

İSTANBUL TEKNİK ÜNİVERSİTESİ ★ LİSANSÜSTÜ EĞİTİM ENSTİTÜSÜ

**RASTGELE YÖNLENDİRİLMİŞ KARBON NANOTÜP TAKVİYELİ
KOMPOZİTLERİN MODELLENMESİ**

DOKTORA TEZİ

Emre KÖROĞLU

Uçak ve Uzay Mühendisliği Anabilim Dalı

Uçak ve Uzay Mühendisliği Programı

EKİM 2022

İSTANBUL TEKNİK ÜNİVERSİTESİ ★ LİSANSÜSTÜ EĞİTİM ENSTİTÜSÜ

**RASTGELE YÖNLENDİRİLMİŞ KARBON NANOTÜP TAKVİYELİ
KOMPOZİTLERİN MODELLENMESİ**

DOKTORA TEZİ

**Emre KÖROĞLU
(51112109)**

Uçak ve Uzay Mühendisliği Anabilim Dalı

Uçak ve Uzay Mühendisliği Programı

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Halit Süleyman TÜRKMEN

EKİM 2022

ISTANBUL TECHNICAL UNIVERSITY ★ GRADUATE SCHOOL

**MODELLING OF RANDOMLY ORIENTED
CARBON NANOTUBE REINFORCED COMPOSITES**



Ph.D. THESIS

**Emre KÖROĞLU
(511112109)**

Department of Aeronautics and Astronautics Engineering

Aeronautics and Astronautics Engineering Programme

Thesis Advisor: Prof. Dr. Halit Süleyman TÜRKMEN

OCTOBER 2022

İTÜ, Lisansüstü Eğitim Enstitüsü'nün 511112109 numaralı Doktora Öğrencisi Emre KÖROĞLU, ilgili yönetmeliklerin belirlediği gerekli tüm şartları yerine getirdikten sonra hazırladığı “RASTGELE YÖNLENDİRİLMİŞ KARBON NANOTÜP TAKVİYELİ KOMPOZİTLERİN MODELLENMESİ” başlıklı tezini aşağıda imzaları olan jüri önünde başarı ile sunmuştur.

Tez Danışmanı : **Prof. Dr. Halit Süleyman TÜRKMEN**
İstanbul Teknik Üniversitesi

Jüri Üyeleri : **Prof. Dr. Reha ARTAN**
İstanbul Teknik Üniversitesi

Prof. Dr. Şenol ATAÖĞLU
İstanbul Teknik Üniversitesi

Doç. Dr. Cengiz İPEK
İstanbul Medeniyet Üniversitesi

Dr.Öğr.Üyesi Özgür DEMİR
Yıldız Teknik Üniversitesi

Teslim Tarihi : 4 Temmuz 2022
Savunma Tarihi : 10 Ekim 2022



Sevgili Eşime,



ÖNSÖZ

Tez çalışmam süresince desteğini esirgemeyen değerli hocam Prof.Dr. Halit Süleyman TÜRKMEN başta olmak üzere, tez izleme komitesi üyeleri Prof.Dr. Reha ARTAN ve Prof.Dr. Melih PAPİLA'ya çok teşekkür ederim.

Her zaman yanımda bulunan sevgili eşim Serdar Aytekin KÖROĞLU'na, beni daima motive eden sevgili dostalarım Eda ŞENTÜRK, Hilal ERDEM ve İnci-Mengüç ÜNVER'e çok teşekkür ederim.

Haziran 2022

Emre KÖROĞLU
(Uçak Mühendisi)

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖNSÖZ.....	ix
İÇİNDEKİLER	xi
KISALTMALAR	xiii
SEMBOLLER	xv
ÇİZELGE LİSTESİ.....	xvii
ŞEKİL LİSTESİ.....	xix
ÖZET.....	xxi
SUMMARY	xxv
1. GİRİŞ	1
1.1 Karbon Nanotüpler (KNT)	3
1.1.1 KNT kompozitlerin kullanım alanları	5
1.1.2 Karbon nanotüplerin özellikleri	5
1.2 Literatürde KNT Takviyeli Kompozitler	7
1.2.1 Homojenizasyon	7
1.2.2 Malzeme özellikleri	9
1.3 Tezin Amacı	11
1.4 Tezin Planı.....	12
2. HOMOJENİZASYON	13
2.1 Analitik Yöntemler.....	15
2.1.1 Sınır durumlar.....	15
2.1.2 Yaklaşık yöntemler.....	19
2.2 Sayısal Yöntemler	25
2.2.1 Temsili hacim elemanı (THE)	25
2.2.2 Hill Mandel koşulu	27
2.2.3 Fisher'in yaklaşımı	28
3. TEK TAKVİYELİ THE HOMOJENİZASYONU: HACİMSEL YAKLAŞIM	
– EN KÜÇÜK KARELER	31
3.1 En Küçük Kareler Regresyonu.....	31
3.1.1 Çok değişkenli doğrusal regresyon	33
3.1.2 Malzeme katsayıları için regresyon	36
3.1.3 Düzlem gerilme	36
3.1.4 Örnek çalışma	37
3.1.5 Düzlem gerilme için problemin uyarlanması	40
3.1.6 Alt örneklemeler ile belirsizlik tespiti	40
3.1.7 Sistemin tekliği sorunu.....	41
3.1.8 Malzeme sabitlerinin dağılımı	41
3.1.9 Pozitif belirlilik.....	46
3.1.10 Gerilme tahmini	46
3.1.11 Regresyon analizi	48
3.2 Makine Öğrenmesi Yaklaşımı.....	56
3.2.1 Makine öğrenmesi	57
3.2.2 Makine öğrenmesi yoluyla malzeme sabitlerinin belirlenmesi	67

3.2.3 Sonuçlar	71
4. TEK TAKVİYELİ THE HOMOJENİZASYONU: SINIR YAKLAŞIMI – OPTİMİZASYON	73
4.1 Kullanılan Malzeme Modelleri.....	74
4.2 Problemin Genel Tanımı	75
4.3 Optimizasyon.....	77
4.4 Optimizasyon Tabanlı Homojenizasyon	79
4.4.1 Hedef fonksiyonu.....	79
4.4.2 Sınır şartları	79
4.4.3 Dizayn parametreleri	80
4.4.4 Kısıtlar	81
4.5 Çözüm Yaklaşımı	81
4.5.1 Global optimizasyon.....	82
4.5.2 Lokal optimizasyon	83
4.6 Sonuçlar.....	85
5. SONUÇLAR	87
5.1 Gelecek Çalışmalar.....	89
KAYNAKLAR.....	91

KISALTMALAR

ÇKNT	: Çok duvarlı karbon nanotüpler
FESEM	: Field emission scanning electronic microscope
FFT	: Fast Fourier Transform (Hızlı Fourier dönüşümü)
KNT	: Karbon nanotüp
KUBC	: Kinematic uniform boundary condition (Kinematik düzgün sınır şartı)
PBC	: Periodic boundary condition (Periyodik sınır şartı)
SUBC	: Static uniform boundary condition (Statik düzgün sınır şartı)
THE	: Temsili hacim elemanı
TKNT	: Tek duvarlı karbon nanotüpler

SEMBOLLER

L_i	: Elastisite tansörü
M_i	: Esneklik tansörü
c_i	: Hacim oranı
σ	: Gerilme
ε	: Şekil değiştirme
K	: Hacim modülü
G	: Kayma modülü
S	: Eshelby tansörü
T	: Gerinim yoğunlaştırma tansörü
$\bar{\sigma}, \bar{\varepsilon}$	: Gerilme ve şekil değiştirmenin hacimsel ortalamaları
$\bar{L}$	: Efektif elastisite tansörü
$\langle \rangle$	: Hacimsel ortalama (alternatif gösterim)
β_i	: Regresyon katsayısı
$y, \hat{y}$	: Gerçek değer, tahmini değer

ÇİZELGE LİSTESİ

Sayfa

Çizelge 3.1 : Örnek durumlarla ilgili sayısal bilgiler	38
Çizelge 3.2 : Gerilme [Pa] ve şekil değiştirme hacimsel ortalamaları (O tipi).....	40
Çizelge 3.3 : Regresyon analizi özeti (S tipi)	53
Çizelge 3.4 : Regresyon analizi özeti (O tipi).....	53
Çizelge 3.5 : Regresyon analizi özeti (Y tipi).....	54
Çizelge 3.6 : Çekirdek fonksiyon tipleri.....	62
Çizelge 3.7 : Makine öğrenmesi algoritma parametreleri	71

ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa

Şekil 1.1 : Kompozit malzemede takviye, matris ve ara-faz	1
Şekil 1.2 : Kompozit malzemenin efektif davranışı	2
Şekil 1.3 : Parçacık ve elyaf takviyeli kompozitler	3
Şekil 1.4 : Tek duvarlı karbon nanotüp (yandan görünüş)	4
Şekil 2.1 : İzotropik bileşenli heterojen ve homojen anizotropik modeller.....	14
Şekil 2.2 : Voigt ve Reuss durumları.....	16
Şekil 2.3 : Şişkin-dolgu problemi	19
Şekil 2.4 : Saflık-bozan problemi	20
Şekil 2.5 : THE örneklemeleri.....	26
Şekil 2.6 : Fisher'in tek KNT'li modeli.....	28
Şekil 2.7 : Rasgele ve mod-şekli sınır şartı.....	29
Şekil 3.1 : İnterpolasyon ve regresyon	32
Şekil 3.2 : Örnek durumlar	37
Şekil 3.3 : Hacimsel ortalamaların hesaplanması	39
Şekil 3.4 : Kutu grafiği	42
Şekil 3.5 : S tipi örnek kutu grafikleri	43
Şekil 3.6 : O tipi örnek kutu grafikleri.....	43
Şekil 3.7 : Y tipi örnek kutu grafikleri.....	44
Şekil 3.8 : Şekil değiştirme hacim ortalamaları dağılımı	45
Şekil 3.9 : E ₃₃ kutu grafiği (E ₃₂ elenmesiyle)	45
Şekil 3.10 : Pozitif belirlilik oranı	46
Şekil 3.11 : Test verisi gerilme tahmini.....	47
Şekil 3.12 : Tahmin - Artık grafiği	49
Şekil 3.13 : QQ grafiği	50
Şekil 3.14 : Ölçek – Konum grafiği.....	51
Şekil 3.15 : Artık – Kaldıraç grafiği.....	52
Şekil 3.16 : Sınıflandırma problemi.....	58
Şekil 3.17 : Sınıflandırma problemi.....	60
Şekil 3.18 : Destek vektör makineleri akış diyagramı.....	63
Şekil 3.19 : Etkisi yüksek veri	63
Şekil 3.20 : P tane dışarıda bırak çapraz doğrulama (n=5, P=2)	66
Şekil 3.21 : K bölmeli çapraz doğrulama (n=12, K=4)	66
Şekil 3.22 : Makine öğrenmesi aktivite diyagramı.....	68
Şekil 3.23 : Eğitim ve test verisi dönüşümü	70
Şekil 3.24 : Bağlı hata – ortalama değer.....	72
Şekil 3.25 : Bağlı hata – maksimum değer.....	72
Şekil 4.1 : Global modelden alınan THE'nin lokal analizi.....	74
Şekil 4.2 : Aynı sınır şartları uygulanan heterojen izotropik ve homojen anizotropik THE'ler	76
Şekil 4.3 : Global ve lokal arama.....	79
Şekil 4.4 : Rasgele (soldaki) ve Latin hiperküp (sağdaki) örnekleme	82
Şekil 4.5 : Optimizasyon yaklaşımı aktivite diyagramı	84

Şekil 4.6 : Ortalama bağıl hata.....	85
Şekil 4.7 : Maksimum bağıl hata	86



RASTGELE YÖNLENDİRİLMİŞ KARBON NANOTÜP TAKVİYELİ KOMPOZİTLERİN MODELLENMESİ

ÖZET

20. yüzyılın ortalarından itibaren kompozit malzemeler, havacılık endüstrisi de dahil olmak üzere birçok alanda giderek daha fazla kullanılmaya başlanmıştır. Birden fazla malzemeyi tek bir heterojen malzeme olarak kullanmanın temel amacı, tek fazlı bir malzemeye kıyasla çok daha iyi bir malzeme elde etmek için bileşenlerin en iyi özelliklerinden yararlanmaktır. Öte yandan kompozit malzemeler, malzemenin tasarlanmasına, yani tasarım gereksinimlerini karşılamak için özelliklerin ayarlanmasına izin verir.

Yapısal tasarım perspektifiyle kompozit malzemeler iki ana bileşenden oluşur: matris fazı ve takviye fazı. Malzemeye ortam ve aynı zamanda esneklik sağlayan matris fazı her ne kadar daha yüksek hacimsel orana sahip olsa da, modellenmesi daha zor olan bileşen takviye fazıdır. Bunun nedeni, kimi zaman takviyelerin matris fazına göre çok küçük boyutta olmaları ve çok fazla sayıda bulunabilmeleridir.

Bu malzemeleri yapı tasarımında kullanmak üzere bir bünye modeli oluşturmak için heterojen malzemelerden homojen malzeme özellikleri elde etme amacıyla homojenizasyon adı verilen yöntemler geliştirilmiştir.

Takviye geometrisi için çok kısıtlayıcı varsayımlar altında, yaklaşık veya yarı analitik homojenizasyon kullanılarak, kompozit malzemenin global davranışı belli bir dereceye kadar tahmin edilebilir.

Daha gerçekçi sonuçlar verebilen bir alternatif olarak, malzemenin bir kısmı, malzemenin global davranışını temsil edecek şekilde modellenebilir. Malzeme ölçeğini olduğu gibi kullanılmamasının nedeni, takviyeler çok fazla ve/veya çok küçük olduğunda, gerekli hesaplama kaynaklarının gerçekçi olmaktan uzaklaşmasıdır. Bu nedenle temsili bir model ile anizotropik malzeme katsayıları hesaplanabilir, böylece heterojen malzeme homojen anizotropik bir malzeme ile temsil edilebilir.

Ancak bu yöntem kendi kısıtlamalarıyla birlikte gelir. Modelin geçerli olarak kabul edilebilmesi için, modelin sınırlarındaki dalgalanmaların önemli olmaması için belirli bir büyüklükte olması gerekir. Buna Hill Mandel kriteri denir. Bu kriter uygun olarak oluşturulan temsili model yalnızca belirli bir nihai malzeme tasarımını modeller, yani model yeniden kullanılamaz.

Son yıllarda kompozit malzemeler, nano ölçekteki takviyelerden bile yararlanmaktadır. Bu malzemelerden biri olan karbon nanotüpler, takviye bileşeni olarak kullanıldığında belirgin avantajlara sahiptir. Ancak ölçeği ile ilgili olarak,

temsili bir model oluřturmak ve aynı zamanda Hill Mandel kriterine uymak daha zordur.

Bazı alıřmalarda hem temsili hacim elemanından, hem de yaklaşık analitik yöntemlerden yararlanılmıştır. Takviye uzunluęu doęrultusunda yalnızca tek bir elastik katsayı elde edip, daha sonra farklı tipteki taviyelerin birlikte ortaya koyduęu global davranışı hesaplamak için Mori-Tanaka gibi yaklaşık bir yöntem kullanılmıştır.

Bu noktada soru řudur: Dięer anizotropik özellikler için bu yaklaşımı sürdürmek mümkün müdür? Modelin Hill Mandel kriterinin kısıtlamalarına uyduęu göz önüne alındığında, malzeme katsayılarını elde etmek için genellikle interpolasyon kullanılmaktadır.

Bu alıřmada öncelikle problem sadece minimum sayıda deęil, ok sayıda sınır kořulu ile ele alınmıştır. Modelin Hill Mandel kořullarından uzak olması durumunda mutlaka bir belirsizlik olması beklenmektedir. ok sayıda farklı sınır kořulu kullanılarak elde edilen veriler üzerinden, en küçük kareler regresyonu kullanılarak elastik katsayılar elde edilebilir ve belirsizlik de ayrıca hesaplanabilir.

Problemin incelenebilirliğini korumak adına düzlem gerilme modeli kullanılarak, 2 malzeme fazlı ve 3 farklı takviye geometrisine sahip temsili hacim elemanları oluřturulmuřtur. Tüm modeller aynı boyutta bir dikdörtgen olup, aynı aę yapısına sahiptir. Daha sonra modeller rastgele yer deęiřtirme sınır kořullarına tabi tutulur. Son olarak, řekil deęiřtirme ve gerilmelerin hacimsel ortalamaları hesaplanır.

Elastik katsayılar en küçük kareler yöntemiyle hesaplanmıştır. Bir alt örnekleme teknięi kullanılarak, malzeme katsayılarındaki belirsizlik de elde edilmiştir. Sonuçlara göre bulunan malzeme katsayılarının kullanışlı olmaktan uzak olduęunu görölmüřtür.

Daha sonra aynı hacimsel yaklaşım bu sefer elastik katsayılar hesaplanmadan, gerilme ve řakıl deęiřtirmenin hacimsel ortalamaları artasındaki ilişkiyi kurmak üzere makine öęrenmesi yöntemleriyle ele alınmıştır. Böylece hacimsel yaklaşımın bünye ilişkisini sağlama yeteneęinin deęerlendirilmesi amaçlanmıştır.

En küçük kareler ve makine öęrenmesi yaklaşımlarının hataları karşılaştırıldığında, anlamlı bir fark olmadığı göröldü. Buradan, hacimsel ortalamalar kullanılarak, en güncel istatistiksel modelleme teknikleriyle bile önemli bir gelişme sağlanamayacağı sonucuna varılmıştır.

Daha sonra, hacimsel yaklaşıma alternatif olarak, temsili elemanın sınırlarından elde edilen verilere dayanan farklı bir homojenleřtirme yöntemi ortaya konmuřtur. Bir optimizasyon çerçevesi kullanan yaklaşım, orijinal modelin tepki kuvvetleri ile homojenleřtirilmiş anizotropik model tepki kuvvetleri arasındaki fark minimum olacak řekilde en iyi elastik katsayıları bulmayı amaçlar.

Önceki yaklaşımda kullanılan aynı örnek modeller kullanılmış ancak bu sefer ok daha yüksek hesaplama yükü nedeniyle sınır kořullarının sayısı azaltılmıştır. Temsiliyetin daha iyi olması için uygulanacak yer deęiřtirme sınır kořulları, deneysel

karakterizasyon için de yaygın olarak kullanılan doğal titreşim modu şekillerinden seçilmiştir.

Bu formdaki problemin birçok yerel minimuma sahip olabileceğinden ötürü, global minimumu bulmak için 2 adımlı bir yaklaşım önerilmiştir. Bu yaklaşıma göre, arama alanını global olarak taramak için önce latin-hiperküp tabanlı bir yöntem kullanılır. Aday noktalar bulunduktan sonra, yerel minimumu bulmak için yerel bir arama algoritması ile aramaya devam edilir.

Sonuçlar, latin hiperküp örnekleme kullanan küresel aramanın bile, hacim ortalamasına dayalı en küçük karelerden daha iyi performans gösterdiğini göstermiştir. Ardından kullanılan yerel arama, tahminleri daha da iyileştirmiştir. Ancak sonuçlar, tek bir takviye ölçeğinde homojenleştirilmiş malzeme katsayılarının uygulamada fazlaca hataya neden olduğunu da ima etmektedir.

Öte yandan, yeni yaklaşım, temsili hacim elemanın boyutunu küçültmek için hala kullanılabilir. Ayrıca hacim ortalamalarından farklı olarak, modelin sınırlarındaki birçok düğümden gelen verilere dayanan benzerlik metriği, daha yüksek doğruluğa sahip bir malzeme modeline yol açar.

MODELLING OF RANDOMLY ORIENTED CARBON NANOTUBE REINFORCED COMPOSITES

SUMMARY

Starting from the mid-20th century composite materials are increasingly being used in many areas including aerospace industry. Main aim of using multiple materials as a single heterogeneous material is to take advantage of the best features of the constituents in order to get a much better material compared to a material with a single phase. On the other hand composite materials allow the material to be engineered, i.e. tweak the properties to meet the design requirements.

For structural design purposes composite materials are made of 2 main components: a matrix phase and a reinforcement phase. Even though the matrix which provides the medium and at the same time flexibility to the material and which is the component with greater volume fraction, modeling of the the reinforcement phase is comparatively difficult. This is due to the fact that sometimes the scale of the reinforcement is comparable with the matrix phase but sometimes their number or size may differ by orders of magnitude.

In order to create a constitutive model to be used in the design of structures made of these materials, mathematical methods called homogenization are developed to obtain homogeneous material properties from heterogeneous materials.

By using approximate or semi-analytical homogenization, under very restrictive assumptions for the geometry of the reinforcements, the global behavior of the composite material can be estimated to a certain extent.

As an alternative with a much higher fidelity, part of the material can be modeled so that it represents the global behavior of the material. The reason for not using the material scale as is due to the fact that when the reinforcements are too many and/or too small the required computational resources cease to be feasible. Therefore with the representative element, anisotropic material coefficients can be calculated, so that the heterogeneous material can be represented by a homogeneous anisotropic material.

But this method comes with its own restrictions. In order to be considered as a valid element, the model must cover a certain volume so that the variations over the element is not significant. This is called the Hill Mandel criterion. For the task at hand the created representative model element models only a specific final material design, the model is not reusable.

In recent years composite materials take advantage of reinforcements even on the nanoscale. Being one of these materials, carbon nanotubes, have distinct advantages

when used as the reinforcement component. But regarding its scale, it is harder to create a representative model and at the same time conform the Hill Mandel criterion.

Some studies took advantage of both representative volume element and approximate analytical methods but at the same time violated the Hill Mandel criterion to obtain only single elastic coefficient along its length and proceeded with an approximate method like Mori-Tanaka in order to calculate the global characteristics of the material.

At this point the question is: is it possible to continue this approach for the remaining anisotropic properties? Conventional approach is, given that the model conforms the restrictions of the Hill Mandel criterion, to obtain the material coefficients by interpolation.

In this study first the problem is handled not only with the minimum number of boundary conditions but many of them. It is expected that there will certainly be a variance when the model is far from the Hill Mandel conditions. By using excessive number of boundary conditions, the elastic coefficients are obtained by using least squares regression and the variance can be calculated.

For the sake of simplicity 3 planar representative volume elements with 2 material phases are created. All models have the same uniform and rectangular mesh pattern. Then, the models are subjected to random displacement boundary conditions. Finally volumetric averages of strain and stress are calculated.

The elastic coefficients are calculated by least squares method. By making use of a sub-sampling technique, the variance of individual material coefficients are determined. The variances showed that the material coefficients were far from being useful.

After analyzing the results, the same volumetric approach will be utilized, but this time without calculating the elastic coefficients, the relations between two volumetric data stress and strain are investigated. By doing so the capability of the volumetric approach to provide the constitutive relation is evaluated.

When the errors of the least squares and machine learning approaches are compared, there was no significant difference. So from there it can be concluded that by using volumetric averages, no significant improvement can be achieved even through state of the art statistical modelling techniques.

And then to improve the performance of the volumetric approach, a different homogenization method, based on data extracted from the boundaries of the representative element, is presented. The approach, using an optimization framework, tries to find the best elastic coefficients so that the difference between the reaction forces of the original model and the homogenized anisotropic model is minimum.

Same example models are used but this time due to the much higher computational load, the number of boundary conditions are lowered. To be representative, the

conditions are chosen from natural vibration mode shapes which is commonly used for experimental characterisation.

Due to the fact that the problem in this form may have many local optima. To find the global optimum a 2 step approach is proposed. The framework first uses a latin-hypercube based method to scan the search space globally. After finding candidate points, the search continues with a local search algorithm to find the local minimum

The results show that even the global search using latin hypercube sampling outperforms the volume average based least squares. Local search further improves the estimations. But the results also implicate that at the scale of a single reinforcement, the homogenized material coefficients cause too much error to be used in practice.

On the other hand the new approach can still be used to decrease the size of a representative element. Also unlike volume averages, the similarity metric which is based on the data from many nodes on the boundaries of the model, leads to a material model with higher fidelity.

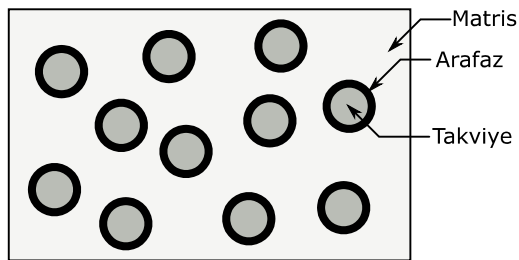


1. GİRİŞ

İnsanoğlunun teknolojiyi taşları yontarak elde ettiği tarihlerden bu yana malzeme, teknolojiyle birlikte anılan bir kavramdır. Önceleri bulunduğu formda kullanılabilen malzemeler, daha sonra ya daha saflaştırarak ya da farklı yöntemlerle birleştirilerek muhtelif ihtiyaçları karşılayacak şekilde yeni formlarda hayatımıza kazandırılmışlardır.

Günümüzde temel malzeme tipleri metal, seramik, polimer ve bunların kombinasyonlarıyla oluşturulan kompozitler olarak sınıflandırılmaktadır. Tarihsel olarak bakıldığında dört kategoriden de malzemelerin çok eski zamanlardan beri kullanıldığı görülmektedir. Metallerden doğal olarak bulunabilen altın, gümüş ve bakır MÖ 5000’li yıllardan beri kullanılagelmiştir. Daha sonraları aşınma dayanımı arttırmak üzere bronz gibi alaşımlar kullanılmaya başlamıştır. Yine seramik malzemelerden kil ve cam uzun yıllardır kullanılmaktadır. Polimer malzemelere gelince sadece petro-kimyasal süreçlerden elde edilenler değil, yün, selüloz, pamuk gibi malzemeler de hesaba katılırsa binlerce yıldır medeniyeti şekillendiren malzemeler arasındadır.

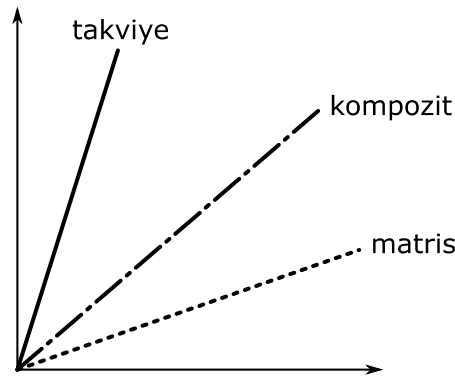
Kompozitlere gelince örneğin kerpiç, ev, eşya ve hatta teknelere kadar kullanım imkânı bulmuştur. Diğer taraftan beton yapılar Roma İmparatorluğu zamanında bile sıklıkla kullanılmıştır. Kompozitler her ne kadar uzun süredir kullanımda olsalar da, 20. yüzyılda petrol türevi polimer malzemelerin ortaya çıkmasıyla daha önemli ölçüde gündeme gelmişlerdir. Özellikle polimerlerin düşük performans gösterdiği rijitlik ve dayanım gibi konularda iyileştirme imkânı yaratmasıyla 1960’lı yıllardan itibaren altın çağını yaşamaya başlamıştır.



Şekil 1.1 : Kompozit malzemede takviye, matris ve arafaz.

Kısaca tanımlamak gerekirse, iki veya daha fazla malzemenin farklı oranlarda ve birbirinden ayrı fazlarda bulunduğu (belirli bir ara-yüzle ayrılan) malzemelere kompozit malzemeler denir. Kompozit malzemelerde genellikle hacimsel olarak daha yüksek oranda bulunan ve nispeten daha az rijitliğe sahip olan matris fazı ve bu fazı destekleyen, dayanımını, rijitliğini arttıran takviye fazı bulunur (Şekil 1.1)

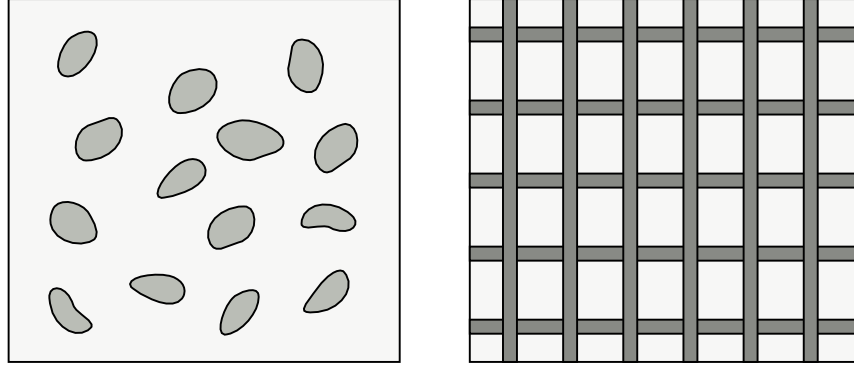
Matris malzemelerden örneğin polimerler, kolay üretilebilirlik, korozyon dayanımı ve hafiflik gibi tercih edilmelerinde önemli rol oynayan özelliklere sahiptirler. Fakat gerekli dayanım ve rijitlik için takviyeye ihtiyaç duyarlar. Takviyeler ise her ne kadar daha rijit ve dayanıklı olsalar da kullanışlı formlarda üretilememeleri, gevrek olmaları gibi nedenlerle polimer gibi matris malzemelere ihtiyaç duyarlar.



Şekil 1.2 : Kompozit malzemenin efektif davranışı.

İki ayrı fazı bağımsız değerlendirdiğimizde gözlemlenen mekanik davranış, kompozit durumunda bir nevi uzlaşma içerisinde davranır. Şekil 1.2’de de görüldüğü gibi kompozitin özelliği iki fazın özellikleri arasında yer alır. Kompozitin nihai davranışını hacimsel oranlar, takviye geometrisi, dağılımı gibi faktörler belirler. Bu parametrelerin ayarlanmasındaki kolaylık da, alaşım gibi malzemelerden farklı olarak, malzeme dizaynını ara mamül üreticisinden alıp son üreticiye taşıması ve sonuç olarak daha verimli malzemelerle çalışma imkanını doğurmaktadır.

Matris fazı açısından metal, seramik veya en çok kullanılan polimer gibi seçenekler yer alır. Polimer malzemelerden polyester, epoksi, vinil ester, polyamid, poliüretan reçine gibi seçenekler bulunur. Takviye fazı için de cam elyafı ve karbon elyaf sıklıkla kullanılmaktadır.



Şekil 1.3 : Parçacık ve elyaf takviyeli kompozitler.

Takviye olarak kullanılacak bileşenlerin uzunluğu kesit boyutlarına göre çok daha fazla olan elyaf geometrisine sahip olabildiği gibi en-boy oranı 1'e yakın parçacık şeklinde de olabilir (Şekil 1.3). Mühendislikte son yıllarda gittikçe daha küçük ölçeklere erişim imkanının gerçekleşmesiyle, nano-malzemeler heyecan verici potansiyelleriyle parçacık takviye tipleri arasındaki yerlerini almaya başlamışlardır. Önümüzdeki bölümde bu malzemelerden karbon-nanotüpler konusuna daha detaylı değinilecektir.

1.1 Karbon Nanotüpler (KNT)

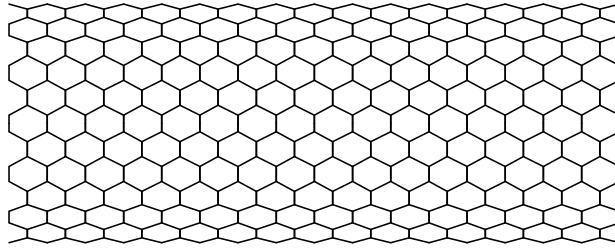
Karbon, ağırlık olarak evrende en çok rastlanan dördüncü elementtir. Bu özelliğinin yanında birçok elementle çok sayıda farklı bağ (yapısal ve geometrik izomerler) kurabilmesi ve özellikle dünyadaki sıcaklıklarda geniş bir çeşitlilikte organik bileşikler kurmasıyla karşımıza sıklıkla çıkmaktadır.

Karbon atomları bileşikler dışında, allotrop denilen farklı kristal dizilimleriyle, değişik fiziksel özellikler gösterebilmektedirler. Bilinen en yüksek sertliğe sahip yüzey merkezli kübik yapıda bulunan elmas, bu allotroplardan biridir. Diğer bir taraftan grafit ise katmanlı bir yapıda olup, her katmanda karbon atomları hekzagonal bir dizilimle birbirlerine bağlıdır.

1985 yılında Kroto ve arkadaşları, lazer buharlaştırma tekniğini karbon plazmasıyla kullanırken Fulleren adı verilen, karbon atomlarının küresel bir kafes şeklinde dizildikleri yapıyı keşfettiler (Kroto, Heath, O'Brien, Curl, & Smalley, 1985). Ardından 1991 senesinde de Iijima, geçirimli elektron mikroskopuyla silindirik formda, nanotüp ismi verilen formların varlığını göstermiştir (Iijima, 1991). Karbon nanotüplerin keşfi ile nano-teknolojinin en önemli alanlarından biri bulunmuş oldu.

Karbon nanotüpler (KNT) en genel haliyle, karbon atomunun bal peteği örgülü yapılarından bir tanesi olan grafen katmanının veya fullerenlerin içi boş silindir şeklinde bükülmesiyle oluşturulmuş biçimleridir. Bundan dolayı KNT'ler, grafen tabakasının yuvarlanma şekline göre sınıflandırılabilir. KNT'ler mikrometrik yükseklikte ve nanometrik çapta olmaktadır.

Karbon nanotüpler katman sayılarına göre sınıflandırılabilirler. Ortak eksenli silindir duvarların sayısına göre, tek duvarlı ve çok duvarlı olmak üzere iki kategoride ele alınırlar.



Şekil 1.4 : Tek duvarlı karbon nanotüp (yandan görünüş).

1993 yılında keşfedilen tek duvarlı karbon nanotüpleri (TKNT) (Şekil 1.4), yalnızca içi boş bir silindirik yapıya sarılmış tek bir grafit katmanı olan bir karbon nanotüp sınıfıdır (Iijima & Ichihashi, 1993).

Çok duvarlı nano tüplerin (ÇKNT) grafit ile benzer özellikleri olmakla birlikte iki grafen tabakası arasında yaklaşık 0,034 nm ara katman mesafesi bulunmaktadır. Çok duvarlı nanotüpler uzunluk olarak tek duvarlı nanotüplere benzemektedirler fakat çok duvarlı nanotüplerin çapları tek duvarlı nanotüpten çok büyük olmaktadır. İç ve dış çapları yaklaşık olarak sırasıyla 5 ve 100 nm civarında olmaktadır. Özellikleri de tek duvarlı nanotüplerden daha farklıdır.

Çok duvarlı karbon nanotüpler, duvarların sayısı ve aralarındaki etkileşim, düzgün olmamaları nedeniyle TKNT'lerden daha karmaşıktır.

Üreticilerin çoğu, tek duvarlı karbon nanotüplere kıyasla sentezlenmeleri daha kolay olduğu için çok duvarlı nanotüpler üretmeyi tercih etmektedir. Çoğunlukla araç şasisi ve spor ürünleri gibi ürünlerde daha kuvvetli polimerlere sahip olmak için yığın halinde eklenirler.

Tek duvarlı nanotüpler başta nano elektrikli cihazlar için olmak üzere çeşitli uygulamalar için potansiyel olarak uygun adaydır.

1.1.1 KNT kompozitlerin kullanım alanları

KNT takviyeli kompozitler şimdiden endüstride birçok alanda kullanılmaya başlamıştır.

Hafiflik ve dayanıklılık gibi malzeme özelliklerinin en üst düzeyde talep bulduğu havacılık sektöründe nano-malzemeler şimdiden kullanılmaya başlamıştır. ABD merkezli ZYVEX Technologies şirketi katılığı önemli ölçüde artıracak nanotakviyeli kompozitler geliştirmektedir. Bu kompozitlerden AROVEXTM uçak motoru kaportaların iç yüzeylerinde kullanılmaktadır. Bu firma ayrıca AIRBUS'ın öncülüğünü üstlendiği NATIONAL COMPOSITES CENTER konsorsiyumunda yüksek performanslı kompozitlerin KNT ile iyileştirilmesi konusunda çalışmalar yapmaktadır. Yine aynı firma bunun yanında doğrudan yapı elemanı olmadığı halde KENTERATM isimli teknoloji ile kırılan yarış otomobili parçalarını nanotüp takviyeli yapıştırıcılarla daha dayanıklı daha güçlü bir şekilde yapıştırılma imkânı sağlamıştır.

EDEN Energy şirketinin inşaat sektöründe girişimi olan EdenCrete TM isimli KNT içeren beton katkı maddesi üretmektedir. Bu ürün Denver'daki taşıma yolu imalatında uygulanmış olup, çekme mukavemetini %25 gibi önemli ölçüde arttırdığı tespit edilmiştir. Ayrıca Georgia eyaletinde bir vagon fabrikasında zemin betonunda kullanılmıştır.

Çeşitli rüzgar değirmeni üreticileri, örneğin Finlandiya'da Bayer ve Amroy Oy, KNT'yi reçine içine başarılı bir şekilde dahil ederek rüzgar değirmenleri kanatlarının ağırlığını azaltmayı amaçlayan geliştirme projeleri yürütmüşlerdir. Bu proje ile hafif rüzgâr türbini kanatlarının inşası için kullanılan, bir KNT takviyeli epoksi reçine Hyptonite® geliştirmişlerdir.

KNT'nin kullanıldığı spor ekipmanları günümüzde marketlerde yer bulmaktadır. Yonex firması, ürettikleri Badminton raketleri için KNT takviyeli kompozitleri tercih etmiştir.

1.1.2 Karbon nanotüplerin özellikleri

KNT'lerin özellikleri, yoğunluk, kafes yapısı gibi özelliklerine bağlıdır. Nanotüp tipleri ve çapları da yapılarını etkileyen önemli faktörlerdendir. Çapları geniş olan KNT'ler grafit gibi davranırlar. Bir KNT'nin çapı küçüldükçe, karakteristik özellikleri kendi türüne daha çok bağımlı olmaktadır. KNT'ler geniş yüzey alanı ve yüksek en-

boy oranına sahip olmaktadır. Bu oranı 1000:1 den büyük olabilmektedir. Yoğunlukları $1,33 \text{ g/cm}^3$ değeriyle, alüminyumun $2,7 \text{ g/cm}^3$ değerinden küçük olmaktadır.

Ayrıca, KNT'ler kimyasal olarak neredeyse asaldır. Bu nedenle diğer malzemelerle reaksiyona girmezler. Diğer önemli özellikleri aşağıda kısaca açıklanmaktadır:

1.1.2.1 Elektriksel özellikler

KNT'ler olağanüstü elektriksel özelliklere sahiptir. Özel yapılarına bağlı olarak metalik veya yarı iletken olabilirler. Eğer n ve m parametreleri eşitse veya aralarındaki fark 3'ün katıysa metalik özellik gösterirler.

Bir bakır tel, 1 MA/cm^2 'lik bir akım kapasitesine sahiptir; Öte yandan, bu değer karbon nanotüpleri için 1 GA/cm^2 'ye ulaşabilir (Wei, Vajtai, & Ajayan, 2001). İletkenlik olarak tek duvarlı KNT'ler 106 S/m 'ye varan değerlere kadar çıkabilmektedirler.

1.1.2.2 Isısal özellikler

Bilinen tüm malzemeler arasında ölçülen en yüksek ısı iletkenliği, kristal karbona aittir. Grafit ve elmasın ısı kapasitesi ve ısı iletkenliği dikkat çekicidir. Saf iletkenlik değeri saf elmas için $2000\text{-}2500 \text{ W/m.K}$ iken grafit için 2000 W/m.K 'dir.

KNT'lerin elmasınkine kıyasla daha iyi bir ısı iletkenliği vardır. Nanotüp test sonuçları, onun ısı iletkenliğinin elmasın en az iki katı olduğunu göstermiştir (Hone, Whitney, Piskoti, & Zettl, 1999). Ayrıca KNT'lerin oda sıcaklığında yaklaşık 6000 W/m.K 'lik bir termal iletkenliğe sahip iken iyi iletkenliği açısından iyi bilinen bakırın ısı iletkenliği 385 W/m.K 'dir. Çok duvarlı nanotüplerde deneysel olarak 3000 W/m.K değerlerine kadar termal iletkenlik ölçülmüştür (Kim, Shi, Majumdar, & McEuen, 2001).

KNT'ler tüp boyunca çok iyi termal iletken olmasına rağmen, tüp eksenine için yanal olarak iyi yalıtırlardır.

1.1.2.3 Mekanik özellikler

Elektriksel ve termal özelliklerinin yanı sıra, olağanüstü mekanik özelliklerinden dolayı da ilgi çekmektedirler.

KNT'lerde, doğadaki en kuvvetli bağ olan sigma bağı vardır. Bu nedenle doğada var olabilecek Young modülü en yüksek fiber olarak nitelendirilebilir. Bu durum hem

teorik (Lu, 1997), hem de deneysel çalışmalarla (Poncharal, Wang, Ugarte, & De Heer, 1999) gösterilmiştir. ÇKNT'lerde, tüpler arasında bulunan van der Waals kuvvetleri sayesinde TKNT'lere kıyasla bir miktar daha yüksek Young modülü gözlemlenmiştir.

Diğer bir taraftan birçok sert malzeme çekme dayanımına kadar %1 oranlarına kadar şekil değiştirebilse de KNT'lerde bu oran %15'lere varabilmektedir.

KNT'ler için deneysel, teorik modelleme ve simülasyon çalışmaları yapılmaktadır. Hesaplamalı olarak nanotüplerin davranışı bağımsız olarak modellenip simülasyonu yapıldığı gibi, ayrıca bunların kompozit malzeme içerisine takviye olduğu durumlar da incelenmektedir. Bu simülasyonlarda karbon atomlarının dağılımı, bu tüplerin uzunluğu, çapı gibi geometrik bilgilerle üretim sonuçlarından gözlemle elde edilen eğrisel geometriye sahip olmaları veya matris malzeme içerisinde bulunmalarından ötürü matris malzeme ile aralarındaki bağların yine genel malzeme davranışına etkileri, nanotüplerin hacim oranları, dağılımları ve doğrultularındaki düzen/rasgelelik bu tip simülasyonlara konu olmaktadır.

1.2 Literatürde KNT Takviyeli Kompozitler

Karbon nanotüp (KNT) takviyeli kompozitlerin mühendislik dizayn sürecinde değerlendirilebilmeleri için pratik modellere ihtiyaç duyulmaktadır. Bu kapsamda micro ve nano mekanikte, homojenizasyon adı verilen ve heterojen malzemelerin makroskopik özelliklerinin, bileşen özelliklerinden yola çıkılarak tayin edilmesi yoluna gidilmektedir.

Homojenizasyon, eğer takviyeler nispeten seyrek ve geometrileri elipsoide yakınsa (veya bir şekilde o hale lokal olarak getirilebiliyorsa) analitik teknikler, farklı geometrilere uygulanabilirliği ve sonuçların daha hassas alınma gerekliliği olan durumlar için sayısal teknikler aracılığıyla gerçekleştirilebilir.

1.2.1 Homojenizasyon

1.2.1.1 Analitik teknikler

Eshelby'nin çalışmasıyla, mikromekanik için önemli bir süreç başlamış oldu (Eshelby, 1957). Seyrek ve elipsoidal takviyelere sahip bir matrisin eş değer malzeme sabitlerinin bulunmasını sağlayan bu yöntem, daha sonra ortaya çıkan birçok analitik tekniğe temel oluşturmuştur.

Sonrasında Mori ve Tanaka, daha yüksek hacim fraksiyonlarına izin veren ve inklüzyonlar arası etkileşimi de modelleyebilen bir yöntem sunmuştur (Mori & Tanaka, 1973). Çok sayıda çalışmada kullanılan yöntem, (Selmi, Friebe, Doghri, & Hassis, 2007) ve (Yanase, Moriyama, & Ju, 2013) çalışmalarında polimer-KNT kompozitler için uygulanmıştır.

Bir diğer popüler yaklaşım da kendinden tutarlı (self-consistent) homojenizasyon yöntemidir (Hill, 1965). Bu yöntemde inklüzyonlar arası etkileşim, inklüzyonun efektif elastik özellikleri taşıyan bir ortam içerisinde analiz edilerek hesaba katılır. (Seidel & Lagoudas, 2006)'da yöntem KNT takviyeli kompozitlere uygulanmıştır. Bu yöntemin geliştirilmiş bir türevi de (Benveniste, 2008)'de görülebilir.

1.2.1.2 Sayısal teknikler

Analitik yöntemler çözüm hızı açısından her ne kadar avantajlı gözükseler de, takviye geometrisi kısıtlamaları, hata oranı gibi sebeplerden ötürü sayısal teknikler de sıklıkla kullanılmaktadır. Bu tekniklerde genellikle bir temsili hacim elemanı (THE) adı verilen 3 boyutlu bir model kullanılır. Kompozitin efektif özellikleri bu model üzerinde uygulanan kuvvet veya yer değiştirme nedeniyle sonuç olarak hesaplanan şekil değiştirme / gerilme değerleri kullanılarak elde edilir. (Liu & Chen, 2003) ve (Kumar & Srivastava, 2016)'de sonlu elemanlar yöntemi bu analizleri gerçekleştirmek üzere tercih edilmiştir. Genellikle kabuk eleman tercih edilmesinin yanında bazı çalışmalarda KNT geometrisi kiriş elemanlar kullanılarak da oluşturulmuştur (García-Macías, Guzmán, Flores, & Castro-Triguero, 2019).

Sonlu elemanlar yöntemi dışında FFT (Ghossein & Lévesque, 2014; Leclerc, et al., 2016) ve ağsız (meshless) yöntemler (Wang & Liew, 2015) de kullanılmaktadır. Ayrıca 2 aşamalı yaklaşımlarda, moleküler dinamik simülasyonlarının da kullanıldığı görülmektedir (Alian, Kundalwal, & Meguid, 2015; Ghossein & Lévesque, 2014).

1.2.1.3 Temsili hacim elemanı (THE)

THE için, heterojen bir malzemenin makroskopik davranışını temsil edebilecek kadar büyük olması gerekliliğinin yanında, analiz edilebilirlik açısından da üstten bir kısıtı bulunmaktadır. THE'nin temsil yeteneğinin boyutuyla olan ilişkisi (Moussaddy, Theriault, & Lévesque, 2013)'de incelenmiştir.

Başka bir yaklaşıma göre THE'ler bütün hacmi temsil etmek yerine sadece bir adet takviyenin yakın çevresi için oluşturulur. Daha sonra farklı yönlenmeler, hacim fraksiyonları veya takviyeye has geometri, arafaz gibi özelliklerin ayrı ayrı hesaba katılıp, istatistiksel olarak makroskopik ölçeğe (Mori-Tanaka gibi) analitik yöntemlerle aktarılır (Fisher, Bradshaw, & Brinson, 2003).

1.2.1.4 Deneysel çalışmalar

Homojenizasyon odaklı çalışmaların bir kısmında çalışmayı desteklemek adına deneysel çalışmalar da yapılmıştır.

KNT'lerin matris içerisine dağılımını tespit etmek üzere field emission scanning electronic microscope (FESEM) kullanılmıştır (Song & Youn, 2006).

Malzeme karakterizasyonu için rezonant ultrason spektroskopisi ve elektromanyetik akustik rezonans teknikleri (Tane, Okuda, & Tanaka, 2019) ile universal deney cihazları (Curtu & Motoc, 2008) kullanılmıştır.

1.2.2 Malzeme özellikleri

1.2.2.1 Malzeme özellikleri - lokal

KNT takviyeli kompozitlerin karakterinde, KNT'lerin matris içerisinde dağılımı, KNT-matris etkileşimi ve KNT'lerin geometrileri önemli rol oynar. Örneğin KNT'lerin matris içerisinde yer yer topaklanması (agglomeration) (Ji, Cao, & Feng, 2010; Hammerand, Seidel, & Lagoudas, 2007) çalışmalarında irdelenmiştir.

KNT-Matris arasındaki bağların etkisi olan arafazın, yüksek hacim fraksiyonlarında kayda değer olduğu gözlenmiştir (Esteve & Spanos, 2009). (Xu, Wu, Jiao, & Liu, 2017) çalışmasında ise yumuşak ve sert arafaz etkileri üzerinde durulmuştur.

KNT geometrisindeki eğrilik de davranışa etki eden bir başka husustur. Eğrilğin elastik davranışa etkisi (Yanase, Moriyama, & Ju, 2013), (Pan, Bian, Zhao, & Zhao, 2016) ve (Shi, Feng, Huang, Hwang, & Gao, 2004) çalışmalarında incelenmiştir.

1.2.2.2 Malzeme/mekanik özellikler - global

Homojenizasyon çalışmaları sadece elastik özelliklerin belirlenmesi için gerçekleştirilmez. Bunun dışında termo ve viskoelastik etkiler (Ansari & Hassanzadeh-Aghdam, 2017), ısı iletkenlik (Wang, Tseng, & Tsai, 2019; Kianfar,

Seyyed Fakhrabadi, & Mashhadi, 2020; Mortazavi, Bardoun, & Ahzi, 2013), piezoelektrik özellik (Hasanzadeh, Ansari, & Hassanzadeh-Aghdam, 2019; Wang, Zhu, Jin, Chen, & Zhang, 2014), plastisite (Barai & Weng, 2011) gibi bir çok karakter benzer homojenizasyon teknikleriyle incelenebilir. Çekme mukavemeti de elastik açıdan incelenen bir diğer konudur (Joshi, Sharma, & Harsha, 2011).

Bu çalışmaların yanında malzemenin global mekanik davranışı üzerine de çalışmalar yapılmıştır. (Kianfar, Seyyed Fakhrabadi, & Mashhadi, 2020)'de araç çarpışma güvenliği konusu; (Segurado & LLorca, 2006) küresel takviyeli kompozitlerin kırılma davranışı; (Garcia-Macias, Rodriguez-Tembleque, Castro-Triguero, & Saez, 2017) silindirik yapıdaki bir KNT-polimer kompozitin burkulma sonrası davranışı; (Arani, Maghamikia, Mohammadimehr, & Arefmanesh, 2011) dikdörtgen bir plağın burkulma davranışı; (Ogierman & Kokot, 2016)'de kısa fiber takviyeli kompozitlerin homojenizasyonu için Mori-Tanaka yöntemi kullanılarak yapının doğal frekansları ve transient davranışını; (Heshmati, Yas, & Daneshmand, 2015)'de ise fonksiyonel olarak derecelendirilmiş KNT takviyeli kompozit kirişlerin titreşim davranışı incelenmiştir.

1.2.2.3 Matris/takviye tipleri

Son dönemde KNT'ler sıklıkla homojenizasyon çalışmalarına konu olmaktadır (Liu & Chen, 2003; Selmi, Friebel, Doghri, & Hassis, 2007). KNT'lerin ayrıca çok duvarlı varyantları da incelenmiştir (Seidel & Lagoudas, 2006; Joshi & Upadhyay, 2014).

KNT'ler dışında yine karbon allotropu olan grafenler üzerine modelleme çalışmaları yapılmıştır (Selmi, Friebel, Doghri, & Hassis, 2007; Ji, Cao, & Feng, 2010; Hussein & Kim, 2018).

Karbon allotropları dışında, doğrudan gerçek yapılar değil de temel geometrik şekillere göre de takviyeli kompozit modelleme çalışmaları yapılmıştır. Örneğin (Xu, Wu, Jiao, & Liu, 2017)'de elipsoidal partiküller, (El Moumen, Kanit, Imad, & El Minor, 2015)'de küresel partiküller kullanılmıştır.

Takviyeler dışında matris malzeme olarak polimer (örneğin PET (Gómez-del Río, et al., 2010)), metal (Barai & Weng, 2011) ve seramik (Poh, Della, Ying, Goh, & Li, 2015) malzemeler kullanılmıştır.

1.3 Tezin Amacı

Mikromekanik alanındaki mevcut durumda, kompozit malzemelerin global ölçekteki davranışlarını belirlemek üzere ara bir ölçekte oluşturulacak ve istatistiksel anlamda eş değer kabul edilebilecek bir temsili hacim elemanı modeli kurulması ve bu modelin sayısal simülasyonundan elde edilecek malzeme sabitlerinin belirlenmesi şeklinde bir yaklaşım bulunmaktadır. Bu yaklaşımda modellenecek tek bir malzeme durumu bulunduğundan, alternatif bir malzeme için yeni bir model kurulması gerekmektedir.

Bunun nedeni Hill-Mandel kriteri adı verilen ve bir malzemenin elastisite tansöründen beklenen pozitif belirli olma ve simetrik olma özelliklerinin sağlanması için modelin

- belirli bir büyüklükte olması ki bu sayede sınırda uygulanan kuvvet/yer değiştirmelerdeki dalgalanmaların, homojen bir alan yaratma konusunda engel teşkil etmemesi ve
- bu büyüklükte ortalama olarak karakteri belirleyecek sayı, çeşit, dağılımda takviye unsurlarının bulunması

gerekliliğidir.

Tek takviyeli bir model kullanıldığında çok daha basit temsili hacim elemanlar yoluyla global davranış daha ekonomik olarak belirlenebilir ve bunun için tekrar tekrar model kurmaya gereksinim duyulmaz. Fisher'in tek takviyeli modelinde Hill-Mandel kriteri dikkate alınmayıp sadece boy doğrultusundaki elastisite modülü tespit edilmiştir.

Hill-Mandel kriteri gözetilerek gerçekleştirilen homojenizasyon çalışmalarında ya modeli büyük tutarak ya da ensemble ortalama adı verilen çok sayıda THE'nin ortalaması alınarak malzeme parametrelerinin bulunması yoluna gidilmektedir. Bu hesap yüküyle de ancak tek bir malzeme durumu modellenebilmektedir.

Bu tezde herhangi bir malzeme modeli için yapıtaşı olacak tek takviyeli modellerin homojenizasyonu anizotropik olarak incelenecektir. Bu sayede Fisher'in yaptığı gibi, elde edilen lokal parametreler, global ölçekteki malzemenin istatistiksel özellikleri de dikkate alınarak Mori-Tanaka gibi yöntemlerle global parametreler çok hızlı bir şekilde elde edilebilecektir.

Bu doğrultuda önce hacimsel ortalamalar aracılığıyla örnek malzeme durumlarında parametreler elde edilmeye çalışılacak ve ne kadar hata ve belirsizlik olduğu belirlenecektir. Ardından temsili hacim elemanında asıl beklenen özellik olan sınırdaki

davranışını temsil edebilecek şekilde optimizasyon temelli bir yaklaşım ortaya konacak ve hacimsel yaklaşımdaki örnekler üzerinde uygulanacaktır. Geliştirilen yöntemle Hill-Mandel kriterine uyum gözetilmeden hem davranış olarak en yakın model geliştirilecek, hem de temel malzemelerden beklenen temel kriterler ihlal edilmeyecektir.

1.4 Tezin Planı

Öncelikle ikinci bölümde homojenizasyon konusu tarihsel perspektifi ile ele alınacak ve temel kavramlar irdelenecektir. Sonraki bölümde en küçük kareler yöntemiyle malzeme parametrelerinin belirlenmesi konusuna değinilecek, incelenen örnek durumların arkasından regresyon yaklaşımının sınırlarını görebilmek üzere makine öğrenmesi yöntemiyle benzer bir çalışma ortaya konacaktır.

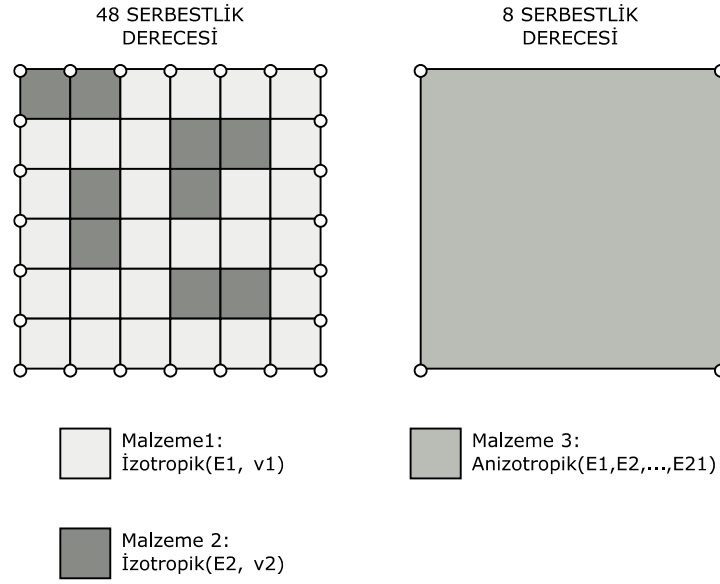
Dördüncü bölümde ise sınır davranışını temel alan ve optimizasyon temelli yaklaşım ortaya konacak ve üçüncü bölümde ele alınan örnekler üzerinde uygulanacaktır.

2. HOMOJENİZASYON

Yapısal bir analiz yapılacağı zaman akla gelen en naif yaklaşım, modeli hiçbir idealleştirmeye gitmeden, mümkün olduğunca birebir özellikte oluşturmaktır. Fakat pratikte bunu gerçekleştirmenin önünde birçok engel bulunmaktadır. İlk akla gelenler hem mikro hem makro ölçekte detaylı bir modelin kurulması, bu kurulumda ihtiyaç duyulacak bünye bilgilerinin deneysel olarak toplanması ve en sonunda bu denli karmaşık ve büyük ölçekli modelin çözülmesi için gerekli hesaplama gücünün olmamasıdır.

Makro ölçekte karmaşık bir geometriye sahip bir yapının yapısal davranışının kestirimi, sonlu elemanlar yöntemiyle her bir bileşeni basit bir geometri üzerinden tanımlı, ayırıştırılmış bir model kullanılarak, gerçek davranışın temsilinden de feragat etmeden ve makul imkanlarla gerçekleştirilebilmektedir.

Eğer yapı homojen bir malzemeden imal edilecek ise, deneysel yoldan elde edilebilecek makul sayıda elastik malzeme katsayısı bu modelde kullanılabilir. Diğer bir taraftan birden fazla bileşenden imal edilen bir kompozit malzeme kullanılacaksa ya deneysel verileri olan bileşenler tek tek modellenmeli ki bu uygulanabilir değildir, ya da bileşenlerin birlikte davranışını temsil edecek eşdeğer bir homojen malzeme kabulü yapılmalıdır. İşte heterojen bir malzemenin global ölçekteki davranışını taklit edebilecek temsili bir homojen malzemenin belirlenmesine homojenizasyon adı verilmektedir.



Şekil 2.1 : İzotropik bileşenli heterojen ve homojen anizotropik modeller.

Şekil 2.1’deki düzlemde tanımlı örnekte görüldüğü gibi heterojen durumu temsil eden modelin davranışını birebir modelleyebilmek için çevresindeki düğüm noktası x serbestlik derecesi ($24 \times 2 = 48$) sayısı kadar yer değiştirme ve kuvvetin ilişkisini kuracak bir katılık matrisi olması gerekir. Fakat bu boyutta bir matrisi tek bir eleman için kullanmak çok da ekonomik olmaz. Alternatif olarak makul sayıda serbestlik derecesine (örnekte 8) sahip bir elemana, anizotropik özellikte bir malzeme tanımlayarak ilk durumdaki problem belirli bir yakınsaklıkla modellenebilir. Özellikle gerçekçi bir problemde, 3 boyutta ve heterojen durumun çok daha karmaşık olduğu durumda gerekecek çözünürlük de dikkate alındığında homojenizasyon yaklaşımının değeri daha rahat anlaşılabilir.

1887’de Voigt’in (Voigt, 1889) çalışmalarında karışım kuralı diye bilinen en basit yaklaşımdan bu yana, hem doğrudan en uygun malzeme sabitlerinin bulunması adına, hem de belirli koşullar çerçevesinde ortaya çıkabilecek limit durumların ortaya konduğu pek çok çalışma yayınlanmıştır.

Bu bölümde öncelikle homojenizasyon konusundaki analitik yaklaşımlara değinilecektir. Eşdeğer homojen malzeme sabitlerinin alabileceği değerlerin sınırlarının belirlenmesi ve ardından Eshelby’nin mikromekanik alanına öncülük eden çalışmasıyla başlayan analitik homojenizasyon tekniklerine yer verilecektir. Daha sonra sayısal yöntemlere esas teşkil edecek Hill-Mandel şartı ile temsili hacim elemanı kavramları tanıtılacaktır. Bu vesileyle ilerleyen bölümlerde ortaya konacak tekniklerin bağlamı ve mevcut çalışmalarla ilişkisi daha iyi anlaşılabilir.

2.1 Analitik Yöntemler

Birçok alanda olduğu gibi kompozit mekaniği alanında da bilgisayarların kullanıma girmesinden önce analitik yaklaşımlar ağırlıktaydı. Bu yaklaşımların bir kısmı, matris ve takviye fazların durumları ile ilgili çok az kabul yaparak belirli limit durumları ortaya koymuştur. Diğer bir kısmı da analitik çözümü olan temel bir elastisite probleminde yola çıkarak iki veya daha çok fazdan oluşan bir malzemenin efektif malzeme özelliklerinin tespit etme yoluna gitmiştir.

Bu yaklaşımlarda yapılan kabullerin az olması belirlenen sınırların geniş olmasına ya da çözümü olan problemlerde kullanılan geometrilerin temel tiplerle sınırlı olması ancak yaklaşık bir çözüme ulaşılmasına yol açmaktadır.

2.1.1 Sınır durumlar

Sınır durumlar kronolojik olarak önce Voigt'in, ardından da Reuss'un ortaya koyduğu sınırlarla ilk kez ortaya konmuştur. 1960'lı yıllarda varyasyonel prensiplere dayanan Hashin-Shtrikman'ın (Hashin & Shtrikman, 1962) çalışması ile daha gerçekçi sınırlar belirlenmiştir. Ardından korelasyon fonksiyonları gibi ek bilgiler ışığında bu sınırlar daha da daraltılabilmektedir (Beran, 1968).

2.1.1.1 Voigt-Reuss sınırları

Voigt 1887'de polikristaller için bir eşdeğer elastisite tansörü tanımını yapmıştır (Voigt, 1889). Buna göre tüm yapıda homojen bir şekilde değiştirme kabulü kullanılmaktadır. Eşdeğer elastisite tansörü, bileşenlerin elastisite tansörlerinin hacim oranlarıyla ağırlıklandırılmış ortalamaları olarak bulunmaktadır. Örneğin iki bileşenli bir malzeme için,

$$L_{eşdeğer} = c_1 L_1 + c_2 L_2 \quad (2.1)$$

c_i hacim oranlarını, L_i elastisite tansörlerini göstermektedir.

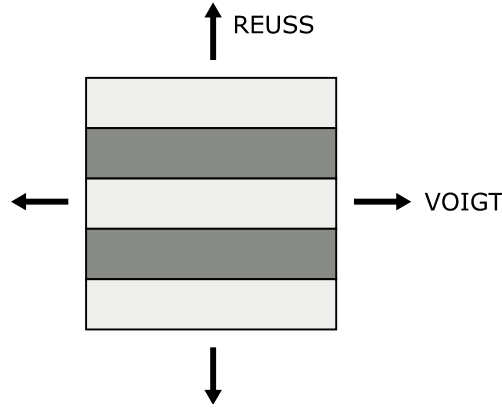
1929'da ise bir önceki kabulün dual kabulü Reuss tarafından yapılarak bu sefer alt sınırlar ifade edilmiştir (Reuß, 1929). Bu durumda da eşdeğer esneklik (compliance) matrisi, bileşenlerin esneklik matrislerinin hacim oranlarıyla ağırlıklandırılmış ortalamaları olarak bulunur. Yine iki bileşenli örnek için,

$$M_{eşdeğer} = c_1 M_1 + c_2 M_2 \quad (2.2)$$

burada da c_i hacim oranlarını, M_i esneklik tansörlerini göstermektedir. Reuss limitini elastisite modülleri üzerinden ifade edersek,

$$L_{eşdeğer} = \left(\frac{c_1}{L_1} + \frac{c_2}{L_2} \right)^{-1} \quad (2.3)$$

olarak bulunur.



Şekil 2.2 : Voigt ve Reuss durumları.

Şekil 2.2'deki örnekte görüldüğü gibi Voigt'in verdiği sınır durumda bileşenler aynı şekil değiştirmeye maruz kalır. Bu durumda elastisite sabitleri yüksek olan bileşen daha fazla gerilmeye maruz kalır. Fiber takviyeli kompozitlerin fiber doğrultularında böyle bir davranış gözlemlenir.

Diğer taraftan şekildeki Reuss durumunda, gerilmeler aynı olup, esnekliği fazla olan daha fazla şekil değiştirir. Fiber takviyeli örneğimizde bu durum fiberlere dik doğrultuda gözlemlenir.

Hill'in daha sonra da değineceğimiz 1963 yılındaki makalesinde (Hill, 1963) Voigt kabulünde bileşen sınırlarında kuvvetlerin dengede olmamasını, Reuss kabulünde ise bileşenlerin birbirleri arasında mükemmel bağlı olamayacaklarından ötürü elde edilecek değerlerin de hatalı olacağına daha sağlıklı kabullerin olabileceğine işaret etmiştir.

2.1.1.2 Hashin-Shtrikman sınırları

Hashin ve Shtrikman (Hashin & Shtrikman, 1962) efektif malzeme davranışı için olası alt ve üst sınırları varyasyon hesabı ile inceleyip, gerçekte Voigt-Reuss sınırlarından daha dar bir aralıkta olması gerektiğini göstermiştir.

Bu yaklaşımda öncelikle kompozit malzemenin sınırına yer değiştirme uygulanır. Ortaya çıkan şekil değiştirme alanının referans bir homojen malzemede olduğu kabul edilir. Fakat bu durumda denge denklemi ihlal edilmiş olur. Dolayısıyla bünye denkleminde

$$\sigma^* = L^H : \varepsilon + \tau \quad (2.4)$$

τ gibi bir ilave gerilme tansörü bileşeni varmış gibi düşünülmelidir. Bu bileşene **gerilme polarizasyon tansörü** denilmektedir.

Yukarıdaki gerilme bağıntısını denge denkleminde kullanıldığında

$$L_{ijkl}^H u_{k,lj} + \tau_{ij,j} = 0 \quad (2.5)$$

Çözümü analitik olarak elde edilebilen, sonsuz elastik bir ortamdaki kütle kuvvetine dair denge denklemi bu denklemle aynı formda olup, kütle kuvveti yerine gerilme polarizasyon tansörü konulduğunda ortaya çıkan yer değiştirme alanı Green fonksiyonları yardımıyla bulunabilir.

Minimum potansiyel enerji prensibi ve elastisite tansörünün (gerilme polarizasyon tansöründe olduğu gibi)

$$L = L^H + L^P \quad (2.6)$$

şeklinde bileşenlerine ayrıldığında, L^P tansörünün pozitif yarı belirli ve negatif yarı belirli olma durumları Hashin-Shtrikman alt ve üst limitlerini belirlemektedir (Willis, 1982). Bu da örneğin 2 bileşenli kompozit bir malzeme için, homojen referans malzemeyi matris veya takviye olarak seçerek elde edilebilir.

İzotropik 2 bileşenli ve istatistiksel olarak izotropik davranan kompozitler için limitler (Hashin, 1983):

$$K_{alt}^* = K_1 + \frac{c_2}{\frac{1}{K_2 - K_1} + \frac{3c_1}{3K_1 + 4G_1}} \quad (2.7)$$

$$K_{üst}^* = K_2 + \frac{c_1}{\frac{1}{K_1 - K_2} + \frac{3c_2}{3K_2 + 4G_2}} \quad (2.8)$$

$$G_{alt}^* = G_1 + \frac{c_2}{\frac{1}{G_2 - G_1} + \frac{6c_1(K_1 + 2G_1)}{5G_1(3K_1 + 4G_1)}} \quad (2.9)$$

$$G_{üst}^* = G_2 + \frac{c_1}{\frac{1}{G_1 - G_2} + \frac{6c_2(K_2 + 2G_2)}{5G_2(3K_2 + 4G_2)}} \quad (2.10)$$

burada K: hacim modülü ve G: kayma modülü olup, $K_1 < K_2$ ve $G_1 < G_2$.

Her ne kadar bileşenlerin geometrisi açısından bir kabul yapılmamış olsa da, bu sınırların pratikte kullanılabilmesi için bileşenlerin karşılıklı malzeme sabit oranlarının 10'u geçmemesi gerekmektedir (Hashin, 1983).

Hashin-Shtrikman sınırları ayrıca deneysel olarak da teyit edilmiştir (Watt & O'Connell, 1980).

2.1.1.3 İstatistiksel parametrelere bağlı sınırlar

Hashin-Shtrikman tarafından belirlenen sınırların daha da iyileştirilmesi için mikro-yapıyı geometrik açıdan tarif eden ilave bilgilerin göz önüne alınması gerekmektedir. Eğer bileşenlerin hacim oranları tek noktalı bir olasılık olarak düşünülürse, 2 veya daha fazla noktalı istatistiksel bilgiler kullanılarak sınırlar daraltılabilir. Beran 3 noktalı korelasyon fonksiyonları kullanarak bir teknik geliştirmiştir (Beran, 1968). Bu doğrultudaki diğer gelişmeler, kendi çalışmasını da içerecek şekilde Torquato'nun (Torquato, 2002) kitabında bulunabilir.

Bu yaklaşımlar bir iyileştirme olarak gözükse de pratikte karşılaşılan problemler nedeniyle bir faydadan söz etmek zor olmaktadır. Özellikle gerekli olan olasılık fonksiyonlarının deneysel yoldan belirlenmesinin karmaşık olması ve zaman gerektirmesi nedeniyle sabitlerin doğrudan belirlenmesine kıyasla kayda değer bir fayda sağlamadığı görülmüştür (Hashin, 1983).

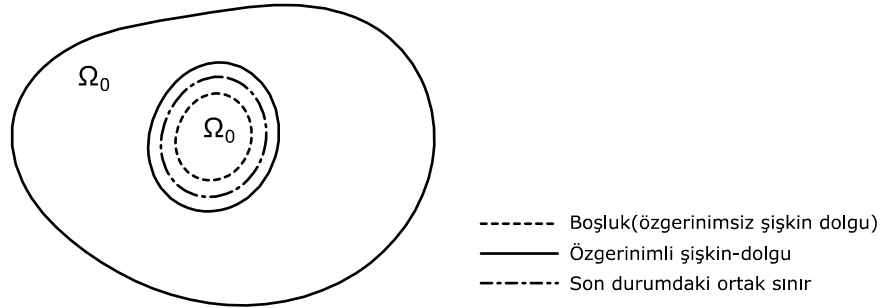
2.1.2 Yaklaşık yöntemler

Bir önceki bölümde bahsi geçen tekniklerin ortaya konmasında asıl amaç mümkün olduğunca duruma özel kabul yapmadan ve diğer taraftan temel fiziksel kanunları ihlal etmeden net sınırların belirlenmesiydi.

1957 yılında Eshelby (Eshelby, 1957) analitik çözümü daha önceden bulunmuş olan, sonsuz bir ortama yerel kütle kuvvetlerinin etki etmesi problemini, sonlu sınırlara sahip bir ortamın içerisinde farklı bir malzemeden ve elipsoidal şeklinde bir takviyeye sahip olması durumuna uyarlayarak, bir anlamda mikromekanik alanının ortaya çıkmasına vesile olmuş ve daha sonra ortaya çıkacak bir çok tekniğe de öncülük etmiştir.

2.1.2.1 Eshelby yöntemi

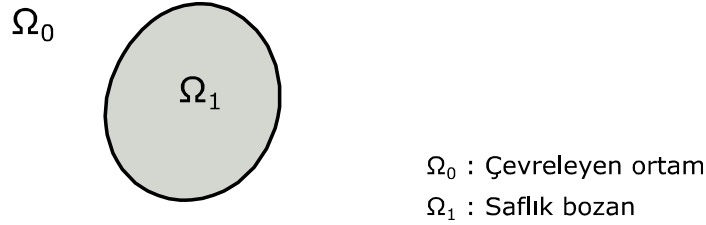
Eshelby homojenizasyon yöntemini kurgularken, malzemenin saflığını bozan iki farklı unsurdan yola çıkmıştır. İlk olarak gerilmesiz homojen bir şekil değiştirmeye (özgerinim/eigenstrain) sahip bir şişkin-dolgunun (inclusion) şekil değiştirme öncesindeki boyutlarında bir deliğe yerleştirilmesi problemini ele almıştır. Ardından bu problemin çözümünü, malzemenin bir bölgesinin farklı bir malzemeden olması ya da saflık-bozan (inhomogeneity) olması durumuna uyarlamıştır.



Şekil 2.3 : Şişkin-dolgu problemi.

Şişkin-dolgu probleminde önce izotropik ve elastik katıdan bir parça alınır (Şekil 2.3). Bu parçanın geometrisi açısından bir kısıtlama bulunmamakla birlikte eğer elipsoidal olarak kabul edilirse, çözüm saflık-bozan problemine de uygulanabilmektedir.

Alınan parça, gerilmeye maruz kalmadan homojen bir şekil değiştirmeye uğrar. Örneğin bu durum sıcaklık etkisi altında genleşme olarak gerçekleşmiş olabilir. Ardından parça sıkıştırılarak eski konumuna yerleştirilir. O durumda sınırlarından kaynatılır ve serbest bırakılır. Sonuçta parça bölgesinde homojen bir şekil değiştirme alanı oluşur ve bu durum çözümü bilinen eliptik integraller aracılığıyla hesaplanabilir.



Şekil 2.4 : Safılık-bozan problemi.

Şişkin-dolgu problemiyle ilişkili olan safılık-bozan probleminde, sonlu katı bir cisim yerine sonsuz bir ortam ele alınır (Şekil 2.4). Ayrıca bu problemde elipsoidal parça, çevreleyen ortamdan farklı elastik özelliklere sahiptir. Tüm yapıya uygulanan homojen bir gerilme alanının, safılık-bozan parçanın varlığı ile nasıl değiştiği, sadece bu parça içindeki gerilme alanının tespit edilmesiyle bulunabileceği gösterilmiştir.

Bu problemde eğer parçadaki homojen gerilmeyi sıfırlayan bir global homojen gerilme uygulanıp, parça yerinden çıkarılırsa, elipsoidal bir boşluğun yaratacağı alan da bulunabilir.

2.1.2.1.1 Şişkin-dolgu problemi

Sonsuz boyutta homojen doğrusal elastik bir cisme yerel (sonsuzda sıfıra giden) bir kütle kuvveti etki etsin. Sonsuzdaki sınırlarda da kuvvet olmasın. Bu durumda yer değiştirme alanı,

$$u_i(\mathbf{x}) = \int_{-\infty}^{\infty} f_j(\mathbf{y}) G_{ij}^{\infty}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{y} \quad (2.11)$$

olarak elde edilebilir. Burada f kütle kuvveti, G de sonsuz elastik bir bölgenin Green fonksiyonudur. Örneğin izotropik malzemeler için bu fonksiyon

$$G_{ij}^{\infty}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{16\pi\mu(1-\nu)|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \left\{ (3-4\nu)\delta_{ij} + \frac{(x_i-y_i)(x_j-y_j)}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2} \right\} \quad (2.12)$$

μ : Lamé parametresi, ν : Poisson oranı ve δ : Dirac delta fonksiyonudur.

Bu problemi şişkin-dolgu problemine uyarlamak için sonsuz ortamda ε^* şeklinde bir özgerinim (eigenstrain) alanı olduğu kabul edilsin. Bir önceki problemin denge denkleminde kütle kuvveti yerine $-L_{ijkl}\varepsilon_{kl,j}^*$ konursa, yer değiştirme alanı (Mura, 1987)

$$u_i(\mathbf{x}) = \int_{-\infty}^{\infty} L_{mjkl}\varepsilon_{kl}^*(\mathbf{y}) \frac{\partial G_{mi}^{\infty}(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial y_j} d\mathbf{y} \quad (2.13)$$

ifadesiyle elde edilir.

Eğer ε_{ij}^* 'nin sadece şişkin-dolguda sabit değerli ve çevreleyen ortamda 0 olduğu göz önüne alınırsa, integral sınırları olarak şişkin-dolgu hacmi alınabilir.

2.1.2.1.2 Tek saflık-bozan problemi

Bir önceki problemde şekil değiştirme alanı (Qu & Cherkaoui, 2006),

$$\varepsilon_{ij}^*(\mathbf{x}) = L_{klmn}\varepsilon_{mn}^*P_{ijkl}^{\Omega}(\mathbf{x}) \quad (2.14)$$

$$P_{ijkl}^{\Omega}(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} \Gamma_{ijkl}^{\infty}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) dV(\mathbf{y}) \quad (2.15)$$

$$\Gamma_{ijkl}^{\infty}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{4} \left[\frac{\partial^2 G_{ki}^{\infty}(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial x_j \partial y_l} + \frac{\partial^2 G_{kj}^{\infty}(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial x_i \partial y_l} + \frac{\partial^2 G_{li}^{\infty}(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial x_j \partial y_k} + \frac{\partial^2 G_{lj}^{\infty}(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial x_i \partial y_k} \right] \quad (2.16)$$

(2.14)'te

$$S_{ijkl}(\mathbf{x}) = L_{klmn}P_{ijmn}^{\Omega}(\mathbf{x}) \quad (2.17)$$

şeklinde bir tansör tanımlanır ve bu tansöre **Eshelby tansörü** adı verilir. Şişkin-dolgu içerisinde

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{x}) = S_{ijkl}(\mathbf{x})\varepsilon_{kl}^* \quad (2.18)$$

ile bulunabilen ve Eshelby çözümü adı verilen homojen bir şekil değiştirme durumu oluşur. Eshelby tansörü özgerinimden bağımsızdır. Sadece malzeme elastisite tansörü ve şişkin-dolgu geometrisine bağlı olarak bulunabilir. Örneğin izotropik malzemeden küresel bir şişkin-dolgu için (Mura, 1987),

$$\begin{aligned}
S_{1111} &= S_{2222} = S_{3333} = \frac{7 - 5\nu}{15(1 - \nu)} \\
S_{1122} &= S_{2233} = S_{3311} = S_{1133} = S_{2211} = S_{3322} = \frac{5\nu - 1}{15(1 - \nu)} \\
S_{1212} &= S_{2323} = S_{3131} = \frac{4 - 5\nu}{15(1 - \nu)}
\end{aligned} \tag{2.19}$$

Saflık-bozan probleminin çözümün elde etmek için şişkin-dolgu problemi referans alındığında önce sonlu bir cisimde σ^0 gerilme alanı olduğu kabul edilir. Başlangıçta cisim homojen malzemeden olup, ikinci aşamada cismin bir bölgesi saflık-bozan farklı bir malzemeye değiştirilir. Bu durumda gerilme alanının son durumu

$$\sigma^T = \sigma^0 + \sigma \tag{2.20}$$

olur. σ başlangıçtaki gerilmedeki değişikliği gösterir. Yine aynı gösterimle şekil değiştirme alanındaki değişim de ε ile gösterilsin. Son durumda Hooke Yasası gereği,

$$\sigma^T = \begin{cases} L_1(\varepsilon^0 + \varepsilon) & \text{saflık-bozan içinde} \\ L_0(\varepsilon^0 + \varepsilon) & \text{saflık-bozan dışında} \end{cases} \tag{2.21}$$

Şişkin-dolgu problemindeki özgerinimin, saflık-bozan etkiyi simüle etmesi amaçlanmaktadır. Şişkin-dolgu probleminde Hooke Yasası

$$\sigma^T = \begin{cases} L_0(\varepsilon^0 + \varepsilon - \varepsilon^*) & \text{şişkin-dolgu içinde} \\ L_0(\varepsilon^0 + \varepsilon) & \text{şişkin-dolgu dışında} \end{cases} \tag{2.22}$$

Şişkin-dolgu ile saflık-bozan içerisindeki gerilme alanını aynı yapacak özgerinimi bulmak üzere, Eshelby çözümü de kullanılarak

$$L_0(\varepsilon^0 + S\varepsilon^* - \varepsilon^*) = L_1(\varepsilon^0 + S\varepsilon^*) \tag{2.23}$$

elde edilir. Son şekil değiştirme alanını, homojen ilk şekil değiştirme alanı ile olan ilişkisini tekrar yazarsak

$$\varepsilon^t = \varepsilon^0 + \varepsilon = \varepsilon^0 + S\varepsilon^* = T\varepsilon^0 \tag{2.24}$$

burada T ,

$$\mathbf{T} = [\mathbf{I} + \mathbf{S}\mathbf{L}_0^{-1}(\mathbf{L}_1 - \mathbf{L}_0)]^{-1} \quad (2.25)$$

ile bulunur ve gerinim yoğunlaştırma tansörü adını alır.

Böylece tek bir saflık-bozan olması durumundaki şekil değiştirme alanı, şişkin-dolgu problemi analojisi kullanılarak bulunmuş oldu. Bu çözüm hala daha tek bir saflık-bozan durumu için geçerlidir. Önümüzdeki bölümden itibaren gerçek problemlere uygulanabilecek çoklu problem çözümlerine değinilecektir.

2.1.2.1.3 Çoklu saflık-bozan problemi

Homojenizasyonda temel amaç, N adet farklı malzemeden saflık-bozan barındıran bir kompozitin efektif malzeme sabitlerinin bulunmasıdır. Bir önceki bölümde sözü edilen gerinim yoğunlaştırma tansörü, benzer bir yaklaşımla

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_r = \mathbf{T}_r \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad (2.26)$$

global ortalama şekil değiştirmeyi, saflık-bozan içindeki ortalama şekil değiştirmeye ilişkilendirir.

Gerilme ve şekil değiştirmelerin global ortalamaları

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = c_0 \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_0 + \sum_{r=1}^N c_r \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_r \quad (2.27)$$

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = c_0 \mathbf{L}_0 \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_0 + \sum_{r=1}^N c_r \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_r \quad (2.28)$$

buradan global gerilme şekil değiştirme ilişkisi

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \left[\mathbf{L}_0 + \sum_{r=1}^N c_r (\mathbf{L}_r - \mathbf{L}_0) \mathbf{T}_r \right] \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad (2.29)$$

olarak bulunur. c hacim yüzdesini, 0 indisi matris fazını, diğer indisler de saflık-bozanları göstermektedir. Köşeli parantez içindeki ifade de global anlamda efektif elastisite tansörü $\bar{\mathbf{L}}$ rolü oynar.

Eshelby yönteminde saflık-bozan, diğer saflık-bozanlardan uzakta bulunur. Böylelikle saflık-bozanlar arası etkileşimin az olduğu kabul edilir. Başlangıçta cisme uygulanan

şekil değiştirme alanı ε^0 , sadece matris malzemeden oluşan (L^0) bir cisme uygulanmış gibi düşünülürse, (2.28)'deki gerinim yoğunlaştırma tansörü,

$$\mathbf{T}_r = [\mathbf{I} + \mathbf{S}_r \mathbf{L}_0^{-1} (\mathbf{L}_r - \mathbf{L}_0)]^{-1} \quad (2.30)$$

ile bulunur.

2.1.2.2 Mori-Tanaka yöntemi

Mori ve Tanaka (Mori & Tanaka, 1973), Eshelby yöntemindeki saflık-bozanların seyrek oldukları kabulü yerine saflık-bozanlar arası etkileşimi mümkün kılacak kadar daha yüksek yoğunluklara uygun bir yaklaşım geliştirmiştir. En önemli farklılık, cismin başlangıçta maruz kaldığı şekil değiştirmeyi sadece matris malzemeden cismin maruz kaldığı ε^0 değil, saflık-bozanların da olduğu kompozit malzemede görülebilecek $\bar{\varepsilon}_0$ ortalama şekil değiştirme olarak kabul eder.

Bu kabulle efektif elastisite tansörü

$$\bar{\mathbf{L}} = \sum_{r=0}^N c_r \mathbf{L}_r \mathbf{T}_r \left[\sum_{n=0}^N c_n \mathbf{T}_n \right]^{-1} \quad (2.31)$$

ile bulunur. Gerinim yoğunlaştırma tansörü, Eshelby Yöntemiyle aynıdır.

2.1.2.3 Kendinden tutarlı (self-consistent) yöntem

Bu yaklaşımda ise Mori-Tanaka'nın başlangıçtaki şekil değiştirme durumu olarak, bütün saflık-bozanların var olduğu kabulü gibi, ilaveten malzeme elastisite tansörünü de matris malzeme değil, en sonda bulunacak efektif elastisite tansörü olarak kabul eder (Hill, 1965).

Bunun sonucunda efektif elastisite tansörü,

$$\bar{\mathbf{L}} = \mathbf{L}_0 + \sum_{r=1}^N c_r (\mathbf{L}_r - \mathbf{L}_0) \bar{\mathbf{T}}_r \quad (2.32)$$

ve gerinim yoğunlaştırma tansörü de,

$$\bar{\mathbf{T}}_r = [\mathbf{I} + \bar{\mathbf{S}}_r \bar{\mathbf{L}}^{-1} (\mathbf{L}_r - \bar{\mathbf{L}})]^{-1} \quad (2.33)$$

şeklinde bulunur.

Mori-Tanaka'ya nazaran daha gerçekçi kabuller altında bulunulmuş olmasına rağmen dikkat edilirse $\bar{L}$ tansörü denklemin her iki tarafında da yer almakta ve bu nedenle kapalı formdaki bu ifadenin çözümü için iteratif yollara başvurulmalıdır. Bu da çözüm maliyetini önemli ölçüde arttırmaktadır.

2.2 Sayısal Yöntemler

Homojenizasyonda temel amaç kompozit bir malzeme için global gerilme ve şekil değiştirme alanlarını birbiriyle ilişkilendirecek efektif bir elastisite tansörünün bulunmasıdır. Diğer bir deyişle

$$\langle \sigma \rangle = \bar{L} \langle \varepsilon \rangle \quad (2.34)$$

ifadesindeki $\bar{L}$ tansörünün bulunması amaçlanmaktadır.

Önceki bölümlerde hacim oranları gibi çok basit parametreler üzerinden yapılan kabullerle kurulan sınır durumlar ile saflık-bozan geometrileri, hacim içerisinde dağılımları gibi kabuller çerçevesinde analitik yöntemlerle bulunabilecek çözümler ortaya kondu.

Daha karmaşık geometriler, fazlar arası yüksek elastik sabit oranları gibi faktörler ile bu yaklaşımlardan elde edilen çıktıların pratik faydaları azalmaktadır. Bu nedenle birçok alanda olduğu gibi homojenizasyon için de sıklıkla sayısal yöntemlere başvurulmaktadır.

Sayısal yöntemlerdeki yaklaşım, aslında fiziksel bir deney yürütme ile prensipte aynıdır. Uygun sınır/yüklem koşulları altında cismin cevabına göre elastik sabitlerin elde edilmesi amaçlanır. Fakat bu yaklaşımların global davranışı temsil edebilmesi için belli şartlar bulunmaktadır.

2.2.1 Temsili hacim elemanı (THE)

Mekanik deneylerde kullanılacak olan numunelerin üretim yöntemi, geometrisi, deney aletine nasıl bağlanacağı gibi hususlar önem arz eder. Aynı şekilde sayısal bir yöntem aracılığıyla benzer bir işlem için de özellikle numunenin geometrisi önemli rol oynar. Burada kastedilen geometri şekilden ziyade, modelin büyüklüğü olup heterojen malzemeyi istatistiksel olarak temsil edecek kadar büyük bir model belirlenmelidir.

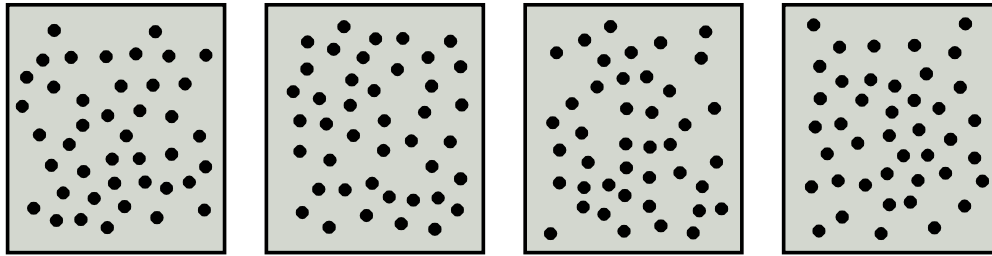
Temsili modelin büyüklüğünü belirlerken ölçek ayrımı adı verilebilecek bir kavrama dikkat etmek gerekir. Buna göre dört adet büyüklük arasında ölçek bazında bir farklılık olmalıdır (Zaoui, 2002). Sürekli ortamlar mekaniği kabullerinin geçerli olduğu en düşük boyuta d_0 , saflık-bozanların tipik boyutuna d , temsili hacim elemanı (THE) adı verilen ve kompozit malzemeyi istatistiksel olarak temsil edebilecek büyüklükteki modelin boyutuna l ve son olarak modellenecek yapının global boyutu L ile gösterilirse,

$$d_0 \ll d \ll l \ll L \quad (2.35)$$

şeklinde bahsi geçen kavramların merteye farklılıkları bulunması gerekmektedir.

Temsili hacim elemanın, malzemeyi istatistiksel olarak temsil edebilme durumu matematikte ergodik olma kavramıyla irdelenir. Ergodik bir modelde belirli bir mesafede iki nokta arasındaki farklılık, zamansal ve mekânsal olarak değişmez.

THE, rasgele üretilen, bileşenlerin hacim oranları, malzeme sabitleri, geometrileri gibi parametrik özellikleri koruyan bir modeldir. Yani bu parametrelere sahip sonsuz sayıda THE üretilir. THE'nin bu olası örneklemelerinin sayısı arttıkça efektif özelliklerin ortalaması (ensemble ortalama adı verilir) belirli bir değere yakınsar. Bu durum zamansal değişmezlik olarak nitelendirilebilir.



Şekil 2.5 : THE örneklemeleri.

Şekil 2.5'te görüldüğü gibi THE örneklemeleri birbirinden farklı olup, belirli özelliklerin ortalamaları istatistiksel efektif değerlere yakınsayacaktır.

Diğer bir taraftan alternatif bir yol olarak THE'nin boyutunun büyütülmesi yoluyla da efektif değerlere ulaşılabilir. Fakat bu değerlere ancak sonsuzdaki limitte ulaşılabilir. Pratikte ise bunu yapmak mümkün olmadığı gibi (2.35) no'lu denklemdeki l harfiyle gösterilen ölçek mertebesine de uyulmalıdır.

Bu noktada ensemble ortalamasının, THE örneklem boyutlarının yeterince büyük olmasa da efektif değerlere ulaştırdığı gösterilmiştir (Huet, 1990).

THE'nin bir örneklemini oluşturmak üzere, örneğin bileşenlerin hacim oranları ve geometrileri gibi belirli özellikleri istatistiksel olarak sağlayan modeller üretilmesi gerekir. Takviye hacim yoğunlukları arttıkça, THE'leri rasgele üretirken takviyelerin girişim olasılığı artar. Bu problemin üstesinden gelmek üzere bazı algoritmalar geliştirilmiştir. Örneğin en popüler algoritmalarından biri olan RSA'da takviyeler tek tek önce eklenir, sonra girişim kontrolü yapılır ve girişim görüldüğünde o takviye iptal edilir ve yeni random üretilen takviyeye geçilir (Feder, 1980).

2.2.2 Hill Mandel koşulu

Temsili hacim elemanının yeterince büyük olduğu durumlarda, heterojen malzemelerden elde edilen sabitlerle homojen eşdeğer malzeme sabitleri bulunabilmektedir. Ama boyut küçülünce özellikle sınırlardaki gerilme veya şekil değiştirme dağılımları bu eşdeğerliği bozmaktadır.

Elastisite teorisinde şekil değiştirme enerjisi esas alındığında iki önemli sonuca varılır:

1. Elastisite tansörü pozitif belirli olmalıdır.
2. Elastisite tansörü simetrik olmalıdır.

THE'nin yeterince büyük olduğu durumlarda elde edilen efektif elastisite tansörlerinde bu şartlara uygun sonuçlar elde edilmiştir.

Daha küçük boyutlu THE'lerde ise Hill (Hill, 1963) sadece belirli sınır koşullarında bu şartlara uygunluk sağlanacağını göstermiştir.

Efektif değerleri göstermek üzere T tansörünün hacimsel ortalaması,

$$\langle T \rangle = \frac{1}{V} \int_V T dV \quad (2.36)$$

şeklinde verilmek üzere,

Hill-Mandel koşuluna göre

$$\langle \sigma \varepsilon \rangle = \langle \sigma \rangle \langle \varepsilon \rangle \quad (2.37)$$

olur. Yani yereldeki enerji yoğunluklarının hacim ortalaması, gerilme ve şekil değiştirmelerin hacim ortalamalarının çarpımına eşit olmalıdır. Bu koşul aşağıda belirtilen 3 farklı sınır şartı tipinde sağlanmaktadır:

- Statik düzgün sınır şartı (SUBC)

$$u(x) = \langle \varepsilon \rangle x \quad (2.38)$$

- Kinematik düzgün sınır şartı (KUBC)

$$t(x) = \langle \sigma \rangle n \quad (2.39)$$

- Periyodik sınır şartı (PBC)

$$u(x + L) = u(x) + \langle \varepsilon \rangle L \quad (2.40)$$

veya

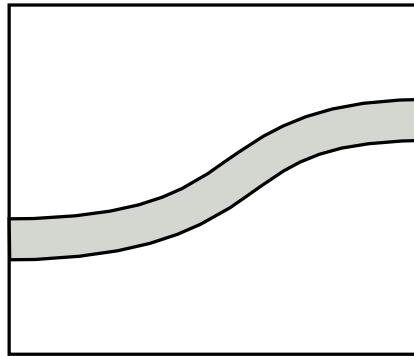
$$t(x + L) = -t(x) \quad (2.41)$$

burada L periyodu, u yer değiştirmeyi, t gerilme vektörünü (traction) göstermektedir.

Model bu sınır şartları altında her ne kadar büyüklük olarak THE kabul edilebilecek seviyede olmasa da, lokal-global enerji tutarlılığına sahip olur. Fakat SUBC ve KUBC yüklemeleriyle elde edilecek katılık ve compliance matrislerinde (birbirlerine göre tersleri alındığında) farklılık ortaya çıkar. Bu durum iki bileşenli bir kompozit için (Ostoja-Starzewski, 1998) çalışmasında gösterilmiştir.

2.2.3 Fisher'in yaklaşımı

Fisher 2003 senesinde karbon nanotüp takviyeli kompozitlerin homojenizasyonu üzerine bir çalışma yayınladı. Bu çalışmada nanotüplerdeki eğriselliğin, malzemenin efektif elastik özelliklerine olan etkisi incelenmiştir. Önceki THE yaklaşımlarından farklı olarak, Fisher bu çalışmada Şekil 2.6'da da görüldüğü gibi içerisinde yalnızca bir adet takviye bulunan bir THE kurgulamıştır (Fisher, Bradshaw, & Brinson, 2003). Böyle bir THE önceki bölümlerde belirtilen büyüklük kriterinden oldukça uzaktır.



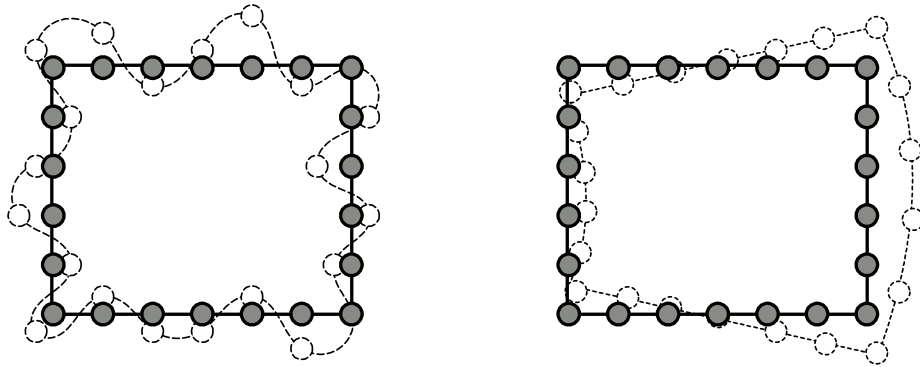
Şekil 2.6 : Fisher'in tek KNT'li modeli.

Eğriselliğin etkisini incelemek üzere tek eksenli bir çekme simülasyonu kurgulanmış ve sonuç olarak boy doğrultusunda geçerli efektif elastik malzeme sabiti bulunmuştur. Sadece tek bir malzeme sabiti için yapılan bu basit homojenizasyon uygulamasını, deneysel çalışmalardan elde edilen eğrilik, hacim oranı gibi istatistikleri de göz önüne alarak Mori-Tanaka yöntemiyle global bir homojenizasyon tekniğine dönüştürmüştür.

Fisher lokal homojenizasyon gerçekleştirirken tek bir malzeme sabitini dikkate alarak takviye için izotropik malzeme kabulü yapmıştır. Bu tez çalışmasında Fisher'in uygulamasına benzer şekilde ama bu sefer malzeme için anizotropik katsayıların tespit edilmesi yoluna gidilecektir.

Anizotropik katsayıları belirlemek üzere ensemble yaklaşımındaki gibi sadece büyüklüklerin farklı örneklemdeki istatistiksel denkliliği referans alınmayacaktır. Çünkü tek bir takviye söz konusu olduğunda istatistiksel olarak eş başka örneklemelerin üretilmesi mümkün değildir. Bunun yerine doğrudan tek bir örneklemin farklı sınır şartlarına cevabı kullanılacaktır.

Farklı sınır şartları olarak tüm sınır düğüm noktalarına belirli aralıklarda rasgele yer değiştirme uygulama şeklinde olabileceği gibi (bu tezin 3. bölümü), bunun çok pratik olamayacağı ve sınırlı sayıda etkili durumu göz önüne almak adına doğal titreşim mod şekillerinden yola çıkılarak elde edilecek sınır şartları da (bu tezin 4. bölümü) uygulanabilir (Şekil 2.7).



Şekil 2.7 : Rasgele ve mod-şekli sınır şartı.

Literatürde birçok çalışmada sorgulanmadan koşulsuz şartsız Hill koşuluna uygunluk referans alınmaktadır. Fakat Hashin'in (Hashin, 1983) makalesinde, homojen bir alan yaratan sınır koşullarının uygulanmasını (SUBC, KUBC, PBC) İngilizce expedient kelimesiyle nitelendirerek bu uygulamanın faydalı ama, şart olmayacağı yorumunu yapmıştır.

Önümüzdeki bölümden itibaren tek takviyeli THE'lerin farklı sınır koşullarındaki davranışlarından elde edilen bilgiler ışığında homojenizasyon teknikleri ortaya konacak ve sonuçları tartışılacaktır.

3. TEK TAKVİYELİ THE HOMOJENİZASYONU: HACİMSEL YAKLAŞIM – EN KÜÇÜK KARELER

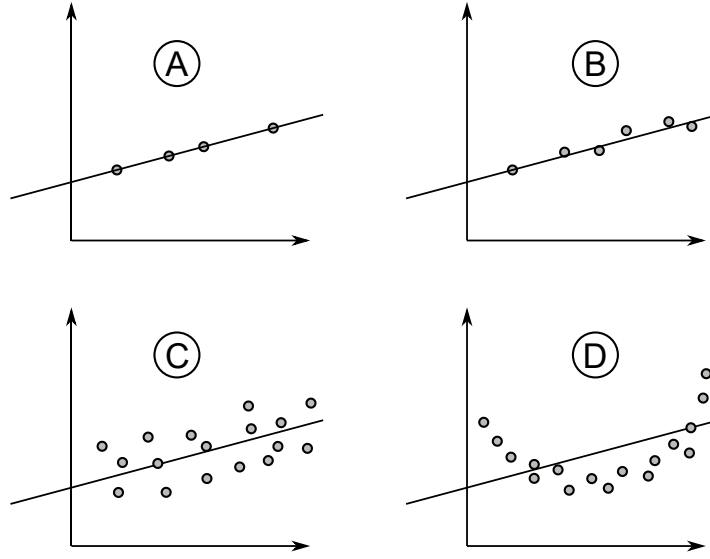
Geçtiğimiz bölümde kompozit malzemelerin homojenizasyonu teorisinden ve analitik ve sayısal yaklaşımlarından bahsedilmişti. Buna göre analitik yaklaşımlarla takviyelerin basit geometrileri olduğu ve çevredeki diğer takviyelerle bir etkileşimin olup olmadığına göre çözümler bulunmaktadır. Basit geometrilerin yetersiz kalabileceği durumlarla ilgili olarak da temsili hacim elemanı yaklaşımı ve bu yaklaşımın uygulanabilmesi için THE'nin sahip olması gereken özellikler ortaya kondu.

Bu bölümde ise karbon nanotüp takviyeli kompozitler için THE yaklaşımı ele alınacaktır. Literatürde sıklıkla başvurulduğu gibi tek takviyeli bir model üzerinden gerçekleştirilecek homojenizasyon, Hill-Mandel şartlarına uygunluk göstermemesi nedeniyle sadece standart yükleme şartları üzerinden elde edilecek sonuçlar güvenilir olmayacaktır. Bu nedenle ortaya çıkacak belirsizliklerin de belirlenebilmesi açısından çok sayıda farklı yükleme şartı dikkate alınacak ve bu verilerle kurgulanacak en küçük kareler regresyonu işlemiyle hem malzeme sabitleri belirlenecek, hem de sabitlerdeki belirsizlikle gerilme ve şekil değiştirme durumlarının hacimsel ortalamaların arasındaki doğrusal ilişki durumu sorgulanacaktır.

Bu doğrultuda önce en küçük kareler regresyonuna değinilip ardından incelenecek örnek durumlar ortaya konacaktır. Regresyon sonuçlarının sunumunu takiben hacimsel ortalamalar için ilave olarak makine öğrenmesi yaklaşımıyla bir regresyon analizi daha gerçekleştirilecektir.

3.1 En Küçük Kareler Regresyonu

En basitten başlamak üzere düzlemde doğru denklemini ele alalım: $y=A+Bx$. Burada amaçlanan x uzayından y uzayına doğrusal bir dönüşümdür. Sadece iki parametre ile (örneğin iki noktanın konumu) bu dönüşüm tanımlanabilir. Her bir x için tanımlı bir y değeri vardır, belirsizlik yoktur (Şekil 3.1-A).



Şekil 3.1 : İnterpolasyon ve regresyon.

Gerçek hayatta yapılan ölçümlerde belirli bir hassasiyet seviyesi vardır. Yöntemin sınırları, ortam gürültüsü veya kontrol dışı faktörlerle ölçümlerde hata vardır. Ayrıca ölçüm yapılan olgu, çok karmaşık faktörlere bağlı olarak ortaya çıkabilir ve bu da ideal bir davranıştan uzaklaştırabilir.

Fakat yine de örneklemelere bakıldığında kimi zaman neredeyse doğrusal bir ilişki gözlemlenebilir. Bu da gürültü veya numunedeki hataları vs. ihmal ettiğimizde aslında tam bir doğrusallık olduğu şeklinde yorumlanır (Şekil 3.1-B).

Diğer zamanlarda ilişki bir orantılılık barındırabilir ama belirsizlik de ihmal edilemeyecek kadar büyük olabilir. Böyle durumlarda da belirsizliği akıldan çıkarmadan hala daha bu modelle faydalı sonuçlar elde edilebilir (Şekil 3.1-C).

Son olarak üçüncü duruma benzer bir durum daha vardır. Fakat burada ortaya çıkan belirsizlik aslında yapay bir belirsizliktir. Tamamen deterministik olarak elde edilen verilere baktığımızda, ortada büyük bir belirsizlik yoktur fakat doğrusal model ile modellenecek kadar basit bir durum olmadığından ötürü, doğrusal modelle açıklanamayacak farklılıklar belirsizlik olarak kabul edilebilir (Şekil 3.1-D).

Basit bir doğrusal regresyon modeli veya son dönemde popülaritesi artan makine öğrenmesi teknikleri ile karmaşık durumlar, bir miktar belirsizlik pahasına yaklaşık olarak modellenebilir. Örneğin optimizasyon çalışmalarında karmaşık modellerin

yerine, az sayıda parametre ile ifade edilen ve belli bir miktar hata payı olan ama çok hızlı modeller olarak karşımıza çıkmaktadır.

Literatürde heterojen malzemelerin homojenleştirilmiş malzeme katsayılarının, malzemenin davranışını yüzde yüz temsil edemeyeceği zaten bilinmektedir. Fakat yine de Hill-Mandel koşullarına en uzak örnekler olan tek takviyeli basit modellerde regresyon yoluyla elde edilecek malzeme sabitlerindeki belirsizliklerin belirlenmesi, efektif malzeme sabitleri yoluyla elde edilen tahmini “gerilmenin hacimsel ortalaması” değerleri gibi çıktıların hesaplanıp incelenmesi bu ölçekteki modellerle ilgili olarak hacimsel yaklaşımın sınırlarını ortaya koyacaktır.

Malzeme parametrelerinin birden fazla olması nedeniyle regresyon modelinin de çok değişkenli olacağından ötürü öncelikle bu doğrultuda gerekli ifadeler türetilecek, fakat regresyon analizi değerlendirmeleri örnek çalışma ortaya konduğunda hem açıklanacak hem de uygulanacaktır.

3.1.1 Çok değişkenli doğrusal regresyon

En yüksek seviyede simetriye sahip malzeme modeli olan izotropik malzemelerde bile 2 adet parametre olduğu göz önüne alınırsa, regresyonun da çok değişkenli olması gerekmektedir. Çok değişkenli regresyon modeli:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_k x_k + \varepsilon \quad (3.1)$$

denkleminle ifade edilebilir. Burada x_i regresyon değişkenlerini, β_i regresyon katsayılarını ve ε da ortalaması 0, standart sapması σ olan rasgele hata terimidir. Regresyonda amacımız, örneklem olarak ele alınan $x - y$ veri setini (burada x 2 boyutlu ve y bir boyutlu matrisler) kullanarak belirli bir hata normu çerçevesinde en az hatayı yapan regresyon katsayılarının bulunmasıdır.

Doğrusal regresyonda değişkenler arası etkileşim veya değişkenlerin daha yüksek derecelerden etkileri de yer alabilir. Örneğin,

$$\beta_3 x_1 x_2 + \beta_4 x_1^3 \quad (3.2)$$

ifadesindeki terimlerde ilk terim regresyon değişkenleri arası etkileşimi, ikinci terim de bir değişkenin yüksek dereceden etkilerini göz önüne almaktadır. Doğrusal elastisite kapsamında bünye denkleminde regresyon değişkenleri olarak malzeme

parametreleri ele alındığında ne etkileşim, ne de yüksek dereceli terimler kullanılmamaktadır.

Aslında bu tip terimler yerine göre kurulan modelin hem hata oranını hem de genelleştirebilme yeteneğini arttırabilir. Fakat tez kapsamında doğrusal elastisitedeki standart model kullanılacak olup, sadece potansiyel bir iyileşme olup olmadığını görmek üzere sadece buradaki terimler değil, makine öğrenmesi adı altındaki daha yenilikçi modeller ve yardımcı teknikler kullanılacaktır.

Regresyon konusuna geri dönersek, çok değişkenli regresyonda ifadelerin daha sade bir şekilde ifade edilebilmesi için sıklıkla matris gösteriminden faydalanılmaktadır. Buna göre (kalın punto harf/semboller matris veya vektör olduğunu göstermek üzere),

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (3.3)$$

ile n adet gözlemin oluşturduğu denklem sistemi ifade edilmektedir. Burada,

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \quad \mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1k} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nk} \end{bmatrix} \\ \boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_k \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.4)$$

$\mathbf{X}$ matrisindeki 1'lerden oluşan ilk sütun, sabit terimlerin modele dahil edilebilmesi için kullanılmaktadır.

Amaç, hata terimlerinin karelerinin toplamını minimize edecek şekilde $\boldsymbol{\beta}$ terimlerinin tahmini değerlerini bulmaktır:

$$\min_{\boldsymbol{\beta}} \boldsymbol{\varepsilon}^T \boldsymbol{\varepsilon} \quad (3.5)$$

Hata terimini diğer terimler cinsinden ifade edersek,

$$\boldsymbol{\varepsilon}^T \boldsymbol{\varepsilon} = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^T (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) \quad (3.6)$$

çarpımı yaptıktan sonra,

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\varepsilon}^T \boldsymbol{\varepsilon} &= \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y} - \mathbf{y}^T \mathbf{X} \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} \boldsymbol{\beta} \\ &= \mathbf{y}^T \mathbf{y} - 2\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y} + \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} \boldsymbol{\beta}\end{aligned}\quad (3.7)$$

Bu ifadenin $\boldsymbol{\beta}$ 'ya göre minimumunu bulmak için türevi sıfıra eşitlenir,

$$\left. \frac{\partial(\mathbf{y}^T \mathbf{y} - 2\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y} + \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} \boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} \right|_{\hat{\boldsymbol{\beta}}} = -2\mathbf{X}^T \mathbf{y} + 2\mathbf{X}^T \mathbf{X} \hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{0} \quad (3.8)$$

Sonuç olarak regresyon katsayıları (eğer $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$ mevcutsa):

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} \quad (3.9)$$

ile bulunur. Sağ taraftaki $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T$ kısmı, $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 'nın yanındaki ifadenin bir nevi tersi gibi düşünülebilir. Dikdörtgen matrisler için bu sahte ters alma işlemine Moore-Penrose genelleştirilmiş tersi adı verilir.

Moore-Penrose genelleştirilmiş tersin bulunabilmesi için regresyon değişkenleri doğrusal bağımsız olmalıdır. Fakat tez kapsamında ele alacağımız modelde bu konuda bir sorun ortaya çıkacak ve uygun bir çözüm uygulanacaktır.

Elde edilen regresyon katsayılarını kullanarak tahmini y değerlerini ($\hat{y}$) bulmak istersek,

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X} \hat{\boldsymbol{\beta}} \quad (3.10)$$

ifadesindeki gibi regresyon katsayıları vektörü ile tahmin yapılacak yeni x noktalarının oluşturduğu matris çarpılmalıdır.

Eğer bu tahmin yapılacak noktalardaki gerçek değerler elimizde mevcutsa, hata (daha sık kullanılan tabirle artık değerler):

$$\mathbf{e} = \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}} \quad (3.11)$$

Bu noktada modele veya verilere hiç müdahale etmeden nasıl regresyon katsayılarının bulunacağı gösterilmiş oldu. Kurulan regresyon modelinin analizi ile ilgili bazı yardımcı grafik tabanlı ve istatistiksel analiz araçları, üzerinde çalışılacak olan tezin asıl örnek çalışmaları üzerinde açıklanıp uygulanacaktır.

Bu nedenle regresyon konusuna ara verilip, bir sonraki bölümde malzeme parametreleri için regresyon probleminin nasıl kurgulanacağı ele alınacaktır.

3.1.2 Malzeme katsayıları için regresyon

Hill-Mandel koşulları, temsili hacim elemanının büyüklüğü ile ilgili olarak, hacimsel ortalamalar üzerinden malzeme katsayılarının bulunabilmesi için tanımlanmıştır. Yeterince büyük olan bir THE’de işlem kolaylığı da sağlaması nedeniyle düzgün yer değiştirme yükleriyle hacimsel ortalamalar bulunur ve buradan malzeme sabitlerine ulaşılır. Örneğin,

$$\begin{bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \tau_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_1 & E_4 & E_5 \\ . & E_2 & E_6 \\ . & . & E_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \\ \gamma_{xy} \end{bmatrix} \quad (3.12)$$

denkleminde, gerilme ve şekil değiştirme değerleri hacimsel ortalama olarak düşünülürse, her seferinde bir şekil değiştirme değeri düzgün yüklemeyle elde edilip diğer şekil değiştirme ortalamaları da sıfırda tutularak malzeme matrisindeki 3 sütun tek tek bulunabilir.

Literatürde, orijinal referansta yer almayıp, ama sanki şartlara uygunluk bakımından olmazsa olmaz bir koşul gibi uygulanan bu sınır şartları yerine herhangi bir yükleme şartı altındaki hacimsel ortalamalar da kullanılabilir. Sonuç Hill-Mandel şartına uygun THE’ler için değişmeyecektir.

Yine yukarıdaki örnekte görüleceği gibi, malzeme sabitlerinin bulunması için 3 farklı yükleme durumu gerekmektedir. Fakat Hill-Mandel şartına uymayan daha küçük ölçeklerdeki THE’lerde her farklı yükleme, farklı malzeme sabitlerine götürecektir. Problemin, mümkün mertebe azami çeşitlilikteki sınır koşullarına göre çözülüp, elde edilen veriler ışığında en az hatayla temsil eden sabitlerin bulunması amacıyla artık denklem çözümü değil fazla belirlenmiş sistemler için kullanılan regresyon analizi yapılmalıdır.

Her bir analiz için gerekli süre ve belirlenmesi gereken malzeme sabiti sayısının makul seviyelerde kalmasını sağlamak üzere düzlem gerilme problemi ele alınacaktır. Bir sonraki bölümde bu model hakkında bilgi verilecektir.

3.1.3 Düzlem gerilme

Bir boyutu diğer iki boyutuna göre çok küçük olan problemlerde (örneğin yüklemeleri düzlemde kalan ince levhalar), düzlem normali doğrultusundaki gerilmelerin sıfır kabul edildiği ideal modele düzlem gerilme adı verilmektedir. 3 gerilme bileşeni $\sigma_z =$

$\tau_{yz} = \tau_{xz} = 0$ olup, z yönünde şekil değiştirmeler sıfırdan farklıdır. Anizotropi açısından, simetri durumu olarak bir kabul yapılmaksızın triklinik malzeme olarak nitelendirilebileceği gibi, düzlemine göre doğal olarak bir simetri arz ettiğinden ötürü monoklinik malzeme olarak da değerlendirilebilir.

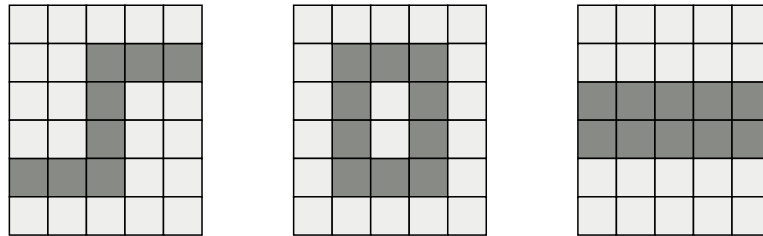
Tez kapsamında gerçekleştirilen sonlu elemanlar analizleri Ansys yazılımı üzerinden gerçekleştirilmiştir. Ansys'te düzlem gerilme modeline ait bünye modeli,

$$\begin{bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z = 0 \\ \tau_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_{11} & E_{21} & E_{31} & E_{41} \\ . & E_{22} & E_{32} & E_{42} \\ . & . & E_{33} & E_{43} \\ . & . & . & E_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \\ \varepsilon_z \\ \gamma_{xy} \end{bmatrix} \quad (3.13)$$

olarak tanımlanmıştır. Görüldüğü gibi 10 elastik sabit bulunmaktadır ama denklem sisteminde σ_z teriminin sıfır olmasıyla bir kısıt da bulunmaktadır. Malzeme sabitlerinin de bağımsız değişkenler olduğu dikkate alınırsa, ε, γ terimlerinin birbirine bağımlı olması gerekmektedir. Bunun da regresyon için ilerleyen bölümlerde problem teşkil edeceği görülecektir.

3.1.4 Örnek çalışma

Önceki bölümde değinildiği gibi, problemin sadeliğini korumak adına düzlem gerilme modelinden faydalanılacaktır. Geometri olarak, basit sınır şartlarının uygulanabilmesi ve sonraki çalışmalarda kolaylıkla tekrar üretilebilmesi açısından temsili hacim elemanı geometrisi dikdörtgen olarak belirlenmiştir. Benzer gerekçelerle bu dikdörtgen bölgeden, kare biçimindeki elemanlardan oluşan bir ağ yapısı oluşturulmuştur.



Şekil 3.2 : Örnek durumlar.

Şekil 3.2’de görüldüğü gibi 6x5 elemandan oluşan bir ağ yapısı kurgulanmıştır. İki malzeme fazı, farklı dağılımların etkilerini incelemek üzere 3 farklı dağılımda kullanılmıştır. Bu üç farklı dağılıma bundan sonra (şekildeki sırayla) S, O ve Y

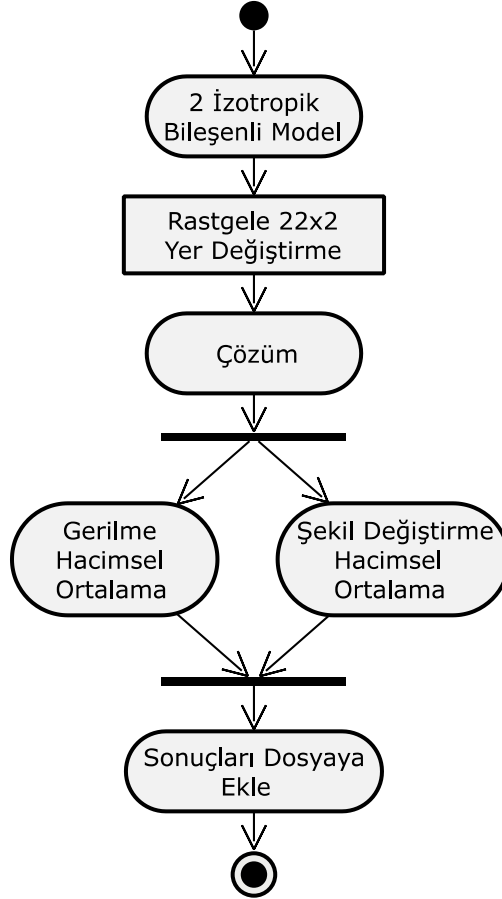
harfleriyle atıfta bulunulacaktır. Örneklerle ilgili bazı sayısal bilgiler Çizelge 3.1’de listelenmiştir.

Çizelge 3.1 : Örnek durumlarla ilgili sayısal bilgiler.

Özellik	Değer
Toplam eleman sayısı	30
Toplam düğüm noktası sayısı	42
Çevresel düğüm sayısı	22
Eleman tipi	PLANE 182
Yatay eleman sayısı	5
Düşey eleman sayısı	6
Düğüm serbestlik sayısı	2
Elastisite Modülü 1	3 GPa
Elastisite Modülü 2	800 GPa
S – Hacim oranı	8/30
O – Hacim oranı	10/30
Y – Hacim oranı	10/30

Örneklerden yatay takviyeli (Y) olan için ayrıca dikey takviyeli örneğe gerek duyulmamıştır. Çünkü elde edilecek malzeme katsayıları, dönme transformasyonu ile elde edilebilmektedir. O tipinde iki doğrultuda da takviye bulunmaktadır. S tipi de, KNT’lerde görülen eğriliği temsil edebilecek karakterde ve basit olduğundan tercih edilmiştir.

İzotropik bileşenlerin elastisite modülü 3 ve 800 GPa olarak uygulanmıştır. Bunun nedeni hem KNT takviyeli polimer kompozitlere yakın olması, hem de modüller arası farkın fazla olmasıyla homojenizasyonun daha problemlili sonuç vermesiyle en kötü durumu değerlendirebilmektir.



Şekil 3.3 : Hacimsel ortalamaların hesaplanması.

Problemin Ansys'te kurulumunda Şekil 3.3'te görülen akış şeması takip edilmiştir. Buna göre önce dikdörtgen geometri oluşturulur. Ardından ağ yapısı matris malzeme kullanılarak oluşturulur. Takviye elemanlarını oluşturmak üzere, her örneğin ilgili elemanlarının malzeme tipi değiştirilir.

Sonra 22x2 (çevre düğüm noktası sayısı x her düğümün serbestlik derecesi) = 44 serbestliğe belirli bir büyüklükle sınırlı olmak kaydıyla rastgele yer değiştirme uygulanır ve çözüm gerçekleştirilir.

Post-processing aşamasında hem gerilme hem de şekil değiştirme bileşenleri için hacimsel ortalamalar hesaplanır. Bunun için her eleman hacmi ve elemandaki gerilme/şekil değiştirme büyüklüğü çarpılıp, tüm elemanlar için toplanır ve toplam

hacme bölünür. Son olarak bu değerler (4 gerilme ortalaması ve 4 şekil değiştirme ortalaması) veri dosyasına eklenir. Veri setini oluşturmak üzere bu işlem bir döngü içerisinde çok sayıda gerçekleştirilince, tek veri dosyasında tüm sonuçlar toplanır. Oluşturulan veri setlerinden birinin ilk birkaç satırı Çizelge 3.2’de verilmiştir.

Çizelge 3.2 : Gerilme [Pa] ve şekil değiştirme hacimsel ortalamaları (O tipi)

σ_x	σ_y	σ_z	τ_{xy}	ε_x	ε_y	ε_z	γ_{xy}
7.53×10^5	7.08×10^6	0.00	-1.05×10^7	1.02×10^{-4}	4.75×10^{-4}	-2.47×10^{-4}	-1.50×10^{-3}
2.73×10^7	-1.55×10^7	0.00	-1.11×10^7	3.92×10^{-3}	-1.68×10^{-3}	-9.56×10^{-4}	-6.65×10^{-3}
-1.45×10^6	-2.90×10^6	0.00	1.38×10^7	-1.44×10^{-4}	-2.14×10^{-4}	1.53×10^{-4}	4.42×10^{-3}
2.03×10^7	2.98×10^6	0.00	-1.18×10^7	3.03×10^{-3}	-5.20×10^{-4}	-1.08×10^{-3}	-6.21×10^{-3}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

3.1.5 Düzlem gerilme için problemin uyarlanması

Gerilme ve şekil değiştirmenin hacimsel ortalamaları bulunduğundan sonra problemin malzeme sabitlerini bulmak üzere en küçük karelere uygun formata dönüştürülmesi gerekmektedir. Bunun için denklem (3.13) yeniden düzenlendiğinde:

$$\bullet \begin{bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \\ \tau_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon_x & \varepsilon_y & \varepsilon_z & \gamma_{xy} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_x & 0 & 0 & \varepsilon_y & \varepsilon_z & \gamma_{xy} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_x & 0 & 0 & \varepsilon_y & 0 & \varepsilon_z & \gamma_{xy} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon_x & 0 & 0 & \varepsilon_y & 0 & \varepsilon_z & \gamma_{xy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{11} \\ E_{21} \\ E_{31} \\ E_{41} \\ E_{22} \\ E_{32} \\ E_{42} \\ E_{33} \\ E_{43} \\ E_{44} \end{bmatrix} \quad (3.14)$$

denklem sistemi elde edilir. Toplanan hacimsel ortalamalar verisi kullanılarak, her durumda toplanan 4 gerilme, 4 de şekil değiştirme hacimsel ortalama değerleri, 4 satırlık gerilme vektörü ve 4 satırlık şekil değiştirme matrisi üretir. Tüm durumlardan elde edilen veriler bu formatta alt alta eklenerek en küçük kareler için kullanılabilecek veri tablosu oluşturulabilir. Bu yolla rastgele n adet durum için veri üretildiğinde, 4n x 1 gerilme vektörü ve 4n x 10 şekil değiştirme matrisi ortaya çıkar.

3.1.6 Alt örneklemeler ile belirsizlik tespiti

İstatistikte alt örneklemeler kullanılarak pek çok konuda çıkarımlar yapmak mümkündür. Örneğin yeniden örnekleme yöntemleri Bootstrap (Efron, 1992) veya

Jackknife (Quenouille, 1956) kullanılarak sınırlı sayıda veriden dağılım parametreleri gibi bilgiler tahmin edilebilir.

Mevcut çalışmada veri sayısı açısından bir problem olmadığından ötürü, yeniden örnekleme yapmak yerine tüm veri setinden belirli büyüklerde örneklem her defasında rastgele olarak seçilip, malzeme katsayıları hesaplanacak. Daha sonra bu katsayıların dağılımı incelenecektir. Bu yolla hem katsayıların beklenen değeri, hem ne kadar değişiklik gösterebileceği, hem de en kötü (beklenen değerden en uzak) değerleri gözlemlene imkanı doğacaktır.

3.1.7 Sistemin tekilliği sorunu

Herhangi bir alt örneklem ile malzeme sabitlerinin bulunması için (3.14)'teki şekil değiştirme matrisinin, (3.9) denklemindeki gibi Moore Penrose tersinin alınması gerekir. Üretilen verilerde bu ilk kez denendiğinde, beklenenden değerlerden mertebe olarak çok farklı sonuçlar elde edildi. Tekillik sonucu oluşan bu durum zaten (3.13) denklemindeki z yönündeki gerilmenin 0 olma zorunluluğuyla nedeniyle beliren kısıt nedeniyle beklenmekteydi.

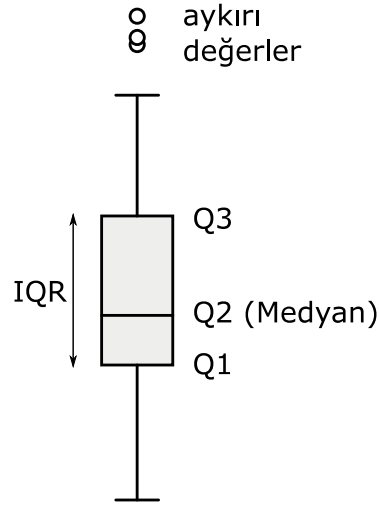
Bağımlı sütunları bulmak üzere sırasıyla bir sütun sanki bir çıktı değeri ve diğer sütunlar girdi değeri gibi düşünülüp regresyon modelleri kuruldu. Sonuçlar incelendiğinde 1, 2, 3, 5, 6 ve 8 no'lu sütunların birbirleriyle doğrusal ilişki içerisinde oldukları görüldü.

Bu tekillikten kaynaklanan problemi çözmek üzere 8. sütun temsili olarak silindi ve kalanlarla regresyon gerçekleştirildi. Ardından 8. sütuna denk gelen malzeme sabiti başka sütunlar silinerek belirlendi.

3.1.8 Malzeme sabitlerinin dağılımı

O, Y ve S için ayrı ayrı üretilen 4500 veriden her defasında rastgele 150 verilik alt örneklem oluşturulup, bir önceki bölümde tarif edilen (sütun eleme) yöntemle malzeme sabitleri 150 kez hesaplanmıştır.

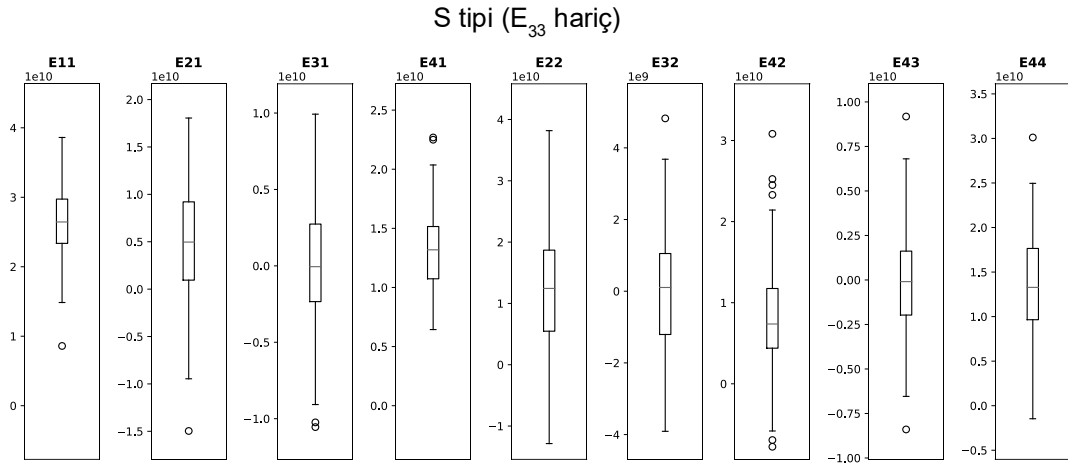
Bir örneklemdeki dağılımı görselleştirmek üzere histogram, kutu grafiği gibi araçlara başvurulur. Histogram her ne kadar daha detaylı bir görünüm verse de, birden fazla örnekleme aynı anda incelerken kutu grafiği daha temiz bir görüntü verir. Bu nedenle sabitlerdeki belirsizliği göstermek üzere kutu grafiklerden faydalanılmıştır.



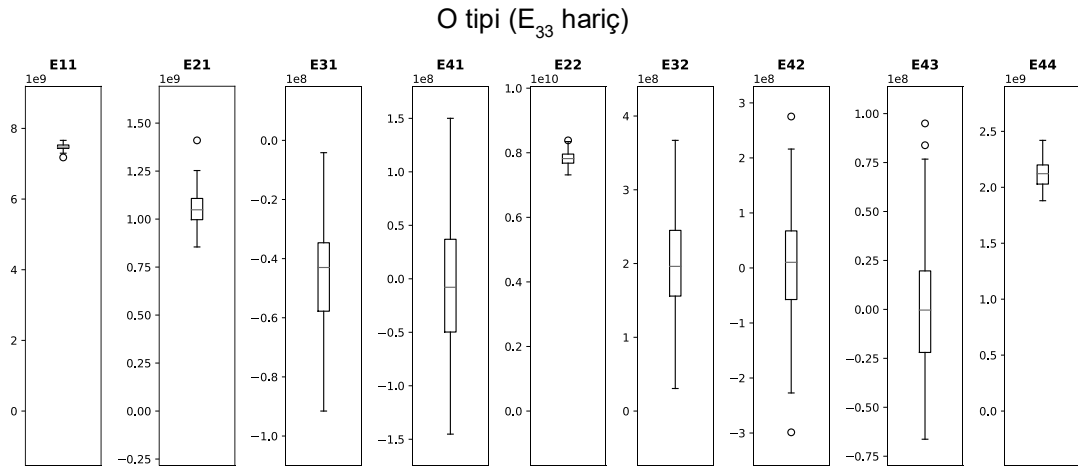
Şekil 3.4 : Kutu grafiği.

Kutu grafiği Şekil 3.4’te görüldüğü gibi bir kutu ile altında ve üstünde çıkıntılardan ve daha uzaktaki noktalardan oluşur. Kutunun alt çizgisi 1. çeyrek üst sınırını (Q1), kutu içindeki çizgi 2. çeyrek üst sınırını (Q2 veya medyan), kutunun üst çizgisi ise 3. çeyrek üst sınırını (Q3) gösterir. Çıkıntı olarak belirtilen alt ve üst çizgiler de kutu yüksekliğine IQR (inter-quartile range) denirse, Q1 ve Q3’dan 1.5 IQR uzaklıktaki sınırlar içerisindeki en küçük ve en yüksek değerleri gösterir. 1.5 IQR sınırları ötesinde bulunan değerler de aykırı değer adını alırlar. Bu değerlerin, 2. ve 3. çeyrekteki değerlere bakarak bulundukları yerlerin pek olası olmadığına kanaat getirilebilir.

Bu çalışmada kutu grafiklerinin kolaylıkla kıyaslanabilmesi için grafik sınırları özel olarak belirlenmiştir. Buna göre her grafik eğer sıfırdan geçmiyorsa, sıfır seviyesi (yerine göre) alt veya üst sınır olarak gösterilmelidir. Bu yolla belirsizliğin, medyan değerinin büyüklüğüne kıyasla ne kadar olduğu kolaylıkla görülebilmektedir.



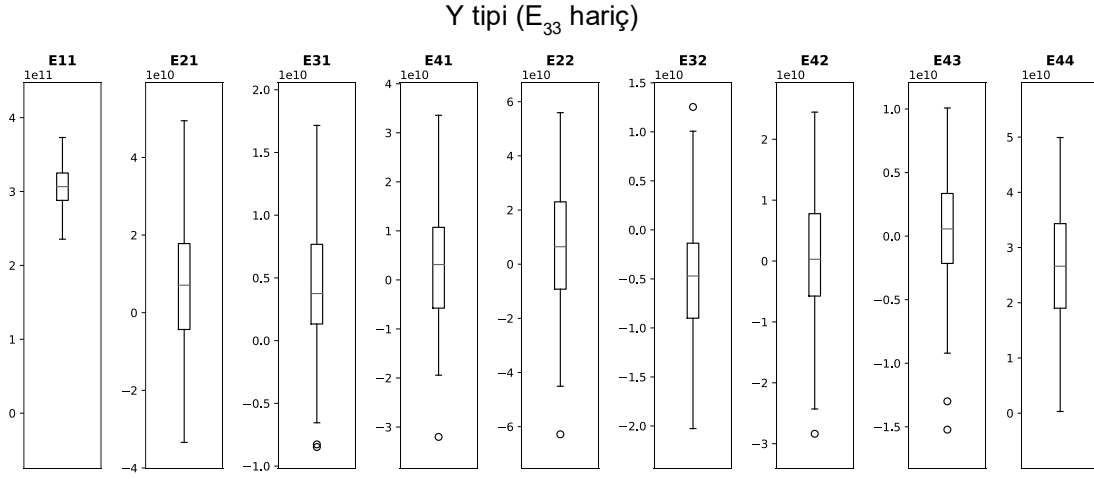
Şekil 3.5 : S tipi örnek kutu grafikleri.



Şekil 3.6 : O tipi örnek kutu grafikleri.

Kutu grafiklerden (Şekil 3.5, 3.6 ve 3.7) görüleceği üzere, hacimsel ortalamalardan elde edilen malzeme sabitleri yüksek oranda değişkenlik göstermektedir. Kutu grafik en düşük en yüksek değer arası mesafeler, en az medyan değer büyüklüğünde olduğu görülmektedir. Ayrıca her üç durumda, E42 ve E43 sabitlerinde aykırı değerler de görülmüştür.

Birçok sabitin işareti açısından bile belirsizlik mevcuttur. Regresyon sabitleri olarak düşünüldüğünde bu durumun istatistiksel olarak ifadesi tüm veri seti kullanılarak yapılacak olan regresyon analizi kısmında belirtilecektir.



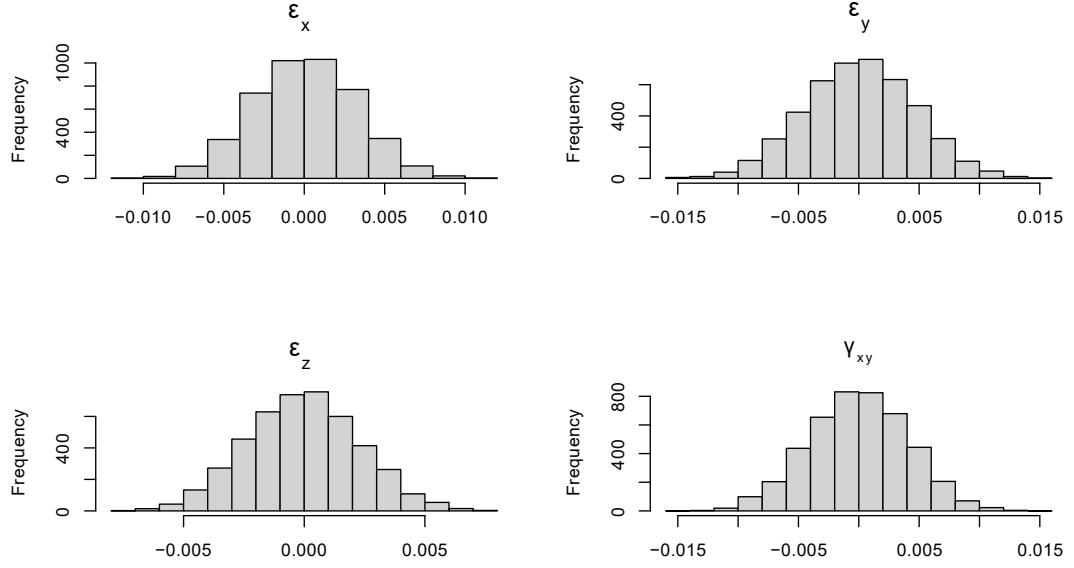
Şekil 3.7 : Y tipi örnek kutu grafikleri.

E_{11} ve E_{44} sabitlerinin, diğerlerine nazaran, sıfırdan farklı oldukları görsel olarak tespit edilebilmektedir. Bu da hacimsel ortalamaların kullanıldığı yöntemle, tüm sabitlerin aynı hassasiyetle bulunamayacağını işaret etmektedir.

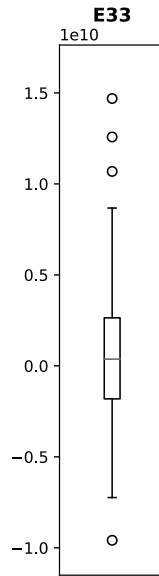
Önceki 3 grafikte kolon verisini ihmal ettiğimiz E_{33} 'e dair sonuçlar gösterilememiştir. E_{33} 'ün doğrusal bağımlı olduğu E_{11} , E_{21} , E_{22} , E_{31} ve E_{32} no'lu sütunlardan birinin elenmesinin ardından gerçekleştirilecek regresyon hesabı sonucunda E_{33} sabitleri için de dağılım elde edilebilir.

Aday sütunlardan hangisinin eleneceğine karar vermek üzere bir önceki sonuçlardan faydalanılabilir. Elde edilecek sabitler ve kullanılan veri setinde büyüklük farkları varsa, en küçük olan sonuçlara en az etkisi olandır ve elenmek üzere ilk sırada tercih edilmelidir.

Şekil 3.8'de görüldüğü gibi şekil değiştirme değerlerinin hacim ortalamaları arasında kayda değer bir mertebe farkı yoktur. Bu nedenle lineer bağımlı malzeme sabiti kolonlarından, büyüklük olarak en küçük olanın elenmesi uygun olacaktır. Örnek olarak S tipini seçersek, büyüklük olarak en küçük olan sabitin E_{32} olduğu görülmektedir.



Şekil 3.8 : Şekil değıştirme hacim ortalamaları dağılımı.



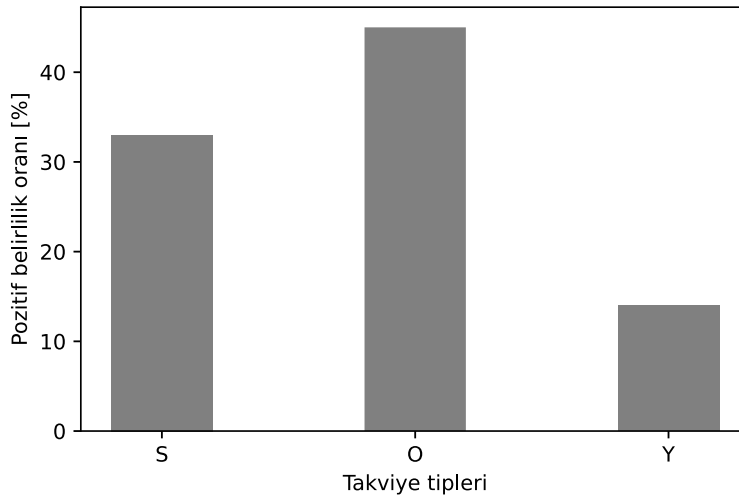
Şekil 3.9 : E_{33} kutu grafiğı (E_{32} elenmesiyle).

Bu sütun elenerek kutu grafiğı hazırlandığında da Şekil 3.9’de görülen grafik elde edilir. Buna göre z doğrultusundaki ana malzeme sabitinin 0’dan farklı olduğuna dair pek bir işaret görülmemektedir.

3.1.9 Pozitif belirlilik

Önceki bölümlerde malzeme matrisinin pozitif belirli olma zorunluluğu dile getirilmişti. Bir önceki bölümde her bir örneklemden elde edilen malzeme sabitleri setinin bileşenleri bağımsız olarak incelenmiş ve dağılımı ortaya konmuştu.

Hacimsel ortalamalardan elde edilen her bir set, bir malzeme matrisinin bileşenleri olduğuna göre, bu matrisin de pozitif belirli olması beklenmelidir. Bu doğrultuda her bir örneklemin pozitif belirliliği değerlendirildi. Ardından alınan tüm örneklemeler içerisinde, pozitif belirli olanların oranı hesaplandı.



Şekil 3.10 : Pozitif belirlilik oranı.

Şekil 3.10’da görüldüğü gibi, her üç durumda da pozitif belirlilik %50 seviyesine bile ulaşamadı. Yatay takviyeli durum diğer takviye tiplerine nazaran en az pozitif belirliliği gösterdi.

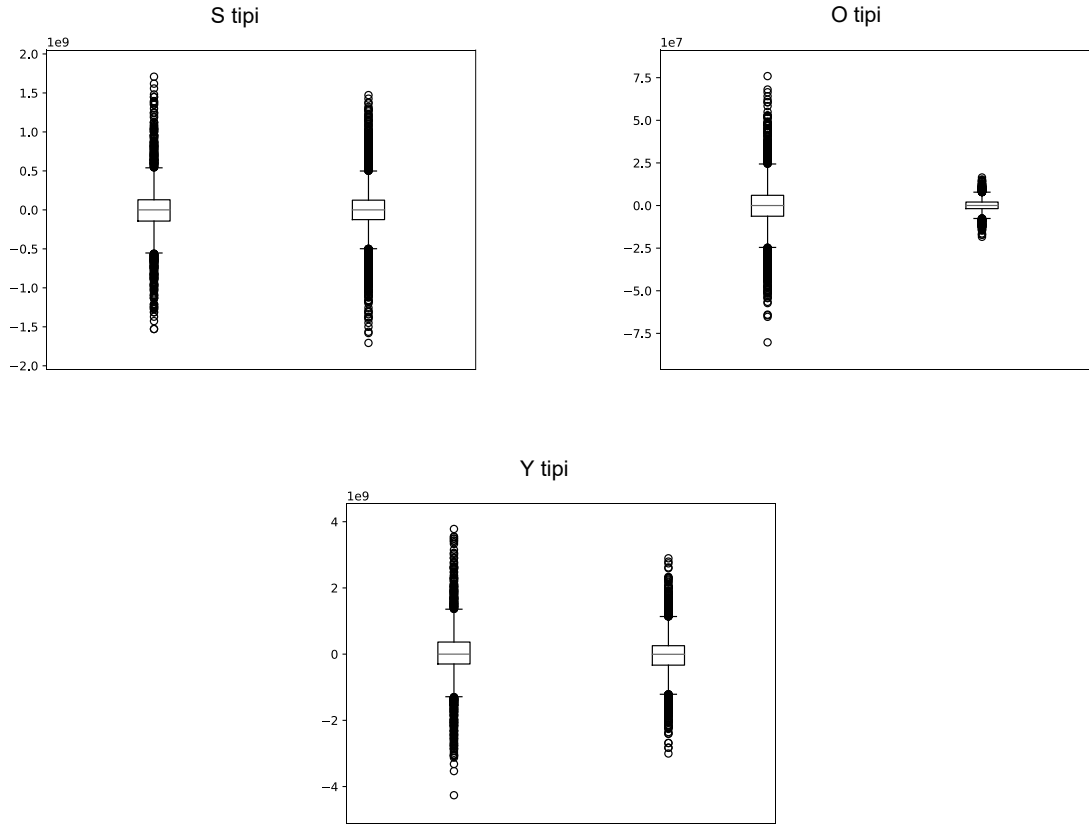
3.1.10 Gerilme tahmini

Homojenizasyon prosedürü sonunda elde edilen malzeme sabitleri daha sonra yapılacak analizlerde kullanılmak üzere elde edilmiş olsalar da, öncelikli olarak gerilme ve şekil değiştirmelerin hacimsel ortalamaları arasında bir ilişki kurulduğu için, bu ilişkinin ne kadar doğru olduğu da kontrol edilmelidir.

Normalde regresyon analizinde, modelin veri seti üzerinden hesaplanan hata değerleri ilerleyen bölümlerde elde edilecektir. Ancak bir regresyon modelinin asıl gücü, modelin kurulmasında kullanılan eğitim setiyle değil, daha önce kullanılmamış bir veri

setiyle belirlenmelidir. Bu yolla modelin genelleme yeteneđi daha objektif olarak elde edilebilir.

Örnek durumlar için oluşturulan veri setinin %80'i eğitim (yani model kurulurken kullanmak üzere), kalan %20'si de test verisi olarak kullanılarak hata durumu değeriendirilmiştir. Elde edilen sonuçlar için yine kutu grafiklerinden faydalanılmıştır.



Şekil 3.11 : Test verisi gerilme tahmini.

Oluşturulan modelin test verisi kullanılarak yapılan gerilme tahmini sonunda elde edilen hata miktarı Şekil 3.11'de gösterilmiştir. Burada 3 ayrı durum için ikişer adet kutu grafiđi bulunmaktadır. Soldaki grafik tahmin edilmeye çalışılan gerilmelerin hacimsel ortalamalarının (gerilmenin 4 bileşeni de aynı kümede) dağılımını, sağ taraftaki ise hata dağılımını göstermektedir.

Grafiklerden görüldüğü gibi S ve Y tipinde hata dağılımı büyüklük olarak, tahmin edilmeye çalışılan gerilme hacimsel ortalamalarına denk seviyededir. O tipinde ise nispeten daha düşük seviyede hata ortaya çıkmıştır. Fakat onda da örneğin 1Q ve 3Q arası açıklıkların oranı %30 seviyesindedir. Bu grafiklerden, tahmindeki hatanın, sabitlerdeki belirsizlikle paralel olarak oldukça yüksek olduğu anlaşılmaktadır.

3.1.11 Regresyon analizi

Önceki bölümlerde regresyon katsayılarının nasıl elde edileceği gösterilmişti. Fakat genellikle bu katsayıların bulunması, regresyon modelinin veya alt bileşenlerinin temsil yeteneğini bize tam olarak ifade edemez. Bu nedenle regresyon analizi teknikleriyle elde edilen modelin kontrol edilmesi gerekmektedir.

Regresyon analizi için gerekli istatistiklerin hesaplanmasında R programlama dili kullanılmıştır (R Core Team, 2021). R dili ve yazılımı genellikle istatistiksel hesaplamalarda kullanılmak üzere fonksiyonlar ve grafik oluşturma imkanları barındırır. Ayrıca dünya genelinde popüleritesi ve kullanıcılarında da katkılarıyla çok sayıda harici kütüphane ile pek çok konuda analiz altyapısı sunmaktadır.

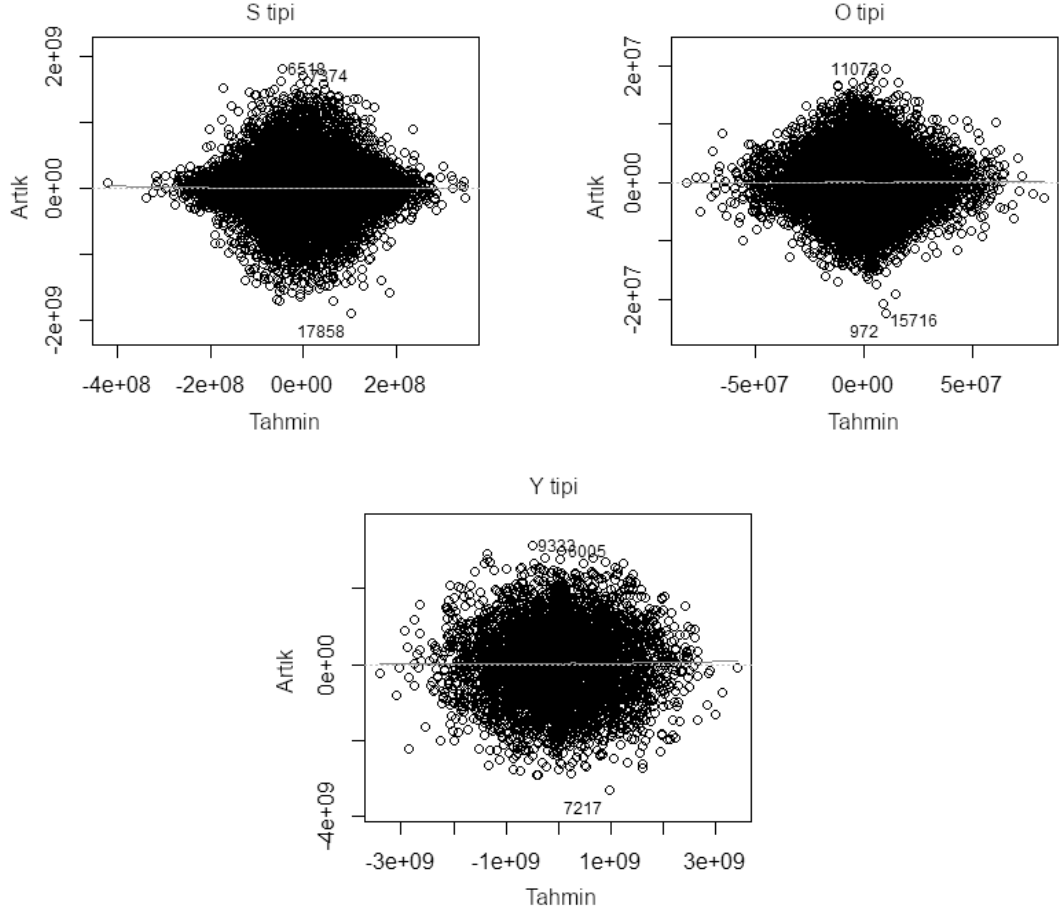
Denklem (3.14)'te sunulan şekil değiştirme matrisi ve gerilme vektörünün tüm durumlarını alt alta eklediğimizde oluşan veri seti doğrudan R'nin içine aktarıldıktan sonra regresyon analizi tek satırlık bir çağrıyla gerçekleştirilir. Burada önceki hesaplamalarda olduğu gibi, kolonların lineer bağımsız olmamasından ötürü, E_{33} 'e ait olan kolon hesaplamalarda çıkarılmıştır.

Sıfır şiddetinde şekil değiştirme, sıfır şiddetinde gerilmeye karşılık gelmesi gerektiğinden ötürü regresyon modelinde sabit terim dahil edilmemiştir.

3.1.11.1 Tanısal grafikler

Analiz özetlerine geçmeden önce regresyon analizleri öncesinde kurulan modelle ilgili tanısal grafiklerin incelenmesi gerekir. Bu grafikler yoluyla, kurulan modelin, yapılan kabullerle ilgili olarak bir ihlalin veya modele etki eden diğer unsurlarla ilgili fikir edinilir.

Örnek durum verileriyle kurulan modellerden ilk elde edilen grafik tipi model tahminlerindeki hatadaki varyansın sabit olup olmadığını kontrol eder. Yatay ekseninde tahmini değerleri, dikey ekseninde artık (hata) değerleri bulunur.

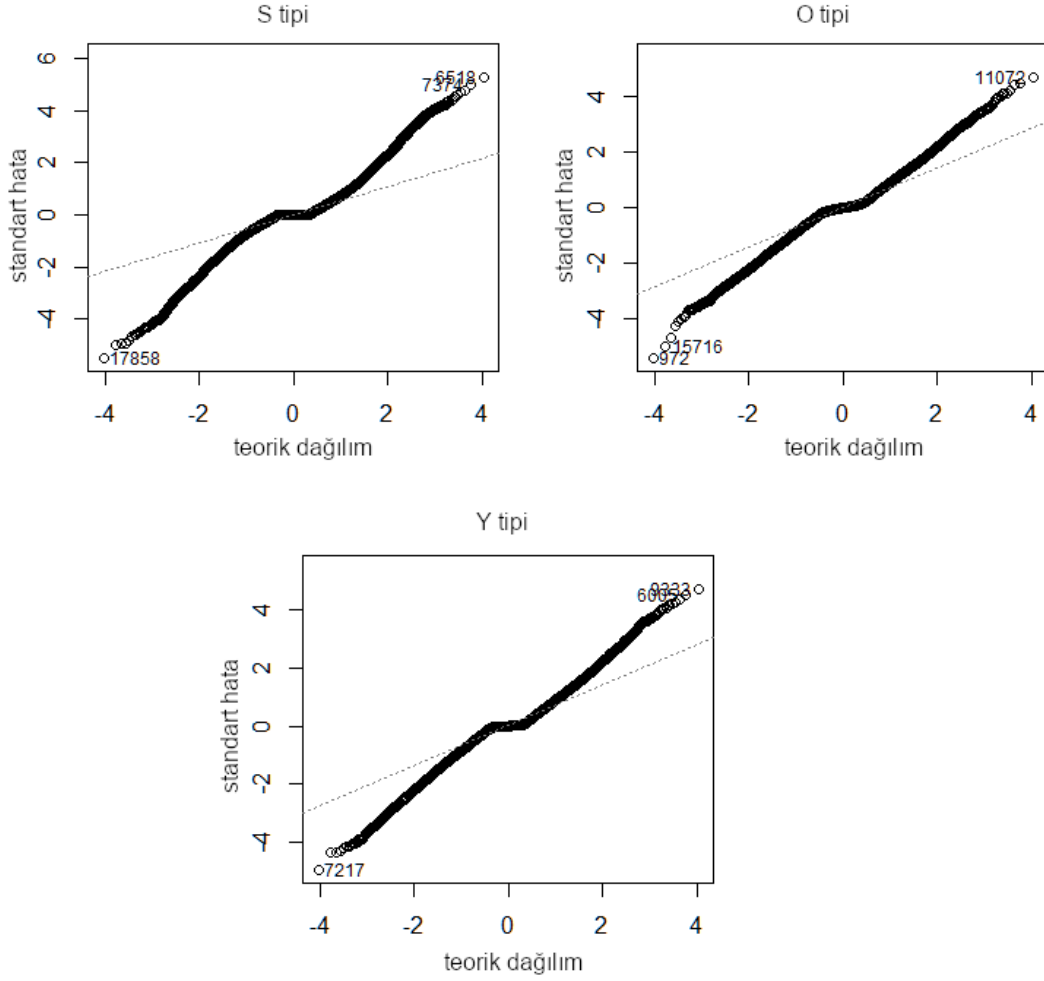


Şekil 3.12 : Tahmin - Artık grafiği.

Şekil 3.12’de üç durum için de tahmin-artık grafiği görülmektedir. Üç durumda da benzer bir şekilde ortada yoğunlaşmış ve dışa doğru azalan bir varyans görülmektedir. Çifte yay (double bow) olarak adlandırılan bu durum, sabit varyans kabulüne aykırıdır.

Genel bir modelleme durumunda çözüm olarak girdi veya çıktı verilerine transformasyon uygulanarak bir iyileştirme elde edilebilir (Montgomery, Peck, & Vining, 2021). Fakat bu çalışmada model terimlerinin doğrudan malzeme sabitleri olduğu düşünüldüğünde, böyle bir müdahale sabitlerin temsil ettiği olguyu da değiştireceğinden kabul edilemez. Çünkü nihai amaç gerilme hacim ortalamalarını, şekil değiştirme hacim ortalamaları üzerinden tahmin etmek değil, malzeme sabitlerinin tespit edilmesidir.

Tanısal grafiklerden QQ grafiği, artıkların normal dağılıma sahip olduğu kabulünün kontrolü için kullanılmaktadır. Bu grafikte artıkların mümkün mertebe bir doğru üzerinde olmaları, normallik kabulüne uygunluğa işaret eder.

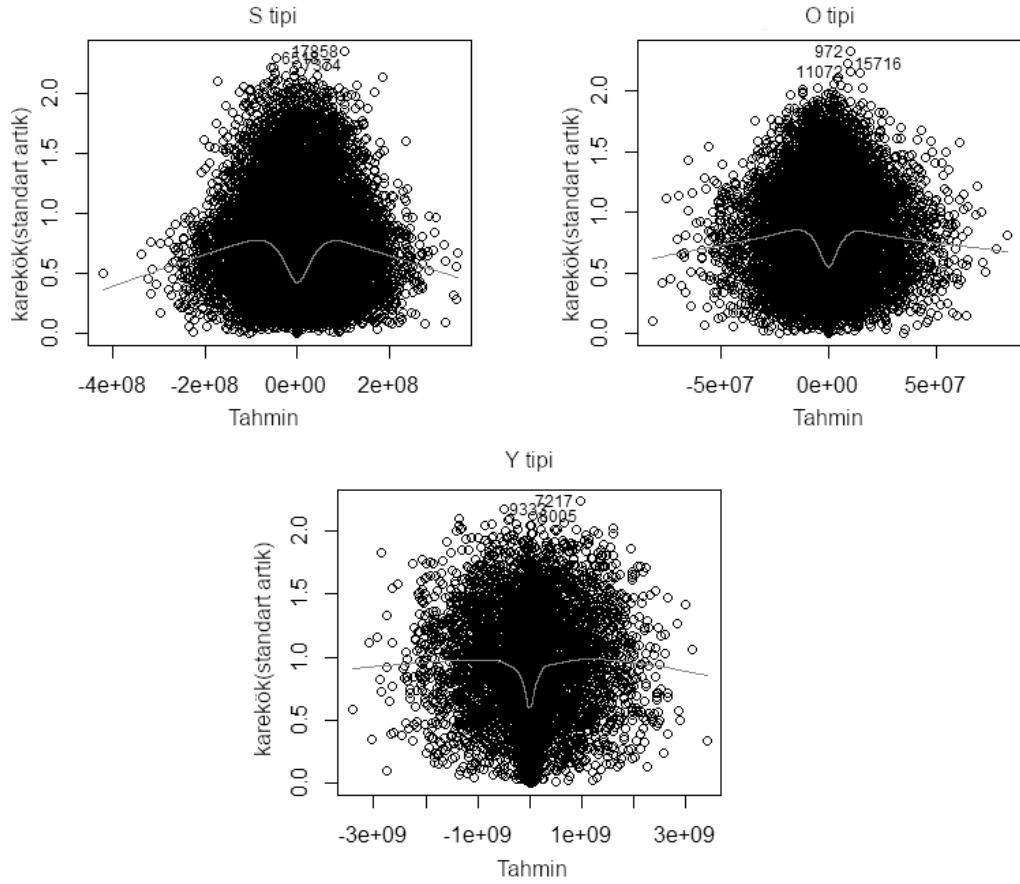


Şekil 3.13 : QQ grafiği.

R programında artık değerler QQ grafiğinde standartlaştırılmış olarak, yani artıkların değerleri, artıkların standart sapmasına bölünerek normalize edilmiş olarak sunulur. Yatay eksen ise uyumu kontrol edilecek teorik normal dağılım bulunmaktadır.

Şekil 3.13’de bir önceki grafikte olduğu gibi üç durum da benzer bir görüntü çizmektedir. Orta kısımda farklı eğimdeki bir parçayla ayrılan iki paralel doğru parçasından ibaret mevcut durum, leptokurtosis denilen ve 4. standartlaştırılmış moment değerinin normal dağılımından yüksek olduğunu gösterir. Sonuç olarak yine normallik kabulünün ihlal edildiği görülmektedir.

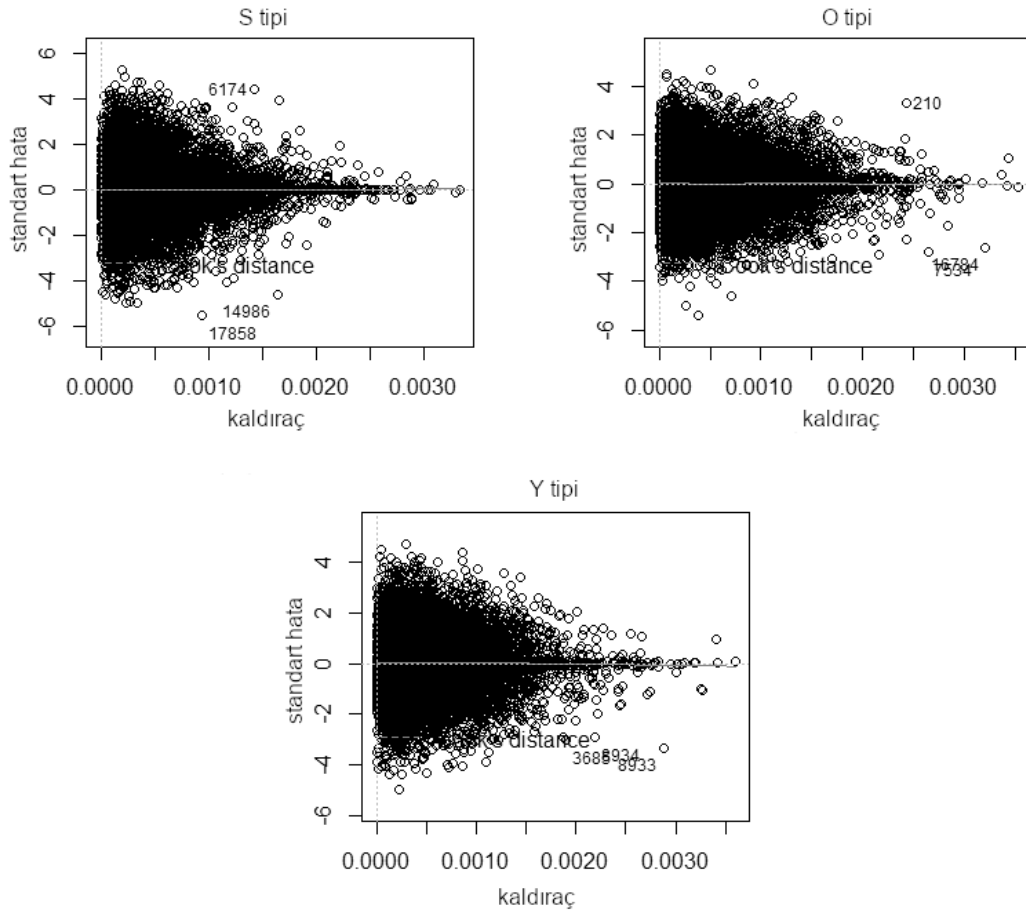
Bir diğer grafik tipi de ölçek-konum grafiğidir. Artık-Tahmin grafiğine benzer bir grafikdir. Ama orada doğrusal olmayan trendlerin bulunması durumunda varyansın sabitliğinin kontrolü zorlaşabilir. Bu nedenle standartlaştırılmış artıklar tahmin değerlerine göre çizilir.



Şekil 3.14 : Ölçek – Konum grafiği.

Şekil 3.14’de görüleceği üzere düzgünleştirilmiş eğrinin önce eğimli olup, sonra merkezde 3 kere yön değiştirdiği görülmektedir. Dolayısıyla sabit varyans kabulünün geçerli olmadığı bir kez daha görülmektedir.

Son olarak ele alınacak olan grafik artık-kaldıraç grafiğidir. Bu grafikte kullanılan veri setinde aykırı değerler olup olmadığı ve özellikle diğer verilere kıyasla modele yüksek oranda etki eden değerlerin varlığı kontrol edilir.



Şekil 3.15 : Artık – Kaldıraç grafiği.

Artık-kaldıraç grafiğinde etkisi yüksek değerler olduğunda bu değerler Cook mesafesi adı verilen sınırların dışında gözükürler. Şekil 3.15’de görüldüğü gibi üç durumda da etkisi yüksek veriler bulunmamaktadır. Bu da uygulanan rasgele sınır şartlarının modele baskın karakterde veri üretmediği, yani üretilen verinin homojen olarak etki ettiğini göstermektedir.

3.1.11.2 Artıklar

Bu ve takip eden alt bölümlerde değerlendirilecek regresyon analiz özetleri Çizelge 3.3, Çizelge 3.4 ve Çizelge 3.5’de görülmektedir.

Çizelge 3.3 : Regresyon analizi özeti (S tipi).

Artıklar				
Min	1Q	Medyan	3Q	Maks
-1.89×10 ⁹	-1.25×10 ⁸	2.05×10 ⁴	1.26×10 ⁸	1.81×10 ⁹
Katsayılar				
	Tahmin	Std. Hata	t değeri	Pr(> t)
E11	2.62×10 ¹⁰	1.75×10 ⁹	15.001	< 2×10 ⁻¹⁶
E21	5.12×10 ⁹	1.05×10 ⁹	4.884	1.05×10 ⁻⁶
E31	6.35×10 ⁸	1.55×10 ⁹	0.411	0.681
E41	1.30×10 ¹⁰	1.01×10 ⁹	12.789	< 2×10 ⁻¹⁶
E22	1.16×10 ¹⁰	1.21×10 ⁹	9.564	< 2×10 ⁻¹⁶
E32	-2.61×10 ⁸	1.10×10 ⁹	-0.237	0.813
E42	7.20×10 ⁹	8.81×10 ⁸	8.179	3.04×10 ⁻¹⁶
E43	-2.38×10 ⁸	1.17×10 ⁹	-0.203	0.839
E44	1.37×10 ¹⁰	1.26×10 ⁹	10.933	< 2×10 ⁻¹⁶
Artık standart hata: 3.42×10 ⁸ (17991 serbestlik)				
Çoklu R-kare: 0.04524, Düzeltilmiş R-kare: 0.04476				
p-değeri: < 2.2×10 ⁻¹⁶				

Çizelge 3.4 : Regresyon analizi özeti (O tipi).

Artıklar				
Min	1Q	Medyan	3Q	Maks
-2.25×10 ⁷	-1.97×10 ⁶	-6.10×10 ³	2.02×10 ⁶	1.95×10 ⁷
Katsayılar				
	Tahmin	Std. Hata	t değeri	Pr(> t)
E11	7.48×10 ⁹	2.12×10 ⁷	352.333	< 2×10 ⁻¹⁶
E21	1.06×10 ⁹	2.17×10 ⁷	49.011	< 2×10 ⁻¹⁶
E31	-4.66×10 ⁷	1.94×10 ⁷	-2.398	0.0165
E41	-1.49×10 ⁶	1.24×10 ⁷	-0.12	0.9045
E22	7.81×10 ⁹	4.16×10 ⁷	187.884	< 2×10 ⁻¹⁶
E32	2.06×10 ⁸	3.65×10 ⁷	5.643	1.70×10 ⁻⁸
E42	-7.96×10 ⁵	1.45×10 ⁷	-0.055	0.9562
E43	-2.06×10 ⁶	1.49×10 ⁷	-0.138	0.8902
E44	2.12×10 ⁹	1.56×10 ⁷	135.803	< 2×10 ⁻¹⁶
Artık standart hata: 4.15×10 ⁸ (17991 serbestlik)				
Çoklu R-kare: 0.9193, Düzeltilmiş R-kare: 0.9193				
p-değeri: < 2.2×10 ⁻¹⁶				

Çizelge 3.5 : Regresyon analizi özeti (Y tipi).

Artıklar				
Min	1Q	Medyan	3Q	Maks
-3.32×10^9	-2.96×10^8	6.28×10^5	3.28×10^8	3.15×10^9
Katsayılar				
	Tahmin	Std. Hata	t değeri	Pr(> t)
E11	3.07×10^{11}	3.41×10^9	90.115	$<2 \times 10^{-16}$
E21	6.41×10^9	2.59×10^9	2.477	0.0132
E31	3.76×10^9	3.10×10^9	1.211	0.2258
E41	2.76×10^9	2.02×10^9	1.364	0.1725
E22	5.54×10^9	3.72×10^9	1.489	0.1364
E32	-4.62×10^9	3.36×10^9	-1.373	0.1699
E42	-7.84×10^8	2.08×10^9	-0.377	0.7065
E43	1.27×10^8	2.41×10^9	0.053	0.9581
E44	2.50×10^{10}	2.56×10^9	9.784	$<2 \times 10^{-16}$
Artık standart hata: 6.68×10^8 (17991 serbestlik)				
Çoklu R-kare: 0.345, Düzeltilmiş R-kare: 0.3447				
p-değeri: $< 2.2 \times 10^{-16}$				

Artıklar kısmında, kurulan modelin eğitim verileri üzerinde kullanılmasıyla bulunan tahmini değerlerle, gerçek değer arasındaki farktan elde edilen hata değerlerinin dağılımı özetlenmektedir. Burada kontrol edilmesi gereken temel husus, regresyon modeli kurulurken başta yapılan, hataların normal dağıldığı ile ilgili yapılan varsayımın sonuçlarla uyumudur. Buna göre medyan değerinin 0'a yakın, diğer çeyreklerdeki değerlerin de sıfır noktasına göre simetrik olması gerekmektedir.

Analiz özetlerine bakıldığında medyan değerlerin her ne kadar tam sıfırda olmasalar da, diğer çeyreklerdeki değerlere kıyasla düşük mertebede oldukları ve sıfıra yakın oldukları; birinci ve üçüncü çeyrek değerleriyle minimum ve maksimum değerlerin büyüklük olarak yakın ve ters işaretli oldukları ve yaklaşık olarak simetrik oldukları görülmektedir. Böylelikle artıkların sıfır etrafında simetrik olduğu beklentisi karşılanmaktadır.

3.1.11.3 Regresyon katsayıları

Tahmin sütunu altında listelenen değerler, regresyon sabitlerinin, diğer bir deyişle malzeme sabitlerinin tahmini değerleridir. Daha önce kutu grafikleriyle gösterilen malzeme sabitleri Moore-Penrose tersi kullanılarak bulunmuştu. Buradaki tahminler

de matematiksel olarak aynı yolla bulunmuştur. Fakat tekrarlı örnekleme yaparak küçük veri setleri oluşturmak yerine, ana veri setinin tamamı kullanılmıştır.

Alınan sonuçlarda özellikle gerilme ve şekil değiştirmelerin aynı serbestlikteki ilişkilerini gösteren sabitler (E11, E22 ve E44) diğer sabitlere nazaran daha yüksek değerlerde bulunmuştur. Diğer taraftan negatif malzeme sabitlerine de rastlanmıştır. Ama bu sabitler büyüklük olarak nispeten daha küçük değerlerdedir. Ayrıca bu sabitler genellikle çapraz ilişki kuran (E32, E43) sabitler olmuştur.

3.1.11.4 Standart hata

Bu değer regresyon katsayısındaki belirsizliği göstermektedir. S tipi örnekte bu değer sabitin %10'undan %20'sine kadar çıkmaktadır. Negatif malzeme sabitlerindeki belirsizlik, sabitin mertebesinde bile büyük olduğundan bu değerlere güvenilmemesi gerektiğini vurgulamaktadır.

O tipi örneğe gelindiğinde standart hatanın özellikle aynı serbestlikteki sabitlerde oldukça düşük olduğu fakat yine negatif sabitlerde standart hatanın da oransal olarak büyük olduğu görülmektedir.

Son olarak y tipinde sadece yatay takviye doğrultusundaki gerilme şekil değiştirme ilişkisine ait standart hata düşük olup, diğer sabitlerde bu oran oldukça yüksek çıkmıştır.

3.1.11.5 P-değeri

Bu değer, regresyon katsayısının sıfıra eşit olma olasılığını gösterir. Genellikle bu değer %5'in altında olması, değişkenin modele kayda değer bir etkisi olduğu yönünde yorumlanır.

p-değerleri incelendiğinde S tipinde E_{31} , E_{32} ve E_{43} sabitlerinin sıfıra eşit olma ihtimalleri kayda değer seviyede yüksektir. O tipinde ise E_{31} , E_{41} , E_{42} ve E_{43} sabitleri için p-değerleri yüksektir. Son olarak Y tipinde E_{11} ve E_{44} dışındaki tüm sabitlerin p-değerleri yüksek bulunmuştur. Bu sonuçlardan her ne kadar tipler arası farklılıklar da malzeme sabitlerinin aktif olmalarını etkilese de

- z doğrultusuyla ilgili sabitlerin daha etkisiz
- örnekten örneğe büyük farklılıklar

olduğu görülmüştür.

3.1.11.6 R-kare

Bu deęer regresyon modelinin, ıktı deęerini ne oranda aıklayabildięini gsterir. Kurulan modelin kalitesi iin nemli bir byklktr. Bu deęerin 1 deęerine yakın olması modelin olayı iyi aıkladıęı eklinde yorumlanmalıdır.

Dzeltilmiř r-kare deęeri model parametrelerinin henz belli olmadıęı durumlarda, fazla parametrenin yaratacaęı yanıltıcı yksek deęeri dzeltmek zere geliřtirilmiřtir. Bu tez kapsamında malzeme sabitlerinin sayısı ve doęrusal etkileri dıřında bir faktr kullanılmadıęı iin bu dzeltmenin nemi yoktur.

Sonuçlara bakıldığında s tipinde %4,5 gibi ok dřk bir r-kare deęeri grlmektedir. O tipinde en yksek deęer olan %91,9, son olarak y tipinde ise s tipine nazaran daha yksek ama isabetli bir tahmin elde edilecek deęerlerden uzak bir deęer olan %34,5 bulunmuřtur.

Buradan kk lekli modellerdeki gerilmelerin hacimsel ortalamalarının tespitinde, ekil deęiřtirmelerin hacimsel ortalamalarının kullanımının yeterince gvenilir sonular ortaya koyamadıęı anlařılmaktadır. Ayrıca her farklı takviye durumunda farklı seviyelerde bařarı kaydedilmiřtir.

3.2 Makine ęrenmesi yaklařımı

En kk kareler regresyonu yntemi aslında istatistiksel ęrenme denilen ve gnmzde makine ęrenmesi olarak da adlandırılan tekniklerin temel yapıtařı olarak adlandırılabilir. Kullanım alanları, teknięin alt bileřenleri, zme yaklařımları farklı olsa da birok ęrenme teknięi belli oranlarda dięerleri yerine kullanılabilir.

nceki blmde kullanılan teknikte de aslında makine ęrenme yntemlerinde kullanılan pek ok iyileřtirme yntemi kullanılabilirdi. Ama bazı noktalarda modele veya ynteme mdahale edilmesi, elde edilen sonucu tezin amacından uzaklařtıracaęı iin kullanılamamıřtı.

rneęin veri transformasyonu, zellik seimi, model seimi, hiper parametrelerin ayarlanması gibi teknikler modeli iyileřtirmek zere sıklıkla kullanılır. Fakat malzeme parametrelerinin belirlenmesi amacıyla bu tekniklerden faydalanılması mmkn olmamıřtır.

Veri transformasyonu kapsamında, hacimsel ortalamaların doğrusal olmayan bir fonksiyon ile dönüştürülüp regresyonda kullanılabilirdi. Bu durumda dönüşüm fonksiyonu ve parametreleri kurulan ilişkinin bir parçası olacak ve malzeme parametreleri, beklenen değerlerden uzakta anlamsız parametreler halini alacaktı.

Benzer şekilde farklı model tipleri de gerilme ve şekil değiştirme arasındaki doğrusal ilişki dışında bir bağıntı kuracak ve yine elde edilecek parametreler eşdeğer malzeme parametreleri olarak kullanılamayacaktı. Hiper parametreler de bu bağlamda yine kullanılamamaktadır.

Yine özellik seçimi adına ve modelin iyileştirilmesine yardımcı olmak üzere ilave parametrelerin modele eklenmesi de yine temel gerilme - şekil değiştirme ilişkinin ortadan kalkmasına sebep olacaktı.

Peki madem bu teknikler ve makine öğrenmesi adıyla nitelendirilebilecek daha güncel model tiplerinin kullanımıyla tez kapsamında ne elde edilebilir? Hacimsel ortalamalar kullanılarak elde edilen sabitlerin tek takviyeli modeller için başarısı (başarısızlığı) önceki bölümde gösterilmişti. Verilen kısıtlar altında hacimsel ortalama verisi bu başarıyı gösteriyorsa, kısıtlamalar kalktığında, her ne kadar malzeme sabitleri bulunamasa da, kurulmaya çalışılan ilişkide bir iyileşme görülüp görülmeyeceği, hacimsel verilerin malzeme sabitlerinin bulunması ile alakalı olarak ne kadar isabetli indikatörler olacağı daha anlaşılır olacaktır.

Bu doğrultuda sıradaki bölümlerde makine öğrenmesi tekniğine genel bir bakışın ardından bu kapsamda kullanılan destek vektör makineleri, veri transformasyonu, çapraz doğrulama gibi tekniklerle ilgili bilgilerin ardından mevcut veriler üzerinde kullanımıyla elde edilen sonuçlar sunulacaktır.

3.2.1 Makine öğrenmesi

Kısaca makine öğrenmesi veriden yola çıkılarak model kurulmasını amaçlamaktadır. Bu tanım belki bir önceki bölümdeki teknik de dahil olmak üzere pek çok yaklaşım için ortak olarak kullanılabilir. Fakat makine öğrenmesinde bu süreçte modelin yapısı, veriye uygulanacak dönüşümler gibi modelin performansında kritik önem taşıyan süreçlerin doğrudan insan müdahalesi olmadan yapılmasını sağlayacak birtakım çözümler barındırır.

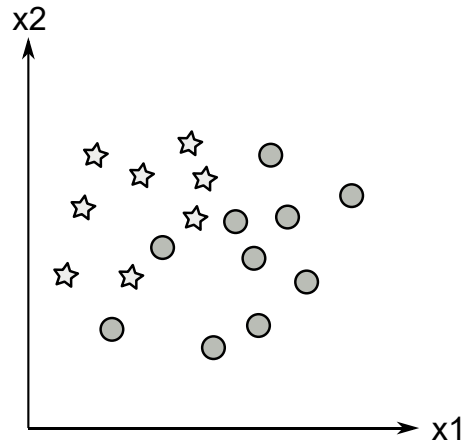
Aslında yapay zekâ adı verilen ve ana hedef olarak insan zekasının makineler aracılığıyla taklit edilmesini amaçlayan, hatta bununla yetinmeyip insan zekasının kavrayamayacağı ölçeklerde ve karmaşıklığındaki problemleri modellemek üzere ortaya çıkan tekniklerin oluşturduğu geniş bir alanın önemli bir alt dalıdır. Optimizasyon, kontrol, olasılık/istatistik, mantık gibi birçok farklı alandaki ilgili çözümler sıklıkla ithal edilerek kullanılır.

3.2.1.1 Ana problem tipleri

Makine öğrenmesi teknikleriyle çok farklı alanlarda çözüm sağlanabilmektedir. Problemler doğaları gereği bazen modellenen girdi ve çıktı değerlerini sunabilirlerken, bazen etiketleme olarak da adlandırılan eşleştirilebilecek bir çıktı değerine sahip olmayabilir. Ya da iki durumun belki de arası bir durum olarak nitelendirilebilecek ve etiketleme gibi doğrudan olmasa da daha dolaylı bir başarı kriteri aracılığıyla modele yardımcı veriler sunulabilir.

Gözetimli öğrenme adı verilen en yaygın problem tipinde eldeki veya elde edilecek veri setinde eşleşme yapılacak girdi ve çıktı değerleri bulunmaktadır. Öğrenmenin, en küçük kareler regresyonunda kullanılan veri seti gibi sürekli bir uzaydan toplanan girdi ve çıktı verileriyle yapıldığı türüne regresyon adı verilir.

Daha önceden plansız gerçekleşen olaylardan toplanan (örneğin doğa olayları üzerinden toplanan) verilerden bu model kurulabileceği gibi planlı olarak tasarlanmış deney verileri üzerinden gerçek veya simülasyon sonuçlarıyla da regresyon gerçekleştirilebilir. Dizayn parametrelerinin performans çıktılarıyla olan ilişkisini kurmak üzere regresyon tekniklerinden faydalanılabilir.



Şekil 3.16 : Sınıflandırma problemi.

Eğer çıktı değerleri ayrık kategoriler biçiminde ise bu tip gözetimli öğrenmeye sınıflandırma adı verilir (Şekil 3.16). Bu tip problemlere örnek olarak infrared veya akustik iz verisinden yola çıkılarak kaynağın tipinin belirlenmesi verilebilir.

Sınıflandırma gibi ayrık bir uzaya eşleştirme yapma amacıyla, ama çıktı etiketlerinden yoksun problemler üzerinden gerçekleştirilen öğrenmeye ise gözetimsiz öğrenme adı verilir. Örneğin bu kapsamdaki kümeleme probleminde, etiket verileri olmadan veri setindeki olası gruplaşmalar tespit edilmeye çalışılır. Bunun dışında verilerde anomali teşkil edecek noktaların tespiti için de bu başlıktaki yöntemlerden faydalanılabilir.

Hedefin gecikmeli ödüllendirme mekanizmalarıyla belirlendiği öğrenme biçimine ise takviyeli öğrenme (reinforcement learning) adı verilir. Sürücüsüz/insansız hava, deniz ve kara araçlarındaki kontrol sistemlerinde kullanılmaktadır.

3.2.1.2 Regresyon modelleri ve destek vektör makineleri

Aslında en küçük kareler yöntemi de sonradan ortaya çıkan bir çok yöntemle temel oluşturduğu için bir makine öğrenmesi yaklaşımı olarak nitelendirilebilir. Fakat son dönemde makine öğrenmesiyle kastedilen yöntemler daha çok yapay sinir ağları veya derin öğrenme, destek vektör makineleri, gauss süreci regresyonu (Kriging) (Rasmussen, 2003) olmaktadır.

Yapay sinir ağları, en küçük karelerde kullanılan polinom tabanlı modellerde olduğu gibi problemi global bir yapıya sahiptir. Her ne kadar model yapısı, genelleme yeteneğini arttırmak üzere modifiye edilebilir olsa da, sonuç olarak modelin tüm bileşenleri çıktı değerlerinin belirlenmesinde aktif rol oynarlar.

Diğer taraftan çekirdek (kernel) tabanlı destek vektör makineleri veya gauss süreci regresyonu tekniklerinde veriler modelin yapısı üzerinde doğrudan belirleyici bir rol oynar.

Destek vektör makinelerinin kökeni 1960'lı yıllara kadar uzanır (Vapnik & Chervonenkis, 1964). Ancak asıl ilgiyi 1990'ların ortalarında elde etmiştir (Boser, Guyon, & Vapnik, 1992).

Yöntemin ana fikrini daha basit yolla elde etmek üzere doğrusal bir fonksiyon olarak:

$$f(x) = \langle w, x \rangle + b \quad (3.15)$$

ele alalım. w model parametrelerini, x modelin değişkenlerini b terimi de bias adı verilen modelin sabit değerini ifade eder. Bu modelin eldeki veri setine en uygun parametrelerini bulmak üzere aşağıdaki optimizasyon problemi çözülmelidir:

$$\min_{w,b} \frac{1}{2} \|w\|^2 \quad (3.16)$$

$$y_i - \langle w, x_i \rangle - b \leq |\varepsilon|$$

Bu yolla, f fonksiyonunun ε hassasiyetiyle veriyi modelleyebileceği kabul edilir. Yani kurulan konveks problemin olurlu bir çözümü olmalıdır. Katı sınır adı verilen bu kabul yerine daha toleranslı bir model kurmak adına aşağıdaki form tercih edilir:

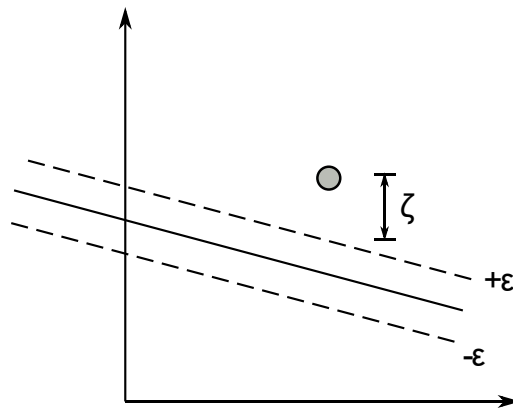
$$\min_{w,b,\xi_i,\xi_i^*} \frac{1}{2} \|w\|^2 + C \sum_{i=1}^l (\xi_i + \xi_i^*) \quad (3.17)$$

$$y_i - \langle w, x_i \rangle - b \leq \varepsilon + \xi_i$$

$$\langle w, x_i \rangle + b - y_i \leq \varepsilon + \xi_i^*$$

$$\xi_i, \xi_i^* \geq 0$$

Önceki formdan farklı olarak bu sefer katı kısıtlar yerine, bu kısıtları bir miktar ihlaline izin verecek ξ_i, ξ_i^* esneklik değişkenleri ilave edilmiştir. Böylelikle olurlu bir çözüm elde edilebilir. Esneklik değişkenlerinin etkileri grafik olarak da görülmektedir (Şekil 3.17).



Şekil 3.17 : Sınıflandırma problemi.

Görüldüğü gibi verilerin hata bandı dışına bulunmasına izin verilmekte ama bu durum ayrıca hedef fonksiyonunda cezalandırılmaktadır.

3.2.1.3 Modelin genelleme yeteneđi

Kurulan optimizasyon probleminde, en küçük kareler yaklaşımından farklı olarak, model katsayılarının kareleri minimize edilmektedir. Bunun sebebi modelin genelleştirme yeteneđini arttırabilmektir.

Yine en küçük kareler örneğinden yola çıkarak, modele ne kadar çok terim eklerseniz, eğitim için kullanacağınız verilere o kadar az hatayla uyum sağlar. Fakat bu asıl amaç olan modelin farklı verilerde de yüksek tahmin etme yeteneđini olumsuz etkiler. Aşırı öğrenme adı verilen bu durumda, öğrenme yerine model adeta kullanılan verileri ezberler.

Bias – varyans uzlaşısı adı verilen bu durumda, öğrenme verilerine uyum ile diğer veri setleriyle (test verisi) ortaya çıkacak hataların varyansı arasında bir uzlaşma kurulmalıdır. Bu klasik regresyon yöntemlerinde minimize edilecek hata fonksiyonuna bazı ceza terimleri eklenerek gerçekleştirilir.

Destek vektör makinelerinde ise optimizasyon problemindeki w model parametrelerinin karelerinin toplamının minimizasyonu gerçekleştirilerek bu özellik eklenmiştir.

Bias-varyans uzlaşısı ise esneklik parametrelerinin bulunduğu terimin başındaki C katsayısı ile modelin ne oranda düzgünleştirileceđi ayarlanabilmektedir.

3.2.1.4 Çekirdek fonksiyonları

Daha önce sunulan destek vektör makineleri modeli doğrusaldı. Kaynağı doğrusal olmayan problemlerde, hataya tolerans göstererek en azından olurlu bir çözüm elde edebilmek için ϵ terimi kullanılmıştı. Problem ne kadar doğrusal olmaktan uzaklaşırsa, bu yaklaşımda hata da büyük ölçüde artacaktır. Bu nedenle modelin doğrusal olmayan bir yapıya sahip olması gerekmektedir.

Yine regresyon yöntemlerinde de kullanılan, terimlerin kuvvetleri ve çarpımlarından elde edilen etkileşim terimleri kullanarak doğrusal olmayan bir yapı elde edilebilir. İki değişkenli bir örnek olarak,

$$f(x_1, x_2) = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_1^2 + a_4x_2^2 + a_5x_1x_2 \quad (3.18)$$

verilebilir. Bu modelde değişken (özellik) sayısı aynı, fakat doğrusal olmayan bir yapıya sahip. Model, önceki modelde olduğu gibi yine katsayılarla göre doğrusal bir

yapıdadır. Bu yaklaşımın kötü tarafı, birçok pratik problemde ihtiyaç duyulacak değişken sayısı ve kuvvet derecesi, modeli hesaplanması mümkün olmayan bir ölçeğe çıkarmaktadır.

(3.17) no'lu doğrusal model genellikle Lagrange çarpanları yaklaşımıyla, alternatif bir formda (dual) çözülür: (Smola & Schölkopf, 2004)

$$\begin{aligned} \min_{\alpha_i, \alpha_i^*} & -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^l (\alpha_i - \alpha_i^*)(\alpha_j - \alpha_j^*)k(x_i, x_j) - \varepsilon \sum_{i=1}^l (\alpha_i + \alpha_i^*) \\ & + \sum_{i=1}^l y_i(\alpha_i - \alpha_i^*) \\ & \sum_{i=1}^l (\alpha_i - \alpha_i^*) = 0 \\ & \alpha_i, \alpha_i^* \in [0, C] \end{aligned} \quad (3.19)$$

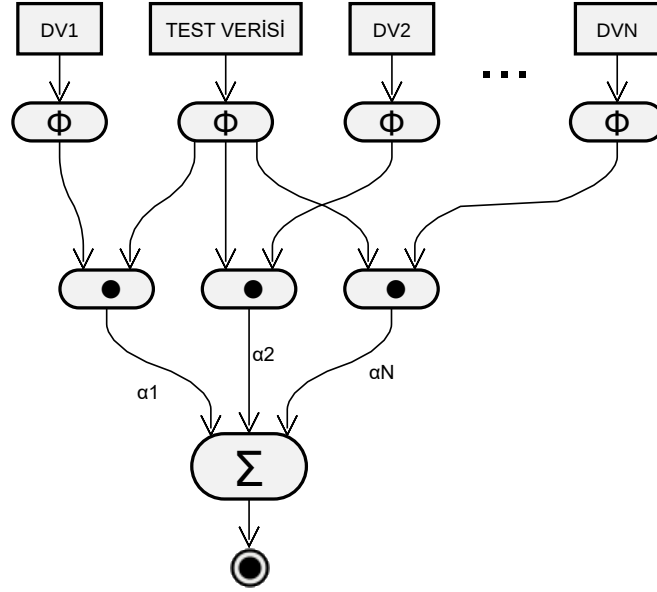
Önceki formdan farklı olarak doğrusal bir iç çarpım yerine $k(x_i, x_j)$ terimi kullanılmıştır. Bu terim iç çarpım olarak ifade edilebilecek ve probleme doğrusal olmayan bir özellik uzayına taşıyan çekirdek fonksiyonudur. Buradaki çekirdek fonksiyonu aslında Laplace veya Fourier dönüşümü gibi integral transformlarda karşılaşılan çekirdek fonksiyonları gibidir. Fakat destek vektör makinelerinde bu çekirdekten,

$$\iint k(x, x')f(x)f(x')dxdx' \geq 0 \quad (3.20)$$

olması beklenir (Mercer & Forsyth, 1909). Bu sayede çekirdek fonksiyonu x ve x' vektörlerinin iç çarpım olarak ifade edilebilirliğini sağlar. Sıklıkla kullanılan çekirdek fonksiyonu tipleri **Çizelge 3.6**'da görülebilir.

Çizelge 3.6 : Çekirdek fonksiyon tipleri.

Çekirdek Tipi	Fonksiyon
Polinom	$k(x_i, x_j) = (x_i \cdot x_j + r)^d$
Radyal Baz Fonksiyonu	$k(x_i, x_j) = e^{-\gamma \ x_i - x_j\ ^2}$
Sigmoid	$k(x_i, x_j) = \tanh(\gamma(x_i \cdot x_j) + r)$

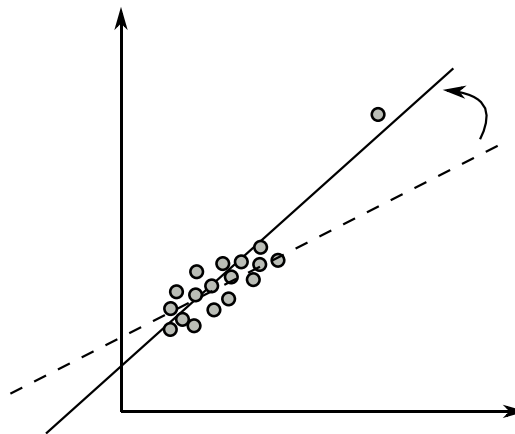


Şekil 3.18 : Destek vektör makineleri akış diyagramı.

Sonuç olarak elde edilecek regresyon modelinin akışı Şekil 3.18 'de görülmektedir. Destek vektörler olarak anılan noktalar, tüm eğitim veri noktaları değil bir alt kümesidir. Bu da daha makul boyutlarda bir model elde edilmesini sağlamaktadır.

3.2.1.5 Verilerin dönüştürülmesi

Destek vektör makineleri her ne kadar genelleme ve doğrusal olmayan modelleme yeteneklerine sahip olsa da kullanılacak verilerdeki bazı istenmeyen özellikler, tahmin etme yeteneğini kötü yönde etkileyebilir.



Şekil 3.19 : Etkisi yüksek veri.

Örneğin tanısal grafikler kısmında kaldıraç etkisinden bahsedilmişti. Buna göre bazı veri noktaları (Şekil 3.19), diğer noktalara kıyasla model parametrelerinin belirlenmesinde baskın bir rol oynayabilir ve bu istenmeyebilir.

Ayrıca yine tanısal grafiklerde artık (hata) değerlerinin dağılımıyla ilgili yapılan kabuller de ihlal edilebilir. Bu çalışmadaki verilerde merkezde daha büyük varyans olduğu görülmüştü.

Bu problemlere çözüm olarak model kurulumundan önce veri setine bazı ön-işlemler gerçekleştirilebilmektedir. Bağımsız (girdi) değişkenler için genellikle iki yöntem tercih edilir:

Standard ölçekleme: Her bir bağımsız değişkene ait verinin ortalamasının 0 ve standart sapmasının 1 olması sağlanır. Buna göre:

$$x_{yeni} = \frac{x_{eski} - x_{ortalama}}{x_{std.sapma}} \quad (3.21)$$

Normalizasyon (min-maks ölçekleme): Tüm değerler doğrusal olarak [0,1] aralığına ölçeklenir:

$$x_{yeni} = \frac{x_{eski} - x_{minimum}}{x_{maksimum} - x_{minimum}} \quad (3.22)$$

Cevap değişkenine genellikle kuvvet dönüşümü uygulanır. En yaygın olarak kullanılan türü Box-Cox (Box & Cox, 1964) dönüşümü olarak adlandırılır ve aşağıdaki gibi uygulanır:

$$g(y) = \begin{cases} \frac{y^\lambda - 1}{\lambda} & \lambda \neq 0 \\ \log y & \lambda = 0 \end{cases} \quad (3.23)$$

Burada kullanılan lambda sabitinin en uygun değerinin otomatik olarak elde edilmesi mümkündür. Bunun için λ parametresi modele eklenir ve log-olabilirlik fonksiyonunu bu parametreye göre maksimize edilir.

Box-Cox fonksiyonu 0'dan büyük y değerleri için uygulanabilmektedir. Son zamanlarda alternatif olarak negatif değerlere de imkan tanıyan Yeo-Johnson dönüşümü de kullanılmaktadır (Yeo & Johnson, 2000). Bu dönüşüm de:

$$g(y) = \begin{cases} \frac{(y+1)^\lambda - 1}{\lambda} & \lambda \neq 0, y \geq 0 \\ \log(y+1) & \lambda = 0, y \geq 0 \\ -[(-y+1)^{2-\lambda} - 1]/(2-\lambda) & \lambda \neq 2, y < 0 \\ -\log(-y+1) & \lambda = 2, y < 0 \end{cases} \quad (3.24)$$

3.2.1.6 Model seçimi ve çapraz doğrulama

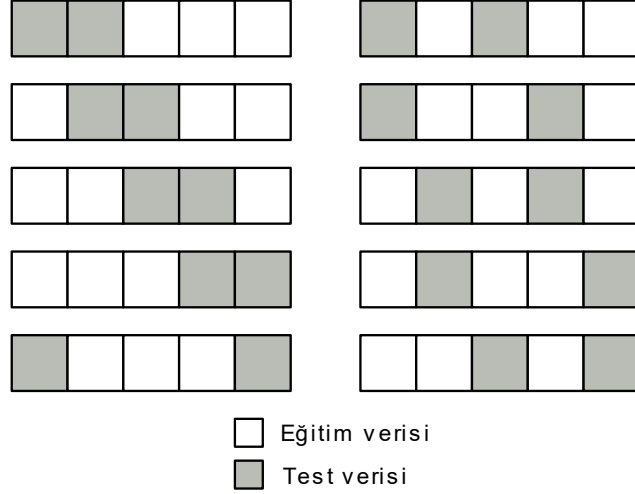
En küçük kareler yönteminde bile sadece özelliklerin doğrusal etkileri değil, kuvvetleri ve diğer özelliklerle etkileşimi gibi ek özellikler ile model doğrusal olmayan bir uzaya taşınıp verilere daha yüksek seviyede uygunluk sağlanabilir. Diğer bir taraftan da genelleme yeteneği konusundaki bölümde de bahsedildiği gibi her ne kadar her ilave model terimi eğitim verisine uyumu arttırsa da, modelin veriyi ezberlemesi değil genelleme yapılabilmesi beklenmektedir.

Fakat modelin hangi esneklik seviyesindeki durumu en iyisi olabilir sorusunun genel geçer bir formülü bulunmamaktadır. Bu nedenle eldeki veri üzerinden model adayları arasından en iyi seçimi yapmak üzere bir çözüme başvurmak gerekmektedir.

Önceki bölümlerde modelin başarısını ölçmek üzere veri seti eğitim ve test verisi olarak iki (eşit olmayan) kısma ayrılmıştı. Bu sayede verinin büyük kısmıyla eğitim gerçekleştirilip, kalan kısmıyla da ezberlemeden genelleme yapma yeteneği ölçülebilmisti.

Bu noktada her ne kadar bu tez çalışmasında baş göstermese de örneğin 3 boyutlu veya daha rafine bir ağ durumunda üretilebilecek veri sayısında ciddi oranda bir kısıt ortaya çıkabilir. Bu da eldeki veri sayısında ekonomik bir politika belirlenmesini zorunlu kılar. Sadece zorunluluktan değil, verinin eğitimde kullanılabilecekken bir kısmının çöpe atılması da akılcı bir yaklaşım olamaz.

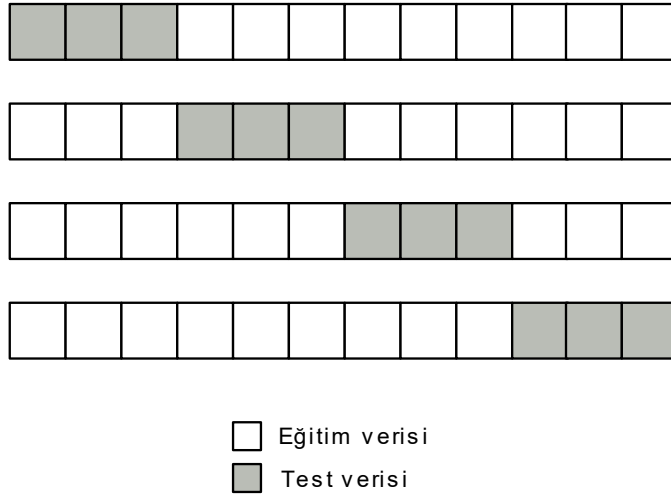
İşte bu gerekçelerle çözüm olarak genellikle çapraz doğrulama adı verilen yöntem kullanılır. Bu yöntemde veri kalıcı bir şekilde eğitim ve test verileri olarak ayrılmaz. Onun yerine tüm veri üzerinden dönüşümlü olarak her veri hem eğitim hem de test verisi olarak değerlendirilir. İki ana yaklaşım bulunur: P taneyi dışarıda bırak yaklaşımı ve K bölmeli çapraz doğrulama



Şekil 3.20 : P tane dışarıda bırak çapraz doğrulama ($n=5$, $P=2$).

P tane dışarıda bırak yaklaşımı ile her seferinde P adet veri test verisi olur ve diğer veriler eğitim verisi olur. Tüm veriler test rolünü üstlendiklerinde tüm sonuçların ortalaması kullanılır. Şekil 3.20’de örnek durum veri sayısı 5 ve $P=2$ için yapılacak modellemeler şematik olarak gösterilmiştir.

K bölmeli çapraz doğrulamada ise belirlenen sayıda adet üzerinden değil, bölmeleme sayısı üzerinden modelleme gerçekleştirilir. Her seferinde bir bölüm test rolünü, diğerleri eğitim verisi rolünü üstlenir. Örnek bir durum veri sayısı 12 ve bölme sayısı $K=4$ için Şekil 3.21’de gösterilmiştir.



Şekil 3.21 : K bölmeli çapraz doğrulama ($n=12$, $K=4$).

Çapraz doğrulama dışında, önceki bölümlerde kullanılan alt örnekleme tekniğine benzer bir yaklaşım olan bootstrap yöntemi de yine başvurulacak çözümlerden biridir.

(Efron, 1992). Bu yöntemle göre her seferinde rasgele alt örneklem, geri koyarak elde edilir. Bu yolla istenilen sayıda eğitim-test veri seti kurulur. Daha sonra her set için elde edilen sonuçlardan çıkarım yapılır.

Destek vektör makinelerinde model yapısına doğrudan müdahale edilemez. Onun yerine modelin hiper parametreleri bulunur. İlk verilen formdaki C parametresi buna örnektir. Bu gibi parametreler modelin belirli karakteristiklerine müdahale imkânı tanır ama uygun değerleri için net bir formül bulunmaz. Bu nedenle yukarıda sunulan model seçimi yöntemleri kullanılarak parametrelerin uygun değerleri belirlenir.

3.2.2 Makine öğrenmesi yoluyla malzeme sabitlerinin belirlenmesi

Makine öğrenmesi yöntemi, bu çalışmada en küçük kareler yöntemine alternatif olarak değil, hacimsel ortalamaların malzeme karakterini temsil edebilme yeteneğini gösterebilmesi için kullanılmıştır. Kurulan regresyon modeli neticesinde malzeme parametreleri doğrudan elde edilemeyecektir. Fakat modelleme açısından birçok teknik seferber edilip, gerilme – şekil değiştirme hacimsel ortalamaları ilişkisinin ne ölçüde kurulabildiğine ışık tutulacaktır.

3.2.2.1 Scikit-Learn kütüphanesi

Önceki bölümlerde bahsi geçen makine öğrenmesi tekniklerinden sadece destek vektör makineleri modelinin sabitlerinin belirlenmesi için bile ayrı bir optimizasyon algoritması gerekmektedir. Çapraz doğrulama, verileri bölme, veri transformasyonu gibi süreçler için ayrı ayrı algoritmalar kullanılması gerektiği gibi her bir süreç için de alternatif yaklaşımların değerlendirmeye alınıp en uygun olanın kullanılması gerekir.

Bunun yanında hataları ayıklanmış, hız açısından optimize edilmiş olması nedeniyle mevcut uygulamalarda kendini kanıtlamış yazılım kütüphanelerinin kullanımı tercih edilmektedir. Bu çalışmada, şu aralar en popüler kütüphanelerden biri olan Python programlama dili tabanlı Scikit-Learn kütüphanesi tercih edilmiştir (Pedregosa, et al., 2011).

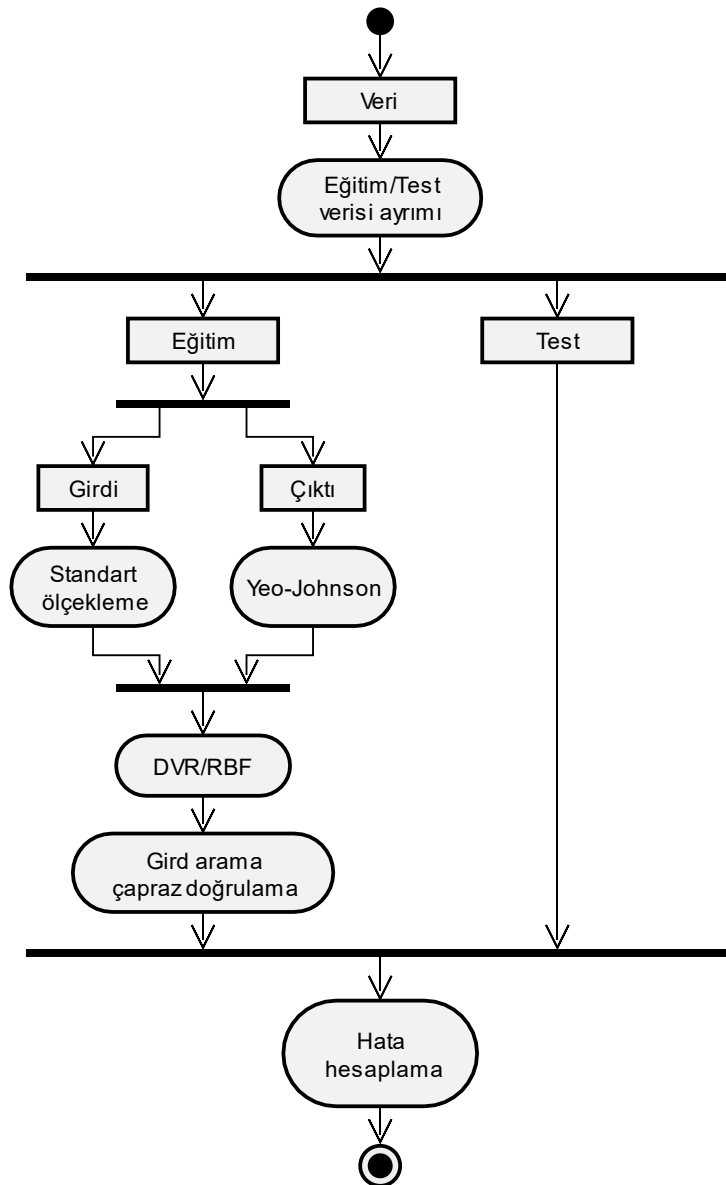
Scikit-Learn kütüphanesi orta ölçekli gözetimli ve gözetimsiz problemlerde kullanılmak üzere birçok güncel makine öğrenmesi algoritmasını bir araya getiren bir kütüphanedir. Geliştiriciler, doğrudan sağladıkları algoritmalar yanında örneğin destek vektör makineleri için LibSVM kütüphanesi gibi harici kodları entegre etme yoluyla

veya kendi algoritmalarını daha temel kütüphanelerin üzerine inşa ederek bu kütüphaneyi oluşturmuşlardır.

Kullanım açısından da sunulan algoritmaların bir boru hattı mantığıyla, standart bir arayüzle kurgulanması, istenildiğinde bileşenlerin alternatif bir yaklaşım için hızlıca değiştirilmelerine olanak sağlamaktadır.

3.2.2.2 Modelleme algoritması

Scikit-Learn platformu üzerinde kurgulanan modelleme sürecinin aşamaları Şekil 3.22’de görülen aktivite diyagramı ile verilmiştir.



Şekil 3.22 : Makine öğrenmesi aktivite diyagramı.

Öncelikle veri dosyası okunur. Burada okunacak olan veri, en küçük kareler kısmında kullanılan veriyle aynıdır. Yine daha önce yapıldığı gibi verinin bir kısmı eğitim amaçlı olarak, diğer kısmı da genelleme yeteneğinin kontrol edilmesi için test verisi olarak ayrılır. Oransal olarak da yine %80-20 şeklinde bölümlenmiştir.

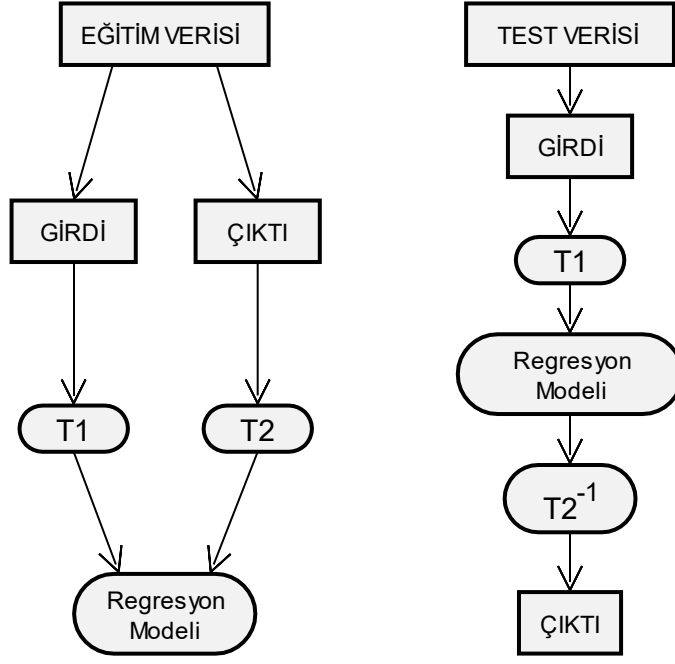
Ardından test verisi bir yanda tutulup, eğitim verisinin girdi ve çıktı değerleri ayrı ayrı dönüşüme tabi tutulur. Girdi verileri standart ölçekleme fonksiyonu aracılığıyla, ortalaması 0, standart sapması 1 olacak şekilde bir dönüştürülmüştür. Diğer bir deyişle,

$$StandartDönüşüm(x) = \frac{x - \mu}{\sigma} \quad (3.25)$$

burada μ bir değişkenin ortalama değeri ve σ ise aynı değerlerin standart sapmasını göstermektedir.

Çıktı değerleri de, önceki bölümlerde açıklanan Yeo-Johnson kuvvet dönüşümü yöntemiyle dönüştürülmüştür.

Dönüşüm konusunda SciKit Learn kütüphanesiyle sunulan önemli bir özellik, dönüşüm işlemlerinin fonksiyonel bir nesne olarak tanımlanmasıdır. Regresyon işlemleri dönüştürülmüş veri setiyle gerçekleştirildiği için, ister test amaçlı olsun, ister daha sonra tahmin amacıyla modelin kullanımında bu nesne ile dönüşüm kolaylıkla yapılabilmekte, hatta çıktı verileri dönüştürülmüş uzayda elde edileceği için gerçek değerlerini bulmak üzere geri dönüşüm işlemi de yapılabilmektedir (Şekil 3.23).



Şekil 3.23 : Eğitim ve test verisi dönüşümü.

Dönüşüm tipleri ve parametreleri tanımlandıktan sonra model tipi belirlenmelidir. Önceki bölümlerde tanıtılmış olan destek vektör regresyon modeli tercih edilmiştir. Bu modelle ilgili seçilebilecek çekirdek fonksiyonu tiplerinden radyal baz fonksiyonu tercih edilmiştir.

Çekirdek modelinin belirlenmesi dışında, doğrusal tipteki (katı sınır) destek vektör makinesinde gösterildiği gibi C parametresi gibi modelin bir takım ilave sayısal parametreleri bulunmaktadır. Bu parametreler yoluyla genelleme yeteneği gibi konularda rol oynayacak özellikler kontrol edilebilmektedir. Ancak bu parametrelerin etkileri problemde farklılık göstereceği için genel geçer bir formül bulunmamaktadır. Bunun yerine model seçimi tekniklerinden olan çapraz doğrulama tekniğiyle en uygun parametre değerleri bulunabilmektedir.

Scikit Learn kütüphanesindeki GridSearchCV fonksiyonu bu doğrultuda kullanılmıştır. Parametrelerin olası değerlerinin kombinasyonu uzayı, bu fonksiyonun sunduğu çapraz doğrulama yöntemiyle taranıp en uygun değerler tespit edilebilmektedir. Bu çalışmada fonksiyonun varsayılan ayarı olan 5 bölmeli çapraz doğrulama işlemi kullanılmıştır.

Bu kurulum adımından sonra öğrenme aşamasına geçilir. Öğrenme işlemi sonucunda artık test verisiyle hata oranı tespit edilebilir. Hata tespiti ile ilgili olarak kütüphane

tarafından farklı tipte hata büyüklükleri hesap fonksiyonları sunulmaktadır. Örneğin maksimum hata, mutlak hatanın ortalaması gibi büyüklükler hesaplatılabilmektedir.

Çalışma kapsamında makine öğrenmesi yöntemiyle ilgili tercih edilen yöntem ve parametreleri Çizelge 3.7’de gösterilmiştir.

Çizelge 3.7 : Makine öğrenmesi algoritma parametreleri.

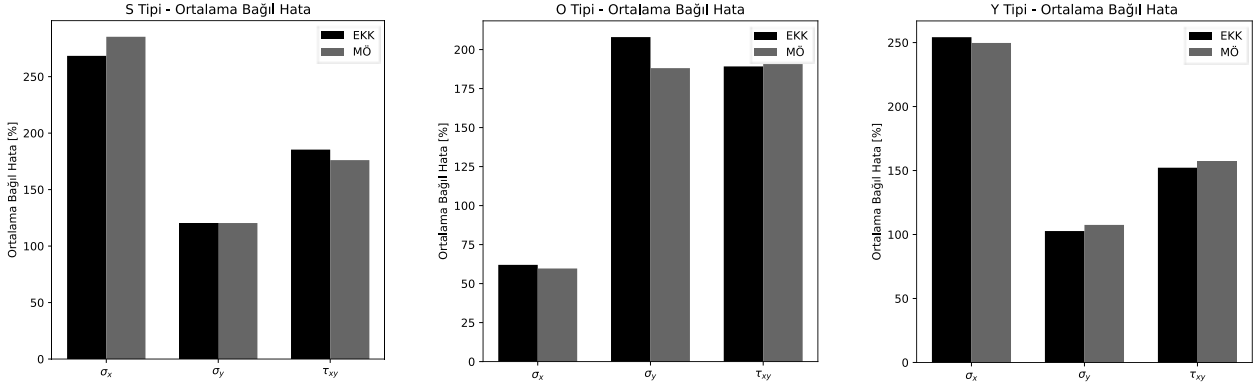
Özellik	Değer
Yöntem	Destek vektör makinesi
Çekirdek	Radyal baz fonksiyonu
Parametreler	Gamma ve C
Çapraz doğrulama	GridSearchCV
Çapraz doğrulama kriteri	Ortalama mutlak hata
Girdi dönüşümü	Standart
Çıktı dönüşümü	Yeo-Johnson

3.2.3 Sonuçlar

Önceki bölümlerde en küçük kareler ile malzeme sabitleri elde edilmişti. Bu sabitlerin doğrudan makine öğrenmesi ile elde edilebilmesi mümkün olmadığından kıyaslama yapmak üzere gerilmenin hacimsel ortalamaları üzerinden hareket edilmiştir.

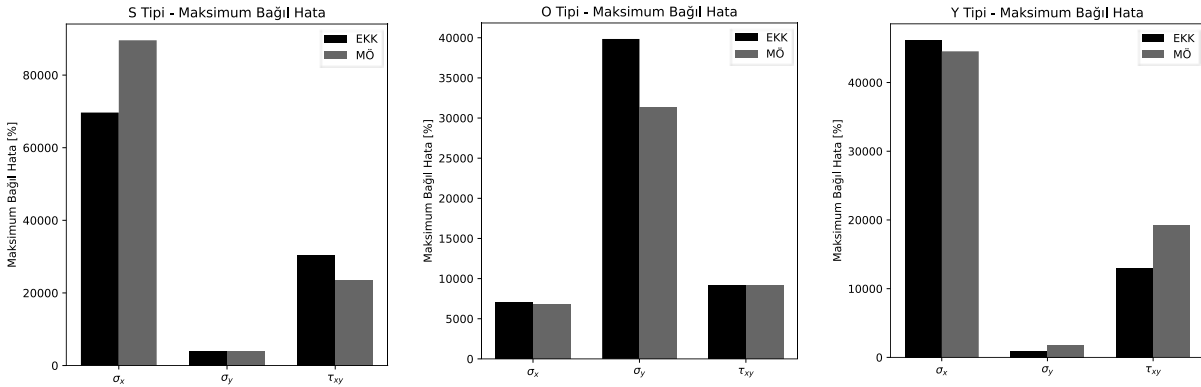
Üç farklı takviye durumu için x ve y doğrultusundaki normal gerilme ve kayma gerilmesi ayrı ayrı incelenmiştir. Sonuçlar, ortaya çıkan bağıl hatanın ortalaması için çubuk grafiği olarak Şekil 3.24’de gösterilmektedir.

Grafiklerde görüldüğü gibi sonuçlar arasında kayda değer bir farklılık görülmemektedir. Ayrıca kimi durumda makine öğrenmesi, kimi durumda da en küçük kareler daha iyi sonuç vermiştir. Bu noktada makine öğrenmesi yaklaşımının ilave bir kazanç sağlamadığı görülmektedir.



Şekil 3.24 : Bağıl hata – ortalama değ r.

Tahminlerdeki bağıl hatanın %250 seviyelerine kadar  ıktığı ve bunun pratikte bir fayda yaratmayacağı da gözlemlenmektedir.



Şekil 3.25 : Bağıl hata – maksimum değ r.

Şekil 3.25'te de bağıl hatanın maksimum değ rleri kıyaslanmıştır. Ortalama değ rlerdeki durum burada da geçerlidir. Ayrıca %80000 gibi  ok y ksek oranda hataların da ortaya  ıkabileceğini g stermektedir.

Elde edilen veriler ışığında řu sonu lara varılabilir:

1. Veriler  zerinden ger ekleřtirilen istatistiksel y ntemler kayda değ r bir farklılık yaratmamaktadır
2. Asıl problemin kaynağın model  l eğinin k   k olması ve/veya veri olarak hacimsel ortalamaların kullanılmasıdır.

Bir sonraki b l mde, hacimsel ortalamalara alternatif olarak modelin sınır davranışı  zerinden kurulacak bir eřleřtirmenin homojenizasyonun performansını nasıl etkilediğı incelenecektir.

4. TEK TAKVİYELİ THE HOMOJENİZASYONU: SINIR YAKLAŞIMI – OPTİMİZASYON

Parçacık takviyeli bir kompozit malzemenin homojenizasyonu için temsili bir hacim elemanının oluşturulup, bu elemanın standart yükleme şartları altında ortaya çıkan şekil değiştirme ve gerilme durumlarından elde edilen hacimsel ortalamalar üzerinden malzeme sabitleri elde edilebilmektedir. Burada oluşturulan THE'nin Hill-Mandel koşullarına uygunluk göstermesi gerekmektedir. Ergodiklik olarak da ifade edilebilecek bu uygunluk hacmin, bölgeden bölgeye olan farklılıklara hassasiyet göstermeyecek derecede büyük olmasını zorunlu kılmaktadır.

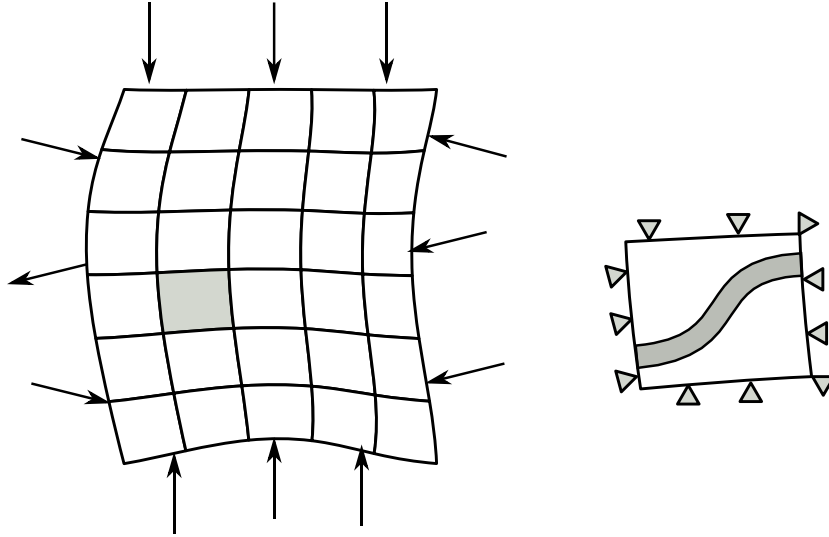
Diğer bir taraftan THE'nin büyük olmasının yanında, içine konulacak takviyelerin de yeterince detaylı modellenenebilmesi, diğer bir deyişle oluşturulacak olan ağ yapısının yeterince yüksek çözünürlükte olması gerekmektedir. Ayrıca her seferinde detaylı bir modelin kurgulanması ve sonlu elemanlar ile hesaplaması, dizayn gibi karmaşık senaryolar için pratik olmamaktadır.

Bu sebepten ötürü Hill-Mandel kriterini dikkate almadan sadece tek bir takviye ile ve hacimsel ortalamalar üzerinden yapılacak homojenizasyonun ne kadar sağlıklı bir yaklaşım olacağı bir önceki bölümde incelendi. Farklı sınır durumlarının ortaya çıkaracağı belirsizliği de dikkate almak üzere çok sayıda farklı yükleme şartı üzerinden uygulanan en küçük kareler regresyonuyla malzeme sabitlerine ulaşıldı.

Sonuç olarak şekil değiştirme ve gerilme hacimsel ortalamaları üzerinden iyi bir ilişki kurulamadığı görülmüştür. Ayrıca bu ilişki kurulurken elde edilen malzeme sabitlerinde yüksek bir belirsizlik görüldü. Hatta yer yer, malzeme matrisinin uyması gereken pozitif belirli olma şartına bile uyamadığı tespit edildi.

Ardından aynı veriler üzerinden, yalın bir regresyon modeliyle alakalı bir problem olup olmadığını görmek üzere alternatif bir yöntem olarak makine öğrenmesi kullanıldı. Bu sayede gerilme ve şekil değiştirme hacimsel ortalamaları arasında kurulabilecek en yakın ilişkinin derecesi ölçülmeye çalışıldı. Fakat tekrar görüldü ki hacimsel ortalamalar, tek takviyeli THE'ler gibi Hill-Mandel şartlarını sağlamayan modeller için başarılı sonuçlar ortaya koyamamaktadır.

Probleme daha genel bir perspektiften bakarak, çözülmeye çalışılan problemin daha uygun formda kurgulanması beraberinde daha iyi sonuçları getirebilir. Aslında homojenizasyon ile çözülmeye çalışılan problem, temsili bir eleman üzerinden heterojen bir malzemenin homojen eşdeğerinin malzeme katsayılarının bulunmasıdır. Bu da biri heterojen diğeri homojen iki THE'nin sınırlarındaki yüklere yakın cevaplar vermesi anlamına gelir.



Şekil 4.1 : Global modelden alınan THE'nin lokal analizi.

Diğer bir taraftan sınırdaki cevap dışında hacimsel anlamda bir uyum olmasına da gerek yoktur. Çünkü sınırlardaki uyum sağlandıktan sonra, ilave bir lokal model ile hacimsel durum da tespit edilebilir (Şekil 4.1). Global olarak tüm durum elde edilmek istense bile (ki bu çoğu zaman gerekli olmaz), lokal analizler birbirinden bağımsız (uzay boyutu küçük) ve hatta paralel olarak hesaplanabilir.

Bu bölümde bu yaklaşımı ortaya koymak üzere önce problemin temel özellikleri ve yöntemle ilgili bazı arka plan bilgilere değinilecek ardından problemin son formu ve izlenecek adımlar ortaya konacaktır. Sonuçlar kısmında, elde edilen performans, bir önceki bölümde elde edilen klasik yaklaşımla karşılaştırılacaktır.

4.1 Kullanılan Malzeme Modelleri

Gerilme ve şekil değiştirme durumlarının hacimsel ortalamaları arasında ilişki kurulan yaklaşımda, oluşturulan THE modeli, matris ve takviye fazları için kullanılan iki farklı izotropik malzemeden oluşmuş heterojen bir yapıdaydı.

Bu bölümde eşleştirme hacimsel ortalamalar arasında değil, heterojen ve homojen malzeme modellerinin kullanımıyla ortaya çıkacak davranış üzerinden gerçekleştirilecektir. Buna göre bir adet referans model yine heterojen yapıda, ayrıca bu modelin davranışına uyum sağlayacak ikinci bir THE modeli de homojen ve anizotropik malzeme modeliyle oluşturulacaktır.

Düzlem durumda anizotropik bünye denklemi aşağıda verildiği gibi ifade edilebilir:

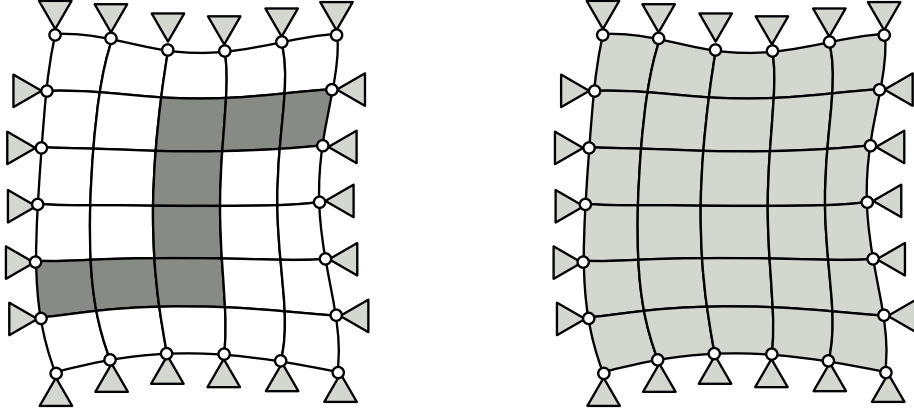
$$\begin{bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ 0 \\ \tau_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_{11} & E_{21} & E_{31} & E_{41} \\ . & E_{22} & E_{32} & E_{42} \\ . & . & E_{33} & E_{43} \\ . & . & . & E_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \\ \varepsilon_z \\ \gamma_{xy} \end{bmatrix} \quad (4.1)$$

Buna göre her bir nokta için 4 gerilme ve 4 şekil değiştirme bileşeni bulunmaktadır ve bu durumlar arası ilişki kuran simetrik malzeme matrisi 10 adet bileşenle anizotropik malzeme modelini temsil eder.

Bu bölümde ortaya konacak yaklaşımla, izotropik bileşenlere sahip heterojen modelin sınır davranışları ile anizotropik homojen malzemenin sınır davranışları arasında bir eşleştirme yapılacaktır. Önceki yaklaşımdan farklı olarak malzeme parametreleri analiz sonucu elde edilen veriler üzerinden elde edilmeyecek, doğrudan malzeme parametreleri analiz sürecine sokulup, uyumu maksimize edecek şekilde belirlenecektir.

4.2 Problemin Genel Tanımı

Öncelikle çözülecek problemi ortaya koymak üzere, Şekil 4.2’de eşleştirme yapılacak iki adet model görülmektedir. Bu iki modelden biri önceki örneklerle aynı yapıda, yani iki adet izotropik malzemedan oluşmaktadır. Diğer modelde homojen olarak tek bir anizotropik malzeme kullanılmıştır.



Şekil 4.2 : Aynı sınır şartları uygulanan heterojen izotropik ve homojen anizotropik THE'ler.

Görüldüğü gibi iki modelde de eş ağ yapısı bulunmaktadır. Şekilde görüldüğü gibi 22 adet sınır düğüm noktasının 2 adet serbestlik derecesi de dikkate alarak, toplamda 44 adet serbestlik derecesi için sınırdan uygulanacak muhtelif yer değiştirmeler şeklindeki yüklere modeller aynı sayıda tepki kuvvetiyle karşılık verecektir.

Çözülmesi gereken ana problem, bu iki modeldeki tepki kuvvetlerini belirli bir norm çerçevesinde eşleştirmek üzere anizotropik modelin malzeme sabitlerinin en uygun değerlerinin bulunmasıdır. Burada norm olarak kastedilen ve benzerliği tanımlayacak kriter, ortalama hatanın, maksimum hatanın veya en yüksek n sayıda hatanın minimizasyonu şeklinde farklı formlarda tanımlanabilir.

Hacimsel ortalamaların kullanıldığı yaklaşımda çok sayıda sınır şartı üzerinden malzeme sabitleri doğrudan elde edilebilmekteydi. Yeni problemin bağlamında yukarıda ifade edilen benzerlik kriteri sadece bir yükleme durumu için ifade edilmişti. Dolayısıyla bu kriterin birden fazla sınır şartını da kapsaması için birden fazla analiz için bu kriterler hesaplanıp tamamı değerlendirmeye alınmalıdır. Aksi takdirde tek bir durum üzerinden gerçekleştirilen eşleşmenin genelleme yeteneği zayıf olacaktır.

Bu nedenle her arama adımında birden fazla sayıda analiz yapıp toptan bir kriter hesaplanmalı ve bir sonraki arama adımına devam edilmelidir. Tabii böylelikle arama algoritmasına her adımda analiz sayısı kadar katlanmış bir yük getirmektedir. İlerleyen bölümlerde bu konuyla ilgili olarak sınırlı sayıda ama mümkün mertebe temsil yeteneği yüksek durumların kullanıldığı bir yaklaşım ortaya konacaktır.

4.3 Optimizasyon

Bu bölümde yaklaşımın tanımlanmasına geçmeden önce, dayandığı matematiksel temel olan optimizasyona değinilecektir. Optimizasyonun tanımı oldukça basit fakat uygulamada problem tipleri, kapsamı, çözüm yöntemleri gibi pek çok unsurla başlı başına ana alanlardan biridir. Kısaca alternatifler arasından en iyi olanı seçmek şeklinde ifade edilebilir.

Özel olarak belli parametrelerin girdi olduğu ve tek bir çıktının olduğu sürekli uzayda tanımlı fonksiyonlar üzerinden düşünülürse, bu fonksiyonun verilen girdi aralığı için alabileceği minimum değeri bulma işlemi olarak tanımlanabilir. Eğer problemde amaç maksimum değerin bulunması ise, minimize edilecek fonksiyon eksi işaretle çarpılıp minimizasyon problemi haline getirilebilir.

$$\begin{aligned} \min_x f(x) \\ g_i(x) \leq 0 \quad i = 1, \dots, m \\ h_j(x) = 0 \quad j = 1, \dots, n \end{aligned} \tag{4.2}$$

Yukarıda verilen denklemde ifade edildiği gibi f fonksiyonunu minimum yapan x parametrelerinin bulunmasıdır. Minimize edilecek f fonksiyonuna hedef fonksiyonu adı verilir. x değişkenleri genellikle dizayn değişkenleri olarak adlandırılırlar. Problem sadece bu şekilde ifade edilebiliyorsa, yani dizayn değişkenleri için arama uzayında bir kısıtlama yoksa bu problem tipine kısıtsız optimizasyon problemi adı verilir. Aksi takdirde h veya g gibi ilave fonksiyonlar aracılığıyla tanımlanan birtakım kısıtlamalar mevcutsa bu durumda probleme kısıtlı optimizasyon adı verilir. Bu kısıtlar h fonksiyonlarında olduğu gibi eşitlik kısıtları ile, veya g fonksiyonlarında olduğu gibi eşitsizlik kısıtları olarak ortaya çıkabilir.

Ayrıca sayısal algoritmalarda dizayn değişkenleri için alt ve üst limitler tanımlanabilir. Bu limitler çözüm yöntemlerinde farklı bir yoldan sürece katılmaktadır.

Eğer hedef fonksiyonu ve kısıtlar açık olarak biliniyorsa aday minimum noktalar Karush-Kuhn-Tucker (Karush, 1939) kriterleri ile belirlenebilir. Bu kriterler sayesinde elde edilen aday noktaların minimum olup olmadığı kontrol edilebilir.

Bazı problemlerde f , g ve h fonksiyonları karmaşık sistemler biçiminde ortaya çıkabilir. Bu nedenle bazı problemler bu kriterler için gerekli olan türev değerlerinin

elde edilmesindeki zorluklardan ötürü, sayısal yaklaşımlar veya hiç türev bilgisine başvurmadan doğrudan arama yöntemleri kullanılabilir.

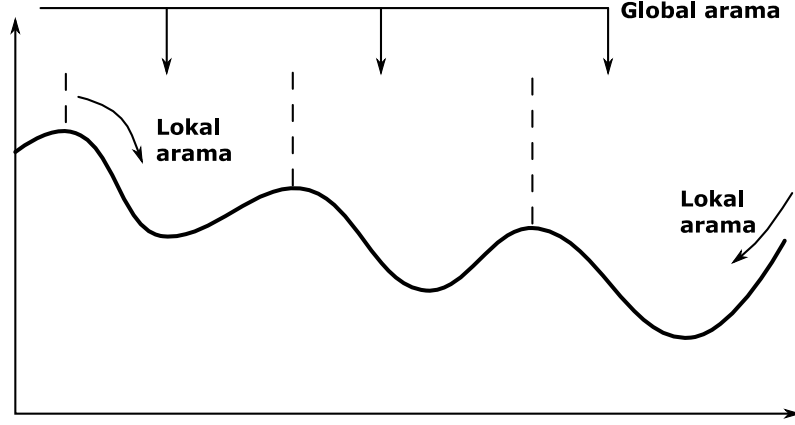
Sürekli fonksiyonlar üzerinden tanımlı bir optimizasyon probleminde genel olarak 3 tip yaklaşım bulunmaktadır:

- Doğrudan fonksiyonların değerleri üzerinden arama: Yön bilgisinden ziyade elde edilen noktaların diğerlerine kıyaslama yapılarak arama algoritması ilerler. Türev bilgileri bu yöntemlerde kullanılmaz, bu bilgilerin elde edilmesi zor olan problemler için tercih edilir. Yakınsama süresi diğerlerine göre yavaştır.
- Birince mertebe arama yöntemleri: fonksiyonun en hızlı arttığı yön doğrultusunda arama yapılır. Çok değişkenli fonksiyonun gradyanı kullanılır.
- İkinci mertebe yöntemleri: Arama sürecini daha da hızlandırmak için ikinci mertebe türev olan Hessian matrisi kullanılır.

Optimizasyon uygulanacak problemler, minimum noktanın makul sayıdaki arama adımı ile bulunup bulunmayacağına göre zorluk açısından sınıflandırılır. Kolaydan zora doğru sıralanırsa

- Hedef ve kısıtların tümüyle doğrusal fonksiyonlarla ifade edildiği doğrusal programlama problemi
- Eğer hedef fonksiyonu kuadratik ve konveks ise, konveks kuadratik programlama
- En genel durumda, doğrusal olmayan programlama problemi

Bu zorluk sınıflandırmasında sadece ilk iki tipte global bir minimum değerden bahsedilebilir. Bunun dışında birçok gerçekçi problemin minimum arama sonucunda ortaya çıkan çözüm için sadece dar bir çevrede lokal olarak minimum olduğuna kanaat getirilebilir.



Şekil 4.3 : Global ve lokal arama.

O nedenle pratikte, global optimizasyon kapsamındaki tekniklerle kaynaklar dahilinde elde edilebilecek tüm aday noktalar üzerinden belirlenen en iyi nokta global optimumun olarak kabul edilir. Global arama teknikleri tüm uzayı görece verimsiz olarak taradığı için genellikle global arama ve lokal arama teknikleri tandem olarak kullanılır (Şekil 4.3).

4.4 Optimizasyon Tabanlı Homojenizasyon

Bu bölümde homojenizasyon problemi önceki bölümde verilen optimizasyon genel çerçevesine uygun olarak tanımlanacaktır. Buna göre minimizasyonu yapılacak hedef fonksiyonu, uygulanması gereken kısımlar ve bu fonksiyonları parametrize eden dizayn değişkenleri belirlenmelidir.

4.4.1 Hedef fonksiyonu

Hedef fonksiyonu benzerliği maksimize veya diğer bir deyişle farklılığı minimize etmek üzere kurulmalıdır. Uygun yer değiştirme sınır şartlarının uygulandığı kabulüyle THE'nin vereceği cevap, sınır düğüm noktalarının serbestlik doğrultularındaki tepki kuvveti olur.

4.4.2 Sınır şartları

Sınır şartlarının, en küçük kareler regresyonu yaklaşımında olduğu gibi binlerce farklı durumda uygulanması optimizasyon için yapılacak hesaplama yükü açısından uygulanabilir değildir.

Bu nedenle genel davranışı temsil etmek üzere sınırlı sayıda ama temsil yeteneği yüksek yükleme durumu seçilmelidir. Literatürde malzemelerin karakterizasyonu amacıyla sıklıkla doğal titreşim modları kullanılmaktadır (Mishra & Chakraborty, 2015) (Gibson, 2000).

Bu çalışmada da bu yaklaşım takip edilerek, temsili sınır şartları olarak THE'nin ilk 10 doğal titreşim mod şekli uygun bir şekilde normalize edilip sınır düğüm noktalarına uygulanmıştır.

Her bir sınır şartı durumu için iki modelden de elde edilecek tepki kuvvetleri $22 \times 2 = 44$ adet olacaktır. Bu iki tepki kuvveti seti üzerinden bir fark normu tanımlanmalıdır. Her bir serbestlik için farkın mutlak değeri veya karesi kullanılabilir.

Tüm serbestlikler için bu mutlak değerlerin ortalaması (L^1 normu), karelerinin ortalaması (L^2 normu) veya maksimum değeri (L^∞ normu) kullanılabilir. Farkın mutlak değeri özellikle aykırı değerlere daha toleranslı olması açısından tercih edilmektedir. Dolayısıyla hedef fonksiyonu

$$\min_{E_1, E_2, \dots, E_n} \sum_i^{10} \sum_j^{22} \sum_k^2 |Tepki_{HETERO}^{i,j,k} - Tepki_{HOMO}^{i,j,k}| \quad (4.3)$$

olarak ifade edilebilir. Burada n malzeme sabiti sayısını, i mod şekli no, j düğüm no ve k serbestlik no'yu göstermektedir. HETERO referans THE'yi, HOMO ise homojen anizotropik malzemeyi belirtir. Her ne kadar yukarıda ortalama ifadesi kullanılsa da optimizasyon açısından toplama ve ortalama işlemi açısından fark olmayıp, ortalamada ayrıca gereksiz bir bölme adımı bulunmaktadır.

4.4.3 Dizayn parametreleri

Problemin dizayn parametreleri, benzetilecek olan homojen anizotropik malzemedan oluşturulan THE modelinin elastik malzeme katsayılarıdır. Malzeme matrisinin simetrik ve pozitif belirli olma koşulu daha önce belirtilmişti. Matrisin sadece üst üçgeni kullanıldığı için simetri koşulu için ilave bir önleme gerek yoktur. Pozitif belirli olma ise daha karmaşık bir koşul olup, bu konuya kısıtlarla ilgili bölümde değinilecektir.

Optimizasyonun yapılabilmesi için dizayn parametrelerinin tanımlandığı uzayın sınırları da belirlenmelidir. Büyük sınırlar arama süresini uzatıp, optimizasyonun

makul sürelerde sonuçlanmasına engel olur. Fazlasıyla dar alındığında da bu sefer olası en iyi noktalara artık ulaşmak mümkün olmaz.

İzotropik THE modelinde kullanılan 2 malzemenin biri takviye diğeri matris olup aralarında elastisite modülü açısından mertebe farkı bulunmaktadır. Fakat en küçük kareler regresyonundan elde edilen sonuçlar bizlere bu değerlerden daha dar bir aralığı da seçebileceğimize işaret etmektedir. Ayrıca geniş sınırlardan bağlayıp, bulunan sonuçlara göre daha dar uzaylara odaklanmak da mümkündür.

4.4.4 Kısıtlar

Mekanik tasarım problemlerinde kısıtlar genellikle hesaplanması zahmetli olan gerilme, yer değiştirme gibi analiz çıktılarıdır. Bu nedenle formları da optimizasyon sürecini zorlaştıracak şekilde doğrusal olmayan karmaşık bir yapıdadırlar.

Homojenizasyon probleminde bu değerler doğrudan hedef fonksiyonunda olup, kısıt olarak sadece malzeme sabitlerinin uyması gereken pozitif belirli olma şartı bulunmaktadır. Pozitif belirli olma şartı geometrik olarak düşünüldüğünde konik formdadır. Bu koninin içi pozitif belirli olup, sayısal olarak bakıldığında malzeme matrisinde diyagonal üzerindeki sabitlerin pozitif ve diyagonal dışı terimlerin de büyüklükleri görece büyük olmayacak şekilde negatif olabilecekleri anlamına gelmektedir.

Kısıtın matematiksel olarak ifadesi de tüm özdeğerlerin sıfırdan büyük olması gerektiği şeklinde ifade edilebilir. Yani,

$$\min(\text{özdeğer}(E)) > 0 \quad (4.4)$$

Sonuç olarak çözülecek olan optimizasyon probleminin tamamı,

$$\min_{E_1, E_2, \dots, E_n} \sum_i^{10} \sum_j^{22} \sum_k^2 |Tepki_{HETERO}^{i,j,k} - Tepki_{HOMO}^{i,j,k}| \quad (4.5)$$

$$\min(\text{özdeğer}(E)) > 0$$

4.5 Çözüm yaklaşımı

Problem tanımı ardından uygun bir çözüm yaklaşımı geliştirilmelidir. Fakat bu çalışmada, her ne kadar bir yaklaşım önerilse de temel amaç homojenizasyonun

özellikle tek takviyeli THE'ler için farklı bir problem formunda kurgulanmasıyla elde edilecek sonuçların irdelenmesidir. Bu nedenle çözümün elde edilme hızından ziyade daha iyi bir çözümün varlığına dair bulgular incelenecektir.

Önceki bölümlerde optimizasyon problemleri çözümünde sıklıkla global ve lokal yaklaşımların birlikte kullanıldıkları belirtilmişti. Burada da aynı yol izlenerek uzay önce global olarak taranacak, ardından aday noktalar için ilave lokal arama yoluna gidilecektir.

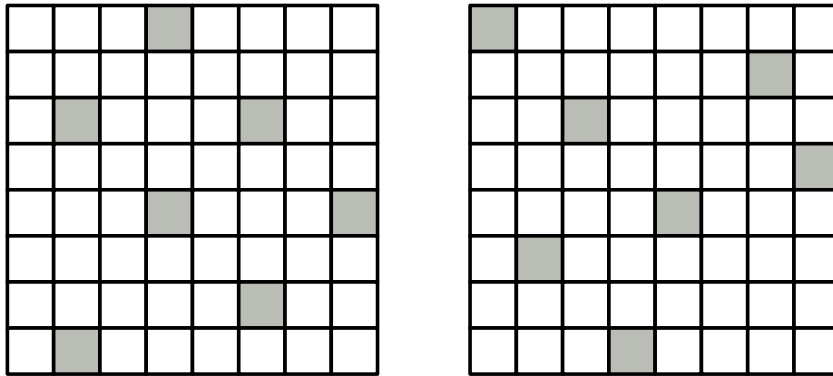
4.5.1 Global optimizasyon

Global arama açısından ilk akla gelen kaba kuvvet yönteminde, rasgele tüm uzaydan noktalar toplanıp en iyi nokta kaydedilerek en iyi nokta aranır. Bu yaklaşımda noktalar belirli bir strateji ile belirlenmediği için arama verimsiz bir şekilde ilerler. Bunun yerine uzayın mümkün mertebe her bölgesinden dengeli bir şekilde örneklem toplamaya dayanan latin hiperküp (LH) örnekleme tekniği tercih edilmiştir (McKay, Beckman, & Conover, 2000).

LH örnekleme yöntemi genelde makine öğrenmesi teknikleri için veri toplama amacıyla kullanılmaktadır. Optimizasyon bakış açısıyla amaç

- arama uzayını önceden belirlenen örneklem sayısı kadar nokta ile
- yüksek verimle
- kapsamlı olarak

aranmasıdır. Yüksek verimi daha açık ifade etmek üzere Şekil 4.4'de görülen örneklemler kurgulanmıştır.



Şekil 4.4 : Rasgele (soldaki) ve Latin hiperküp (sağdaki) örnekleme.

Görüldüğü gibi rasgele yapılan örneklemeyle kimi zaman aynı satır veya aynı sütundan birden fazla örnek toplayıp, kimi satır veya sütunlardan hiç örneklem toplanmaması mümkün olmaktadır. Fakat LH örnekleme ile noktaların mümkün mertebe tüm bu bölüntülerden dengeli olarak toplanması amaçlanmaktadır.

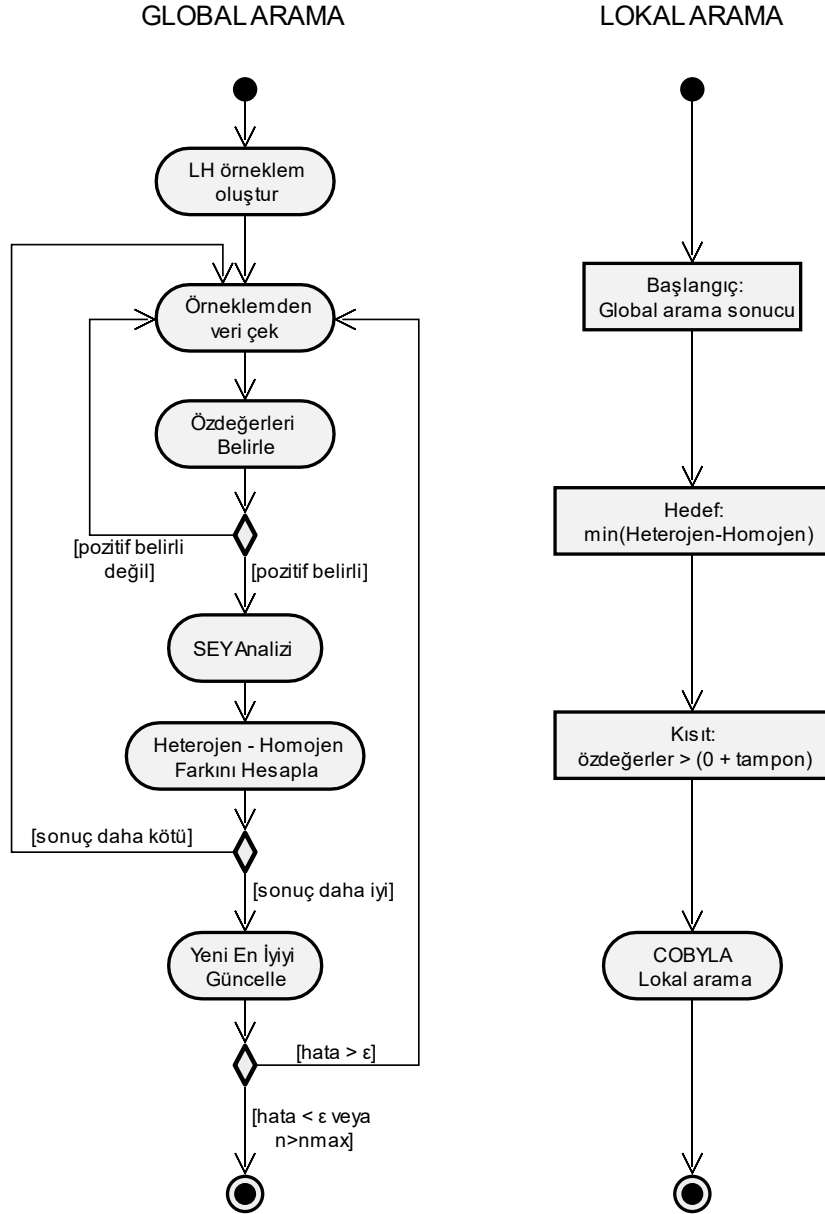
4.5.2 Lokal optimizasyon

Konvansiyonel optimizasyon yöntemleri, lokal arama konusunda, global aramaya kıyasla daha ileri durumdadır. Bu çalışmada lokal arama için Python tabanlı NLOPT kütüphanesinden faydalanılmıştır. Kütüphane kapsamında kısıtlı, kısıtsız, doğrusal, doğrusal olmayan gibi pek çok problem tipine uygun algoritmalar bulunmaktadır. Bunlardan özellikle doğrudan arama yapabilme, doğrusal olmayan ve kısıtlı problemlere uygulanabilme özellikleri nedeniyle COBYLA yöntemi tercih edilmiştir.

M.J.D. Powel tarafından geliştirilen bu yönteme göre her bir adımda, mevcut nokta etrafında kurulan bir güven bölgesi için doğrusal yaklaşık modeller üzerinden bir lineer programlama tekniği uygulanmaktadır (Powell, 1994).

Yöntem oldukça kararlı çalışmaktadır fakat bir çok yöntemde olduğu gibi bu yöntemin bir özelliği, mevcut çalışma için çözüm almayı zorlaştırmaktadır. Arama sonunda kısıtlar dahilinde bir optimum nokta hedeflense de arama sürecinde kısıtların ihlal edilmesi garanti edilememektedir. Optimizasyonda ceza yöntemi denilen yaklaşımlar, kısıt ihlaline izin vermekte fakat cezalandırma yöntemiyle aramanın sonuna doğru kısıtlara uygunluk hedeflenmektedir.

Bu sorunun giderilmesi için çözüm olarak kısıt fonksiyonuna tampon bir değer ilave edilip arama ilerledikçe bu değer düşürülmektedir. Bu yolla tampon sınırı ihlal edilse de gerçek kısıtla hala daha belirli bir mesafe korunacaktır.



Şekil 4.5 : Optimizasyon yaklaşımı aktivite diyagramı.

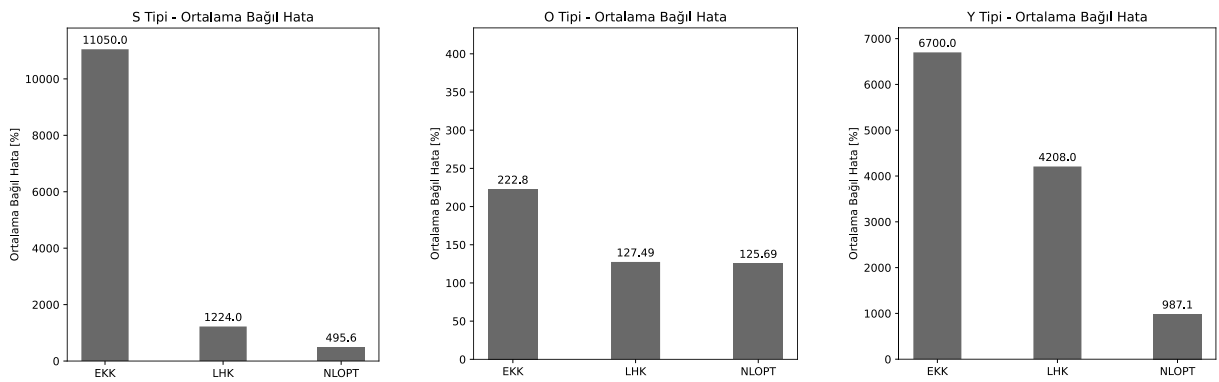
Sonuç olarak optimizasyon yaklaşımının adımları Şekil 4.5'te gösterilmiştir. Önce global aramayla başlanır. LH örnekleme noktaları önce pozitif belirli olup olmadıklarına bakılır, eğer öyleyse analize geçilir ve sonunda hata miktarları belirlenir. Daha iyi bir nokta bulunduğunda, mevcut en iyi nokta güncellenir.

Ardından lokal aramaya geçilir. Bulunan en iyi nokta başlangıç noktası olarak alınır ve kısıtlı arama yapılır. Belirli bir yakınsama görüldüğünde arama sonlanır.

4.6 Sonular

Optimizasyon yaklařımı nceki blmlerde kullanılan  farklı takviye durumuna uygulanmıřtır. nce latin hiperkp yaklařımı ile ilk elde edilen ara sonular kaydedilmiř, ardından tandem olarak uygulanan lokal arama ile nihai sonular elde edilmiřtir.

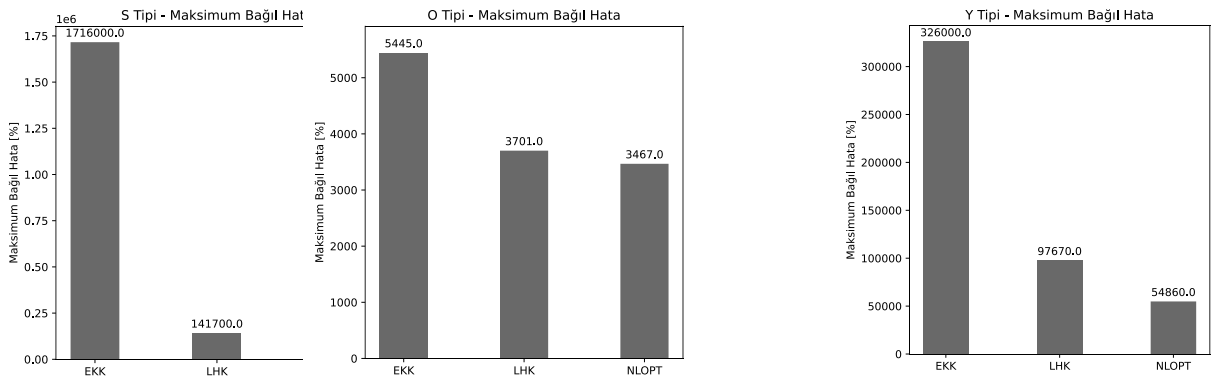
Yine bir nceki blmde verildiėi gibi baėıl hata ortalama deėerleri karřılařtırmak zere en kk kareler, latin hiperkp (LHK) ve lokal arama (NLOPT) iin ubuk grafik olarak řekil 4.6'da verilmiřtir.



řekil 4.6 : Ortalama baėıl hata.

nceki blmden farklı olarak bu hatalar gerilmenin hacimsel ortalamaları iin yapılan tahmin iin deėil, sınır dėm noktalarında elde edilen tepki kuvvetleri iin verilmektedir. Bu nedenle hata mertebelerinde bulunan farklılık bir nceki blm sonularıyla doėrudan bir kıyas yapılmasına izin vermediėi iin deėerlendirme kendi iinde yapılacaktır.

Sonulara gre, takviye tipinden baėımsız olarak latin hiper kp yaklařımı ile bulunan ara sonu ve devamındaki lokal arama ok daha dřk dzeylerde hata retmektedir.



řekil 4.7 : Maksimum baėıl hata.

Maksimum bağıl hata karşılaştırma grafiği de Şekil 4.7'de görülmektedir. Burada da aynı olumlu eğilim tekrar etmektedir.

Sonuçlar bize göstermektedir ki:

1. Sınır davranışı üzerinden kurulan bir eşleştirme, hacimsel ortalamalara kıyasla çok daha iyi sonuç vermektedir.
2. Tepki kuvvetleri üzerinden elde edilen bağıl hata oranı yüksek gözükmemektedir. Fakat çok sayıda düğüm noktasından ve farklı sınır şartlarından elde edilen bu hata, pratikte asıl elde edilmek istenen maksimum gerilme gibi çıktılarına olan etkisi gözükmemektedir.
3. Bu çalışmada ortaya konan yöntemle, Hill Mandel kriteri tabanlı hacimsel yaklaşımda beklenenden çok daha küçük bir temsili hacim elemanı ile homojenleştirme yapılabileceği öngörülmektedir.

Önümüzdeki bölümde elde edilen sonuçlar değerlendirilip, gelecekte bu çalışmayı ilerletmek üzere öneriler sunulacaktır.

5. SONUÇLAR

Çok karmaşık iç yapıları ve bileşenler arası ölçek farklılıkları nedeniyle kompozit malzemelerin modellenmesinde homojenizasyon işlemi önemli bir rol oynamaktadır. Kısıtlayıcı kabuller altında gerçekleştirilen yaklaşık yöntemlerle temsil yeteneği sınırlı modeller kurulabilmektedir. Bunun yerine günümüzde hesaplama imkanlarının gelişmesiyle sonlu elemanlar tabanlı temsili hacim elemanı yaklaşımı, daha az kısıtla daha gerçekçi sonuçlar verebilmektedir.

Diğer bir taraftan temsili hacim elemanı homojenizasyonunda, Hill Mandel kriterleri modelin büyüklüğü açısından bir alt sınır kısıtı getirmekte ve dolayısıyla hesaplama süresi bakımından olumsuz bir durum ortaya çıkmaktadır.

Literatürde karbon nanotüp gibi çok küçük ölçeklerde tanımlı malzemelerle takviye edilen kompozitler için sadece tek bir takviye ile kurulan temsili hacim elemanları kullanılmış ve bu çalışmalarda sadece boy doğrultusundaki elastik sabitlerin elde edilmesine yönelik homojenizasyon işlemi yapılmıştır.

Bu tezde, tek takviyeli temsili hacim elemanı yaklaşımının Hill-Mandel kriterine uymamasının ne tip sonuçlar doğuracağı, bu kriter paralelinde malzeme sabitlerinin tespitinde hacimsel ortalamaların kullanımın sonuçları incelenmiş ve ardından alternatif bir yaklaşımla daha başarılı bir modelin elde edilebilirliği sorgulanmıştır.

Bu doğrultuda önce yeterince büyük modellerde olduğu gibi minimum sayıda durum üzerinden interpolasyonla değil, çok sayıda rasgele sınır şartı kullanılarak en küçük kareler regresyonu yöntemiyle malzeme sabitleri elde edilmiştir. Sonuç olarak veri kümesinden alınan alt örneklemelerle elde edilen katsayılar yüksek seviyelerde varyans olduğu gözlemlenmiştir. Bu varyansın kaynağı ölçek, modelleme tekniği veya hacimsel ortalama kullanımı olması gerekir.

İstatistiksel yaklaşımda kullanılabilecek iyileştirmelerin eksikliğinin bu sonuçlardaki payını tespit etmek üzere aynı model, gerilme - şekil değiştirme arası ilişkiyi kurmak üzere tekrar kullanılmış ve bu sefer makine öğrenmesi ile birlikte modelin kalitesini arttırmaya dönük dönüşümler ve doğrusal olmayan makine öğrenme modelleri kullanılmış, fakat sonuçlar açısından kayda değer bir farklılık görülmemiştir.

Buradan hareketle modelin yeterince büyük olmamasının yanında Hill-Mandel perspektifiyle kullanılan hacimsel ortalama yaklaşımda bir problem olabileceği düşünülmüştür.

Alternatif bir yaklaşım olarak hacimsel ortalamalar yerine, orijinal heterojen model ile homojen anizotropik bir modelin sınır davranışlarının benzetimi üzerinden optimizasyon tabanlı bir çözüm sunulmuştur. Sonuçlara göre sınır benzetimi üzerinden çok daha iyi sonuç alındığı tespit edilmiştir.

Sonuç olarak elde edilen bulgular ışında aşağıdaki değerlendirmeler yapılabilir:

1. Tek takviyeli temsili hacim elemanı için en küçük kareler yöntemi ile gerilme ve şekil değiştirme arasında ilişki kurulduğunda, elde edilen malzeme katsayılarında yüksek belirsizlik gözlenmektedir. Bu belirsizlik gerilmenin hacimsel ortalaması tahminine de yansımaktadır.
2. Malzeme katsayılarının tespit edilmesi bir kenara bırakılıp sadece gerilme - şekil değiştirme ilişkisi üzerinden makine öğrenmesi kapsamındaki güncel modelleme teknikleri kullanıldığında kayda değer bir fark gözlemlenmemektedir. Bu durumda ilişkinin zayıf olmasının modelleme tekniğinden kaynaklanmadığı görülmektedir.
3. Heterojen ve homojen iki modelin sınır davranışını eşleştirme esasına dayanan optimizasyon tabanlı yöntem kullanıldığında, hacimsel yaklaşıma nazaran gözle görülür bir gelişme kaydedilmektedir.
4. Bağlı hata mertebeleri yüksek görülmekle birlikte, bu hatalar tepki kuvvetleri üzerinden elde edilmiştir. Pratikte önemi olan maksimum gerilme gibi indikatörlerin bu yaklaşımla ne kadar yakın tahmin edilebileceği konusunda eldeki verilerle bir çıkarım yapmak mümkün olmadığından, global bir model üzerinden ilave bir çalışma yapılması gerekir.
5. Mevcut yaklaşımlardaki temsili hacim eleman kullanımına alternatif olarak optimizasyon tabanlı yaklaşım kullanıldığında, çok daha küçük boyutlardaki modellerle bile yakın sonuçlar elde edilebileceği öngörülmektedir.

5.1 Gelecek Çalışmalar

Bu çalışma ile sunulan yeni homojenizasyon yaklaşımı en azından temsili hacim elemanı boyutuyla ilgili bir iyileştirme sağlayacaktır. Fakat bunun yanında henüz cevaplanmamış bazı sorular bu konuyla ilgili gelecekteki çalışmalara yön verebilir.

Öncelikle tepki kuvvetleri açısından gözlemlenen yüksek bağıl hatanın, global modelden elde edilmek istenen önemli çıktılar açısından sonuçları incelenmelidir. Sadece basit bir oranlama ile bile en küçük kareler sonucu elde edilen hata, pratikte kullanılabilecek seviyelere düşülebileceğini göstermektedir. Ama bu durum doğrudan bir modellemeyle gösterilmelidir. Olumlu sonuç alma durumunda, bu yaklaşımın devamında kullanılabilecek Mori-Tanaka gibi yaklaşık tekniklerle birlikte çok faydalı bir yöntem ortaya koyulabilecektir.

Temsili hacim elemanının yaygın kullanımına kıyasla, yeni yaklaşımla ne kadar küçültülebileceği de araştırılmalıdır. Bu yolla ilk planda bu tip analizler için kayda değer ilk çıktısı elde edilmiş olacaktır.

Kullanılan optimizasyon yaklaşımı sadece daha iyi noktaların varlığını tespit etmek için kurgulanmıştır. Muhtemel daha iyi noktaların tespitine yönelik farklı optimizasyon teknikleri denenebilir. Bunun yanında problem kısıtlı bir problem olarak kurgulandığı için arama daha yavaş ve kısıtlayıcı ilerlemiştir. Alternatif ve kısıtsız bir formülasyon problemin global optimumu bulmasında yardımcı olabilir.

Sınır şartları açısından mod şekillerinin sayısının veya alternatif yer değiştirme düzenlerinin homojenizasyon sonuçlarına etkisine de bakılmalıdır.

Problem 2 boyutlu ele alındığından, 3 boyutlu geometri ve 21 anizotropik katsayı için de optimizasyon yaklaşımı denenmelidir. Burada özellikle arama uzayının büyüklüğü üstesinden gelinmesi gereken en büyük problem olarak gözükmektedir.

KAYNAKLAR

- Alian, A. R., Kundalwal, S. I., & Meguid, S. A.** (2015). Multiscale modeling of carbon nanotube epoxy composites. *Polymer*, 70, 149–160.
- Ansari, R., & Hassanzadeh-Aghdam, M. K.** (2017). Micromechanical characterizing elastic, thermoelastic and viscoelastic properties of functionally graded carbon nanotube reinforced polymer nanocomposites. *Meccanica*, 52, 1625–1640.
- Ansys Inc.** (2018). *Mechanical APDL Documentation*.
- Arani, A. G., Maghamikia, S., Mohammadimehr, M., & Arefmanesh, A.** (2011). Buckling analysis of laminated composite rectangular plates reinforced by SWCNTs using analytical and finite element methods. *Journal of Mechanical Science and Technology*, 25, 809–820.
- Barai, P., & Weng, G. J.** (2011). A theory of plasticity for carbon nanotube reinforced composites. *International Journal of Plasticity*, 27, 539–559.
- Benveniste, Y.** (1987). A new approach to the application of Mori-Tanaka's theory in composite materials. *Mechanics of Materials*, 6, 147–157.
- Benveniste, Y.** (2008). Revisiting the generalized self-consistent scheme in composites: Clarification of some aspects and a new formulation. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 56, 2984–3002.
- Beran, M. J.** (1968). Statistical continuum theories. *American Journal of Physics*, 36, 923–923.
- Boser, B. E., Guyon, I. M., & Vapnik, V. N.** (1992). A training algorithm for optimal margin classifiers. *Proceedings of the fifth annual workshop on Computational learning theory*, (s. 144–152).
- Box, G. E., & Cox, D. R.** (1964). An analysis of transformations. *Journal of the Royal Statistical Society*, 26, 211–243.
- Brcic, M., Canadija, M., & Brnic, J.** (2013). Estimation of material properties of nanocomposite structures. *Meccanica*, 48, 2209–2220.
- Buitinck, L., Louppe, G., Blondel, M., Pedregosa, F., Mueller, A., Grisel, O., . . . Varoquaux, G.** (2013). API design for machine learning software: experiences from the scikit-learn project. *ECML PKDD Workshop: Languages for Data Mining and Machine Learning*, (s. 108–122).
- Curtu, I., & Motoc, D. L.** (2008). Theoretical-experimental comparisons of multi-phase composite materials elastic coefficients retrieved from tensile, compressive and bending tests. Influencing factors. *Materiale Plastice*, 45, 366–371.
- Dresselhaus, G., Dresselhaus, M. S., & Saito, R.** (1998). *Physical properties of carbon nanotubes*. World scientific.

- Efron, B.** (1992). Bootstrap methods: another look at the jackknife. *Breakthroughs in statistics* (s. 569–593). içinde Springer.
- El Moumen, A., Kanit, T., Imad, A., & El Minor, H.** (2015). Effect of reinforcement shape on physical properties and representative volume element of particles-reinforced composites: statistical and numerical approaches. *Mechanics of Materials*, 83, 1–16.
- Eshelby, J. D.** (1957). The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 241, 376–396.
- Esteva, M., & Spanos, P.** (2009). Effective elastic properties of nanotube reinforced composites with slightly weakened interfaces. *Journal of Mechanics of Materials and Structures*, 4, 887–900.
- Feder, J.** (1980). Random sequential adsorption. *Journal of Theoretical Biology*, 87, 237–254. doi:[https://doi.org/10.1016/0022-5193\(80\)90358-6](https://doi.org/10.1016/0022-5193(80)90358-6)
- Fisher, F. T., Bradshaw, R. D., & Brinson, L. C.** (2003). Fiber waviness in nanotube-reinforced polymer composites - I: Modulus predictions using effective nanotube properties. *Composites Science and Technology*, 63, 1689–1703.
- García-Macías, E., Guzmán, C. F., Flores, E. I., & Castro-Triguero, R.** (2019). Multiscale modeling of the elastic moduli of CNT-reinforced polymers and fitting of efficiency parameters for the use of the extended rule-of-mixtures. *Composites Part B*, 159, 114–131.
- Garcia-Macias, E., Rodriguez-Tembleque, L., Castro-Triguero, R., & Saez, A.** (2017). Eshelby-Mori-Tanaka approach for post-buckling analysis of axially compressed functionally graded CNT/polymer composite cylindrical panels. *Composites Part B*, 128, 208–224. doi:<https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2017.07.016>
- Ghossein, E., & Lévesque, M.** (2014). A comprehensive validation of analytical homogenization models: The case of ellipsoidal particles reinforced composites. *Mechanics of Materials*, 75, 135–150.
- Gibson, R. F.** (2000). Modal vibration response measurements for characterization of composite materials and structures. *Composites Science and Technology*, 60, 2769–2780.
- Gómez-del Río, T., Poza, P., Rodríguez, J., García-Gutiérrez, M. C., Hernández, J. J., & Ezquerro, T. A.** (2010). Influence of single-walled carbon nanotubes on the effective elastic constants of poly (ethylene terephthalate). *Composites Science and Technology*, 70, 284–290.
- Hammerand, D. C., Seidel, G. D., & Lagoudas, D. C.** (2007). Computational micromechanics of clustering and interphase effects in carbon nanotube composites. *Mechanics of Advanced Materials and Structures*, 14, 277–294.
- Harris, C. R., Millman, K. J., van der Walt, S. J., Gommers, R., Virtanen, P., Cournapeau, D., . . . Oliphant, T. E.** (2020, September). Array programming with NumPy. *Nature*, 585, 357–362. doi:[10.1038/s41586-020-2649-2](https://doi.org/10.1038/s41586-020-2649-2)

- Hasanzadeh, M., Ansari, R., & Hassanzadeh-Aghdam, M. K.** (2019). Evaluation of effective properties of piezoelectric hybrid composites containing carbon nanotubes. *Mechanics of Materials*, 129, 63–79.
- Hashin, Z.** (1983, September). Analysis of composite materials: A survey. *Journal of Applied Mechanics*, 50, 481–505. doi:10.1115/1.3167081
- Hashin, Z., & Shtrikman, S.** (1962). On some variational principles in anisotropic and nonhomogeneous elasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 10, 335–342. doi:https://doi.org/10.1016/0022-5096(62)90004-2
- Heshmati, M., Yas, M. H., & Daneshmand, F.** (2015). A comprehensive study on the vibrational behavior of CNT-reinforced composite beams. *Composite Structures*, 125, 434–448.
- Hill, R.** (1963). Elastic properties of reinforced solids: some theoretical principles. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 11, 357–372.
- Hill, R.** (1965). A self-consistent mechanics of composite materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 13, 213–222.
- Hone, J., Whitney, M., Piskoti, C., & Zettl, A.** (1999). Thermal conductivity of single-walled carbon nanotubes. *Physical Review B*, 59, R2514.
- Huet, C.** (1990). Application of variational concepts to size effects in elastic heterogeneous bodies. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 38, 813–841. doi:https://doi.org/10.1016/0022-5096(90)90041-2
- Hussein, A., & Kim, B.** (2018). Graphene/polymer nanocomposites: The active role of the matrix in stiffening mechanics. *Composite Structures*, 202, 170–181.
- Iijima, S.** (1991). Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature*, 354, 56–58.
- Iijima, S., & Ichihashi, T.** (1993). Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter. *Nature*, 363, 603–605.
- Ji, X.-Y., Cao, Y.-P., & Feng, X.-Q.** (2010). Micromechanics prediction of the effective elastic moduli of graphene sheet-reinforced polymer nanocomposites. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18, 045005.
- Joshi, P., & Upadhyay, S. H.** (2014). Evaluation of elastic properties of multi walled carbon nanotube reinforced composite. *Computational Materials Science*, 81, 332–338.
- Joshi, U. A., Sharma, S. C., & Harsha, S. P.** (2011). Effect of waviness on the mechanical properties of carbon nanotube based composites. *Physica E*, 43, 1453–1460.
- Karush, W.** (1939). *Minima of functions of several variables with inequalities as side constraints*. Master's thesis, Department of Mathematics, University of Chicago.

- Kianfar, A., Seyyed Fakhrabadi, M. M., & Mashhadi, M. M.** (2020). Prediction of mechanical and thermal properties of polymer nanocomposites reinforced by coiled carbon nanotubes for possible application as impact absorbent. *Journal of Mechanical Engineering Science*, 234, 882–902.
- Kim, P., Shi, L., Majumdar, A., & McEuen, P. L.** (2001). Thermal transport measurements of individual multiwalled nanotubes. *Physical Review Letters*, 87, 215502.
- Kroto, H. W., Heath, J. R., O'Brien, S. C., Curl, R. F., & Smalley, R. E.** (1985). C₆₀: buckminsterfullerene. *Nature*, 318, 162–163.
- Kumar, D., & Srivastava, A.** (2016). Elastic properties of CNT-and graphene-reinforced nanocomposites using RVE. *Steel and Composite Structures*, 21, 1085–1103.
- Leclerc, W., Ferguen, N., Pélegris, C., Haddad, H., Bellenger, E., & Guessasma, M.** (2016). A numerical investigation of effective thermoelastic properties of interconnected alumina/Al composites using FFT and FE approaches. *Mechanics of Materials*, 92, 42–57.
- Liu, Y. J., & Chen, X. L.** (2003). Evaluations of the effective material properties of carbon nanotube-based composites using a nanoscale representative volume element. *Mechanics of Materials*, 35, 69–81.
- Lu, J. P.** (1997). Elastic properties of carbon nanotubes and nanoropes. *Physical Review Letters*, 79, 1297.
- McKay, M. D., Beckman, R. J., & Conover, W. J.** (2000). A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code. *Technometrics*, 42, 55–61.
- Meguid, S. A., Wernik, J. M., & Cheng, Z. Q.** (2010). Atomistic-based continuum representation of the effective properties of nano-reinforced epoxies. *International Journal of Solids and Structures*, 47, 1723–1736.
- Mercer, J., & Forsyth, A. R.** (1909). Functions of positive and negative type, and their connection with the theory of integral equations. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 83, 69–70. doi:10.1098/rspa.1909.0075
- Mishra, A. K., & Chakraborty, S.** (2015). Determination of material parameters of FRP plates with rotational flexibility at boundaries using experimental modal testing and model updating. *Experimental Mechanics*, 55, 803–815.
- Montgomery, D. C., Peck, E. A., & Vining, G. G.** (2021). *Introduction to linear regression analysis*. John Wiley & Sons.
- Mori, T., & Tanaka, K.** (1973). Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metallurgica*, 21, 571–574.
- Mortazavi, B., Bardon, J., & Ahzi, S.** (2013). Interphase effect on the elastic and thermal conductivity response of polymer nanocomposite materials: 3D finite element study. *Computational Materials Science*, 69, 100–106.

- Moussaddy, H., Therriault, D., & Lévesque, M.** (2013). Assessment of existing and introduction of a new and robust efficient definition of the representative volume element. *International Journal of Solids and Structures*, 50, 3817–3828.
- Mura, T.** (1987). *Micromechanics of defects in solids*. Springer Netherlands.
- Ogierman, W., & Kokot, G.** (2016). A study on fiber orientation influence on the mechanical response of a short fiber composite structure. *Acta Mechanica*, 227, 173–183.
- Ostoja-Starzewski, M.** (1998). Random field models of heterogeneous materials. *International Journal of Solids and Structures*, 35, 2429–2455. doi:[https://doi.org/10.1016/S0020-7683\(97\)00144-3](https://doi.org/10.1016/S0020-7683(97)00144-3)
- Pan, J., Bian, L., Zhao, H., & Zhao, Y.** (2016). A new micromechanics model and effective elastic modulus of nanotube reinforced composites. *Computational Materials Science*, 113, 21–26.
- Pedregosa, F., Varoquaux, G., Gramfort, A., Michel, V., Thirion, B., Grisel, O., . . . Duchesnay, E.** (2011). Scikit-learn: Machine Learning in Python. *Journal of Machine Learning Research*, 12, 2825–2830.
- Poh, L., Della, C., Ying, S., Goh, C., & Li, Y.** (2015). Micromechanics model for predicting effective elastic moduli of porous ceramic matrices with randomly oriented carbon nanotube reinforcements. *AIP Advances*, 5, 097153.
- Poncharal, P., Wang, Z. L., Ugarte, D., & De Heer, W. A.** (1999). Electrostatic deflections and electromechanical resonances of carbon nanotubes. *Science*, 283, 1513–1516.
- Powell, M. J.** (1994). A direct search optimization method that models the objective and constraint functions by linear interpolation. *Advances in optimization and numerical analysis* (s. 51–67). içinde Springer.
- Qu, J., & Cherkaoui, M.** (2006). *Fundamentals of micromechanics of solids*. John Wiley & Sons Inc.
- Quenouille, M. H.** (1956). Notes on bias in estimation. *Biometrika*, 43, 353–360.
- R Core Team.** (2021). *R: a language and environment for statistical computing*. Vienna. <https://www.R-project.org/> adresinden alındı
- Rasmussen, C. E.** (2003). Gaussian processes in machine learning. *Summer school on machine learning*, (s. 63–71).
- Reuß, A.** (1929). Berechnung der fließgrenze von mischkristallen auf grund der plastizitätsbedingung für einkristalle. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 9, 49–58.
- Segurado, J., & LLorca, J.** (2006). Computational micromechanics of composites: the effect of particle spatial distribution. *Mechanics of Materials*, 38, 873–883.
- Seidel, G. D., & Lagoudas, D. C.** (2006). Micromechanical analysis of the effective elastic properties of carbon nanotube reinforced composites. *Mechanics of Materials*, 38, 884–907.

- Selmi, A., Friebe, C., Doghri, I., & Hassis, H.** (2007). Prediction of the elastic properties of single walled carbon nanotube reinforced polymers: A comparative study of several micromechanical models. *Composites Science and Technology*, 67, 2071–2084.
- Shi, D.-L., Feng, X.-Q., Huang, Y. Y., Hwang, K.-C., & Gao, H.** (2004). The effect of nanotube waviness and agglomeration on the elastic property of carbon nanotube-reinforced composites. *J. Eng. Mater. Technol.*, 126, 250–257.
- Smola, A. J., & Schölkopf, B.** (2004). A tutorial on support vector regression. *Statistics and Computing*, 14, 199–222.
- Song, Y. S., & Youn, J. R.** (2006). Modeling of effective elastic properties for polymer based carbon nanotube composites. *Polymer*, 47, 1741–1748.
- Tane, M., Okuda, H., & Tanaka, F.** (2019). Nanocomposite microstructures dominating anisotropic elastic modulus in carbon fibers. *Acta Materialia*, 166, 75–84.
- Torquato, S.** (2002). *Random heterogeneous materials: Microstructure and macroscopic properties*. Springer-Verlag.
- Vapnik, V., & Chervonenkis, A. Y.** (1964). A class of algorithms for pattern recognition learning. *Avtomat. i Telemekh*, 25, 937–945.
- Voigt, W.** (1889). Ueber die Beziehung zwischen den beiden Elasticitätsconstanten isotroper Körper. *Annalen der Physik*, 274, 573–587.
- Wang, J. F., & Liew, K. M.** (2015). On the study of elastic properties of CNT-reinforced composites based on element-free MLS method with nanoscale cylindrical representative volume element. *Composite Structures*, 124, 1–9.
- Wang, T.-Y., Tseng, P.-Y., & Tsai, J.-L.** (2019). Characterization of Young's modulus and thermal conductivity of graphene/epoxy nanocomposites. *Journal of Composite Materials*, 53, 835–847.
- Wang, Z., Zhu, J., Jin, X. Y., Chen, W. Q., & Zhang, C.** (2014). Effective moduli of ellipsoidal particle reinforced piezoelectric composites with imperfect interfaces. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 65, 138–156.
- Watt, J. P., & O'Connell, R. J.** (1980). An experimental investigation of the Hashin-Shtrikman bounds on two-phase aggregate elastic properties. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 21, 359–370. doi:[https://doi.org/10.1016/0031-9201\(80\)90139-9](https://doi.org/10.1016/0031-9201(80)90139-9)
- Wei, B. Q., Vajtai, R., & Ajayan, P. M.** (2001). Reliability and current carrying capacity of carbon nanotubes. *Applied Physics Letters*, 79, 1172–1174.
- Willis, J. R.** (1982). Elasticity theory of composites. H. G. Hopkins, & M. J. SEWELL (Dü) içinde, *Mechanics of Solids* (s. 653–686). Oxford: Pergamon. doi:<https://doi.org/10.1016/B978-0-08-025443-2.50025-2>

- Xu, W., Wu, F., Jiao, Y., & Liu, M.** (2017). A general micromechanical framework of effective moduli for the design of nonspherical nano-and micro-particle reinforced composites with interface properties. *Materials and Design*, 127, 162–172.
- Yanase, K., Moriyama, S., & Ju, J. W.** (2013). Effects of CNT waviness on the effective elastic responses of CNT-reinforced polymer composites. *Acta Mechanica*, 224, 1351–1364.
- Yeo, I.-K., & Johnson, R. A.** (2000). A new family of power transformations to improve normality or symmetry. *Biometrika*, 87, 954–959.
- Zaoui, A.** (2002). Continuum micromechanics: Survey. *Journal of Engineering Mechanics*, 128, 808–816. doi:10.1061/(ASCE)0733-9399(2002)128:8(808)



ÖZGEÇMİŞ

Ad-Soyad : Emre KÖROĞLU

ÖĞRENİM DURUMU:

- **Lisans** : 2006, İstanbul Teknik Üniversitesi, Uçak ve Uzay Bilimleri Fakültesi, Uçak Mühendisliği
- **Yüksek Lisans** : 2010, İstanbul Teknik Üniversitesi, Uçak ve Uzay Mühendisliği, Uçak ve Uzay Mühendisliği

MESLEKİ DENEYİM VE ÖDÜLLER:

- 2011- – Araştırma Görevlisi – İstanbul Medeniyet Üniversitesi

DOKTORA TEZİNDEN TÜRETİLEN YAYINLAR, SUNUMLAR VE PATENTLER:

- **Köroğlu, E., & Türkmen, H. S. (2021).** Modeling of Randomly Oriented Carbon Nanotube Reinforced Composites. *JOURNAL OF MATERIALS AND ELECTRONIC DEVICES*, 4(1), 5-8.

