
		<i>FAD2-11</i>	<i>FAD2-7</i>	<i>FAD2-6</i>	<i>FAD2-11</i>	<i>FAD2-7</i>	<i>FAD2-6</i>	<i>FAD2-11</i>	<i>FAD2-7</i>	<i>FAD2-6</i>
Leaf	C	1	1	1	-	-	-	-	-	-
	40	0,71418	0,92850	0,85593	0,01962	0,11416	0,09517	0,01133	0,06591	0,05495
	80	1,21438	2,27720	1,97064	0,07615	0,19837	0,69643	0,04397	0,11453	0,40208
	160	7,18868	7,68719	5,49709	0,33927	0,12300	0,79313	0,19588	0,07101	0,45791
	320	5,97464	11,04703	2,44064	0,81481	2,66538	0,45699	0,47043	1,53886	0,26384
	640	8,39685	9,71704	7,75369	0,41647	1,43460	1,23540	0,24045	0,82827	0,71326
Root	C	1	1	1	-	-	-	-	-	-
	40	0,96684	15,99135	15,31854	0,38203	7,29866	7,75784	0,22057	4,21388	4,47899
	80	1,06279	8,10906	16,47391	0,22857	0,90857	7,72605	0,13196	0,52456	4,46064
	160	6,80145	34,98766	26,90692	2,47309	11,65494	3,49816	1,42784	6,72898	2,01966
	320	3,35926	13,84117	21,29567	0,31249	5,81812	4,10248	0,18041	3,35909	2,36857
	640	21,72537	24,98494	9,65203	4,88303	11,92643	2,81343	2,81922	6,88573	1,62434
Cotyledon	C	1	1	1	-	-	-	-	-	-
	40	47,31467	22,55803	17,67609	28,05617	4,29628	1,22927	16,19824	2,48046	0,70972
	80	14,46213	29,21194	29,95519	2,03249	2,23540	6,75816	1,17346	1,29061	3,90183
	160	16,57346	23,90170	37,78259	4,79114	2,31777	9,95296	2,76617	1,33816	5,74635
	320	4,38973	15,61766	27,47067	2,36646	3,45049	4,94963	1,36628	1,99214	2,85767
	640	58,49239	23,45923	30,16695	21,16872	4,62733	7,48355	12,22177	2,67159	4,32063

Appendix D. The mean, standard deviation and standard error values of expression data of normalized *FAD2* genes of different tissue samples of **Asol** variety under copper treatments.

Copper (mg L ⁻¹)		Mean			Standard Deviation			Standard Error		
		<i>FAD2-11</i>	<i>FAD2-7</i>	<i>FAD2-6</i>	<i>FAD2-11</i>	<i>FAD2-7</i>	<i>FAD2-6</i>	<i>FAD2-11</i>	<i>FAD2-7</i>	<i>FAD2-6</i>
Leaf	C	1	1	1	-	-	-	-	-	-
	40	1,38013	1,77597	1,63842	0,18419	0,06263	0,05936	0,10634	0,03616	0,03427
	80	0,79980	1,50553	1,26841	0,07320	0,22608	0,34370	0,04226	0,13053	0,19843
	160	1,45178	1,55396	1,10833	0,07061	0,09066	0,14029	0,04077	0,05234	0,08099
	320	2,70180	5,02902	1,09384	0,55771	1,55321	0,21495	0,32199	0,89675	0,12410
	640	0,94471	1,09166	0,86755	0,03336	0,14549	0,08108	0,01926	0,08400	0,04681
Root	C	1	1	1	-	-	-	-	-	-
	40	10,21834	4,23551	17,75621	1,44590	0,24112	1,75852	0,83479	0,13921	1,01528
	80	9,19766	19,27982	16,32068	1,28658	1,33311	0,93925	0,74281	0,76967	0,54228
	160	16,41403	22,97337	3,08384	1,51342	5,65527	0,96597	0,87377	3,26507	0,55771
	320	24,00828	6,27329	3,86109	4,94038	0,92114	0,46993	2,85233	0,53182	0,27131
	640	13,63664	17,65678	18,59443	1,25539	2,12837	1,51181	0,72480	1,22882	0,87285
Cotyledon	C	1	1	1	-	-	-	-	-	-
	40	17,76059	26,60507	68,94573	7,51593	2,07409	1,96295	4,33933	1,19748	1,13331
	80	37,97217	62,40647	2,52341	0,78094	1,53874	0,68661	0,45087	0,88839	0,39641
	160	45,55923	12,12712	2,24263	2,06927	0,87661	0,89004	1,19469	0,50611	0,51386
	320	25,49977	21,60077	9,80563	1,39320	1,37903	5,03193	0,80436	0,79619	2,90519
	640	25,25063	52,05280	1,07139	3,66284	4,82043	0,33793	2,11474	2,78308	0,19511

TRAIL bağı altın nanoparçacıkların glioblastoma TRAIL direncindeki etkisinin incelenmesi

Ilknur Sur Erdem ^{1,2}

¹ Koç Üniversitesi Translasyonel Tıp Uygulama ve Araştırma Merkezi, Koç Üniversitesi, İstanbul, Türkiye
² Nuffield Kadın ve Üreme Sağlığı Departmanı, Tıp Bilimleri Bölümü, Oxford Üniversitesi, Oxford, Birleşik Krallık, İngiltere

(Alınış / Received: 06.06.2022, Kabul / Accepted: 20.08.2022, Online Yayınlanma / Published Online: 23.08.2022)

Anahtar Kelimeler

Glioblastoma
TRAIL,
İlaç direnci,
Altın nanoparçacık,
Hücre canlılığı

Öz: Glioblastomalar, cerrahi tedavideki gelişmelere rağmen, sonrasında uygulanan kemoterapiye ve radyoterapiye direnç gösterdikleri için alternatif tedavi yaklaşımlarına büyük ihtiyaç duyulmaktadır. Glioblastomalarda hayatta kalma ve apoptoz mekanizması aynı madalyonun iki farklı yüzü olarak görüldüğünde, mevcut tedavi stratejilerinin doğru tümör hücre popülasyonlarını hedef alıp almadığı sorusu gündeme gelmektedir. TRAIL, sadece tümör hücrelerinde apoptozu indükleyen en iyi ajanlardan biridir ancak tümör hücreleri TRAIL'e farklı duyarlılık göstermektedir. Bu çalışmada, TRAIL, altın nanoparçacıklar yüzeyinde aktive edilip, TRAIL'e duyarlı ve dirençli glioblastoma hücrelerde canlılığı, ve kaspaz aktivitesini nasıl etkilediği araştırılmıştır. Bu çalışmanın sonuçları, gelecekte glioblastoma için etkili tedavilerin tasarımında faydalı olacaktır.

Investigation of TRAIL conjugated gold nanoparticles` s effect on glioblastoma TRAIL resistance

Keywords

Glioblastoma,
TRAIL,
Drug resistance,
Gold nanoparticles,
Cell Viability

Abstract: Despite advances in surgical treatment, glioblastomas are resistant to chemotherapy and radiotherapy, so there is a great need for alternative treatment approaches. When the mechanism of survival and apoptosis in glioblastomas is seen as two different sides of the same coin, the question arises whether current treatment strategies target the right tumor cell populations. TRAIL is one of the best agents to induce apoptosis in only tumor cells, but tumor cells show different sensitivity to TRAIL. In this study, it was investigated how TRAIL was activated on the surface of gold nanoparticles and affected the viability and caspase activity of TRAIL sensitive and resistant glioblastoma cells. The findings from this study will be useful in the design of effective glioblastoma therapies in the future.

*İlgili Yazar, email: ilknursur@gmail.com

1. Giriş

Glioblastoma, yetişkinlerin merkezi sinir sisteminde en sık görülen ve en kötü olan tümörlerden birisidir. Glioblastoma tedavisinde, cerrahi operasyon sonrası temozolomid ve radyasyon uygulaması kombine standart yöntem uygulanmakta, ancak bu uzun vadeli tümör kontrolünde başarısızlıkla sonuçlanmaktadır [1,2]. Uygulanan radyoterapi, kemoterapi ve cerrahi yöntemler sonrasında glioblastoma hücrelerinin yeniden beyinde yayılması veya bu yöntemlere direnç göstermesinden dolayı, tedavide kesin başarıya ulaşılamamıştır [3,4]. Bu nedenle, glioblastoma tümör gruplarında paradoks halini alan tedavi direncini ortadan kaldırılabilecek alternatif tedavi stratejileri geliştirmek çok önemlidir.

Tumor Nekroz Faktör (TNF) ile ilişkili apoptoz indükleyici ligand (TRAIL, Apo2L), 281 aminoasitten oluşan TNF gen ailesinin üyesidir ve sadece kanserli hücrelerde apoptoza sebep olduğu için gelecek vaat eden bir kanser terapi ajanıdır [5,6]. TRAIL'in anti-tümör aktivitesi, insan kanser hücresi aşılanmış hayvan modellerinde bildirilmiştir

[7-9]. TRAIL, dört plazma zarı reseptörlerine ve bir çözünebilir reseptöre, yani sırasıyla TRAIL-R1 (DR4), TRAIL-R2 (DR5), TRAIL-R3 (DcR1), TRAIL-R4 (DcR2) ve osteoprotegerine bağlanabilir [10]. DR4 ve DR5, TRAIL'e bağlandıktan sonra ölüm indükleyici sinyal kompleksini (DISC) oluşturur. DISC'te bulunan adaptör protein FADD, DR ve Procaspase 8 bağlanarak kendi kendine kaspaz aktivasyonunu gerçekleştirir. DISC tarafından aktive edilmiş kaspaz 8, iki şekilde apoptotik ölüm mekanizmasını yürütmektedir. Tip I hücrelerde, DISC yeterli miktarda kaspaz 8'i harekete geçirir ve bu aşağı yollardaki diğer kaspazları da aktive eder. Tip II hücrelerinde, DISC küçük miktarlarda kaspaz 8 aktive eder ve mitokondriyal apoptotik mekanizması aracılığıyla apoptotik sinyalin amplifikasyonunu gerektirir. Bu mitokondriyal amplifikasyon döngüsü aktivasyonu, Bcl-2 ailesinin proapoptotik üyesi olan Bid'in kesilmesiyle meydana gelir [11]. Kesilmiş Bid, Bax ve Bak'a bağlanır ve mitokondriden sitokrom-c gibi apoptogenik faktörlerin salgılanmasına neden olur.

TRAIL, protein ve peptid ilaçlarında olduğu gibi, in vivo olarak hızla deaktive edilir, düşük stabilite ve çözünürlüğe sahiptir ve hızlı bir şekilde böbrek yolu ile atılır; bu özellikler TRAIL'in klinik uygulamadaki zorluklarını temsil etmektedir [12]. TRAIL'in tek başına yeterli olmadığı kanser tiplerinde, istenilen kanserli hücre ölümüne ulaşılması için birleşimsel yaklaşımlar geliştirilmektedir. Rekombinant TRAIL, sadece kanser hücre hatlarında apoptozu indükleyip, normal dokuları etkilemeden güçlü anti-tümör aktivitesi sergilediği için kanser tedavisi için ümit vaadeden yaklaşımlardan birisidir [13]. TRAIL'in tümörlere taşınması ve etkisi için kullanılacak en iyi ajanlardan birisi, nanoparçacıklar olabilir [14]. Nanoparçacıklar, kanser tedavisinde tümörü hedefleme, birçok hücre içine alınma özelliği, beyin kan bariyeri ve çoklu ilaç direncinden kaçış gibi yeteneklerinden dolayı birçok yarar sağlamaktadır [15-19]. Nanoparçacıkların hedefli verilmesi, onların tümörlü bölgede birikimine neden olup, sistemik toksisiteyi azaltarak tedavinin etkisini arttırmaktadır. Önceki çalışmada, TRAIL bağı demir oksit nanoparçacık sentezlenmiş, ve sentezlenen bu ligandın, in vitro olarak glioblastoma hücrelerinde apoptozu, in vivo olarak glioma hücrelerini hedeflemedeki yeteneğini önemli derecede arttırdığı görülmüştür [14]. En yaygın kullanılan altın nanoparçacıkların (AuNPs) ilaç salınımında, kanser hücrelerini teşhisi ve öldürme yöntemlerinden biri olan fototermal terapi gibi uygulamalarda kullanımının güvenli olduğu görülmüştür [20-26]. Buna rağmen, AuNPs bağı TRAIL'lerin glioblastoma TRAIL duyarlı ve dirençli hücreleri üzerindeki etkileri henüz araştırılmamıştır.

Bu çalışmada, glioblastoma gibi kötü huylu bir kanser türünün, TRAIL gibi klinik uygulamalar için önemli bir yer teşkil eden bir faktöre duyarlılığının nanoparçacık teknolojileri kullanarak moleküler düzeyde araştırılması amaçlanmıştır. Çalışmadan çıkan sonuçlarla, tedavi duyarlılığın iyileştirecek yöntemler belirlendiğinde, yeni ilaç tasarımları ve yeni ajan geliştirmek daha kolay olacaktır.

2. Materyal ve Metot

Altın (III) klorit trihidrat (Sigma Aldrich, ABD), sodyum sitrat dihidrat (Sigma Aldrich, ABD), Dulbecco's modified Eagle's Medium (DMEM, Gibco, USA), Fetal sıgır serumu (FBS, Gibco, USA) penisilin/streptomisin (Gibco, USA), kullanılmıştır.

2.1. TRAIL üretimi

his-TRAIL içeren pQE vektörü bakterilere transform edildikten sonra, bakteriler 100 ug/ml ampicilin içeren sıvı Luria-Bertani (LB) besiyerine konuldu. Gece boyunca 37°C'de sallanarak 250 ml besiyerinde büyütüldü. Ertesi gün çoğalan bakterilerden, her 250 ml LB (ampicilin) içerisine 10 ml olacak şekilde bakteri konulduktan sonra 37°C'de sallanmaya bırakıldı. Çoğalan bakterinin 600 nm dalga boyunda OD değeri 0.6 olunca, 0.1 mM olacak şekilde IPTG eklendi.

25°C'de gece boyunca inkübasyona bırakıldıktan sonra, santrifüj tüplerine aktarılan bakteriler 7000 rpm'de 4°C'de 10 dakika boyunca santrifüj edilip bakterilerin çökmesi sağlandıktan sonra 10 ml lysis solüsyonunda çözüldü. Buz içinde 1 saat tutulduktan sonra, buz içindeyken 2 dakika sonike edildi. Daha sonra 30 dakika 12000 rpm'de santrifüjlendi. Proteinin saflaştırılmasında, santrifüj sonucu oluşan supernatant Ni-NTA resinine inkübe edildi. Sonrasında kolon birkaç defa yıkandıktan sonra kolona HisTag aracılığıyla bağlı olan protein kolondan saf olarak elde edildi. Elüsyon çözeltisinin içinde bulunan his-TRAIL, gece boyu PBS içerisinde diyalize bırakıldı, etkili bir diyaliz için PBS en az 3 kez değiştirildi.

2.2. AuNP sentezi ve Nanoparçacıkların TRAIL ile etkileşimi

AuNPs'ler sodyum sitratın $\text{HAuCl}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ ile indirgenmesi yoluyla hazırlanır [27]. 50 nm AuNPs sentezi için, 0.05 gr HAuCl_4 500 ml içinde çözüldü. Kaynayınca kadar ısıtılan bu çözeltiye, 4 ml 38.8 mM sodyum sitrat çözeltisi hızlıca eklendikten sonra, 15 dakika daha kaynatıldı.

Sentezlenen 50 nm AuNPs ve saflaştırılan değişik konsantrasyondaki (25 ng/ml ve 50 ng/ml) his-TRAIL proteinini gece boyunca 4°C'de inkübe edilip, etkili bağlanmanın gerçekleştiği konsantrasyon aralığı tespit edildi.

2.3. Hücre kültürü

Çalışmalarda kullanılacak glioblastoma hücre hattı (T98G) American Type Culture Collection (ATCC)'dan satın alınmıştır. Dr. Tuğba Bağcı-Önder'in laboratuvarında bu hücre dizisinden TRAIL'e değişik duyarlılıklarda yeni hücre alt popülasyonları (T98G-TRAIL Dirençli ve T98G-TRAIL Duyarlı hücreler) üretilmiştir [28]. Tüm hücreler, DMEM (Gibco, USA), % 10 FBS (Gibco, USA), % 1 L-glutamine (Gibco, USA), ve % 1 penicillin-streptomycin (Gibco, USA) içeren besiyerlerinde ve 37°C ve 5% CO₂ olan inkubatorde büyütülmüştür.

2.4. Canlılık Analizi

T98G TRAIL Dirençli ve T98G TRAIL Duyarlı hücrelerde yapılan hücre canlılık testi, canlı hücrelerdeki ATP miktarının lüminesans olarak ölçülmesine dayanan Cell TiterGlo (Promega) (CTG) kiti ile yapıldı. Bunun için 96-kuyucuklu tabaklara 10.000 hücre/kuyucuk olacak şekilde hücreler ekildi. İkinci günde kontrol değişik kontrasyonlarda AuNPs, TRAIL ve TRAIL bağı AuNPs olacak şekilde TRAIL uygulandı. 24 saatin sonunda kitin protokolüne uygun olarak CTG uygulandı ve plate okuyucuda sonuçlar görüntülendi.

2.5. Kaspaz 3/7 aktivitesi

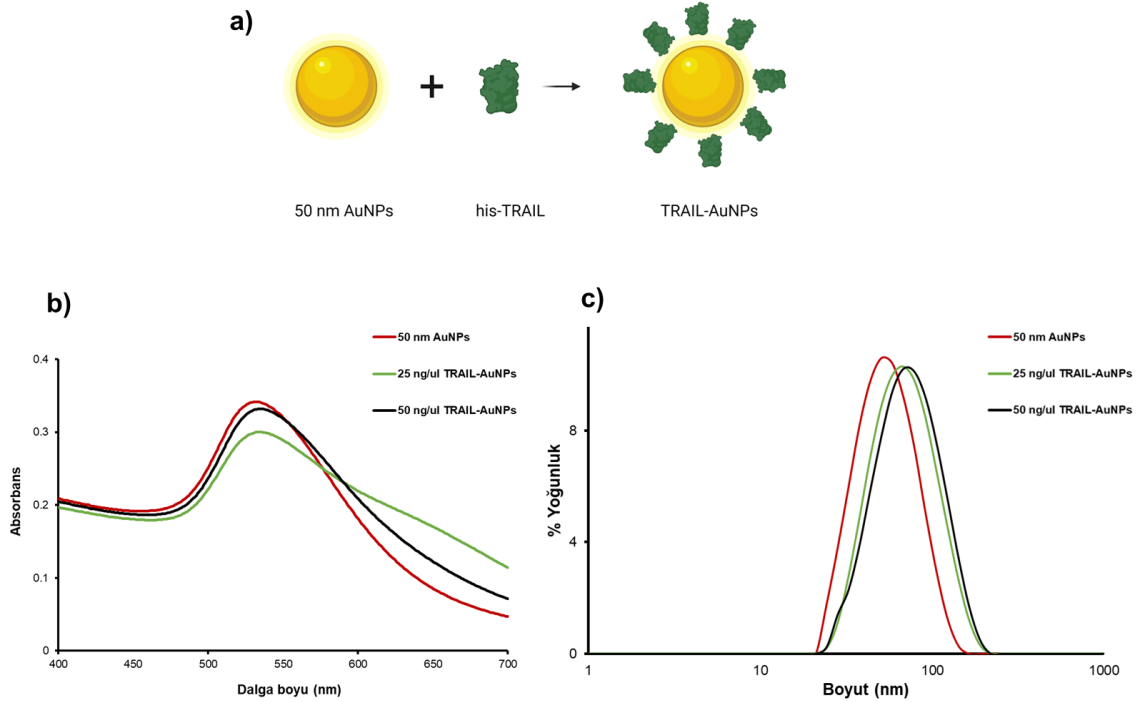
Kaspaz 3/7 aktivitesi testi için Caspase-GLO 3/7 (Promega) kiti kullanıldı. Tetrapeptit sekansına sahip bir prolüminesans kaspaz 3/7 substratı olan DEVD, aktif kaspaz 3/7 tarafından kesildiğinde lusiferaz enzimi substratı olan aminoluciferin açığa çıkmaktadır. Kit bunun lüminesans olarak ölçülmesine dayanır. Kaspaz 3/7 aktivitesi testi için 96-kuyucuklu tabaklara 10.000 hücre/kuyucuk olacak şekilde hücreler ekildi. İkinci günde kontrol (0 ng TRAIL/ml), ve değişik kontrasyonda diğer ligandlar ile muamele edildi. 3 saatin sonunda kitin protokolüne uygun olarak Caspase-GLO 3/7 solüsyonu uygulandı ve plate okuyucuda sonuçlar görüntülendi.

2.6. Veri analizi

İstatistiksel analiz Student's t testi kullanılarak yapıldı ve veriler, grup başına üç numuneden elde edilen ortalama \pm SD'dir. $p < 0,05$ (*), $< 0,001$ (**), $< 0,0001$ (***) değerleri anlamlı kabul edildi.

3. Bulgular

Saflaştırılan his-TRAIL proteini Coomassie, Ponceau boyaması ile önceki çalışmamızda gösterilmiştir [29]. Penta His antikoru ile yapılan western blotlama sonucunda da beklenen boyutta his-TRAIL (23 kDa) proteinin başarılı bir şekilde saflaştırıldığı tespit edilmiştir [29].

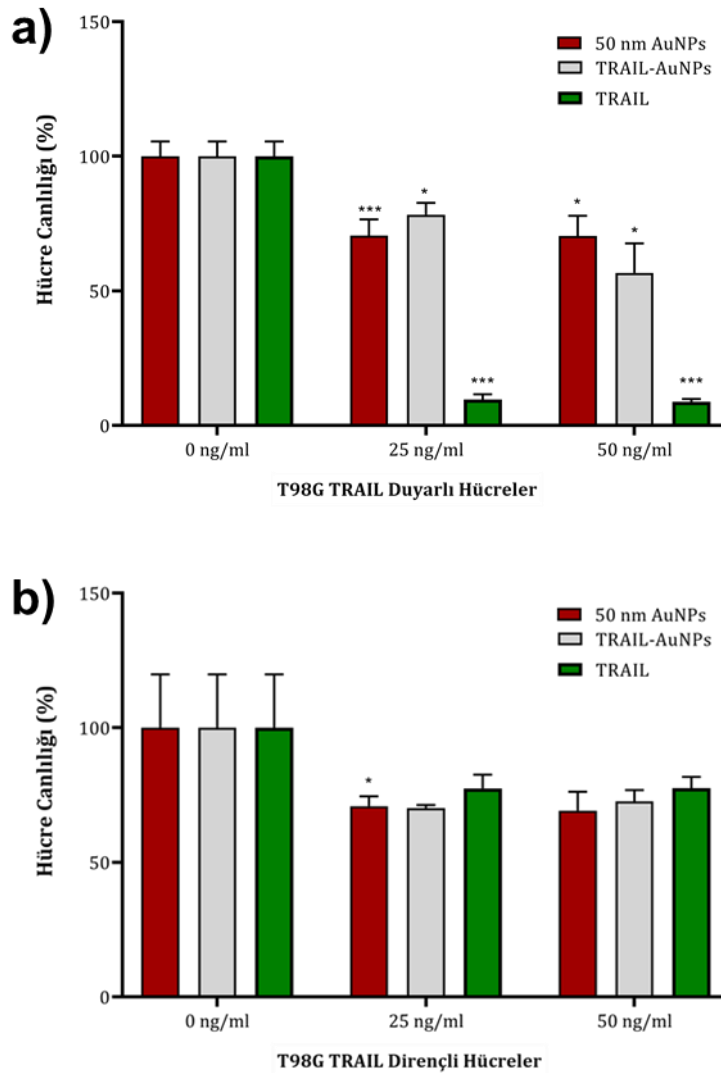


Şekil 1. TRAIL-AuNPs'lerin karakterizasyonu. (a) Şematik gösterimi (b) UV/Vis spektrumu ve hidrodinamik boyutun artması, (c) DLS boyut dağılım grafiği

Sentezlenen AuNPsler, UV-Vis Spektrofotometre ve DLS ile karakterize edilmiştir (**Şekil 1a, 1b, 1c**). 50 nm AuNPs 532 nm dalgaboyunda tek bir UV absorbans tepe değerine sahiptir (**Şekil 1b**). TRAIL, AuNPs üzerinde zayıf bağlı sitrat iyonlarının değiştirilmesi veya AuNPs'in yüzeyinde pozitif yüklü his-TRAIL ve negatif yüklü sitrat iyonlarının iyonik etkileşimleri yoluyla TRAIL'in amino ve karboksilik asit fonksiyonel gruplarının spesifik olmayan etkileşimi yoluyla AuNPs yüzeyinde konjuge edildi.

50 nm AuNPs TRAIL ile birlikte absorbans değeri değiştiği görülmüştür. 50 nm AuNPs'in doğru büyüklük aralığında olduğu DLS ile gösterilmiştir (**Şekil 1c**). Sentezlenen ligandlara DLS ile büyüklüklerine bakıldığında, 50 nm AuNPs'nin his-TRAIL ile bağlanmasıyla birlikte, hidrodinamik boyutun artması ile TRAIL bağı nanoparçacıkların 50 nm'den daha büyük olduğu görülmüştür (**Şekil 1c**).

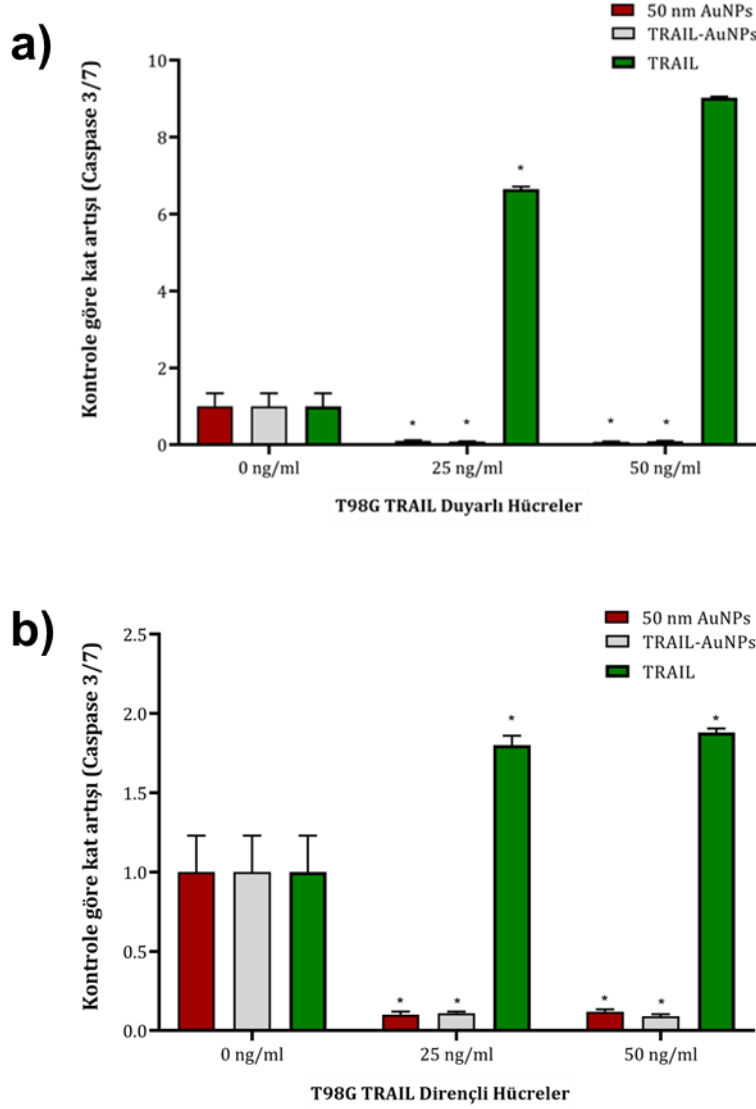
50 nm AuNPs, TRAIL-AuNPs, ve TRAIL için yapılan hücre canlılık deneyi sonuçlarına göre TRAIL dirençli hücrelerde canlılık 25 ve 50 ng/ml TRAIL-AuNPs ile %75'in altına düşerken sadece TRAIL verilen dirençli hücrelerde %75'in üzerinde canlılık görüldü. TRAIL duyarlı hücrelerde ise, sadece TRAIL ile muamele sonucu hücre canlılığının %10'un altında olduğu tespit edildi (**Şekil 2**).



Şekil 2. T98G TRAIL duyarlı (A) ve dirençli (B) hücrelerde 24 saat 50 nm AuNPs, TRAIL-AuNPs, ve TRAIL maruz kalması sonucu doza (0 ng/ml, 25 ng/ml ve 50 ng/ml) bağlı hücre canlılık (%) analizi. Herhangi bir uygulama yapılmayan (0 ng/ml) hücreler kontrol olarak kullanıldı ve her grubun (0 ng/ml) hücreleri ile karşılaştırmalar yapılmıştır. Veriler, her grubun 0 ng/ml kontrolüne göre normalleştirildi (*p<0.05, **p<0.001, ***p<0.0001).

T98G hücrelerinden seçilen TRAIL dirençli alt-popülasyonlara AuNPs, TRAIL, TRAIL-AuNPs uygulanmasının ardından kaspaz 3/7 aktivitesindeki artış özellikle 25 ng/ml ve 50 ng/ml'de 2 kate yakinen 50 nm AuNPs ve

TRAIL-AuNPs verilen gruplarda 1 katın altında olarak bulundu (Şekil 3). Genel olarak da AuNPs'nin yalnızca çok yüksek konsantrasyonlarda hücreleri apoptoza götürdüğü gösterilmiştir [30,31]. Başka bir grup tarafından yapılan araştırmada ise altın nanoparçacıkla yapılan modifikasyonlar sonrası hücrelerin apoptoza geç girdiği gösterilmiştir [32]. Bu çalışmada görülen altın nanoparçacık konsantrasyonunun hücrelerdeki kaspaz 3/7 aktivitesini geciktirmiş olması gerek AuNPs konsantrasyon düşüklüğünden gerekse apoptoza girme süresinin geç olmasından kaynaklanmış olabilir.



Şekil 3. T98G TRAIL duyarlı (A) ve dirençli (B) hücrelerde 24 saat 50 nm AuNPs, TRAIL-AuNPs, ve TRAIL maruz kalması sonucu doza (0 ng/ml, 25 ng/ml ve 50 ng/ml) bağlı kaspaz 3/7 aktivite analizi. Herhangi bir uygulama yapılmayan (0 ng/ml) hücreler kontrol olarak kullanıldı. Veriler, 0 ng/ml kontrole göre normalleştirildi (*p<0.05).

T98G TRAIL duyarlı hücrelerde de en fazla kat artışı 50 ng/ml TRAIL'de görülmüştür (Şekil 3). 50 nm AuNPs, ve TRAIL-AuNPs'nin kaspaz 3/7 aktivitesine önemli bir etkisi olmamıştır.

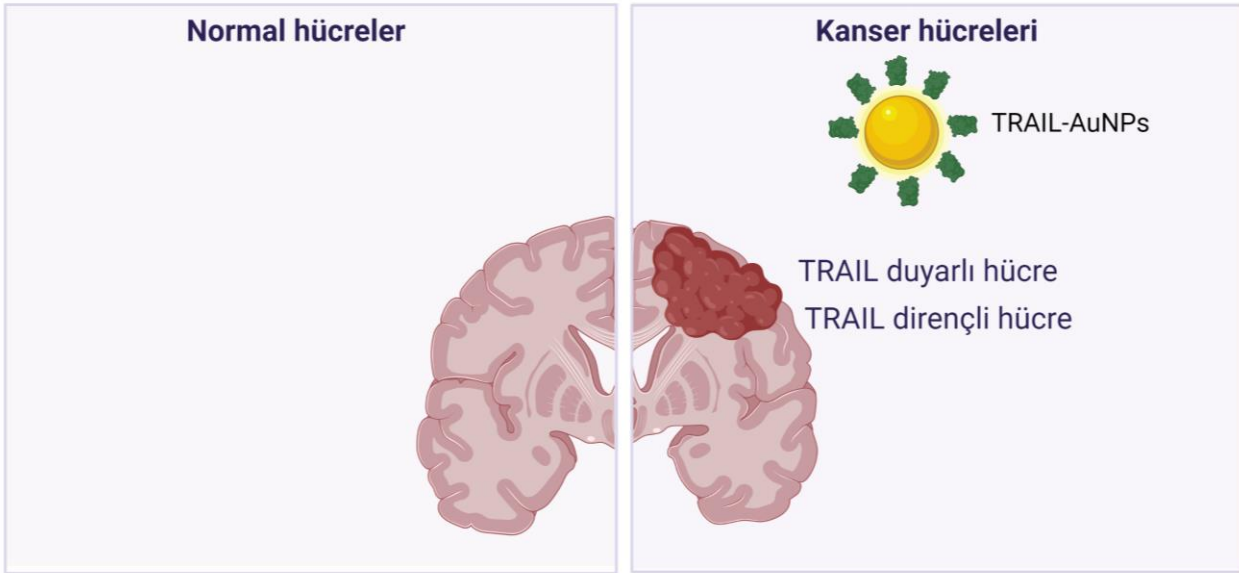
4. Tartışma ve Sonuç

Glioblastoma, beyin tümörleri arasında en sık görülen ve en agresif primer beyin tümörüdür. Farklı moleküler, genetik değişimlerin ve epigenetik profillerin değişik tip gliomalarla ilişkili olduğu gösterilmiştir. Cerrahi işlemi takiben kombine TMZ ve radyasyon uygulaması, glioblastoma hastalarında standart olarak uygulanan tedavi şeklidir. Son yıllarda glioblastoma hücrelerinde TRAIL direncini duyarlı hale getirmek için büyük çaba sarf edilmiştir. Ancak, hücrelerde ortaya çıkan TRAIL direncinden dolayı, klinikte uygulanması için çok sayıda soru cevapsız kalmaktadır. Dolayısıyla TRAIL dirençli hücrelerin, direnç göstermesine sebep olan mekanizmaları tespit

edip, bu dirençli hücreleri duyarlı hale getirebilecek alternatif yolları araştırmak önem teşkil etmektedir. Bu çalışmada, TRAIL-AuNPs konjugasyonunun hücre canlılığı, kaspaz aktivitesi üzerine etkisi ve TRAIL direncindeki önemi araştırılmıştır.

Nanoparçacıklar, kan beyin bariyerini geçtikleri için gerek kanser tedavisi gerekse kanser teşhisi için önemlidirler. Son zamanlarda, nanopartikülün boyutu ve şeklinin, in vitro hücresel alımla ilgili olarak önemli olduğu bildirilmiştir. Yapılan çalışmada, küresel şekilli nanopartiküller, çubuk şekilli partiküllere göre artan bir alıma sahip olduğu gözlenmiştir [33]. Yazarlar ayrıca, 50 nm küresel altın nanoparçacıklarının (AuNPs), çalışılan tüm nanoparçacıkların en iyi hücre içine alınma özelliğine sahip olduğunu keşfettiler. Bu özelliğinden dolayı bu çalışmada 50 nm AuNPs kullanılmıştır. Dikkat çekici bir şekilde, AuNPs tıpta tarih boyunca kullanılmış ve günümüz teknolojisinde de kullanılmaya devam etmektedir [34]. Son zamanlarda, AuNPs hedeflenen ligandlarla ve radyoterapinin in vitro ve in vivo etkinliğini artırma yeteneğinden dolayı kanserde potansiyel bir araç olarak çok dikkat çekti [35-40]. Teşhis olarak, altının yüksek atom numarası ve manyetik rezonans görüntüleme (MRI), aktif ajanlarla konjugasyon yeteneği tümör dokusunun hassas ve spesifik görüntülenmesini sağlamıştır [41-44]. Tedavi açısından, AuNPs ve radyoterapi birlikte kullanıp, tümör dokusunda kalıcı olan AuNPs bağlı radyosensitizörler ile kanser hücrelerini radyoterapiye duyarlı hale getirebilir. Çeşitli çalışmalar, AuNPs modifikasyonlarının hem hücresel hem de hayvan çalışmalarında radyo-duyarlılaştırıcı etkilerini daha önce göstermiştir [45-50].

TRAIL ile TRAIL-AuNPs`nin kanser hücrelerine hedefli taşınması



AuNPs yüzeylerinin kanser membran reseptörlerini tanıyan TRAIL ile kaplanması

Nanoparçacıkların tümörlü bölgeye hedefli olarak taşınması

Bu bölgede radyoterapi ve fototermaal terapi gibi alternatif tedavilerin etkisini artırmak

Şekil 4. Çalışmanın özeti (Şekil Biorender kullanılarak hazırlanmıştır)

Bu çalışmada, sitrat kaplı AuNPs yüzeyine konjuge edilen his-TRAIL proteini, TRAIL dirençli hücrelerin duyarlılığını artırmak etkin bir şekilde aktive etmek için kullanılmıştır (**Şekil 4**). Bulgularımız, TRAIL konjuge altın nanoparçacıkları kullanan çalışma ile tutarlı olup, modifiye edilmemiş TRAIL'e kıyasla TRAIL-AuNPs ile inkübe edilen TRAIL dirençli hücrelerde daha fazla ölüm kaydedilmiştir [51]. Bu sonuçların, aynı zamanda akciğer kanserinde AuNP'ler ve TRAIL'in birlikte tedavisi üzerine hücre canlılığında bir azalmayı gösteren önceki bulgularla da uyumlu olduğu görülmüştür [52]. Ancak gözlenen TRAIL-AuNPs muamelesi ile TRAIL dirençli hücre canlılığındaki azalma daha çok yapılan TRAIL bağı gümüş nanoparçacıklarında (TRAIL-AgNPs) görüldüğü kadar çok büyük fark olmadığı için TRAIL-AuNPs konjugasyonun fototermaal terapi veya radyoterapi etkinliğini artırmak için kullanılabilir [29].

Sonuç olarak AuNPs yüzeylerinin kanser membran reseptörlerini tanıyan TRAIL ile kaplanması, nanoparçacıkların tümörlü bölgeye hedefli olarak taşınmasını sağlayıp, bu bölgede kullanılacak radyoterapi ve fototermaal terapi gibi alternatif tedavilerin etkisini artırmaya yardımcı olabilir. Glioblastoma tedavisinde, TRAIL direncinin üstesinden gelmek için TRAIL-AuNP'leri kullanmak yeni kombinasyon tedavilerinin önünü açabilecektir.

Teşekkür

Bu çalışmayı yapmamda destek olan Prof.Dr.Mustafa Çulha, Prof.Dr.İhsan Solaroğlu, ve Prof.Dr. Tuğba Bağcı Önder, ve Ahmet Cingöz'e teşekkürü bir borç bilirim. Bu çalışma TÜBİTAK (Proje No: 116C011) tarafından desteklenmiştir.

Kaynakça

- [1] Furnari, F.B., Fenton, T., Bachoo, R.M., Mukasa, A., Stommel, J.M., Stegh, A., Hahn, W.C., Ligon K.L., Louis D.N., Brennan C., Chin L., DePinho R.A., Cavenee, W.K. 2007. Malignant astrocytic glioma: genetics, biology, and paths to treatment. *Genes Dev*, 21:2683–2710.
- [2] Parsons, D.W., Jones, S.N., Zhang, X., Lin, J.C., Leary, R.J., Angenendt, P., Mankoo, P., Carter, H., Siu, I.M., Gallia, G.L., Olivi, A., McLendon, R., Rasheed, B.A., Keir, S., Nikolskaya, T., Nikolsky, Y., Busam, D.A., Tekleab, H., Diaz, L.A., Hartigan, J., Smith, D.R., Strausberg, R.L., Marie, S.K., Shinjo, S.M., Yan, H., Riggins, G.J., Bigner, D.D., Karchin, R., Papadopoulos, N., Parmigiani, G., Vogelstein, B., Velculescu, V.E., Kinzler, K.W. 2008. An integrated genomic analysis of human glioblastoma multiforme. *Science*, 321:1807–1812.
- [3] Stupp, R., Hegi, M.E., Mason, W.P., van den Bent, M.J., Taphoorn, M.J., Janzer R.C., Ludwin, S.K., Allgeier, A., Fisher, B., Belanger, K., Hau, P., Brandes, A.A., Gijtenbeek, J., Marosi, C., Vecht, C.J., Mokhtari, K., Wesseling, P., Villa, S., Eisenhauer, E., Gorlia, T., Weller, M., Lacombe, D., Cairncross, J.G., Mirimanoff, R.O. 2009. Effects of radiotherapy with concomitant and adjuvant temozolomide versus radiotherapy alone on survival in glioblastoma in a randomised phase III study: 5-year analysis of the EORTCNCIC trial. *Lancet Oncol*, 10:459–466.
- [4] Vredenburgh, J.J., Desjardins, A., Reardon, D.A., Peters, K.B., Herndon, J.E. 2nd., Marcello J, Kirkpatrick, J. P., Sampson, J.H., Bailey, L., Threatt, S., Friedman, A.H., Bigner, D.D., Friedman, H.S. 2011. The addition of bevacizumab to standard radiation therapy and temozolomide followed by bevacizumab, temozolomide, and irinotecan for newly diagnosed glioblastoma. *Clin Cancer Res*, 17:4119–4124.
- [5] LeBlanc HN, and Ashkenazi A. 2003. Apo2L/TRAIL and its death and decoy receptors. *Cell Death Differ*, 10:66–75.
- [6] Me´rino, D., Lalaoui, N., Morizot, A., Solary, E., Micheau, O. 2007. TRAIL in cancer therapy: present and future challenges. *Expert Opin. Ther. Targets*, 11:1299–1314.
- [7] Roth, W., Isenmann, S., Naumann, U., Kugler, S., Bahr, M., Dichgans, J., Ashkenazi, A., Weller, M. 1999. Locoregional Apo2L/TRAIL eradicates intracranial human malignant glioma xenografts in athymic mice in the absence of neurotoxicity. *Biochem Biophys Res Commun*, 265:479–483.
- [8] Kelley, S.K., Harris, L.A., Xie, D., DeForge, L., Totpal, K., Bussiere, J., Fox, J.A. 2001. Preclinical studies to predict the disposition of Apo2L/tumor necrosis factor-related apoptosis-inducing ligand in humans: characterization of in vivo efficacy, pharmacokinetics, and safety. *J Pharmacol Exp Ther*, 299:31–38.
- [9] Saito, R., Bringas, J.R., Panner, A., Tamas, M., Pieper, R.O., Berger, M.S., Bankiewicz, K.S. 2004. Convection-enhanced delivery of tumor necrosis factor-related apoptosis-inducing ligand with systemic administration of temozolomide prolongs survival in an intracranial glioblastoma xenograft model. *Cancer Res*, 64:6858–6862.
- [10] Kelley, S.K., Ashkenazi, A. 2004. Targeting death receptors in cancer with Apo2L/TRAIL. *Curr. Opin. Pharmacol.*, 4:333–339.
- [11] Luo, X., Budihardjo, I., Zou, H., Slaughter, C., Wang, X. 1998. Bid, a Bcl2 interacting protein, mediates cytochrome c release from mitochondria in response to activation of cell surface death receptors. *Cell*, 94:481–490.
- [12] Nitsch, R., Bechmann, I., Deisz, R.A., Haas, D., Lehmann, T.N., Wendling, U, Zipp, F. 2000. Human brain-cell death induced by tumour-necrosis-factor-related apoptosis-inducing ligand (TRAIL). *Lancet*, 356:827–828.

- [13] Chinnaiyan, A.M., Prasad, U., Shankar, S., Hamstra, D.A., Shanaiah, M., Chenevert, T.L. 2000. Combined effect of tumor necrosis factor-related apoptosis-inducing ligand and ionizing radiation in breast cancer therapy. *Proc Natl Acad Sci USA*, 97:1754–1759.
- [14] Perlstein, B., Finniss, S.A., Miller, C., Okhrimenko, H., Kazimirsky, G., Cazacu, S., Lee, H.K., Lemke, N., Brodie, S., Umansky, F., Rempel, S.A., Rosenblum, M., Mikklesen, T., Margel, S., Brodie, C. 2013. TRAIL conjugated to nanoparticles exhibits increased anti-tumor activities in glioma cells and glioma stem cells in vitro and in vivo. *Neuro Oncol.*, 15:29-40.
- [15] Sur, I., Cam, D., Kahraman, M., Baysal, A., Culha, M. 2010. Interaction of multi-functional silver nanoparticles with living cells. *Nanotechnology*, 21:175104.
- [16] Sur, I., Altunbek, M., Kahraman, M., Culha, M. 2012. The influence of the surface chemistry of silver nanoparticles on cell death *Nanotechnology*, 23:10.1088/0957-4484/23/37/375102.
- [17] Sanvicens, N., Marco, M.P. 2008. Multifunctional nanoparticles–properties and prospects for their use in human medicine. *Trends Biotechnol*, 26: 425–433.
- [18] Aggarwal, P., Hall, J.B., McLeland, C.B., Dobrovolskaia, M.A., McNeil, S.E. 2009. Nanoparticle interaction with plasma proteins as it relates to particle biodistribution, biocompatibility and therapeutic efficacy. *Adv. Drug Deliv. Rev.*, 61:428–437.
- [19] Bahrami, B., Hojjat-Farsangi, M., Mohammadi, H., Anvari, E., Ghalamfarsa, G., Yousefi, M., Jadidi-Niaragh, F. 2017. Nanoparticles and targeted drug delivery in cancer therapy. *Immunol. Lett.*, 190:64–83.
- [20] Ajnai, G., Chiu, A., Kan, T., Cheng, C.C., Tsai, T.H., Chang, J. 2014, Trends of Gold Nanoparticle-based Drug Delivery System in Cancer Therapy. *J. Exp. Clin. Med.*, 6:172–178.
- [21] Kong, F.Y., Zhang, J.W., Li, R.F., Wang, Z.X., Wang, W.J., Wang, W. 2017. Unique Roles of Gold Nanoparticles in Drug Delivery, Targeting and Imaging Applications. *Molecules*, 22:1445.
- [22] Brown, S.D., Nativo, P., Smith, J.A., Stirling, D., Edwards, P.R., Venugopal, B., Flint, D.J., Plumb, J.A., Graham, D., Wheate, N.J. 2010. Gold nanoparticles for the improved anticancer drug delivery of the active component of oxaliplatin. *J. Am. Chem. Soc.*, 132:4678–4684.
- [23] Dreaden, E.C., Austin, L.A., Mackey, M.A., El-Sayed, M.A. 2012. Size matters: Gold nanoparticles in targeted cancer drug delivery. *Ther. Deliv.*, 3:457–478.
- [24] Dickerson, E.B., Dreaden, E.C., Huang, X., El-Sayed, I.H., Chu, H., Pushpanketh, S., McDonald, J.F., El-Sayed, M.A. 2008. Gold nanorod assisted near-infrared plasmonic photothermal therapy (PPTT) of squamous cell carcinoma in mice. *Cancer Lett.*, 269:57–66.
- [25] El-Sayed, I.H., Huang, X., El-Sayed, M.A. Selective laser photo-thermal therapy of epithelial carcinoma using anti-EGFR antibody conjugated gold nanoparticles. 2006. *Cancer Lett.*, 239:129–135.
- [26] Pissuwan, D., Valenzuela, S.M., Cortie, M.B. 2006. Therapeutic possibilities of plasmonically heated gold nanoparticles. *Trends Biotechnol.*, 24, 62–67.
- [27] Handley, D.A., Hayat MA (ed). 1989. In colloidal gold: principles, methods, and applications. Academic, New York, 131s.
- [28] Cingoz, A., Ozyerli-Goknar, E., Morova, T., Seker-Polat, F., Selvan, M.E., Gümüş Z.H., Bhare, D., Shah, K., Solaroglu, I., Bagci-Onder, T. 2021. Generation of TRAIL-resistant cell line models reveals distinct adaptive mechanisms for acquired resistance and re-sensitization. *Oncogene* 40 (18), 3201-3216.
- [29] Sur-Erdem, I., Muslu, K., Pınarbası, N., Altunbek, M., Seker-Polat, F., Cingöz, A., Aydın, S.O., Kahraman, M., Culha, M., Solaroglu, I., Bagci-Onder, T. 2020. TRAIL-conjugated silver nanoparticles sensitize glioblastoma cells to TRAIL by regulating CHK1 in the DNA repair pathway. *Neurological Research* 42: 1061-1069.

- [30] Selim, M. E., Hendi, A. A. 2012. Gold Nanoparticles Induce Apoptosis in MCF-7 Human Breast Cancer Cells. *Asian. Pac. J. Cancer. Prev.* 13: 1617–1620.
- [31] Lan, M.Y., Hsu, Y.B., Hsu, C.H., Ho, C.Y., Lin, J.C., Lee, S.W. 2013. Induction of Apoptosis by High-Dose Gold Nanoparticles in Nasopharyngeal Carcinoma Cells. *Auris, Nasus, Larynx*, 40:563– 568.
- [32] Fytianos, K., Chortarea, S., Rodriguez-Lorenzo, L., Blank, F., Von Garnier, C., Petri-Fink, A., Rothen-Rutishauser, B., 2017. Aerosol delivery of functionalized gold nanoparticles target and activate dendritic cells in a 3D lung cellular model. *ACS nano* 11: 375-383.
- [33] Chithrani, B.D., Ghazani, A.A., Chan, W.C.W. 2006. Determining the Size and Shape Dependence of Gold Nanoparticle Uptake into Mammalian Cells. *Nano Letters* 6(4):662–668.
- [34] Pricker, S. 1996. Medical uses of gold compounds: Past, present and future. *Gold Bull* 29:53–60.
- [35] Albanese, A., Tang, P.S., Chan, W.C.W. 2012. The effect of nanoparticle size, shape, and surface chemistry on biological systems. *Annu Rev Biomed Eng* 14:1–16.
- [36] Liu, C.J., Wang, C.H., Chien, C.C., Yang, T.Y., Chen, S.T. 2008. Enhanced x-ray irradiation-induced cancer cell damage by gold nanoparticles treated by a new synthesis method of polyethylene glycol modification. *Nanotechnology* 19:295104.
- [37] Liu, C.J., Wang, C.H., Chen, S.T., Chen, H.H., Leng, W.H. 2010. Enhancement of cell radiation sensitivity by pegylated gold nanoparticles. *Phys Med Biol* 55: 931–945.
- [38] Hainfeld, J.F., Slatkin, D.N., Smilowitz, H.M. 2004. The use of gold nanoparticles to enhance radiotherapy in mice. *Phys Med Biol* 49:N309–N315.
- [39] Hainfeld, J.F., Dilmanian, F.A., Zhong, Z., Slatkin, D.N., Kalef-Ezra, J.A. 2010. Gold nanoparticles enhance the radiation therapy of a murine squamous cell carcinoma. *Phys Med Biol* 55: 3045–3059.
- [40] Zhang, X.D., Wu, D., Shen, X., Chen, J., Sun, Y-M. 2012. Size-dependent radiosensitization of PEG-coated gold nanoparticles for cancer radiation therapy. *Biomaterials* 33: 6408–6419.
- [41] Cai, Q-Y, Kim, S.H., Choi, K.S., Kim, S.Y., Byun, S.J. 2007. Colloidal gold nanoparticles as a blood-pool contrast agent for x-ray computed tomography in mice. *Invest Radiol* 42: 797–806.
- [42] Kircher, M.F., de la Zerda, A., Jokerst, J.V., Zavaleta, C.L., Kempen, P.J., I. 2012. A brain tumor molecular imaging strategy using a new triple-modality MRI/photoacoustic-Raman nanoparticle. *Nat Med* 18: 829–834.
- [43] Jin, Y.D., Jia, C.X., Huang, S.W., O'Donnell M., Gao, X.H. 2010. Multifunctional nanoparticles as coupled contrast agents. *Nat Commun* 1: 41.
- [44] Park, J.A., Reddy, P.A.N., Kim, H.K., Kim, I.S., Kim, G.C. 2008. Gold nanoparticles functionalised by Gd-complex of DTPA-bis(amide) conjugate of glutathione as an MRI contrast agent. *Bioorgan Med Chem Lett* 18: 6135–6137.
- [45] Liu, C.J., Wang, C.H., Chen, S.T., Chen, H.H., Leng, W.H. 2010. Enhancement of cell radiation sensitivity by pegylated gold nanoparticles. *Phys Med Biol* 55: 931–945.
- [46] Hainfeld, J.F., Slatkin, D.N., Smilowitz, H.M. 2004. The use of gold nanoparticles to enhance radiotherapy in mice. *Phys Med Biol* 49: N309–N315.
- [47] Hainfeld, J.F., Dilmanian, F.A., Zhong, Z., Slatkin, D.N., Kalef-Ezra, J.A. 2010. Gold nanoparticles enhance the radiation therapy of a murine squamous cell carcinoma. *Phys Med Biol* 55: 3045–3059.
- [48] Jain, S., Coulter, J.A., Hounsell, A.R., Butterworth, K.T., McMahon, S.J. 2011. Cell-specific radiosensitization by gold nanoparticles at megavoltage radiation energies. *Int J Radiat Onc* 79: 531–539.
- [49] Rahman, W.N., Bishara, N., Ackerly, T., He, C.F., Jackson, P. 2009. Enhancement of radiation effects by gold nanoparticles for superficial radiation therapy. *Nanomed-Nanotechnol* 5: 136–142.

- [50] Chattopadhyay, N., Cai, Z., Pignol, J.P., Keller, B., Lechtman, E. 2010. Design and characterization of HER-2-targeted gold nanoparticles for enhanced x-radiation treatment of locally advanced breast cancer. *Mol Pharm* 7: 2194–2206.
- [51] Huang, Y.J., Hsu, S.H. 2017. TRAIL-functionalized gold nanoparticles selectively trigger apoptosis in polarized macrophages. *Nanotheranostics*, 1[3]:326-337.
- [52] Ke, S., Zhou, T., Yang, P., Wang, Y., Zhang, P., Chen, K., Ren, L., Ye, S. 2017. Gold Nanoparticles Enhance TRAIL Sensitivity Through Drp1-Mediated Apoptotic and Autophagic Mitochondrial Fission in NSCLC Cells. *Int J Nanomed.*, 12:2531-2551.