



# Bazalt/PANI Kompozitlerinin Dielektrik Özelliklerinin Tahmini için Makine Öğrenmesi Modellerinin Karşılaştırılması

Önder Eyecioğlu<sup>1\*</sup>

<sup>1\*</sup> Nişantaşı Üniversitesi, Mühendislik Mimarlık Fakültesi, Yazılım Mühendisliği Bölümü, İstanbul, Türkiye (ORCID: 0000-0002-9735-5697), [oeveci@gmail.com](mailto:oeveci@gmail.com)

(İlk Geliş Tarihi 8 Şubat 2021 ve Kabul Tarihi 27 Nisan 2021)

(DOI: 10.31590/ejosat.876423)

**ATIF/REFERENCE:** Eyecioğlu, Ö. (2021). Bazalt/PANI Kompozitlerinin Dielektrik Özelliklerinin Tahmini için Makine Öğrenmesi Modellerinin Karşılaştırılması. *Avrupa Bilim ve Teknoloji Dergisi*, (23), 817-826.

## Öz

İletken polimer kompozit malzemeler, süper kapasitörler, varistörler veya sensörler gibi birçok teknolojik uygulamada kullanılır. Teknolojik uygulamalar için çok önemli olan bu malzemelerin dielektrik geçirgenlik gibi elektronik özellikleri, katkı oranı ve sıcaklık gibi temel parametrelere bağlı olarak doğrusal olmayan davranış göstermektedir. Olası parametre konfigürasyonlarının fazlalığından dolayı bu özelliklerin istenen değerleri sağlaması için tüm uygun parametrelere setlerinin deneysel olarak belirlenmesi zahmetli ve maliyetlidir. Bu amaç için pratik bir yöntem önermek çok önemlidir. Bu çalışmada, CM1 ve KYZ13 bazalt katkılı PANI polimer kompozitlerinin kompleks dielektrik fonksiyonlarının gerçek ( $\epsilon'$ ) ve sanal bileşenlerinin ( $\epsilon''$ ), açılmal frekansa ( $\omega$ ) ve PANI konsantrasyonuna ( $w$ ) (%10, %25 ve %50) bağlı doğrusal olmayan değişimlerinin tahmini için üç farklı makine öğrenmesi algoritması uygulanmıştır. Bu algoritmalar, Doğrusal Regresyon (LR), k- En yakın komşu regresyonu (k-NN), Karar ağacı regresyonu (DT-R) makine öğrenmesi algoritmalarıdır. Bu algoritmaların eğitim süreçleri için gerekli olan veri seti, deneysel dielektrik ölçümleri kullanılarak oluşturulmuştur. Bu deneysel veriler, oda sıcaklığında 100 Hz ile 17.5 MHz arasında değişen frekans aralığında empedans analizör kullanılarak elde edilmiştir. Bu çalışmada lineer regresyon, k-en yakın komşu regresyon ve karar ağacı regresyon algoritmalarının tahmin performansı ayrıntılı olarak karşılaştırılmıştır. Karşılaştırma, istatistiksel fit, belirleme katsayısı ( $R^2$ ), ortalama karesel hata (OKH) ve ortalama mutlak hata (OMH) istatistiksel performans metriklerinin karşılaştırılması ile belirlenmiştir. Tahmin sonuçlarının performans karşılaştırması ile Lineer Regresyon algoritmasının uygun kararlı bir tahmin performansı göstermemesine karşın, karar ağacı regresyonu modelinin, hem gerçek ( $\epsilon'$ ) hem de sanal bileşenlerinin ( $\epsilon''$ ) hesaplanmasında daha uygun model olduğu görülmüştür.

**Anahtar Kelimeler:** Bazalt/PANI polimer kompozitleri, kompleks dielektrik fonksiyonları, Makine Öğrenmesi Doğrusal Regresyon, k- En yakın komşu regresyonu, Karar ağacı regresyonu.

## Comparison of Machine Learning Models for Estimation of Dielectric Properties of Basalt / PANI Composites

### Abstract

Conductive polymer composite materials are used in many technological applications such as supercapacitors, varistors or sensors. Electronic properties of these materials such as dielectric permeability, which are very important for technological applications, show nonlinear behavior depending on basic parameters such as additive rate and temperature. Due to the abundance of possible parameter configurations, it is cumbersome and costly to experimentally determine all the appropriate sets of parameters to achieve the desired values of these properties. It is very important to propose a practical method for determining the required parameter configurations in order for these properties to provide the desired values. In this study, three different machine learning algorithms have been applied for the prediction of real ( $\epsilon'$ ) and imaginary components ( $\epsilon''$ ) of nonlinear, complex dielectric functions dependent on frequency and PANI concentration (10%, 25% and 50%) of CM1 and KYZ13 basalt doped PANI polymer composites. These algorithms are Linear Regression, k- Nearest neighbor regression, Decision tree regression machine learning algorithms. The data set required for the training processes of these algorithms was created using experimental dielectric measurements. These experimental data were obtained using an impedance analyzer in the frequency range ranging from 100 Hz to 17.5 MHz at room temperature. In this study,

\* Sorumlu Yazar: [oeveci@gmail.com](mailto:oeveci@gmail.com)

the prediction performance of linear regression, k-nearest neighbor regression and decision tree regression algorithms are compared in detail. The comparison was determined by using statistical fit, coefficient of determination (R<sup>2</sup>), mean square error (MSE) and mean absolute error (MAE). Although the Linear Regression algorithm did not show a stable prediction performance with the performance comparison of the prediction results, Decision tree regression model has been found to be a more suitable model for computing both real ( $\epsilon'$ ) and virtual components ( $\epsilon''$ ).

**Keywords:** Basalt / PANI polymer composites, complex dielectric functions, Machine Learning, Linear Regression, k- Nearest neighbor regression, Decision tree regression.

## 1. Giriş

Polimerler ve kompozitleri, teknolojik uygulamalarda kullanılmaktadır. Buna bağlı olarak elektriksel ve mekanik özellikleri ve bu özelliklerinin iyileştirilmesine yönelik çok sayıda araştırma yapılmaktadır. Özellikle polimer kompozitlerin dielektrik özellikleri üzerine yapılan çalışmalar dikkat çekicidir (Kılıç, 2020; Kılıç, Özdemir, Karabul, Karataş, & Çataltepe, 2020; Moez A. A., 2012). İletken bir polimer olan Polyaniline (PANI), kolay sentezi, yüksek çevresel kararlılığı, yüksek elektrik iletkenliği ve nispeten düşük maliyeti hafif, esnek ve kolay işlenebilir olması gibi üretim avantajlarının yansira, ayarlanabilir elektriksel ve elektrokimyasal özellikleri ile teknolojik uygulamalarda kullanım açısından ön plana çıkmaktadır (Bhadra, Khastgir, Singha, & Lee, 2009; Boeva Z. A., 2014; H.S., 1997). PANI, varistörler (Bidadi, Olad, Parhizkar, Mohammadi Aref, & Ghafouri, 2013), süper kapasitörler (Boeva Z. A., 2014; H. Tang, 2014) ve sensörler (Ates, 2013) gibi devre bileşenlerini içeren özel uygulamaların özelliklerini geliştirmek için yaygın olarak kullanılmaktadır. PANI' nin dikkat çekici ayarlanabilir elektriksel özelliklerine rağmen mekanik dayanıklılığı zayıftır. Hem bu elektriksel özellikleri sağlayan hem de ısısal ve mekanik olarak dayanıklı polimer içerikli kompozit malzemeler üzerine yoğun bir şekilde çalışılmaktadır (Alkan, Kılıç, Karabul, & Güven, 2020; Narayanankutty & Engineering, 2011; Sukitpaneent, Thanpitcha, Sirivat, Weder, & Rujiravanit, 2007; Wen-Zhi et al., 2006). Bu çalışmalarda temel zorluklardan birisi de, polimer kompozitlerin çok sayıdaki olası kombinasyonlarının numunelerinin hazırlanması ve elektriksel ve mekanik özelliklerin, katkı bileşenleri, katkı konsantrasyonu, sıcaklık gibi bir çok parametreye doğrusal olmayan şekilde bağlı değişimlerinin deneysel olarak test edilmesidir. Bu durum, deneysel çalışmalar için süre ve maliyet problemleri ortaya çıkarmaktadır.

Saf ve katkılı polimerlerin elektriksel özelliklerinin, farklı iç ve dış koşullar (katkı türü, katkı miktarları, sıcaklık vb.) altındaki değişimleri daha önceden elde edilmiş malzeme parametreleri ve deneysel verilere bağlı olarak, olası farklı iç ve dış parametrelerin kombinasyonları için olası ve güvenilir sonuçlar üretebilen nümerik veya simülasyon yöntemleri, deneysel çalışmaların problemlerine çözüm olabilir. Fakat, bu tür metodların kullanılabilmesi için ilgili yapı iyi tanımlanmalı sonuç üretecek fonksiyonlar, ilgili parametreler ile ilişkisi analitik olarak çözümlenebilmelidir. Diğer bir pratik, hızlı ve güvenilir yöntem ise, problem ile parametreler arasındaki matematiksel ilişkilerin açık formülasyonuna ihtiyaç duymayan makine öğrenmesi veya derin öğrenme gibi yapay zekâ algoritmalarının kullanılmasıdır. Scott ve arkadaşları, seramik malzemelerin dielektrik özelliklerini, en çok kullanılan yapay zekâ algoritmalarından olan yapay sinir ağları ile çeşitli uygulamalarda kullanılabilecek doğrulukta tahmin etmişlerdir (Scott, Coveney, Kilner, Rossiny, & Alford, 2007). Mannodi-

Kanakkithodi vd. yaptıkları çalışmada, ilk prensipler yöntemi ile elde ettikleri polimerlerin elektronik ve dielektrik özelliklerinin veri setini kullanarak istenilen özelliklere sahip polimer malzemelerin tasarımı için makine öğrenmesi algoritmalarını önermişlerdir (Mannodi-Kanakkithodi, Pilania, Huan, Lookman, & Ramprasad, 2016). Diğer bir yaptıkları çalışmada ise, polimer malzemelerin ilk prensipler yöntemi ile elde edilmiş veri seti kullanarak regresyon temelli makine öğrenmesi algoritmalarının performans karşılaştırmasını yapmışlardır (Mannodi-Kanakkithodi, Pilania, & Ramprasad, 2016). Başka bir çalışmada, polimer malzemelerin frekans bağımlı dielektrik sabiti ( $\epsilon'$ ) tahmininde Gauss süreci regresyon algoritması (GPR) kullanılmış ve makine öğrenmesi algoritmalarının spesifik uygulamalar için belirli özelliklere sahip polimerlerin keşfinde kullanılabileceğini önerilmiştir (Chen et al., 2020). Shen vd., 2019 yılında yaptıkları çalışmada, simülasyon verilerini kullanarak oluşturdukları makine öğrenmesi modelini, polimer bazlı nanokompozitlerin dielektrik parçalanma mekanizmalarını yarı kantitatif tahmini için kullanmışlardır (Shen et al., 2019).

Önceki çalışmalarımızda, PANI içerikli polimer kompozitlerin dielektrik özelliklerinin tahmini için yapay zekâ algoritmaları başarı ile kullanılmıştır. 2016 yılında yapılan çalışmada, bazalt katkılı PANI kompozitlerinin gerçek ve sanal dielektrik geçirgenlik katsayılarının, katkı konsantrasyonuna ve frekansa bağlı değişimlerinin tahmini yapay sinir ağları modeli ile gerçekleştirilmiştir (Eyecioglu, Karabul, Alkan, Kilic, & Icelli, 2016). Bu çalışma sonucunda, kütlece değişik oranlarda PP ve PANI içeren kompozitlerin dielektrik parametreleri yüksek doğrulukla tahmin edilebilmiştir. Ayrıca, Polipropilen/Polianilin Kompozit Filmlerin dielektrik parametrelerinin frekansa bağlı kompleks dielektrik fonksiyonlarının gerçek ve sanal bileşenleri yapay sinir ağları modeli ile tahmin edilmiştir (Eyecioglu, Kılıç, & Özdemir, 2018). Çalışmada, ileri beslemeli sinir ağları (MLFF) eğitim modeli kullanılmıştır. 2019 yılında yaptığımız çalışmada ise, saf DYPE (düşük yoğunluklu polietilen) ve PANI katkılı (kütlece %0,7; %0,1; %3,0 oranlarında) DYPE kompozit filmlerin kompleks dielektrik fonksiyonlarının gerçek ve sanal bileşenlerinin tahmini, olasılıksal bir sinir ağları tekniği olan Genelleştirilmiş Regresyon Sinir Ağları (GRNN) metodu ile yapılmıştır (Kılıç, Eyecioglu, Özdemir, & Alkan, 2019).

Bu çalışmada, CM1 ve KYZ13 olarak kodlanmış olan iki farklı bazalt türü ile katkılanmış Polianilin (PANI) polimer kompozitlerinin frekansa bağlı kompleks dielektrik fonksiyonlarının gerçek ( $\epsilon'$ ) ve sanal bileşenleri ( $\epsilon''$ ) üç farklı regresyon tabanlı makine öğrenmesi algoritması (doğrusal regresyon, k-en yakın komşu regresyon ve karar ağacı regresyonu) kullanılarak tahmin edilmiştir. Bazalt katkısı, PANI polimerinin mekanik dayanıklılığını arttırmak için gerçekleştirilmiştir. Girdi verisi olarak saf, %10, %25 ve %50 katkılı Bazalt/PANI kompozitlerinin, deneysel empedans spektroskopisi metodu ile 100Hz ile 17,5MHz frekans aralığında elde edilmiş deney verileri kullanılmıştır (Eyecioglu vd., 2016). Algoritmaların performans karşılaştırılmaları, ortalama mutlak

hata (OMH) ve belirleme katsayısı ( $R^2$ ) ölçümleri kullanılarak yapılmıştır.

## 2. Materyal ve Metot

### 2.1. Malzemeler ve Temel Dielektrik Parametrelerin Deneysel Ölçümleri

Çalışmada, CM1 ve KYZ13 olarak kodlanmış olan iki farklı bazalt türü ile katkılanmış Polinailin (PANI) polimer kompozitleri kullanılmıştır. Bu bazalt numunelerini kimyasal çözümülemesi Tablo 1 de verilmiştir.

Tablo 1. Bazalt numunelerinin kimyasal bileşimi

Örnek Bileşen	CM-1	KYZ-13
SiO <sub>2</sub>	41.668	47.790
TiO <sub>2</sub>	2.0800	1.3950
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	13.106	16.918
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	13.823	10.878
MnO	0.1920	0.1630
MgO	9.7540	7.6190
CaO	10.602	11.357
Na <sub>2</sub> O	5.2610	3.1370
K <sub>2</sub> O	1.7370	0.5190
P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	1.7770	0.2240

Katkısız, %10, %25 ve %50 bazalt (CM1 ve KYZ13) katkılı PANI kompozitleri, bazalt numunelerinin PANI ile karıştırılmasıyla ve oda sıcaklığında soğuk bir preste sıkıştırılarak kalıplanması ile hazırlanmıştır. Dielektrik ölçümler, oda sıcaklığında 100 Hz-15 MHz frekans aralığında Empedans Analizörü kullanılarak Dielektrik spektroskopisi ölçüm yöntemi ile yapılmıştır. Bu yöntem ile ilgili malzemenin alternatif akıma verdiği tepki ile kompleks dielektrik (Denklem 2.1) fonksiyonunun gerçek ( $\epsilon'(\omega)$ ) ve sanal ( $\epsilon''(\omega)$ ) bileşenleri, frekans ve sıcaklığın fonksiyonu olarak hesaplanabilir. Dielektrik geçirgenlik, mikrodalga ve radyo frekans işleme sırasında elektromanyetik enerjinin bağlanmasını ve dağılımını belirleyen temel bir parametredir.

$$\epsilon^*(\omega) = \epsilon'(\omega) + i\epsilon''(\omega) \quad (1)$$

### 2.2. Makine Öğrenmesi Algoritmaları

Makine öğrenmesi yaklaşımları, belirli bir girdi verisi ile çıktı verisi arasındaki ilişkiyi verebilen esnek bir model oluşturabilmek için bir öğrenme süreci yürüten yaklaşımlardır. Bu öğrenme süreci, girdi ve çıktı arasındaki parametrelerin doğrusal olmayan fonksiyonel davranışını bulmak yerine, modelin hiperparametrelerini, tipik olarak bağımsız bir doğrulama veri kümesindeki tahmin hatasını en aza indirecek şekilde ayarlaması ile gerçekleştirilir.

PANI polimer kompozitlerinin frekansa bağlı kompleks dielektrik fonksiyonlarının gerçek ( $\epsilon'$ ) ve sanal bileşenlerinin ( $\epsilon''$ ) tahmini için kullanılabilir, üç farklı denetimli makine öğrenmesi regresyon algoritmasının (Doğrusal regresyon (LR), k-En yakın komşu regresyonu (k-NN) ve Karar Ağacı regresyonu (DT-R)) başarımlarının karşılaştırılması yapılmıştır. Algoritmalar, üç farklı modelleme yaklaşımını (doğrudan regresyon, parametrik olmayan örüntü tanıma ve karar grafları) içerek şekilde seçilmiştir.

#### 2.2.1. Doğrusal regresyon (LR)

Doğrusal Regresyon, denetimli öğrenmeye dayalı bir makine öğrenmesi algoritmasıdır. Doğrusal regresyonda,  $N$  adet hedef değere ( $t$ ) karşılık  $N$  adet gözlem içeren  $\{x_n\}$  bir eğitim verisi verildiğinde, uygun bir doğrusal  $y(x)$  fonksiyonunun  $\{x_n\}$  ile  $\{t_n\}$  arasındaki ilişkiyi istatistiksel olarak tanımladığı varsayılır. Daha genel olarak Doğrusal Regresyon algoritması, yeni girdi verilerine karşılık gelen hedef değerleri bulabilecek,  $p(x|t)$  olasılık dağılımını modellemeyi hedefler (Bishop, 2006).

En temel doğrusal regresyon modeli, girdi değişkenlerinin basit lineer kombinasyonu ile oluşturulan modeldir.

$$y(\mathbf{x}) = b_i + \sum w_i \phi_i(\mathbf{x}), \quad i = \{1, 2, \dots, N\} \quad (2)$$

Burada,  $b_i$ , lineer fonksiyon parametreleridir. Bu parametreler modelin anahtar özellikleridir.  $\phi(\mathbf{x})$  ise, modelin baz fonksiyonlarıdır. Farklı baz fonksiyonları tanımlanabilir. Çalışmada, en küçük kareler yaklaşımı kullanılmıştır. Bu yaklaşımda  $\phi_i(\mathbf{x}) = x_i$  olarak alınır ve  $b = (b_1, b_2, \dots, b_n)$  katsayıları, veri setinde gözlemlenen hedefler ile doğrusal yaklaşımla tahmin edilen hedefler arasındaki kalan karelerin toplamını en aza indirecek şekilde seçilir.

$$\min_b \|\mathbf{x}b - \mathbf{t}\|^2 \quad (3)$$

Doğrusal modeller, örüntü tanıma için pratik teknikler olarak önemli sınırlamalara sahip olsalar da özellikle yüksek boyutlardaki girdi uzaylarını içeren problemler için, güzel analitik özelliklere sahiptirler ve sonraki bölümlerde tartışılacak daha karmaşık modellerin temelini oluştururlar.

#### 2.2.2 k-En yakın komşu regresyonu (k-NN)

k-En yakın komşu algoritması, hem sınıflandırma hem de regresyon için kullanılabilen parametrik olmayan bir örüntü tanıma yöntemine dayanan bir makine öğrenmesi algoritmasıdır. En yakın komşu yöntemlerinin arkasındaki ilke, yeni noktaya en yakın mesafede önceden tanımlanmış sayıda eğitim örneği bulmak ve bunlardan etiketi tahmin etmektir. Örnek (komşu) sayısı, kullanıcı tanımlı bir sabittir (k-en yakın komşu öğrenme).

K-en yakın komşu regresyonunda, sürekli değişkenlerin tahmin edilmesine izin verilir. İşlem adımları aşağıda verilmiştir:

1. Seçilen bir numune ile diğer numuneler arasındaki mesafe hesaplanır.
2. Hesaplanan mesafeleri göz önünde bulundurarak numune sıralaması yapılır.
3. Hesaplanan kök ortalama kare hatasına dayanarak, çapraz doğrulama kullanarak en yakın k komşu komşu sayısını bulunur.
4. k-en yakın komşuları kullanarak ters mesafe ağırlıklı ortalama değeri bulunur.

Algoritmanın başarısı, belirli bir veri noktası için mesafe değerlerinin hesaplanmasına ve en yakın komşuların (k) belirlenmesine bağlıdır (Bishop, 2006). Bu çalışmada hesaplamalarda  $k$  değeri 5 olarak alınmıştır. Mesafe değerlerinin hesaplanması için geçerli olan temel üç mesafe ölçüm fonksiyonu vardır. Bu fonksiyonlar, Euclid, Manhattan ve Minkowski mesafe fonksiyonlarıdır. Çalışmada, Minkowski mesafe fonksiyonu seçilmiştir.

$$d = (\sum (|x_i - y_i|)^q)^{\frac{1}{q}} \quad (4)$$

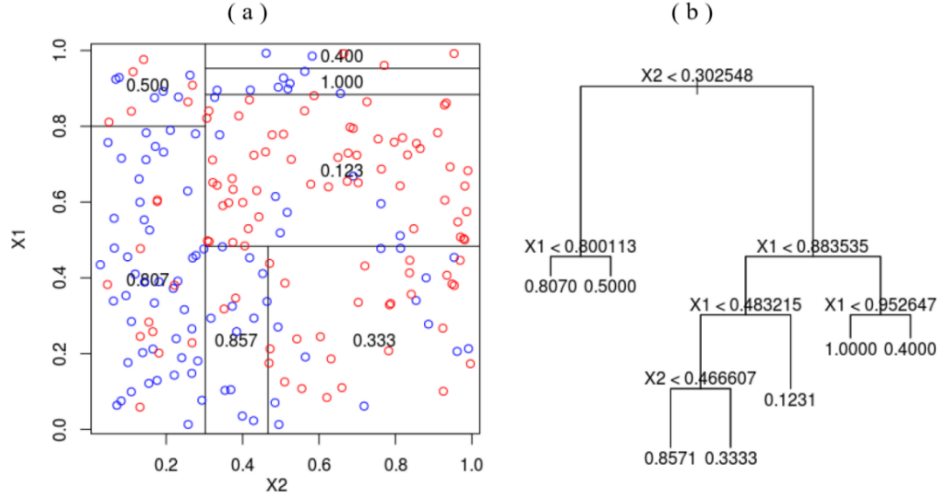
### 2.2.3 Karar Ağacı regresyonu (DT-R)

Genel olarak, bir karar ağacı, denetimli öğrenmeye yönelik hiyerarşik bir böl ve yönet yöntemini uygulayan bir veri yapısı (graf) olarak tanımlanabilir. Bir karar ağacı, dahili karar düğümlerinden ve terminal yapraklarından oluşur (Şekil 1). Bu yöntem aynı zamanda hem regresyon hem de sınıflandırma için kullanılacak verimli bir parametrik olmayan yaklaşımdır. Karar ağaçları, genellikle eğitim örnekleri kümesini açıklayıcı değişkenler için örneklerin değerlerine göre alt gruplara tekrar

tekrar bölerek öğrenilir. Her karar düğümü  $m$ , dalları etiketleyen farklı sonuçlara sahip bir test fonksiyonu  $f_m(x)$  uygular. Bir girdi verildiğinde, her düğümde bir test uygulanır ve sonuca bağlı olarak dallardan biri alınır. Bu süreç kökte başlar ve bir yaprak düğümüne ulaşılan kadar yinelemeli olarak tekrarlanır, bu noktada yaprakta yazılan değer çıktıyı oluşturur (Alpaydın, 2014).

$$f_m(x) = \begin{cases} 1, & x \in X_m \\ 0, & \end{cases} \quad (5)$$

$m$  düğümü için  $X_m$ ,  $m$  düğümüne ulaşan  $X$ 'in bir alt kümesidir.



Şekil 1. Veri seti (a) ve (b) ilişkili karar ağacı örneği.

### 2.3 Hata Ölçümleri

Bu çalışmada, PANI polimer kompozitlerinin frekansa bağlı kompleks dielektrik fonksiyonlarının tahmini için kullanılan makine öğrenmesi algoritmalarının başarımlarının karşılaştırılmasında ortalama mutlak hata (OMH), Ortalama karesel hata (OKH) ve belirleme katsayısı ( $R^2$ ) ölçümleri kullanılmıştır.

$$OMH = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |y_i - \hat{y}_i| \quad (6)$$

$$OKH = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (7)$$

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2} \quad (8)$$

### 3. Araştırma Sonuçları ve Tartışma

Polianilin (PANI), senörler, varistörler gibi birçok uygulama alanında kullanılan iletken bir polimer malzemedir. PANI'nin bu teknolojik uygulamalar için önemli olan dielektrik ve mekanik özelliklerinin ayarlanması önemlidir. Bu özellikler, sıcaklık, frekans gibi dış etkiler altında katkı malzemeleri ile ayarlanabilmektedir. Fakat istenilen dielektrik özelliklere sahip malzemeyi üretebilecek uygun kombinasyonların bulunması çok yoğun deneysel çabaya ihtiyaç duymaktadır (Alkan et al., 2020; Kılıç, 2020; Kılıç, Ergin, Karabul, & Özdemir, 2019). Yoğun zaman ve maliyet gerektiren bu süreçleri Makine öğrenmesi gibi Yapay zekâ modeller kullanarak optimize etmek mümkündür

(Eyecioglu, Karabul, Alkan, Kilic, & Icelli, 2016; Eyecioglu, Kılıç, & Özdemir, 2018; Kılıç, Eyecioglu, Özdemir, & Alkan, 2019). Makine öğrenmesi algoritmaları, bir veri setinin yorumlanmasına, ondan bir anlam çıkarılmasına ve daha sonra çözülmesi gereken problemde ortaya çıkan bilgiyi kullanılmasına izin veren bir bilgisayar bilimi alanıdır. Diğer bir deyişle, makine öğrenimi, örnek bir veri kümesi veya deneyim kullanarak herhangi bir performans kriterini optimize etmek için kullanılacak pratik ve etkili matematik araçlardır. Fakat çok sayıda farklı Makine öğrenmesi model mevcuttur. Uygun modelin tespiti için modeller arasında kıyaslama çalışması yapmak uygun olacaktır. Kullanılan veri setinin sürekli değişkenlerden oluşmasından dolayı ve hedef değişkenin sürekli ve sayısal bir değer olarak (Eyecioglu et al., 2016) tahmin edilmesi gerektiğinden, çalışmada denetimli regresyon algoritmaları seçilmiştir. CM1 ve KYZ13 olarak kodlanmış olan iki farklı bazalt türü ile katılanmış PANI polimer kompozitlerinin frekansa bağlı kompleks dielektrik fonksiyonlarının gerçek ( $\epsilon'$ ) ve sanal bileşenlerinin ( $\epsilon''$ ) tahmini için doğrusal regresyon (LR), k-en yakın komşu regresyonu (k-NN) ve karar ağacı regresyonu (DT-R) makine öğrenmesi algoritmaları karşılaştırılmıştır.

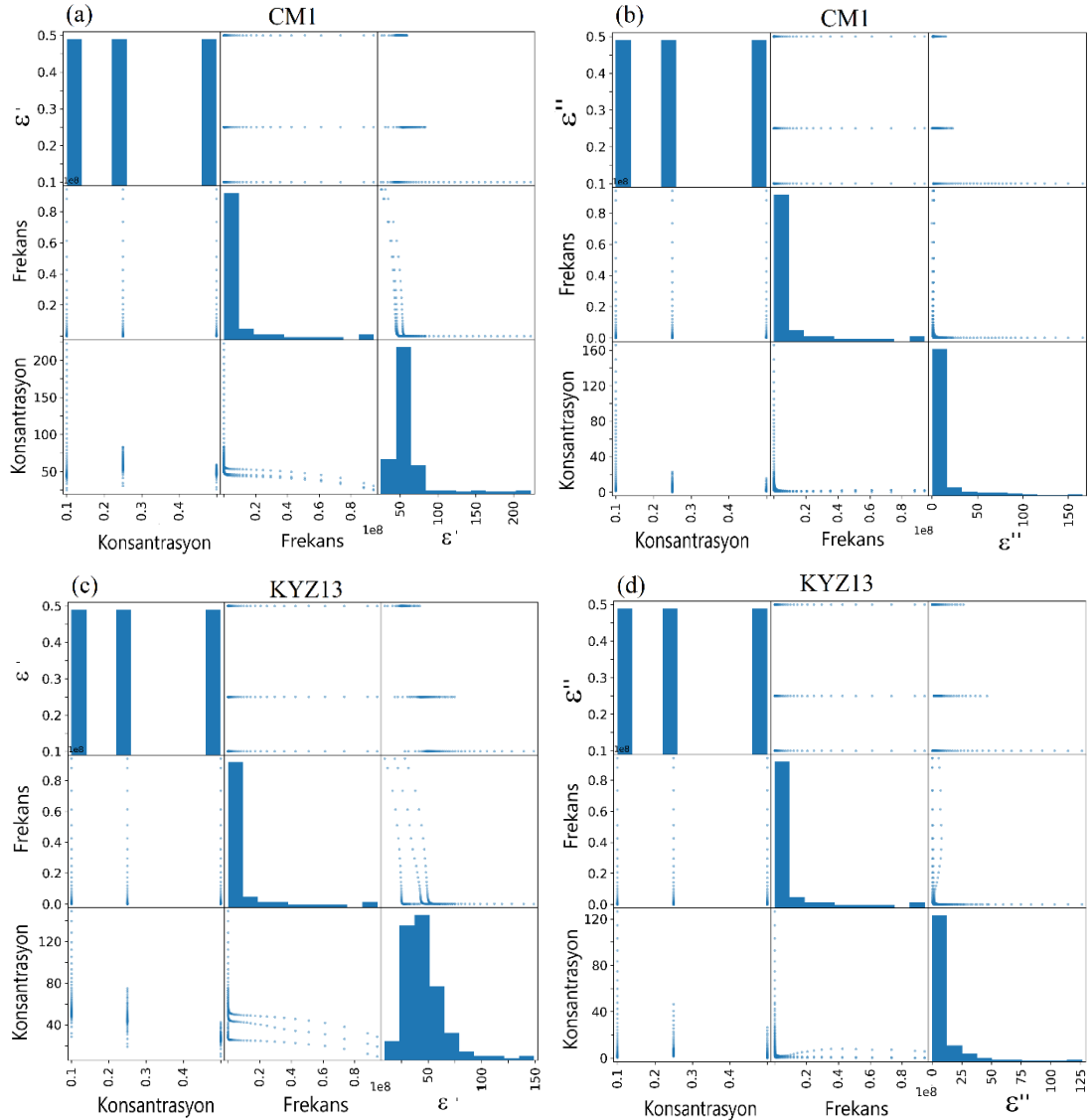
Makine öğrenmesi algoritmalarında, açılal frekans ( $w(Hz)$ ), katkı konsantrasyonu oranı ( $w(\%)$ ), ve kompleks dielektrik fonksiyonlarının gerçek ( $\epsilon'$ ) ve sanal bileşenlerini ( $\epsilon''$ ) içeren 201 veri örneği kullanılmıştır. Çalışmada katkı konsantrasyonları %10, %25 ve %50 olarak alınmıştır. Bu veri setinin temel istatistik özellikleri Tablo 2' de verilmiştir. Bu veri setinin %80'i eğitim verisi olarak, %20'si ise test verisi olarak kullanılmıştır. Eğitim ve test verileri rastgele olarak seçilmiştir.

Tablo 2. Toplam Veri Kümesinin İstatistiksel Özellikleri

Özellik	Kompozit		CM1		KYZ13	
	Konsantrasyon (wt. %)	Frekans (w(Hz))	$\epsilon'$	$\epsilon''$	$\epsilon'$	$\epsilon''$
Sayı	201	201	201	201	201	201
Ortalama	0,283	$9,30 \times 10^6$	61,493	13,440	45,805	10,294
Standart Sapma	0,165	$2,07 \times 10^7$	32,627	27,726	21,307	19,539
Minimum Değer	0,1	$6,28 \times 10^2$	24,767	0,01361	9,490	0
Maksimum Değer	0,5	$9,42 \times 10^7$	222,560	165,740	148,940	126,250

Veri setinde tanımlı, bağımlı ve bağımsız değişkenlerin her kombinasyonu için aralarındaki ilişki, dağılım grafiği matrisi ile verilmiştir. Matrisin, köşegen ve köşegen olmayan bileşenleri, değişkenlerin sırası ile varyans ve kovaryansını vermektedir. Şekil 2'de, CM1 ve KYZ13 bazalt katkıları için dielektrik fonksiyonlarının gerçek ( $\epsilon'$ ) ve sanal bileşenlerini ( $\epsilon''$ ) için açısal frekans ( $w(Hz)$ ), katkı konsantrasyonu oranı (wt. %) bağlı

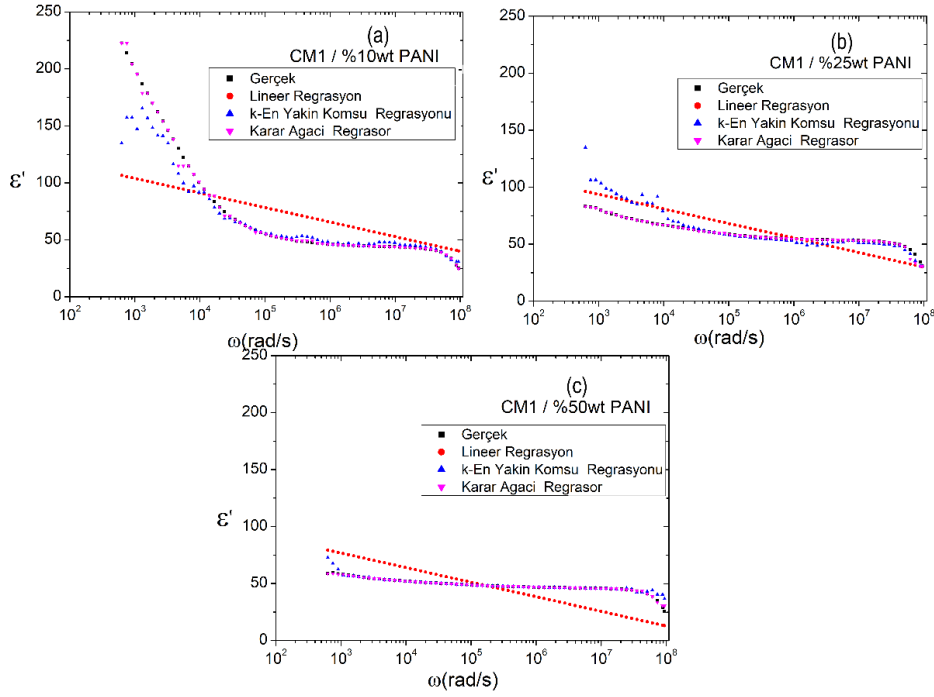
dağılım grafiği matrisi verilmiştir. Bu dağılım grafiklerinde, dielektrik fonksiyonlarının gerçek ( $\epsilon'$ ) ve sanal bileşenlerinin ( $\epsilon''$ ), diğer bağımsız parametrelere fonksiyonel bağımlı olduğu açıkça görülmektedir.



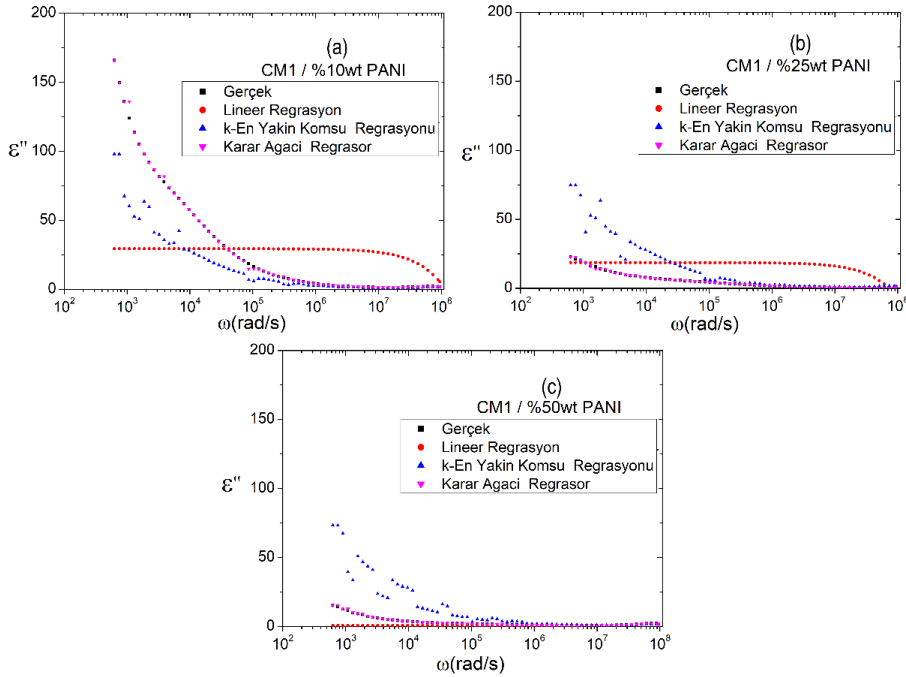
Şekil 2. (a) CM1 bazalt katkısı için gerçek dielektrik bileşeni ( $\epsilon'$ ), (b) CM1 bazalt katkısı için sanal dielektrik bileşeni, ( $\epsilon''$ ), (c) KYZ13 bazalt katkısı için gerçek dielektrik bileşeni, (d) KYZ13 bazalt katkısı için sanal dielektrik bileşeni, ( $\epsilon''$ ) için toplam veri kümesindeki tüm özelliklerin dağılım grafiği.

CM1 Bazalt katkılı PANI kompozitlerinin, dielektrik fonksiyonlarının gerçek ( $\epsilon'$ ) sanal ( $\epsilon''$ ) bileşenlerinin değerlerinin üç farklı makine öğrenmesi algoritması ile tahmin sonuçları

sırası ile Şekil 3'de ve Şekil 4'de verilmiş ve bu sonuçların gerçek deneysel veriler ile karşılaştırılması yapılmıştır.



Şekil 3. (a) %10, (b) %25 ve (c) %50 Konsantrasyonlardaki CM1 bazalt katkısı için gerçek dielektrik bileşenlerinin ( $\epsilon'$ ), frekansa bağlı değerlerinin doğrusal regresyon (LR), k-en yakın komşu regresyonu (k-NN) ve karar ağacı regresyonu (DT-R) makine öğrenmesi algoritmaları ile tahmin sonuçları



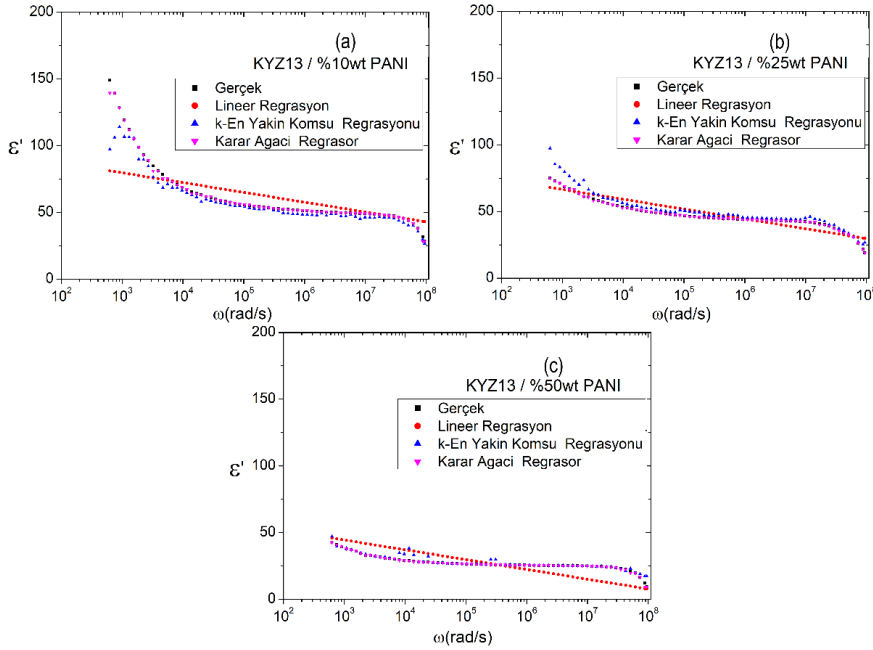
Şekil 4. (a) %10, (b) %25 ve (c) %50 Konsantrasyonlardaki CM1 bazalt katkısı için sanal dielektrik bileşenlerinin ( $\epsilon''$ ), frekansa bağlı değerlerinin doğrusal regresyon (LR), k-en yakın komşu regresyonu (k-NN) ve karar ağacı regresyonu (DT-R) makine öğrenmesi algoritmaları ile tahmin sonuçları

Her iki grafikten de görüldüğü üzere, tüm katkı konsantrasyonları için hem  $\epsilon'$ , hem de  $\epsilon''$  değerlerinin frekansa bağlı değişimlerinin k-en yakın komşu regresyonu (k-NN) ve karar ağacı regresyonu (DT-R) makine öğrenmesi algoritmaları ile tahmin sonuçları, deneysel sonuçlar ile büyük bir uygunluk içerisinde olduğu görülmektedir. k-NN ve DT-R tahmin

sonuçlarının frekansa ( $\omega$ ) bağlı fonksiyonel davranışı, gerçek deneysel ölçüm değerlerinin fonksiyonel davranışı ile aynıdır. Fakat bu uyumluluk, doğrusal regresyon (LR) tahmin sonuçlarında ortaya çıkmamaktadır. LR sonuçlarında hem fonksiyonel davranışlarında hem de özellikle uç değerlerde tutarsızlık vardır.

PANI polimerlerine CM1 katkısının deęişik konsantrasyonlardaki katkısının,  $\epsilon'$  ve  $\epsilon''$  deęerleri üzerindeki frekansa baęlı etkisi Şekil 3 ve Şekil 4 de gösterilmiştir. Katkı türünün etkisinin incelenmesi amacı ile benzer hesaplamalar

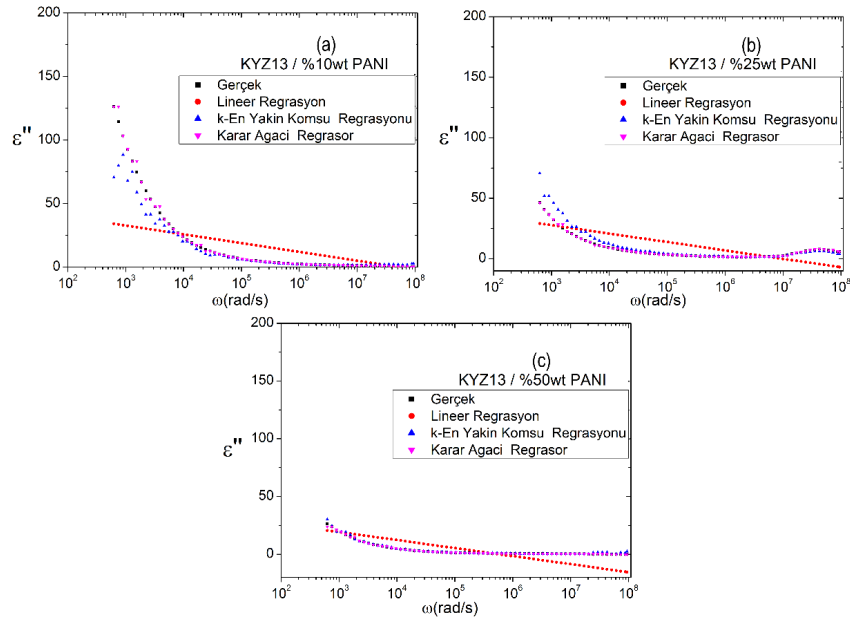
KYZ13 bazalt katkısı için de gerçekleştirilmiştir. Deęişik konsantrasyonlardaki KYZ13 katkısında, frekansa baęlı olarak  $\epsilon'$  ve  $\epsilon''$  deęerleri makine öğrenmesi algoritmalarının tahmin sonuçları sırası ile Şekil 5 ve Şekil 6' da verilmiştir.



Şekil 5. (a) %10, (b) %25 ve (c) %50 Konsantrasyonlardaki KYZ13 bazalt katkısı için s gerçekte dielektrik bileşenlerinin ( $\epsilon'$ ), frekansa baęlı deęerlerinin doğrusal regresyon (LR), k-en yakın komşu regresyonu (k-NN) ve karar ağacı regresyonu (DT-R) makine öğrenmesi algoritmaları ile tahmin sonuçları

Şekil 5 ve Şekil 6 dan açıkça görüldüğü üzere, CM1 katkısında PANI polimerlerinin dielektrik özelliklerinin sonuçlarına benzer olarak sonuçlar elde edilmiştir. PANI iletken polimerlerine, KYZ13 katkısında, frekansa ( $\omega$ ) baęlı dielektrik özelliklerinin tahmin sonuçlarının doğrusal regresyon (LR), k-en yakın komşu regresyonu (k-NN) ve karar ağacı regresyonu (DT-R) makine öğrenmesi algoritmaları ile tahmin sonuçlarının

deęerleri ve fonksiyonel davranışları incelenmiştir. Bu sonuçlardan k-en yakın komşu regresyonu (k-NN) ve karar ağacı regresyonu (DT-R) makine öğrenmesi algoritmaları sonuçlarının, gerçekte deneysel ölçüm sonuçları ile büyük uyumluluk içerisinde olduğu görülmüştür. Fakat, doğrusal regresyon (LR) makine öğrenmesi sonuçları deneysel ölçüm sonuçlarından farklı olarak lineer azalan tahmin sonuçları vermektedir.



Şekil 6. (a) %10, (b) %25 ve (c) %50 Konsantrasyonlardaki KYZ13 bazalt katkısı için sanal dielektrik bileşenlerinin ( $\epsilon''$ ), frekansa baęlı deęerlerinin doğrusal regresyon (LR), k-en yakın komşu regresyonu (k-NN) ve karar ağacı regresyonu (DT-R) makine öğrenmesi algoritmaları ile tahmin sonuçları

Bahsedilen makine öğrenme algoritmalarının doğruluk doğrulamaları, k-kat çapraz doğrulama prosedürü ile tahmin edilmiştir. Çalışmada, k değeri, 10 olarak seçilmiştir. Bu prosedürde, girdi veri seti, eğitim verisi ve test verisi olarak iki kısma ayrılmıştır. Tüm veri setinin %80'i eğitim veri seti olarak, %20'si ise test veri seti olarak kullanılmıştır ve test veri seti rastgele seçilmiştir. Her bir doğrulama durumu açısından bağımlı değişken olan katkılı PANI polimerlerinin dielektrik fonksiyonlarının doğruluk değerleri, kullanılan üç makine

öğrenmesi algoritması için Tablo 3'de sunulmuştur. DT-R modeli, CM1 katkısı için  $\epsilon'$  hesaplamalarında ortalama 0.974 doğruluk değeri,  $\epsilon''$  hesaplamalarında ise ortalama 0.912 doğruluk değeri vermiştir. Yine DT-R modeli KYZ13 katkısı için  $\epsilon'$  hesaplamalarında ortalama 0.981 doğruluk değeri,  $\epsilon''$  hesaplamalarında ise ortalama 0.962 doğruluk değeri vermiştir. Bu değerler ile DT-R modeli, bütün tahmin prosedürlerinde diğer modellere göre en yüksek doğruluk değerini vermiştir.

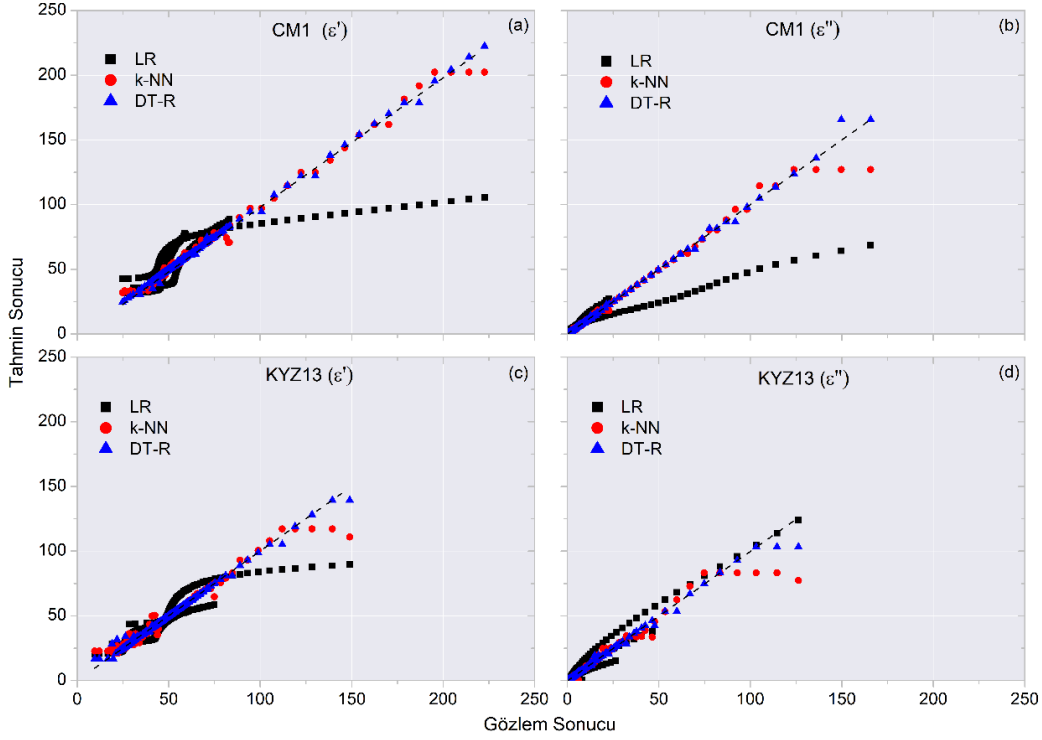
Tablo 3. k-Fold Çapraz Doğrulama Yönteminin Doğruluk Değerleri (k=10)

k	CM1					
	$\epsilon'$			$\epsilon''$		
	LR	k-KNNR	DT-R	LR	k-KNNR	DT-R
1	0.657	0.821	0.992	0.823	0.936	0.997
2	0.056	0.892	0.942	0.578	0.624	0.853
3	0.665	0.848	0.982	0.863	0.930	0.995
4	0.595	0.696	0.991	0.715	0.889	0.995
5	0.459	0.665	0.997	0.876	0.833	0.994
6	0.628	0.832	0.973	0.883	0.903	0.996
7	0.100	0.656	0.950	0.867	0.862	0.547
8	0.639	0.594	0.984	0.564	0.739	0.768
9	0.643	0.884	0.954	0.730	0.738	0.974
10	0.647	0.915	0.970	0.810	0.935	0.996
k	KYZ13					
	$\epsilon'$			$\epsilon''$		
	LR	k-KNNR	DT-R	LR	k-KNNR	DT-R
1	0.911	0.960	0.997	0.647	0.900	0.997
2	0.811	0.822	0.963	0.684	0.629	0.907
3	0.714	0.926	0.928	0.594	0.820	0.994
4	0.872	0.858	0.989	0.490	0.858	0.995
5	0.881	0.856	0.990	0.921	0.930	0.989
6	0.931	0.862	0.994	0.519	0.827	0.758
7	0.893	0.879	0.965	0.582	0.819	0.998
8	0.917	0.957	0.996	0.700	0.961	0.995
9	0.893	0.935	0.988	0.539	0.834	0.994
10	0.908	0.967	0.998	0.793	0.933	0.991

CM1 ve KYZ13 bazalt katkılı PANI iletken polimerlerinin dielektrik gerçek ve sanal fonksiyonlarının tahmini için kullanılan makine öğrenmesi modellerinin performansının istatistiksel değerlendirilmesi için Şekil 7 de, test veri seti

performans grafikleri verilmiştir. Grafikler, test verisinin gerçek değerleri ile tahmin sonuçlarının istatistiksel fit karşılaştırmaları ile oluşturulmuştur.





Şekil 7 Test verisi için Makine öğrenmesi algoritmalarının performans grafikleri.

LR modelinin, CM1 ve KYZ13 katkısında hem gerçek hem de sanal dielektrik fonksiyonları için iyi bir tahmin sonucu elde

edemediği görülmüştür. DT-R modelinin, bütün test süreçlerinde en iyi tahmin performansını sağladığı görülmüştür.

Tablo 4. Makine öğrenmesi modellerinin performans metrikleri

Model	CM1					
	ε'			ε''		
	R <sup>2</sup>	OKH	OMH	R <sup>2</sup>	OKH	OMH
LR	0.623	7,03 × 10 <sup>-3</sup>	6,74 × 10 <sup>-2</sup>	0.940	2,42 × 10 <sup>-2</sup>	1,29 × 10 <sup>-1</sup>
k-NN	0.986	2,61 × 10 <sup>-4</sup>	9,47 × 10 <sup>-3</sup>	0.992	3,19 × 10 <sup>-3</sup>	3,69 × 10 <sup>-2</sup>
DT-R	0.979	3,85 × 10 <sup>-4</sup>	1,06 × 10 <sup>-2</sup>	0.994	2,30 × 10 <sup>-3</sup>	3,39 × 10 <sup>-2</sup>
Model	KYZ13					
	ε'			ε''		
	R <sup>2</sup>	OKH	OMH	R <sup>2</sup>	OKH	OMH
LR	0.812	9,33 × 10 <sup>-3</sup>	7,01 × 10 <sup>-2</sup>	0.605	5,01 × 10 <sup>-1</sup>	2,92 × 10 <sup>-1</sup>
k-NN	0.849	7,48 × 10 <sup>-3</sup>	4,48 × 10 <sup>-2</sup>	0.938	7,99 × 10 <sup>-2</sup>	1,35 × 10 <sup>-1</sup>
DT-R	0.921	3,94 × 10 <sup>-3</sup>	2,87 × 10 <sup>-2</sup>	0.956	5,67 × 10 <sup>-2</sup>	9,29 × 10 <sup>-2</sup>

Ayrıca, kullanılan üç makine öğrenmesinin tahmin performanslarının sayısal ve istatistiki değerlendirmesinin yapılabilmesi için denklem 2.6, 2.7 ve 2.8 kullanılarak mutlak hata (OMH), Ortalama karesel hata (OKH) ve belirleme katsayısı (R<sup>2</sup>) performans metrikleri hesaplanmış ve Tablo 4 de verilmiştir. CM1 katkısı için ε' hesaplamalarında, DT-R modelinin R<sup>2</sup>, OMH ve OKH değerleri sırası ile 0,979, 3,85 × 10<sup>-4</sup> ve 1,06 × 10<sup>-2</sup> olarak ε'' hesaplamalarında ise 0,994, 2,30 × 10<sup>-3</sup> ve 3,39 × 10<sup>-2</sup> olarak hesaplanmıştır. KYZ13 katkısı için ise ε' ve ε'' hesaplamalarında bu değerler sırası ile 0,921, 3,94 × 10<sup>-3</sup> ve 2,87 × 10<sup>-2</sup> ve 0,956, 5,67 × 10<sup>-2</sup> ve 9,29 × 10<sup>-2</sup> olarak hesaplanmıştır. DT-R modeli bütün metrikler için en iyi tahmin sonuçlarını vermiştir.

## 4. Sonuç

Çalışmada iki farklı bazalt katkılı (CM1 ve KYZ13) PANI iletken polimerlerinin gerçek (ε') ve sanal (ε'') dielektrik fonksiyonlarının, açılmal frekansa (w(Hz)), katkı konsantrasyonu oranına (wt. %) bağlı değerlerinin, üç farklı makine öğrenmesi algoritması (LR, k-NN ve DT-R) ile tahmini gerçekleştirilmiştir. Bu üç makine öğrenmesi algoritmalarının tahmin performansları, mutlak hata (OMH), Ortalama karesel hata (OKH) ve belirleme katsayısı (R<sup>2</sup>) istatistiksel performans metrikleri ile karşılaştırılmış ve bilinmeyen değerlerin tahmini için en uygun modelin belirlenmesi amaçlanmıştır.

Hem tahmin sonuçlarının gerçek değerlerin grafikler ile karşılaştırılması hem de Tablo 3 ve 4' de verilen istatistiksel

performans metrik sonuçlarının karşılaştırılması ile açıkça görüldüğü üzere, tüm testlerde, karar ağacı regresyonu (DT-R) modeli en iyi tahmin performansını göstermiştir. k-NN Modelinin de uygun tahmin performansı gösterebilmiş olmasına rağmen, LR modelinin iyi bir performans sağlayamadığı görülmüştür. Bunun nedeninin ise, Şekil 2'de verilen dağılım matrisi grafiğinin kovaryans bileşenlerinden de görüldüğü üzere, hedef değişkenlerin ( $\epsilon'$  ve  $\epsilon''$ ), girdi değişkenlerine ( $w$ ,  $wt$ ) fonksiyonel bağımlılıklarının non-lineer özellik göstermesinden dolayı olduğu düşünülmektedir.

## Kaynakça

Alkan, Ü., Kılıç, M., Karabul, Y., & Güven, Z. (2020). Mechanical and dielectric behavior of LDPE/Bi-1212 films. *Materials Testing*, 62(9), 913-920. doi:10.3139/120.111556

Alpaydin, E. (2014). *Introduction to Machine Learning Third Edition*: MIT Press.

Ates, M. (2013). A review study of (bio)sensor systems based on conducting polymers. *Materials Science and Engineering: C*, 33(4), 1853-1859. doi:https://doi.org/10.1016/j.msec.2013.01.035

Bhadra, S., Khastgir, D., Singha, N. K., & Lee, J. H. (2009). Progress in preparation, processing and applications of polyaniline. *Progress in Polymer Science*, 34, 783-810.

Bidadi, H., Olad, A., Parhizkar, M., Mohammadi Aref, S., & Ghafouri, M. (2013). Nonlinear properties of ZnO-polymer composites prepared by solution-casting method. *Vacuum*, 87, 50-54. doi:https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2012.07.003

Bishop, C. M. (2006). *Pattern Recognition And Machine Learning*: Springer Science+Business Media.

Boeva Z. A., S. V. G. (2014). *Polyaniline: Synthesis, Properties, and Application*. *Polymer Science Series C*, 56 (1), 144-153.

Chen, L., Kim, C., Batra, R., Lightstone, J. P., Wu, C., Li, Z., . . . Vashishta, P. J. n. C. M. (2020). Frequency-dependent dielectric constant prediction of polymers using machine learning. 6(1), 1-9.

Eyecioglu, O., Karabul, Y., Alkan, U., Kilic, M., & Icelli, O. (2016). Artificial Neural Networks Study on Prediction of Dielectric Permittivity of Basalt/PANI Composites. *International Journal of Engineering Technologies*, 2 42-48. doi:10.19072/ijet.27769

Eyecioglu, Ö., Kılıç, M., & Özdemir, Z. G. (2018). Polipropilen/Polianilin Kompozit Filmlerin Dielektrik Özelliklerinin Yapay Sinir Ağları Modeli İle Tahmini Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi Part C: Tasarım ve Teknoloji, 6(4), 787-802. doi:10.29109/gujsc.398275

H. Tang, Y. D., C. Zang, J. Gu, Q. Shen and J. Kan. (2014). Effect of Temperature on Electrochemical Degradation of Polyaniline. *Int. J. Electrochem. Sci*, 9, 7252-7239.

H.S., N. (1997). *Handbook of Organic Conductive Molecules and Polymers*: New York: Wiley.

Kılıç, M. (2020). Natural additive material for desirable dielectric properties of polypyrrole: Limestone. *Synthetic Metals*, 260, 116297. doi:https://doi.org/10.1016/j.synthmet.2020.116297

Kılıç, M., Ergin, Y., Karabul, Y., & Özdemir, Z. G. (2019). Experimental Comparison of PbO and BaO Addition Effect on Gamma Ray Shielding Performance of Epoxy Polymer. *Avrupa Bilim ve Teknoloji Dergisi*, 16, 256-266. doi:10.31590/ejosat.553952

Kılıç, M., Eyecioglu, O., Özdemir, Z. G., & Alkan, Ü. (2019). DYPE/PANI kompozit filmlerin sıcaklığa ve PANI katkı konsantrasyonuna bağlı olarak dielektrik parametrelerinin GRSA ile tahmini Gazi Üniversitesi Mühendislik Mimarlık Fakültesi Dergisi, 35 (2), 1077-1088. doi:10.17341/gazimmfd.422448

Kılıç, M., Özdemir, Z. G., Karabul, Y., Karataş, Ö., & Çataltepe, Ö. A. (2020). Negative real permittivity in (Bi0.3Eu0.7)Sr2CaCu2O6.5 ceramic. *Physica B: Condensed Matter*, 584, 412080. doi:https://doi.org/10.1016/j.physb.2020.412080

Mannodi-Kanakkithodi, A., Pilia, G., Huan, T. D., Lookman, T., & Ramprasad, R. J. S. r. (2016). Machine learning strategy for accelerated design of polymer dielectrics. 6, 20952.

Mannodi-Kanakkithodi, A., Pilia, G., & Ramprasad, R. (2016). Critical assessment of regression-based machine learning methods for polymer dielectrics. *Computational Materials Science*, 125, 123-135. doi:https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2016.08.039

Moez A. A., A. S. S., Elshaer Y.H. (2012). Effect of gamma radiation on low density polyethylene (LDPE) films: Optical, dielectric and FTIR studies. *Spectrochimica Acta Part A*, 93, 203-207.

Narayanankutty, S. J. P.-P. T., & Engineering. (2011). Polyaniline-coated short nylon fiber/natural rubber conducting composite. 50(5), 443-452.

Scott, D. J., Coveney, P. V., Kilner, J. A., Rossiny, J. C. H., & Alford, N. M. N. (2007). Prediction of the functional properties of ceramic materials from composition using artificial neural networks. *Journal of the European Ceramic Society*, 27(16), 4425-4435. doi:https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2007.02.212

Shen, Z.-H., Wang, J.-J., Jiang, J.-Y., Huang, S. X., Lin, Y.-H., Nan, C.-W., . . . Shen, Y. J. N. c. (2019). Phase-field modeling and machine learning of electric-thermal-mechanical breakdown of polymer-based dielectrics. 10(1), 1-10.

Sukitpaneent, P., Thanpitcha, T., Sirivat, A., Weder, C., & Rujiravanit, R. (2007). Electrical conductivity and mechanical properties of polyaniline/natural rubber composite fibers. 106(6), 4038-4046. doi:https://doi.org/10.1002/app.27101

Wen-Zhi, Z., Xian-Wen, K., Shou-Feng, J., Jin-Gao, S., Dong-Sheng, Y., & Bin, F. (2006). Electrochemical characteristics and catalytic activity of polyaniline doped with ferrocene perchlorate. *Journal of Applied Polymer Science*, 102(6), 5633-5639. doi:https://doi.org/10.1002/app.24961