



**MAKİNE ÖĞRENİMİ TEKNİKLERİ KULLANILARAK
VERİYE DAYALI BİRLEŞİK MALZEME MODELİNİN
GELİŞTİRİLMESİ**

Aiman TARIQ



T.C.
BURSA ULUDAĞ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**MAKİNE ÖĞRENİMİ TEKNİKLERİ KULLANILARAK VERİYE DAYALI
BİRLEŞİK MALZEME MODELİNİN GELİŞTİRİLMESİ**

Aiman TARIQ
0000-0003-0369-9091

Prof. Dr. Babür Deliktaş
(Danışman)

DOKTORA TEZİ
İNŞAAT MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI

BURSA – 2024
Her Hakkı Saklıdır

ÖZET

Doktora Tezi

MAKİNE ÖĞRENİMİ TEKNİKLERİ KULLANILARAK VERİYE DAYALI BİRLEŞİK MALZEME MODELİNİN GELİŞTİRİLMESİ

Aiman TARIQ

Bursa Uludağ Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
İnşaat Mühendisliği Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Babür Deliktaş

Modern teknolojik gelişmelerin sağladığı büyük veri zenginliği, birçok mühendislik disiplininde veriye dayalı metodolojileri büyük ölçüde geliştirmektedir. Bu tez, sayısal analizlerde malzeme modelleme ile ilgili çeşitli zorlukları ele almak için veriye dayalı makine öğrenimi teknikler geliştirmeye odaklanmaktadır. Bu bağlamda, makine öğrenimi, sonlu eleman (SE) analizi ve optimizasyon algoritmaları entegre edilerek SmartFIT adı verilen sayısal-deneysel hibrit bir parametre belirleme aracı geliştirilmiştir. Bu ters analiz tabanlı metodoloji, tek bir deney eğrisi kullanarak malzeme modeli doğru ve verimli bir şekilde kalibre etmektedir. SmartFIT programı, kullanıcı eleman alt rutininde (UEL) uygulanan bir kohezif bölge modelinin sekiz parametresini, kullanıcı malzeme alt rutininde (UMAT) uygulanan bir sertleşme modelinin dört parametresini ve bir Johnson-Cook plastisite modelinin beş parametresini başarıyla belirlemiştir. Bu yöntem, simülasyon ve deneysel sonuçlar arasında mükemmel bir uyum sağlarken, geleneksel optimizasyon algoritmalarından 2-3 kat daha hızlıdır. Bu tez aynı zamanda geleneksel malzeme modellere alternatif olarak veriye dayalı elastoplastik malzeme modeli (DD-ECM) geliştirmek için birleşik bir yaklaşım sunmaktadır. Önerilen DD-ECM, karmaşık yapı ve malzeme davranışı sergileyen bir kesme testi numunesini analiz etmek için SE çözücüsüne uygulanmıştır. SE analizleri, birleşik veriye dayalı yaklaşımın yüksek doğruluğunu ve verimliliğini göstermiş ve geleneksel malzeme modellerinden elde edilen sonuçlarla yakından uyumlu sonuçlar vermiştir.

Ayrıca bu tez kapsamında, geliştirilen makine öğrenimi tabanlı tekniklerin çeşitli mühendislik problemlerine uygulanmasını incelemektedir. Bu uygulamalar arasında sürekli elyaf takviyeli kompozitin doğrusal elastik makroskopik davranışı, kısa elyaf takviyeli polimerlerin doğrusal olmayan elastoplastik davranışı, erozyona dayanıklı otoyol kenar taşlarının değerlendirilmesi ve iki yönlü fonksiyonel olarak derecelendirilmiş bir nanokiriş'in doğrusal olmayan stabilite davranışı yer almaktadır.

Anahtar Kelimeler: Makine öğrenimi, malzeme modeli, sonlu elemanlar analizi, optimizasyon algoritmaları, veriye dayalı malzeme modeli
2024, xix + 134 sayfa.

ABSTRACT

PhD Thesis

DEVELOPMENT OF A DATA-DRIVEN UNIFIED MATERIAL MODEL USING MACHINE LEARNING TECHNIQUES

Aiman TARIQ

Bursa Uludağ University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Civil Engineering

Supervisor: Prof. Dr. Babür Deliktaş

The abundance of big data enabled by modern technological advancements is greatly enhancing data-driven methodologies across numerous engineering disciplines. This thesis centers on developing machine learning-based data-driven techniques to address various challenges associated with constitutive modeling in traditional numerical analyses. In this context, a numerical-experimental hybrid parameter identification tool called SmartFIT is developed by integrating machine learning, finite element (FE) analysis and optimization algorithms. This inverse analysis-based methodology utilizes a single experiment curve to calibrate the constitutive model accurately and efficiently. The SmartFIT program successfully identified eight parameters of a cohesive zone model implemented in user element subroutine (UEL), four parameters of a hardening model implemented in user material subroutine (UMAT), and five parameters of a Johnson-Cook plasticity model. This method provides an excellent fit between simulation and experimental results and is 2-3 times faster than traditional optimization algorithms. This thesis also presents a unified approach for developing a data-driven elastoplastic constitutive model (DD-ECM) as an alternative to classical models. The proposed DD-ECM is implemented into FE solver to analyze a shear test specimen exhibiting complex structure and behavior. FE analyses using DD-ECM demonstrated the high accuracy and efficiency of the unified data-driven approach, yielding results closely aligned with those from conventional constitutive models.

Moreover, this thesis investigates the application of developed machine learning based techniques for various engineering problems. These applications include linear elastic behavior of continuous fiber-reinforced composite, elastoplastic behavior of short fiber reinforced polymers, evaluation of erosion-resistant highway shoulder rocks and nonlinear stability behavior of a two-way functionally graded nanobeam.

Key words: Machine learning, constitutive models, finite element analysis, optimization algorithms, data-driven constitutive models

2024, xix + 134 pages.

ÖNSÖZ ve/veya TEŞEKKÜR

Bursa Uludağ Üniversitesi'ndeki akademik çalışmalarım boyunca sağladığı çok değerli bilgi, destek ve rehberliği için danışmanım Prof. Dr. Babür Deliktaş'a en derin şükranlarımı sunmak isterim. Tezim ile ilgili yeni fikirlerin ve kavramların geliştirilmesi, kendisinin sürekli sağladığı motivasyon ve teşvik sayesinde mümkün olmuştur.

Bu çalışmaya zaman zaman değerli görüşleri ile yön veren ve danıştığım her durumda desteklerini esirgemeyen tez izleme komite üyelerim sayın Prof. Dr. Mustafa Özgür Yaylı ve Prof. Dr. Murat Yazıcı hocalarıma katkılarından dolayı teşekkürlerimi sunarım.

Ayrıca, başta bölüm başkan Prof. Dr. Adem Doğangün olmak üzere Bursa Uludağ Üniversitesi İnşaat Mühendisliği Bölümü'nün tüm öğretim üyelerine; destekleri, akademik çalışmalara yönelik teşvikleri, kendilerinden almış olduğum dersler, harika bir çalışma ortamı ve sağladıkları teknik ekipmanlar için teşekkürlerimi sunarım.

Ortak çalışmalar yaptığımız Dr. Öğr. Üyesi Büşra Uzun ve Ayşe Polat'a bilgi paylaşımları ve katkılarından dolayı teşekkürlerimi sunarım.

Doktoramın son 2 yılında bursiyer olarak beni destekleyen ve geliştirdiğimiz SmartFIT yazılımını ulusal ve uluslararası kongrelerde sunma fırsatı veren Bursa Uludağ Üniversitesi-Bilimsel Araştırma Projeleri Birimi'ne FGA-2022-1211 numaralı desteği için minnettarım.

Son olarak, ailemin koşulsuz sevgisi, fedakârlıkları ve bana olan inancı benim en büyük güç kaynağımdır. Dolayısıyla, bana verdikleri sonsuz destek ve ilham için babama, anneme, kız ve erkek kardeşlerime en derin şükranlarımı sunuyorum.

Aiman TARIQ
15/12/2024

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET.....	viii
ABSTRACT.....	ix
ÖNSÖZ ve/veya TEŞEKKÜR.....	x
SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ.....	xiii
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	xvi
ÇİZELGELER DİZİNİ.....	xix
1. GİRİŞ.....	1
1.1. Genel Arka Plan ve Motivasyon	1
1.2. Problem Tanımı.....	5
1.3. Tezin Amacı ve Kapsamı.....	6
1.4. Tezin Düzeni ve Yapısı.....	9
2. KAYNAK ARAŞTIRMASI.....	10
2.1 Optimum Parametreleri Belirlemek için Ters Analiz Yöntemleri.....	10
2.2 Malzeme Modellemesi için Veriye Dayalı Yaklaşım.....	13
3. MATERYAL ve YÖNTEM.....	16
3.1. SmartFIT Hibrit Parametre Tanımlama Yaklaşımının Çerçevesi.....	16
3.1.1. Hibrit yaklaşım için deney tasarımı tekniğinin oluşturulması	17
3.1.2. Hibrit yaklaşımda başlangıç örneklerinin SE modellemesi ve analizleri.....	19
3.1.3. Hibrit yaklaşımın makine öğrenimi modellerinin oluşturulması.....	20
3.1.4. Hibrit yaklaşımın bileşenlerinin entegrasyon prosedürü.....	21
3.2. Hibrit SmartFIT Yazılımı Kullanılarak Çeşitli Modellerin Parametrelerinin Belirlenmesi.....	22
3.2.1. Hibrit SmartFIT yazılımı kullanılarak UEL'ye uygulanan bir kohezif bölge modelinin parametrelerinin belirlenmesi.....	23
3.2.2. Hibrit SmartFIT yazılımı kullanılarak UMAT'a uygulanan izotropik sertleşme plastisite modelinin parametrelerinin belirlenmesi.....	26
3.2.3. Hibrit SmartFIT yazılımı kullanılarak Johnson-Cook modelinin parametrelerinin belirlenmesi.....	27
3.3. Hibrit SmartFIT Yazılımının Performansının Geleneksel Optimizasyon Yöntemi ile Karşılaştırılması.....	30
3.4. Yapısal Test Kullanılarak Veriye Dayalı Malzeme Modelinin Geliştirilmesi.....	31
3.4.1. Genel iş akışı.....	31
3.4.2. Malzeme modellerin kalibrasyonu için veriye dayalı ters analiz yöntemi.....	32
3.4.3. Veriye dayalı elastoplastik malzeme modelinin (DD-ECM) geliştirilmesi.....	38
3.4.4. Geliştirilen DD-ECM'nin Abaqus çözücüsüne uygulanması	41
3.5. Geliştirilen Makine Öğrenme Tabanlı Tekniklerin Farklı Mühendislik Problemlerinde Uygulamaları	49
3.5.1. Sürekli elyaf takviyeli kompozitin makroskopik davranışını tahmin etmek için boosting makine öğrenimi algoritmalarının geliştirilmesi.....	49
3.5.2. Kısa elyaf takviyeli polimerlerin doğrusal olmayan elastoplastik davranışını tahmin etmek için makine öğrenmesi yaklaşımı.....	61
3.5.3. Erozyona dayanıklı otoyol kenar taşları için YSA tabanlı değerlendirme sistemi.....	66

3.5.4. İki yönlü fonksiyonel derecelendirilmiş bir nano kirişin doğrusal olmayan stabilite davranışının ensemble makine öğrenme algoritmaları kullanılarak belirlenmesi.....	75
3.6. Malzemelerin Doğrusal Olmayan Davranışını Tahmin Etmek için Ters Analiz Tabanlı Kendi Kendine Öğrenme Algoritması.....	79
4. BULGULAR ve TARTIŞMA.....	82
4.1. Hibrit SmartFIT Yazılımı Kullanılarak Parametre Tanımlama Sonuçları.....	82
4.1.1. UEL'ye uygulanan kohezif bölge modelinin optimizasyon sonuçları.....	82
4.1.2. UMAT'a uygulanan plastisite modelinin optimizasyon sonuçları.....	85
4.1.3. Tekrarlı yükleme altında kiriş-kolon birleşiminde kullanılan malzeme modelinin optimizasyon sonuçları.....	88
4.2. Hibrit SmartFIT Yazılımın Geleneksel Optimizasyon Yöntemiyle Karşılaştırılmasının Sonuçları.....	89
4.2.1. UEL kohezif bölge modeli kullanılarak karşılaştırma sonuçları.....	89
4.2.2. UMAT plastisite modeli kullanılarak karşılaştırma sonuçları.....	91
4.3. Yapısal Test Kullanılarak Geliştirilen Veriye Dayalı Malzeme Modelinin Sonuçları.....	93
4.3.1. Malzeme modeli kalibrasyon sonuçları.....	93
4.3.2. DD-ECM'nin öğrenme performansı.....	95
4.3.3. DD-ECM kullanılarak SE analiz sonuçları.....	97
4.4. Sürekli Elyaf Takviyeli Kompozitin Makroskopik Davranışını Tahmin Etmek için Makine Öğrenmesi Algoritmalarının Performans Değerlendirmesi.....	100
4.4.1. Bayes optimizasyonu ile parametre ayarlama sonuçları.....	100
4.4.2. Boosting modellerinin performans değerlendirme sonuçları.....	102
4.5. Kısa Elyaf Takviyeli Polimerlerin Elastoplastik Davranışını Tahmin Etmek için Eğitilmiş Makine Öğrenimi Modellerinin Performans Değerlendirmesi.....	106
4.6. Erozyona Dayanıklı Otoyol Kenar Taşları için Geliştirilen YSA Tabanlı Değerlendirme Sisteminin Sonuçları.....	112
4.6.1. Eğitilmiş YSA modelinin performans değerlendirme sonuçları.....	114
4.7. Çift Yönlü Fonksiyonel Derecelendirilmiş Nano Kiriş'in Doğrusal Olmayan Stabilite Davranışını Tahmin Eden Ensemble Makine Öğrenimi Algoritmalarının Değerlendirilmesi.....	116
4.7.1. Ensemble makine öğrenimi modellerinin optimum konfigürasyonu.....	116
4.7.2. Eğitilmiş modellerin performans değerlendirme ve karşılaştırılması	117
4.7.3. SHAP analizi kullanılarak geliştirilen makine öğrenimi modelinin açıklanması.....	122
4.8. Malzemelerin Doğrusal Olmayan Davranışını Tahmin Etmek için Ters Analiz Tabanlı Kendi Kendine Öğrenme Algoritmasının Sonuçları.....	124
5. SONUÇ.....	126
KAYNAKLAR.....	130

SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ

Simgeler	Açıklama
χ	Girdi tasarım parametreleri listesi
χ_{up}	Girdi tasarım parametrelerinin üst sınırı
χ_{low}	Girdi tasarım parametrelerinin alt sınırı
$\mathcal{A}_n$	Girdi tasarım parametresi
$\mathcal{A}_{n_{max}}$	Girdi tasarım parametrenin üst sınırı
$\mathcal{A}_{n_{min}}$	Girdi tasarım parametrenin alt sınırı
L	İncelenen seviye sayısını (üst ve alt sınırlar)
P	Parametre sayısını
y_i	Hedef değeri
$\hat{y}_i$	Tahmin edilen değeri
ϕ_n	Normal kırılma enerjisi
ϕ_t	Teğetsel kırılma enerjisi
σ_{max}	Normal kohezif dayanımı
τ_{max}	Teğetsel kohezif dayanımı
α	Normal şekil parametresi
β	Teğetsel şekil parametresi
λ_n	Normal başlangıç eğimi göstergesi
λ_t	Teğetsel başlangıç eğimi göstergesi
E	Young modülü
ν	Poisson oranı
$f_1(\epsilon)$	Gerinim sertleşme faktörü
$f_2(\dot{\epsilon})$	Gerinim hızı sertleşme faktörü
$f_3(T)$	Sıcaklık yumuşama faktörü
A	Akma gerilmesi
B	Gerinim sertleşme modülü
n	Gerinim sertleşme üssü
C	Gerinim hızı sertleşme parametresi
m	Sıcaklık yumuşama katsayısını
σ_{eq}	Eşdeğer akma gerilmesi
ϵ_p	Birikmiş plastik gerinimi
$\dot{\epsilon}^*$	Boyutsuz gerinim hızını
$\dot{\epsilon}_0$	Referans gerinim hızı
T	Çalışma sıcaklığı
T_r	Oda sıcaklığı
T_m	Erime sıcaklığı
x_{scaled}	Ölçeklendirilmiş x değeri
x	Gerçek değeri
x_{max}	Maksimum değeri
x_{min}	Minimum değeri
σ_{11}	X yönündeki normal gerilmeler
σ_{22}	Y yönündeki normal gerilmeler
σ_{12}	X-Y düzleminde kayma gerilmeleri

ε_{11}	X yönündeki normal gerinimler
ε_{22}	Y yönündeki normal gerinimler
ε_{12}	X-Y düzleminde kayma gerinimler
$\Delta \underline{\sigma}$	Artımlı gerilme vektörü
$\Delta \underline{\varepsilon}$	Artımlı gerinim vektörü
$\bar{\varepsilon}^{ANN}$	Normalize edilmiş YSA girdi (gerinim)
$\bar{\sigma}^{ANN}$	Normalize edilmiş YSA çıktı (gerilme)
S_i^ε	Gerinimler için normalleştirme parametresi
S_j^σ	Gerilmeler için normalleştirme parametresi
B_n ve C_n	YSA gizli katmanlardaki düğümlerin değerleri
σ_n^{ANN}	YSA çıkış katmanındaki düğümlerin değerleri
N_ε	Girdi katmanındaki düğüm sayısı
N_B	Birinci gizli katmandaki düğüm sayısı
N_C	İkinci gizli katmandaki düğüm sayısı
w	Ağırlıklar
$w^{B\varepsilon_i}$	Girdi katmanı ile birinci gizli katman arasındaki ağırlık matrisi
w^{CnB_i}	Birinci gizli katman ile ikinci gizli katman arasındaki ağırlık matrisi
$w^{\sigma_n C_i}$	İkinci gizli katman ile çıktı katmanı ağırlık matrisi
b	Biaslar
$b_i^{B\varepsilon}$	Girdi katmanı ile birinci gizli katman arasındaki bias vektörleri
b_i^{CB}	Birinci gizli katman ile ikinci gizli katman arasındaki bias vektörleri
$b_i^{\sigma C}$	İkinci gizli katman ile çıktı katmanı arasındaki bias vektörleri
C_{ij}	Rijitlik matrisi (Jacobian)
uy	Y ekseninde uygulanan yer değiştirme
E_M	Matris malzemenin elastisite modülü
E_F	Fiber'in elastisite modülü
ν_M	Matris malzemenin Poisson oranı
ν_F	Fiber'in Poisson oranı
V_f	Hacim oranı
λ	En-boy oranı
a_{11}, a_{22}, a_{33}	Fiber oryantasyon tensörleri
$[C]$	Malzemenin rijitlik matrisi
$f_i(x)$	Yeni eklenen tahminci
$\hat{y}^{(i-1)}$	Önceki tahmin
$\hat{y}^{(i)}$	Yeni tahmin
D_{10}, D_{30}, D_{60}	Gradasyon parametreleri
C_u	Homojenlik katsayısı
C_c	Eğrilik katsayısı
L	Malzeme uzunluk ölçeği parametresi
e_{oa}	Yerel olmayan parametre
$\bar{K}$	Zemin parametresi
μ	Doğrusal olmayan parametre
g	Y yönünde malzeme derecelendirme katsayısı
p	Z yönünde malzeme derecelendirme katsayısı
P_n	n modunda burkulma yükü
val	Girdi değişkeninin model çıktısı için önemini

ϕ_0 Örneğin tüm girdi değişkenleri olmadığında sabit değeri

Kısaltmalar	Açıklama
YSA	Yapay sınır ağı
SVR	Destek vektör regresyonu
MÖ	Makine öğrenimi
DD-ECM	Veriye dayalı elastoplastik malzeme modeli
SE	Sonlu elemanlar
SEA	Sonlu elemanlar analizi
UEL	Kullanıcı tanımlı eleman
UMAT	Kullanıcı tanımlı malzeme
JC	Johnson-Cook malzeme modeli
DOE	Deney tasarımı
FEMU	Sonlu elemanlar modeli güncelleme yöntemi
EGM	Denge boşluk yöntemi
CEGM	Bünye denklem boşluk yöntemi
VFM	Sanal alanlar yöntemi
IDICM	Entegre dijital görüntü korelasyon yöntemi
DGM	Dağılım boşluk yöntemi
CCM	Bünye uyumluluk yöntemi
GTN	Gurson-Tvergaard-Needleman modeli
DIC	Dijital görüntü korelasyonu
EGO	Verimli global optimizasyon
LHS	Latin hiperküp örnekleme
.inp	Abaqus girdi dosyası
.odb	Abaqus çıktı dosyası
PCA	Temel bileşen analizi
Min.	Minimum
Max.	Maximum
MPa	Megapascal
GPa	Gigapascal
N	Newton
mm	Milimetre
m	Metre
sec.	Saniye
C3D8R	3D sekiz düğümlü izoparametrik elemanlar
CPS4R	Dört düğümlü düzlem gerilme elemanı
RP	Referans noktası
S11	1. yönündeki normal gerilmeler
S22	2. yönündeki normal gerilmeler
S12	Kayma gerilmeleri
E11	1. yönündeki normal gerinimler
E22	2. yönündeki normal gerinimler
E12	Kayma gerinimler
ReLU	Doğrultulmuş lineer birim
MSE	Ortalama kare hata

RMSE	Kök ortalama kare hatası
R^2	Belirleme katsayısı
ADAM	Uyarlanabilir moment tahmini
DDSDDE	Rijitlik matrisi (Jacobian)
RVE	Temsili hacim elemanı
PCA	Temel bileşen analizi (Principal component analysis)
PCC	Pearson korelasyon katsayısı
AdaB	Adaptive boosting
GBR	Gradient boosting regressor
XGB	Extreme gradient boosting
LGB	Light gradiyent boosting
ETR	Extra trees regressor
RF	Random forest
GOSS	Gradyent tabanlı tek taraflı örnekleme
EFB	Exclusive feature bundling
BO	Bayes optimizasyonu
UNLETB	Nebraska üniversitesi Lincoln-erozyon test yatağı
NDOT	Nebraska ulaştırma bakanlığı
WP	Well performing
PP	Poor performance
NA	Not appropriate
ReLU	Rectified linear unit
NLSGT	Nonlocal strain gradient theory
SHAP	SHapley Additive exPlanations

ŞEKİLLER DİZİNİ

	Sayfa
Şekil 3.1. SmartFIT'te uygulanan metodolojinin genel iş akışı.....	16
Şekil 3.2. Kohezif elemanlı modelin geometrisi.....	23
Şekil 3.3. DOE'deki örnekler için dağılım grafiği.....	25
Şekil 3.4. Veri setinin boyut indirgemesinden sonra PCA dağılım grafiği...	26
Şekil 3.5. a) Kompakt çekme numunesinin SE modeli ve b) referans kuvvet-yer değiştirme eğrisi.....	27
Şekil 3.6. a) Kiriş-kolon bağlantısının SE modeli b) Kirişin serbest ucuna uygulanan tekrarlı yük.....	28
Şekil 3.7. Kuvvet-zaman ve yer değiştirme-zaman eğrilerine ayrıştırılmış döngüsel kuvvet-yer değiştirme histerezis eğrileri.....	29
Şekil 3.8. DD-ECM'yi oluşturmak için şematik diyagram.....	32
Şekil 3.9. Tek eksenli çekme testinden elde edilen yük-yer değiştirme eğrisi.....	33
Şekil 3.10. a) Numunenin boyutları ve b) SE modeli.....	34
Şekil 3.11. Deneysel ve SE simülasyonlu kuvvet-yer değiştirme eğrilerinin karşılaştırılması.....	38
Şekil 3.12. a) Tek yarıklı kesme testi numunesinin boyutları ve (b) SE modeli.....	39
Şekil 3.13. DD-ECM entegre Newton-Raphson yöntemi kullanılarak FEA çözüm stratejisi.....	42
Şekil 3.14. Rijitlik matrisini (Jacobian) hesaplamak için sözde kod.....	46
Şekil 3.15. DD-ECM ile entegre UMAT oluşturmak için sözde kod.....	47
Şekil 3.16. Kompozit RVE'nin makine öğrenimi ile homojenleştirilmesi için genel çerçeve.....	49
Şekil 3.17. PCA ile 2 boyuta indirgeme sonrası dağılım grafiği.....	51
Şekil 3.18. Sürekli elyaf takviyeli kompozit için RVE homojenleştirme şeması.....	52
Şekil 3.19. Girdi parametreleri ve çıktılar arasındaki PCC korelasyon matrisi.....	55
Şekil 3.20. Örnek verilerin t-SNE dağılımı.....	61
Şekil 3.21. Beşinci dereceden polinom fit ile simülasyon eğrisi arasındaki karşılaştırma.....	62
Şekil 3.22. Girdi değişkenleri ile çıktılar arasındaki PCC değerlerinin matrisi.....	63
Şekil 3.23. YSA modelinin eğitim grafiği.....	65
Şekil 3.24. Test edilen malzemeler için gradasyon eğrileri.....	66
Şekil 3.25. UNLETB kullanılarak elde edilen erozyon testi sonuçları.....	67
Şekil 3.26. Erozyon davranışları için önerilen sınıflandırma kategorileri.....	68
Şekil 3.27. a) Tek bir eğriden sentetik veri oluşturma süreci ve b) ilgili erozyon performans gruplarındaki tüm sentetik gradasyon eğrileri.....	69
Şekil 3.28. Kategorik verilerin tek sıcak (one-hot) kodlaması.....	70
Şekil 3.29. Önerilen yapay sinir ağı modelinin mimarisi.....	72
Şekil 3.30. YSA modeli için kullanılan doğrulama teknikleri.....	73
Şekil 3.31. Yanal yaylarla kısıtlanmış iki yönlü fonksiyonel derecelendirilmiş nanokiriş.....	74
Şekil 3.32. Ensemble MÖ metodolojisinin akış şeması.....	74
Şekil 3.33. İlk dört burkulma modu için frekans dağılımı.....	77
Şekil 3.34. Girdi ve çıktı değişkenleri arasındaki Pearson korelasyon	78

	katsayısı.....	
Şekil 3.35.	Kendi kendine öğrenen malzeme davranışının hesaplamalı çerçevesi.....	81
Şekil 3.36.	a) Sınır koşullarına sahip konsol yapısı b) YSA malzeme modelinin mimarisi.....	82
Şekil 3.37.	Referans doğrusal ve doğrusal olmayan yükleme koşulları.....	82
Şekil 4.1.	DoE örneklerine dayalı ilk FEA sonuçlarıyla referans kuvvet-yer değiştirme eğrisinin karşılaştırılması.....	84
Şekil 4.2.	Optimizasyon süreci boyunca hata ve iterasyon eğrisi.....	85
Şekil 4.3.	Referans kuvvet-yer değiştirme eğrisinin optimum parametreler kullanılarak elde edilen sonuçlarla karşılaştırılması.....	85
Şekil 4.4.	Referans kuvvet-yer değiştirme eğrisinin DoE'ye dayalı ilk FEA sonuçları ile karşılaştırılması.....	86
Şekil 4.5.	Optimizasyon süreci boyunca hataya-iterasyon eğrisi.....	87
Şekil 4.6.	Referans kuvvet-yer değiştirme eğrisinin SmartFIT optimum değerleri kullanılarak elde edilen sonuçlarla karşılaştırılması.....	88
Şekil 4.7.	Referans eğrilerin SmartFIT'ten elde edilen eğrilerle karşılaştırılması.....	89
Şekil 4.8.	a) Geleneksel optimizasyon yöntemi ve b) SmartFIT optimizasyonu için hata-iterasyon eğrisi.....	90
Şekil 4.9.	Kuvvet-yer değiştirme referans eğrisinin a) geleneksel optimizasyon ve b) SmartFIT sonucu ile karşılaştırılması.....	91
Şekil 4.10.	a) Geleneksel optimizasyon ve b) SmartFIT optimizasyonu için hataya-iterasyon grafiği.....	92
Şekil 4.11.	Kuvvet-yer değiştirme referans eğrilerinin a) geleneksel optimizasyon ve b) SmartFIT optimizasyonundan elde edilen sonuçlarla karşılaştırılması.....	92
Şekil 4.12.	Optimizasyon iterasyonları sırasında hataya karşı iterasyon eğrisi	93
Şekil 4.13.	SE simülasyonu ve referans eğrisi arasındaki kuvvet-yer değiştirme tepkilerinin karşılaştırılması.....	94
Şekil 4.14.	YSA eğitim süreci boyunca kayıp eğrileri.....	95
Şekil 4.15.	Eğitim ve test sürecinde S11, S22 ve S12'nin dağılım grafiği.....	96
Şekil 4.16.	Kesme bölgesindeki gerilim konsantrasyonunun büyümesi.....	97
Şekil 4.17.	a) DD-ECM ve b) Johnson-Cook modeli kullanılarak üretilen kesme gerilme ve kesme gerinim konturları.....	98
Şekil 4.18.	Referans modelden ve DD-ECM'den elde edilen kesme gerilme ile kesme gerinim eğrisinin karşılaştırılması.....	99
Şekil 4.19.	Hiperparametre optimizasyonu sırasında boosting modellerinin RMSE değerleri.....	101
Şekil 4.20.	R^2 , MAE, MAPE ve RMSE değerlerini karşılaştıran tüm boosting modellerinin radar grafikleri.....	103
Şekil 4.21.	Tüm boosting modelleri için gerçek ve tahmin t-SNE değerlerinin karşılaştırılması.....	105
Şekil 4.22.	MÖ modellerin a) R^2 , b) MAE, c) MAPE ve d) RMSE değerlerini karşılaştıran radar grafikleri.....	107
Şekil 4.23.	Polinom denkleminin altı katsayısı için XGB (üst sıra) ve YSA (alt sıra) modellerinin dağılım grafikleri.....	108
Şekil 4.24.	a) Eğitim ve b) test veri kümesi için XGB ve YSA modellerin Taylor diyagramları.....	108
Şekil 4.25.	Digimat ve YSA'dan elde edilen gerilme-gerinim eğrisinin karşılaştırılması.....	109
Şekil 4.26.	Farklı hacim oranları için YSA tarafından tahmin edilen gerilme-	110

	gerinim eğrileri.....	
Şekil 4.27.	Farklı en-boy oranları için YSA tarafından tahmin edilen gerilme-gerinim eğrileri.....	111
Şekil 4.28.	Eğitim sırasında YSA modelinin tahmin doğruluğundaki iyileşme.....	113
Şekil 4.29.	Doğrulama veri seti kullanılarak elde edilen karışıklık matrisi.....	114
Şekil 4.30.	MÖ modelleri tarafından tahmin edilen burkulma yüklerinin analitik sonuçlarla dağılım grafikleri kullanılarak karşılaştırılması	118
Şekil 4.31.	Tüm ensemble modellerinin performans istatistikleri.....	120
Şekil 4.32.	İlk dört burkulma modu için tüm MÖ modellerinin Taylor diyagramları.....	121
Şekil 4.33.	Her bir girdi parametresinin global önem faktörü sıralaması.....	122
Şekil 4.34.	Her bir burkulma modu için parametrelerin önem faktörü sıralaması.....	123
Şekil 4.35.	İlk dört burkulma modu için özet grafikler.....	124
Şekil 4.36.	Her geçişin sonunda elde edilen kuvvet-deplasman eğrileri.....	125
Şekil 4.37.	YSA ile tahmin edilen gerilme-gerinim eğrilerinin hedef eğri ile karşılaştırılması.....	126
Şekil 4.38.	a) Geleneksel malzeme modeli kullanılarak elde edilen hedef davranış ve b) YSA tabanlı malzeme modeli ile tahmin edilen davranış.....	126
Şekil 4.39.	Eğitim sonunda global kuvvet-yer değiştirme eğrisinin test eğrisi ile karşılaştırılması.....	127
Şekil 4.40.	YSA modeli ile tahmin edilen eğrinin Johnson-Cook modeli kullanılarak elde edilen sonuçlarla karşılaştırılması.....	128

ÇİZELGELER DİZİNİ

	Sayfa
Çizelge 3.1. PPR model parametrelerinin üst ve alt sınırları.....	24
Çizelge 3.2. UMAT model parametrelerinin alt ve üst sınırları.....	27
Çizelge 3.3. Tasarım parametrelerinin üst ve alt sınırları.....	29
Çizelge 3.4. Tasarım değişkenlerinin alt ve üst sınırları ve başlangıç tahmin değerleri.....	37
Çizelge 3.5. Johnson-Cook modelini öğrenmek için DD-ECM'nin yapısı.....	41
Çizelge 3.6. Parametrelerin alt ve üst sınırları.....	51
Çizelge 3.7. Son veri tabanının genel görünümü.....	54
Çizelge 3.8. Cam elyaf takviyeli polipropilen malzeme parametrelerinin minimum ve maksimum değerleri.....	61
Çizelge 3.9. Girdi değişkenleri ve çıktılar tanımlayıcı istatistikleri.....	64
Çizelge 3.10. XGB modelinin optimum hiperparametreleri.....	65
Çizelge 3.11. YSA modelinin optimum hiperparametreleri.....	65
Çizelge 3.12. Test edilen malzemelerin gradasyon parametreleri.....	67
Çizelge 3.13. Burkulma yüklerinin hesaplanması için farklı değişkenlerin değerleri.....	78
Çizelge 4.1. PPR UEL kohezif modeli için optimum parametre değerleri.....	84
Çizelge 4.2. Sertleşme modeli için optimum parametre değerleri.....	87
Çizelge 4.3. Kiriş-kolon bağlantısı için optimum Johnson Cook model parametreleri.....	89
Çizelge 4.4. SmartFIT tarafından belirlenen optimum parametreler.....	94
Çizelge 4.5. Farklı ölçütlere göre YSA modelinin performansı.....	96
Çizelge 4.6. Parametre arama uzayı ve optimum değerler.....	101
Çizelge 4.7. Tüm boosting modellerinin performans değerleri.....	103
Çizelge 4.8. Digimat ve XGB tahmininden elde edilen rijitlik matrisinin elemanları.....	105
Çizelge 4.9. Farklı istatistiksel metriklere göre modellerin performansı.....	106
Çizelge 4.10. Cam elyaf takviyeli polipropilen kompozitin malzeme parametreleri.....	110
Çizelge 4.11. Farklı parametrelere dayalı YSA modeli eğitimi.....	112
Çizelge 4.12. Karışıklık matrisinin çeşitli performans metrikleri kullanılarak değerlendirilmesi.....	115
Çizelge 4.13. Ensemble makine öğrenimi modellerinin performans değerleri..	120

1. GİRİŞ

1.1. Genel Arka Plan ve Motivasyon

Büyük verinin, günümüzde başta e-ticaretten sosyal bilimlere, sağlık alanından, haberleşme sektörüne kadar hayatımızın birçok alanındaki belirleyici özelliği artan bir hızla devam etmektedir. Geçmiş yıllarda matematik modeller veriden daha fazlaydı ve verinin toplanması ve analizi çok pahalıydı. Ancak günümüzde bu durum önemli ölçüde değişim göstermektedir. Veriler, mevcut modellerden daha fazladır ve toplanması, depolanması ve analizi, yazılım alanındaki gelişmeler ile hızlı bir şekilde yapılabilmektedir.

Büyük verinin birçok alanda olduğu gibi mühendislik bilimi ve teknoloji üzerindeki kaçınılmaz belirleyici etkisi, Veriye Dayalı Bilimin, ampirik, teorik ve hesaplamalı mekanikten sonra bilimin dördüncü paradigması olarak görülmesine neden olmuştur. Entegre Hesaplamalı Malzeme Mühendisliğinde (Integrated Computational Material Engineering-ICME) malzemelerin davranışını karakterize etmek için bol miktarda verinin mevcut olduğu senaryoların sayısının artmasıyla, veriden yoksun bir alandan veri açısından zengin bir alana kayda değer bir geçiş yaşanmaktadır. Dolayısıyla malzeme modelleme, tasarım, simülasyon ve üretimin çatısını oluşturan Entegre Hesaplamalı Malzeme Mühendisliği, Veriye Dayalı Bilim için en doğal uygulama alanlarından biridir.

Entegre Hesaplamalı Malzeme Mühendisliğinde, yapısal ve malzeme tasarım süreci, seçilen ilgi alanlarında optimum bir tasarım elde etmek için genellikle oldukça artımlı işlemler gerektirmektedir. Üretim sistemlerinin karmaşıklığını ve ürünlerin kalitesini gerektiren süreçler en çok biyolojik malzemeler, nano-micro polimerik köpükler, polimer esaslı kompozitler ve plastik enjeksiyonla elde edilmiş parçalarda görülmektedir. Bu malzemelerin üretiminde ve kullanımında en basit yapının ve malzemenin tasarımı bile, çok sayıda olasılıkla birleştirilebilen birden çok yapı taşından oluşur. Bu yapı taşlarından birincisi, malzemenin iç yapısını ve mekanik özelliklerini etkileyen üretim parametrelerinin belirlendiği deney tasarımlarıdır. İkinci önemli yapı taşı ise tasarım örneklerinin analizi ve analizler için gerekli olan malzemenin davranışını karakterize eden malzeme modelleridir.

Sonlu Elemanlar Yöntemi (SEM), makine, inşaat, havacılık, otomotiv ve geoteknik mühendisliği gibi çeşitli mühendislik alanlarında yapıların mekanik davranışını başarılı bir şekilde tahmin eden bir analiz aracı olarak büyük bir popülerlik kazanmıştır. Bu yöntem, tasarlanan sistemlerin ve yapıların işlevsel ve güvenilir olmasını sağlamak açısından kritik bir rol oynamaktadır Tariq (2020). Çoğu mühendislik problemi, bir dizi diferansiyel denklem olarak modellenenebilir. Bu diferansiyel denklemler, dış etkilere maruz kalan bir sistemin tepkisini tanımlamaktadır. Birçok diferansiyel denklem analitik olarak çözülemez ve genellikle bu denklemlerin yaklaşık çözümlerini bulmak için sayısal teknikler kullanılmaktadır. Çeşitli sayısal teknikler arasında, SEM'in çok sayıda problemlerin sayısal çözümlerini elde etmek için en güçlü yöntemlerden biri olarak bilinmektedir. SEM temel olarak analiz edilen yapıyı birçok küçük elemana bölmeyi içermektedir. Her eleman için, davranışını tanımlayan diferansiyel denklemler yerel olarak çözülerek rijitlik matrisi veya kütle matrisi gibi matrisler oluşturulmaktadır. Bu bireysel eleman matrisleri, tüm sistemin davranışını temsil eden bir global matrise birleştirilir. Global matrise sınır koşulları eklenir ve sistem çözülerek yapının belirli düğüm noktalarındaki yer değiştirme veya gerilme gibi çıktılar elde edilir. Bu yaklaşım, SEM'in karmaşık yapıların genel davranışını, yönetilebilir yerel bileşenlerde değerlendirme yoluyla doğru bir şekilde yakalamasını sağlamaktadır.

SEM'in temel bileşenlerinden biri de malzemelerin davranışını eleman düzeyinde temsil etmek için kullanılan malzeme modelidir. Uygun bir malzeme modelinin seçiminin, sayısal tahminlerin doğruluğu ve güvenilirliği üzerinde önemli bir rol oynadığı genel olarak kabul edilmektedir. Geleneksel olarak malzeme modelleri, genel anlamda gerilme ve gerinim arasındaki ilişkiyi tanımlayan matematiksel modeller oluşturmayı amaçlamaktadır. Farklı malzemelerin davranışını belirlemek için geliştirilen malzeme modelleri genellikle şu adımlarla oluşturulmaktadır:

- i) Malzemenin davranışını ortaya çıkarmak için test yapılır.
- ii) Malzemenin gözlemlenen davranışını temsil etmek için matematiksel bir model formüle edilir. Model, genellikle gözlemlenen test sonuçlarıyla kalibre edilecek parametreler içerir.

- iii) Geliştirilen modelin performansı, daha önce görülmemiş gerilme yollarını tahmin ederek test edilir ve ek deneylerle karşılaştırılır.
- iv) Matematiksel modelin açıklayamadığı ancak gözlemlenen davranışlarını kapsamak için formülasyonlar değiştirilir.

Çoğu matematiksel olarak geliştirilmiş malzeme modeli, çeşitli parametrelerin belirlenmesini içermektedir. Bunlardan bazı parametreleri fiziksel anlam açısından zayıftır ve deneysel olarak ölçülemez. Malzemelerin davranışlarının tahmininde doğruluk gereksinimleri daha kritik hale geldikçe malzeme modelleri de daha karmaşık hale gelmektedir. Aynı zamanda malzeme modellerinin karmaşıklığı arttıkça, belirlenmesi gereken parametrelerin sayısı da artmaktadır. Mühendislerin sonlu elemanlar analizlerinde malzeme tanımlarken karşılaştıkları en büyük zorluk, malzeme model parametrelerini en doğru ve güvenilir bir şekilde belirlemektir. Bu parametreler, malzemenin dış yükler altındaki davranışını büyük ölçüde etkilemektedir. Bu nedenle, malzemenin davranışını doğru bir şekilde temsil edecek parametrelerin seçilmesi son derece önemlidir. Bir malzeme modelinin en uygun parametresini belirleme sürecine uyarlama (fitting) denir. Uyarlama süreci, iki ana faktör nedeniyle karmaşıktır.

Malzeme modeli parametrelerinin uyarlama sürecindeki ilk zorluk, malzemenin davranışının uygun şekilde karakterize edilmesidir. Basit malzeme modelleri genellikle malzemenin davranışını tanımlamak için yalnızca tek bir malzeme testi gerektirirken, daha karmaşık modeller malzemenin geniş bir koşul aralığında nasıl davrandığını anlamak için çok sayıda test gerektirmektedir. Örneğin, Johnson-Cook plastisite modeli, malzemeyi karakterize etmek için burulma testi, tek eksenli çekme testi ve bölünmüş Hopkinson çubuk testi gerektirmektedir. Bu testler çeşitli sıcaklık ve gerinim hızlarında yapılmalıdır (Johnson ve Cook, 1983). Bu geniş test matrisi, üç farklı test cihazı, çok sayıda test numunesi ve testleri gerçekleştirecek ve verileri işleyecek eğitimli personele ihtiyaç duymaktadır. Bu durum, malzeme karakterizasyonunu hem finansal açıdan pahalı hale getirir hem de gereken zaman ve çaba açısından büyük bir yük oluşturmaktadır.

Uyarlama sürecindeki ikinci zorluk, doğrudan malzeme modelinin kendisinden kaynaklanır. Bir malzemenin davranışını tam olarak tanımlayabilmek için çok sayıda

parametreye ihtiyaç duyulması ve bu parametrelerin çoğunun analitik ya da yarı-ampirik yöntemlerle belirlenememesi, uyarlama süreci zorlaşmaktadır. Mevcut uyarlama tekniklerinin çoğu iteratif (tekrarlamalı) bir yapıya sahiptir ve genellikle her adımda manuel müdahale gerektirmektedir. Bu durum, sürecin zaman alıcı ve hesaplama açısından maliyetli olmasına neden olmaktadır. Ayrıca, bu tür yöntemler genellikle deneyimli bir araştırmacıya ihtiyaç duymakta, bu da süreci daha da zorlaştırmaktadır.

Farklı karmaşıklık derecelerine sahip birçok geleneksel malzeme model geliştirilmiş olmasına rağmen, bu modellerin hiçbiri çeşitli yükleme koşulları altında gerçek malzeme davranışını tam olarak yakalayamamaktadır. Bu matematiksel tabanlı modeller yeni testlerden elde edilen davranış (genellikle daha önce test edilmemiş bir stres yolu için) doğru bir şekilde tahmin edemediğinde, bunların değiştirilmesi veya tamamen yeni modellerin geliştirilmesi gerekmektedir. Ayrıca, bazı malzeme modellerin artan karmaşıklığı, bunların SE kodlarına uygulanmasını zorlaştırmakta ve dolayısıyla mühendislik uygulamalarındaki işlevselliğini kısıtlamaktadır (Shin ve Pande, 2000).

Farklı malzemeler için doğru malzeme modellerine olan yüksek talep, birçok araştırmacıyı alternatif yöntemler geliştirmeye teşvik etmiştir. Son dönemde, hesaplama gücünde ve donanıda yaşanan önemli gelişmelerle birlikte, malzeme modelleme alanı klasik teorilerin ötesine geçerek veri odaklı tekniklere genişlemiştir. Literatürdeki veriye dayalı teknikler arasında özellikle Yapay Sinir Ağları (YSA) malzeme davranışını modellemek için yaygın bir şekilde kullanılmaktadır. YSA'nın malzeme modellemesine uygulanmasına ilişkin ilk araştırma Ghaboussi vd. (1991) tarafından gerçekleştirilmiştir. O zamandan beri, farklı malzemeler için çok sayıda YSA tabanlı malzeme model geliştirilmiştir (Furukawa ve Yagawa, 1998; Hashash vd., 2004; Jung ve Ghaboussi, 2006; Al-Haik vd., 2006; Ghavamian ve Simone, 2019; Lourenço vd., 2024). Bu çalışmalardan bazıları, sinir ağı tabanlı malzeme modellerini SE simülasyonlarına entegre ederek sınır değer problemlerini analiz etmeyi önermiştir. Bu çalışmalar, iyi eğitilmiş bir YSA'nın mühendislik malzemelerinin davranışını modellemek için kullanılabileceğini ve geleneksel bünye modellere kıyasla daha doğru tahminler sağlayabileceğini göstermektedir.

YSA tabanlı malzeme modeli, verilerin karmaşıklığı veya verilerin sürekli güncellenmesi nedeniyle matematiksel bir malzeme model oluşturma zor olduğu durumlar için uygundur. Malzeme modellemesi için en yaygın tercih edilen YSA mimarisi, çok katmanlı ileri beslemeli sinir ağıdır. YSA modeli, malzemenin gerilme-gerinim verileriyle eğitilerek malzeme davranışını öğrenebilir. Eğitim süreci, gerinim verilerinin YSA'nın giriş nöronlarına sunulmasıyla başlamaktadır. Bu bilgi, gizli katmandaki nöronlardan geçerek YSA'nın çıkışına ulaşmaktadır. YSA'nın çıkışındaki gerilme değerleri, hedef gerilmelerle karşılaştırılarak hata hesaplanmaktadır. YSA, çıkış değerleri ile hedef değerler arasındaki hata doğrultusunda nöronların ağırlıklarını değiştirerek öğrenmektedir. Bu hata ağ boyunca geriye doğru yayılır ve bağlantı ağırlıklarını değiştirmek için bir öğrenme kuralı kullanılmaktadır. Bu yüzden çok katmanlı sinir ağı, genellikle geri yayılım (back-propagation) sinir ağı olarak adlandırılmaktadır. Model eğitim süreci, hata en aza indirilene ve belirli bir hata kriteri karşılanana kadar yinelemeli olarak gerçekleştirilmektedir. YSA tabanlı malzeme modeli eğitildikten sonra, sınır değer problemlerinde malzeme davranışını hesaplamak için geleneksel malzeme model gibi kullanılabilir. Model eğitim, yalnızca bir kez yapılır. Bu eğitim süreci, geleneksel bir malzeme modelin geliştirilmesi ve bir malzemeyi tanımlamak için uygun model parametrelerinin seçilmesine eşdeğerdir. Eğitilen YSA malzeme modelinin performansı, eğitim verilerindeki malzeme davranışı hakkındaki bilgilerin kalitesine ve miktarına bağlıdır. YSA malzeme modelleri için kullanılan eğitim verileri gerçek veya sayısal deneylerden elde edilebilir. Eğitim için seçilen gerilme ve gerinim veri setleri, modelin kullanılacağı aralığı kapsamalıdır. En yaygın YSA malzeme modeli formu, girdi olarak gerinimleri ve çıktı olarak gerilmeleri kullanmaktadır. Ancak, doğrusal olmayan malzeme davranışa sahip malzemedeki yol bağımlılığı nedeniyle girdi olarak mevcut gerinim durumu, gerilme durumunu tahmin etmek için yeterli değildir. YSA malzeme modellerinin bu yol bağımlılığını öğrenebilmesi için geçmişteki birkaç gerilme ve gerinim durumu da girdi olarak sinir ağına dahil edilmektedir.

1.2. Problem Tanımı

Endüstrinin yeni malzemeler ve üretim teknikleri geliştirerek performansı artırma ve maliyetleri düşürme yönündeki mevcut çabalarıyla birlikte, SE modelleme gibi

simülasyon tekniklerinin kullanımını artırmaktadır. Ancak, malzeme modellerin uyarlanması süreci, aşılması gereken önemli bir zaman ve maliyet engeli olmaya devam etmektedir. Endüstriyel açıdan bakıldığında, model uyarlamanın içerdiği zaman ve maliyet, yeni malzemeler, gelişmiş üretim teknikleri veya modern modelleme yaklaşımları gibi yeniliklerin uygulanmasını yavaşlatmaktadır. Araştırma açısından bakıldığında ise, bu uyarlama süreci, malzeme davranışını daha doğru tahmin edebilecek yeni malzeme modellerin geliştirilmesini yavaşlatmaktadır. Bu nedenle, farklı malzemelerin davranışlarını temsil eden her türlü malzeme modelini verimli ve doğru bir şekilde uyarlayabilecek bir yöntem ihtiyacı duyulmaktadır.

Öte yandan, geleneksel matematiksel yöntemlerle geliştirilen bünye modellerin karşılaştığı çeşitli parametrelerin belirlenmesi, çok sayıda test gereksinimi ve geliştirilen modellerin SE kodlarına uygulanmasındaki zorluklar, bu modellerin mühendislik uygulamalarında kullanımını kısıtlamaktadır. Bu eksikliklerin giderilmesi için veriye dayalı yaklaşımlar gibi alternatif yöntemler büyük avantaj sağlayabilir. Veriye dayalı malzeme modeller genellikle gerilme-gerinim arasındaki ilişkiyi öğrenmek için büyük miktarda verilere ihtiyaç duymaktadır. Ancak bu veriler, doğrudan yapısal testlerde ölçülen yük ve yer değiştirmeden elde edilemez. Ayrıca, yapı testlerinin gerçekleştirilmesi pahalı olup, önemli miktarda kaynak gerektirmektedir. Bu nedenle, minimum yapı testi ile çok miktarda gerilme-gerinim verisi elde edilebilecek bir yöntem geliştirilmelidir. Buna uygun olarak, yeni yöntemin aşağıdaki sorunlara çözüm sunması gerekmektedir:

- Veriye dayalı malzeme modeli, malzemenin doğrusal olmayan davranışını doğru bir şekilde tahmin edebilecek şekilde geliştirilmelidir.
- Geliştirilen veriye dayalı malzeme model, SE analiz çözücüsüne sorunsuz bir şekilde entegre edilebilmelidir.

1.3. Tezin Amacı ve Kapsamı

Bu tez çalışmasında, makine öğrenimi teknikleri kullanılarak veriye dayalı birleşik malzeme modelinin geliştirilmesi amaçlanmıştır. Bu birleşik öğrenme modeli, makine öğrenmesi, optimizasyon algoritmaları ve sonlu eleman modellerini tek bir çatı altında

birleştirmeyi hedeflenmektedir. Bu tezde ayrıntıları verilen çalışmanın hedefleri şu şekilde özetlenebilir:

- Malzeme modellerinin parametre tanımlaması için ters yöntemlerin, b) malzeme modellemesinde veriye dayalı yaklaşımların kullanımındaki ana ve en son gelişmeleri incelemek.
- Makine öğrenimi gücünü, SE analizi ve optimizasyon algoritmalarıyla birleştiren yeni bir parametre tanımlama yöntemi olan SmartFIT'i geliştirmek.
- SmartFIT yöntemini kullanarak farklı davranış ve karmaşıklığa sahip malzeme modellerinin uyumunu doğrulamak.
- SmartFIT'in verimliliğini ve etkinliğini geleneksel yöntemle karşılaştırarak değerlendirmek.
- Deneylerden elde edilen kuvvet-yer değiştirme ölçümlerini kullanarak veriye dayalı malzeme modeli oluşturmak için SmartFIT ve makine öğrenimi tekniklerini entegre eden bir çerçeve geliştirmek.
- SE simülasyonlarından zengin veri kümeleri çıkarma stratejisini kullanarak karmaşık malzeme davranışlarını öğrenebilen bir makine öğrenimi modeli eğitmek.
- Karmaşık malzeme davranışlarını öğrenebilen bir makine öğrenimi modeli eğitmek için SE simülasyonlarından zengin veri kümelerini çıkarma stratejisi kurmak.
- Veriye dayalı malzeme modelinin rijitlik matrisi (Jacobian) oluşturup kullanıcı malzeme alt programı (UMAT) aracılığıyla SE çözücüsüne entegre etmek.
- Veriye dayalı birleşik malzeme modeli kullanılarak karmaşık yapı ve davranışlara sahip bir mühendislik problemini doğru, güvenilir ve hızlı bir şekilde çözmek.
- Geliştirilen makine öğrenmesi tabanlı teknikleri, kompozit malzemelerin davranışı, taşların erozyon direnci, nano kırılgarlıkların kararlılık davranışı gibi çeşitli mühendislik problemlerine uygulamak.

Bu tez kapsamında, ters analiz yöntemleri kullanılarak malzeme modelini karakterize eden model parametrelerini bulmak için SmartFIT adı verilen bir yazılım geliştirilmiştir. SmartFIT, makine öğrenimi teknikleri ve sonlu elemanlar modellemesini sayısal optimizasyon algoritmalarıyla birleştiren ters malzeme modellemesi üzerine kurulmuştur. SmartFIT, sonlu elemanlar analiz sonuçları ile deneysel veriler arasındaki hatayı en aza indirerek en uygun malzeme parametrelerini otomatik olarak belirlemektedir. SmartFIT

yazılımı, ABAQUS sonlu elamanlar çözücüsü ile entegre olduğundan ABAQUS çözücüsünde mevcut modellerin parametrelerinin belirlenmesinin yanı sıra kullanıcı tanımlı UEL/UMAT/VUMAT vb. programlarla tanımlanan modellerin parametrelerinin belirlenmesi için de uygundur. Ayrıca SmartFIT yazılımı birçok farklı ticari amaçlı geliştirilmiş sonlu elemanlar çözücüsüne kolayca entegre edilebilmektedir.

Geliştirilen SmartFIT yazılımının doğruluğu ve geçerliliği üç farklı malzeme modelinin parametrelerinin belirlenmesiyle gösterilmiştir. SmartFIT, kullanıcı eleman alt programında (UEL) uygulanan bir kohezif bölgesi modeli için sekiz parametre, kullanıcı malzeme alt programında (UMAT) uygulanan bir sertleşme modeli için dört parametre ve mevcut Johnson-Cook plastisite modeli için beş parametreyi belirlemek amacıyla kullanılmıştır. SmartFIT ile elde edilen malzeme parametreleri kullanılarak yapılan SE sonuçları deneysel eğrilerle karşılaştırılarak uyarlama (fit) doğruluğunu gösterilmiştir. Ayrıca, SmartFIT'in hesaplama verimliliğini değerlendirmek amacıyla, sadece SE modelleme ve sayısal optimizasyon algoritmaları kullanan geleneksel bir uyarlama yöntemi ile performansı karşılaştırılmıştır.

Bu tez kapsamında, deneylerden elde edilen yapısal yük-yer değiştirme tepkilerini kullanarak veriye dayalı bir malzeme modeli oluşturmak için bir metodoloji geliştirilmiştir. Bu yaklaşımla, genellikle deneysel olarak ölçülmesi zor olan gerilme ve gerinim değerleri yerine, ölçülmesi daha kolay olan kuvvet-yer değiştirme verilerinden yararlanılarak makine öğrenmesi teknikleri aracılığıyla malzeme modelleri elde edilmiştir. Böylece, matematiksel olarak tanımlanması zor olan malzeme modelleri yerine veriye dayalı öğrenme yöntemleriyle elde edilen modellerin kullanılması hedeflenmiştir. Veriye dayalı modeller, girdiler ve çıktılar arasındaki ilişkiyi öğrenmek için YSA gibi makine öğrenmesi tekniklerini kullanmaktadır. Bu metodoloji, geleneksel malzeme modellerini benzer hesaplama doğruluğuna sahip veriye dayalı malzeme modeliyle değiştirmeyi hedeflemektedir. Geliştirilen veriye dayalı malzeme modeli, her bir yük artışında yakınsayacak şekilde kullanıcı malzeme alt programı (UMAT) aracılığıyla sayısal SE analizine entegre edilebilmektedir. Önerilen metodoloji, yalnızca yük ve yer değiştirme ölçümleri kullanarak herhangi bir malzeme davranışını modelleyebilmesi açısından önemlidir. Doğrulama çalışması için genel çerçeve,

elastoplastik davranış sergileyen çelik malzemeden yapılmış bir kesme numunesinin analizine uygulanmıştır.

1.4. Tezin Düzeni ve Yapısı

Bu tez beş bölümden oluşmaktadır. Her bölümün içeriğine dair kısa bir açıklama aşağıdaki paragraflarda verilmiştir.

- Birinci bölüm (bu bölüm), genel bir giriş yaparak çalışmada ele alınan problemi tanımlamaktadır. Bu temel üzerinden tezin kapsamı ve amaçları açıklanmaktadır. Son olarak, tezin yapısı ve organizasyonu sunulmaktadır.
- İkinci bölüm, malzeme modellerinin kalibrasyonuna dair genel bir arka planla başlamaktadır. Ardından, ters analiz kullanarak optimal model parametrelerini belirlemek için araştırmacılar tarafından geliştirilen çeşitli tekniklerin literatür incelemesi ve yıllar içindeki uygulamaları sunulmaktadır. Ayrıca, veri odaklı malzeme modelleri ve bunların SE gibi sayısal yöntemlerde kullanımı üzerine bir literatür taraması yapılmaktadır.
- Üçüncü bölüm, tez kapsamında geliştirilen iki metodoloji hakkında bilgi vermektedir. İlk olarak, SmartFIT adlı makine öğrenimi tabanlı ters analiz çerçevesinin çalışma yöntemi ve modülleri açıklanmaktadır. Ardından, SmartFIT'in üç farklı örnekte malzeme model parametrelerini belirlemede kullanımı anlatılmaktadır. Ayrıca, deneysel bir test kullanılarak veriye dayalı malzeme modelinin geliştirilmesi ve bunun SE çözücüsüne entegrasyonu için bir yöntem sunulmaktadır.
- Dördüncü bölüm, SmartFIT ve veriye dayalı malzeme modelleme metodolojisi ile elde edilen sonuçları tartışmaktadır. SmartFIT ile belirlenen parametreler ve veriye dayalı malzeme modelleri kullanılarak yapılan SE analizinin doğruluğu deneysel testlerle karşılaştırılarak doğrulanmaktadır. Ayrıca, SmartFIT'in hesaplama verimliliği geleneksel parametre tanımlama tekniği ile karşılaştırılarak sunulmaktadır.
- Beşinci bölüm ise tezin ana sonuçlarını, gelecek çalışmalar ve öneriler içermektedir.

2. KAYNAK ARAŞTIRMASI

2.1. Optimum Parametreleri Belirlemek için Ters Analiz Yöntemleri

Model uyarlama (fitting), bir malzemenin gerçek davranışını en iyi şekilde tahmin eden bir malzeme modelinin parametrelerini seçme sürecidir. Bu basit bir işlem gibi görünse de malzeme modellerinin uyarlanması, malzeme karakterizasyonunda büyük bir zorluk teşkil etmektedir. Bu bölümde, literatürde mevcut olan bazı geleneksel uyarlama teknikleri ve bunların zorlukları açıklanmaktadır.

En basit geleneksel uydurma tekniği, bir malzeme modelinin parametrelerini doğrusal ve doğrusal olmayan regresyon analizi yöntemlerini kullanarak deneysel olarak elde edilen eğrilere uydurarak belirlemektir. Analitik çözümlerin iyi bilinen bir örneği, Young modülünün bir gerilme-gerinim eğrisinden ve akma dayanımının ofset yöntemiyle belirlenmesidir. Analitik çözümler, model parametrelerini uydurmayı oldukça kolay hale getirir de yaygın değildir. Bunun temel nedeni, malzeme modellerinin genellikle bir veya iki parametreden oluşan fonksiyonlardan daha karmaşık olmasıdır. Ayrıca, karmaşık malzeme modelleri genellikle fiziksel anlamı olmayan veya doğrudan ölçülemeyen model parametrelerine sahip olabilir. Bu parametreleri belirlemek için doğası gereği son derece yinelemeli ve her adımda manuel müdahale gerektiren uyarlama teknikleri kullanılmaktadır. Örneğin, metalik malzemelerin yükleme hızlarına bağlı ve plastisite ve hasarı deformasyon mekanizmalarını dikkate alarak geliştirilen Johnson ve Cook (1983) modeline bakıldığında toplam on malzeme parametresini içerdiği görülmektedir. Bu model parametrelerinin malzemenin deformasyon mekanizması üzerindeki etkilerinin doğru bir şekilde anlaşılacak uygun mekanik deneysel testler kullanılarak belirlenmesi gerekmektedir. Bu testler arasında split Hopkinson çubuk testi, çekme testi ve burulma testi bulunmaktadır. Termal veya gerinim hızı etkilerini uyarlamadan önce sertleşme parametrelerinin yarı-statik ve izotermal koşullar altında uyarlanmasını önermektedirler. Model parametrelerinin belirlenmesi ve uygun mekanik testlerin yapılması önemli uzmanlık ve deneyim gerektiren bir alandır.

Bir malzeme modelinin doğruluğunu test etmek için yaygın bir yöntem, deneyin bir sonlu eleman (SE) modelini oluşturmaktır. Bu şekilde, kuvvet-yer değiştirme gibi bilgiler

model uyumunu doğrulamak için kullanılabilir. Eğer simülasyondan ve deneyden elde edilen kuvvet-yer değiştirme verileri yakınsamazsa, kullanılan malzeme modeli parametrelerini ayarlamak için ters analiz yöntemi uygulanmaktadır. Ters analiz, SE modelini sayısal optimizasyon teknikleriyle birleştirerek malzeme modelinin tüm parametrelerine aynı anda uyarlamaktadır. Bu teknikler, deneysel testte ölçülen tepkiler ile SE modelinden elde edilen tepkiler arasındaki farkı en aza indirmek için parametrelerini ayarlamaktadır. SE modeli tüm deneysel sistemi simüle ettiğinden, kuvvet-yer değiştirme gibi doğrudan ölçülen veriler kullanılabilir. Bu da gerilme gibi hesaplanmış değerlere olan bağımlılığı ortadan kaldırmaktadır.

Katı mekaniği alanında, optimum parametreleri belirlemek için çok sayıda ters yöntem geliştirilmiştir. Bunlardan bazıları şunlardır: Sonlu Elemanlar Modeli Güncelleme (Finite Element Model Updating) (Kavanagh ve Clough, 1971), Bünye Denklem Boşluk Yöntemi (Constitutive Equation Gap Method) (Ladeveze ve Leguillon, 1983), Sanal Alanlar Yöntemi (Virtual Fields Method) (Grédiac, 1989), Denge Boşluk Yöntemi (Equilibrium Gap Method) (Claire vd., 2004), Entegre Dijital Görüntü Korelasyon Yöntemi (Integrated Digital Image Correlation Method) (Réthoré, 2010), Kendini Optimizasyon Yöntemi (Self-Optimizing Method) (Yun ve Shang, 2011), Dağılım Boşluk Yöntemi (Dissipation Gap Method) (Blaysat vd., 2012) ve Bünye Uyumluluk Yöntemi (Constitutive Compatibility Method) (Moussawi vd., 2013). Bu yöntemler, özellikle plastisite ve viskoplastisite alanlarında malzeme modellerinin parametrelerinin belirlenmesinde etkili olduklarını kanıtlamıştır. Bu yöntemlerin uygulamaları Chemisky vd. (2015), Martins vd. (2018) ve Andrade-Campos vd. (2022) gibi çalışmalarda bulunabilir. Ayrıca, Sun vd. (2022), Nsengiyumva ve Kim (2022), Fayad vd. (2023), Makhool ve Balzani (2024) ve tarafından ortaya konan ters yöntemler de bir SE modelinin parametrelerinin belirlenmesinde kullanılan diğer yaklaşımlardır.

Springmann ve Kuna (2005), StE 690 yapısal çeliğine uygun Gurson-Tvergaard-Needleman (GTN) modelinin girdi parametrelerini belirlemek için tersine analiz kullanmıştır. Kupon numuneler üzerinde çekme deneyinden elde edilen, yük-deplasman eğrisi gradyan tabanlı bir optimizasyon algoritması kullanılarak bu modelin parametreleri belirlemişlerdir. Daha sonra Springmann ve Kuna, geliştirdikleri algoritmayı kullanarak

bu modelin hasar deformasyon mekanizmasını hesaba katan model parametrelerini belirlemek üzere kullanmışlardır.

Stokastik simülasyon ve yapay sinir ağını birleştirmeye yönelik ilk girişim Novák ve Lehký (2006) tarafından yapılmıştır. Yapay sinir ağının eğitiminde kullanılan eğitim veri setinin stokastik olarak hazırlanması için Latin Hiperküp Örneklemesi kullanılmıştır. Bu çalışmada, malzeme modeli parametreleri deneysel verilere dayanan sonlu eleman analizleri ile tanımlanmıştır.

Cooreman vd. (2008) DC06 çelik malzemenin davranışını karakterize etmek için Swift sertleşme modelinin parametrelerinin yanı sıra Hill 1948 modelinin akma ve kırılma yüzeyi parametrelerini belirlemiştir. Bu çalışmalarda tam alan gerinim ölçümleri yapmak için dijital görüntü korelasyonu (DIC) ile uyumlu bir çift eksenli gerilim testi kullanmışlardır.

Cooreman vd. (2008) aksine, Roux ve Bouchard'ın (2010, 2015) çalışmaları nihai model uydurmadan ziyade optimizasyon tekniklerini ve malzeme parametrelerinin uydurulmasıyla ilgili zorlukları incelemiştir. Ters analiz ile belirlenen nihai parametrelerin bir malzeme davranışını tanımladığından emin olmak için zengin bir veri setinin gerekli olduğunu göstermiştir. Bu çalışmalarda Kriging Verimli Global Optimizasyon (EGO) yöntemi kullanılarak yük-deplasman verilerinin tek başına birkaç yerel çözüm üretebileceği ve malzeme davranışını tam olarak tanımlamak için yetersiz olduğu gösterilmiştir.

Lehký vd. (2014) ters analiz kullanarak malzeme modeli parametrelerini belirlemek için bir FraMePID-3PB yazılımı geliştirmiştir. Kırılma-mekanik parametre değerlerini belirlemek için yapay sinir ağları ve stokastik simülasyonlar kullanılmıştır. Geliştirilen yazılımda Object Pascal dili kullanılmış ve sonlu eleman analizleri ATENA yazılımı kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Önerilen metodoloji kullanılarak simülasyon sayısının önemli ölçüde azaltıldığı ve sayısal sonuçların deneysel eğrilere yakınsadığı gösterilmiştir. Bununla birlikte, bu araştırmada geliştirilen yazılım tam otomatik değildir,

bu da optimize edilen parametrenin bir analiz gerçekleştirmek için hala SE çözücüsüne manuel olarak aktarılması gerektiği anlamına gelir.

Primavera vd. (2015) alüminyum köpüğün model parametrelerini belirlemek için farklı bir ters analiz yaklaşımı sunmuştur. Çalışmada tek bir testten toplanan verileri kullanmak yerine, bir dizi parametreyi belirlemek için üç ayrı malzeme testi kullanmıştır. Malzemenin tepkilerini tam olarak karakterize etmek ve yeterli veri toplamak için özellikle basınç, üç nokta eğilme ve Charpy testleri kullanılmıştır. Araştırmacılar optimizasyon için üç testin verilerini tek bir metrikte birleştirmek yerine çok amaçlı bir genetik algoritma kullanmıştır. Ancak gradyan tabanlı yöntemler veya EGO yöntemlerini ile karşılaştırıldığında, çok amaçlı bir genetik algoritmanın her bir deney için kullanılan SE modelinin her biri birkaç bin kez kullanılması gerektirdiğinden çok büyük bir hesaplama kapasitesini ve zamanı ortaya çıkarmıştır.

2.2. Malzeme Modellemesi için Veriye Dayalı Yaklaşımları

Bir sayısal analizde malzeme davranışını tüm özelliklerini doğru bir şekilde temsil edebilecek bir bünye denklemi oluşturmak zorlu bir iştir. Bünye kanunları genellikle basit yükleme koşulları altında elde edilen deneysel değerleri genelleştirmek için belirli varsayımlara dayalı olarak formüle edilmektedir. Doğrusal olmayan davranış sergileyen malzemelerdeki hızlı gelişmeler, anizotropi ve pekleşme etkilerini karakterize etmek için daha karmaşık bünye modellerin geliştirilmesini zorunlu kılmıştır. Yapısal malzeme modellerinin geliştirilmesindeki temel zorluk, deneysel veriler ile sayısal olarak hesaplanan veriler arasındaki farkları en aza indirmektir. Bunu başarmak için genellikle ek ampirik parametreler bünye modellere dahil edilmektedir. Ancak bu genellikle modellerin karmaşıklığını artırarak kalibrasyonu daha zor hale getirmektedir (Grediac vd., 2006; Versino vd., 2017). Ayrıca, sınır değer problemleriyle ilgili diğer fizik temelli yasalarla karşılaştırıldığında, bünye modelleri deneysel ölçümlerden geliştirildikleri için hatalara veya belirsizliklere daha yatkındır. Bu nedenle, bir bünye model belirli bir deney için hassas bir şekilde kalibre edilmiş olsa bile, farklı bir deneyde tekrar mükemmel sonuçlar vereceğinin garantisi yoktur (Ibáñez vd., 2019).

Büyük veri ve artan hesaplama yeteneklerinin ortaya çıkışı, veriye dayalı yaklaşımları klasik yöntemlere alternatif olarak öne çıkarmıştır. Özellikle, makine öğrenmesi (MÖ) tekniklerinin bilimsel ve mühendislik sorunlarının çözümünde uygulanması giderek daha fazla popülerlik ve kabul görmektedir. MÖ modelleri, girdi ve çıktı verileri arasındaki doğrusal olmayan ve karmaşık ilişkileri öğrenme kapasitesine sahiptir ve bu ilişkiler bir kez öğrenildikten sonra iyi doğrulukta tahminler gerçekleştirmek için kullanılabilirler. Son birkaç on yılda, makine öğrenimi modelleri çeşitli alanlardaki problemleri çözmek için kullanılmıştır.

Literatüre bakıldığında, çeşitli malzemelerin mekanik davranışlarını tahmin etmek için veri odaklı yaklaşımlar kullanılmıştır. Ghaboussi vd. (1991) betonun davranışını tanımlamak için (YSA) tabanlı malzeme modelleme yaklaşımını ilk kez tanıtmışlardır. Bu YSA tabanlı malzeme modelleme çalışmaları daha sonra geomateryaller de dahil olmak üzere daha karmaşık doğrusal olmayan malzeme davranışlarını kapsayacak şekilde genişletilmiştir (Ellis vd., 1992, 1995). Bu ve diğer birçok çalışmanın sonuçları, YSA tabanlı malzeme modellerinin geniş bir mühendislik malzemesi yelpazesinin yüksek oranda doğrusal olmayan davranışını makul bir doğrulukla temsil edebileceğini göstermiştir. YSA'lar, büyük miktarda verilerle çalışabilme kapasitesine sahip olup, uygun bir girdi ve çıktı değişken setiyle eğitilerek malzemelerin karmaşık tepkilerini öğrenebilirler. Bu nedenle YSA'lar çeşitli malzemelerin davranışını modellemek için kullanılmıştır (Ghaboussi vd., 1991; Haj-Ali vd., 2001; Furukawa ve Hoffman, 2004; Liang ve Chandrashekhara, 2008). Ayrıca YSA'lar, viskoplastik davranışı modellemek için de önceki çalışmalarda uygulanmıştır (Furukawa ve Yagawa, 1998; Man ve Furukawa, 2011).

Shin ve Pande (2002), YSA tabanlı malzeme modellerini eğitmek için homojen malzeme testlerinden ek veriler üretmeye yönelik bir strateji tanımlamıştır. Bu strateji, incelenen malzemenin izotropiğinden yararlanılarak gerçekleştirilmiştir. İzotropik varsayımı altında, gerilme-gerinim çiftlerinin dönüşümü, malzeme testinin yapıldığı orijinal eksenler (1-2-3) yerine referans eksenleri (X-Y-Z) döndürülerek gerçekleştirilmiştir. Bu işlem, eğitim verilerini önemli ölçüde artırmıştır.

YSA'ların FEM gibi numerik yöntemlerde kullanımı son birkaç on yılda artmıştır. Hashash vd. (2004) YSA tabanlı malzeme modellerinin SE analizlere sayısal olarak uygulanmasıyla ilgili bazı sorunları tanımlamıştır. YSA tabanlı bünye modelinin rijitlik matrisi (Jacobian) için kapalı form çözümü türetmişlerdir. Doğrulama amacıyla, türetilen formül ABAQUS yazılımındaki kullanıcı tanımlı malzeme alt programı (UMAT) aracılığıyla bir kırışın eğilme analizi ve derin kazı problemi de dahil olmak üzere çeşitli sayısal örnekleri analiz etmek için uygulanmıştır.

Furukawa ve Hoffman (2004) YSA'yı SE analizine entegre etmek için bir algoritma sunmuştur. Bu algoritma, malzemelerin monotonik ve döngüsel plastik deformasyonunu modellemeyi amaçlamıştır. Çalışmalarında, geri gerilimi (back stress) ve sürüklenme gerilimi (drag stress) öğrenmek için iki farklı YSA kullanmıştır. Geri gerilimi, malzemenin kinematik pekleşme davranışını temsil ederken, sürüklenme gerilimi ise izotropik pekleşme davranışını modellemiştir.

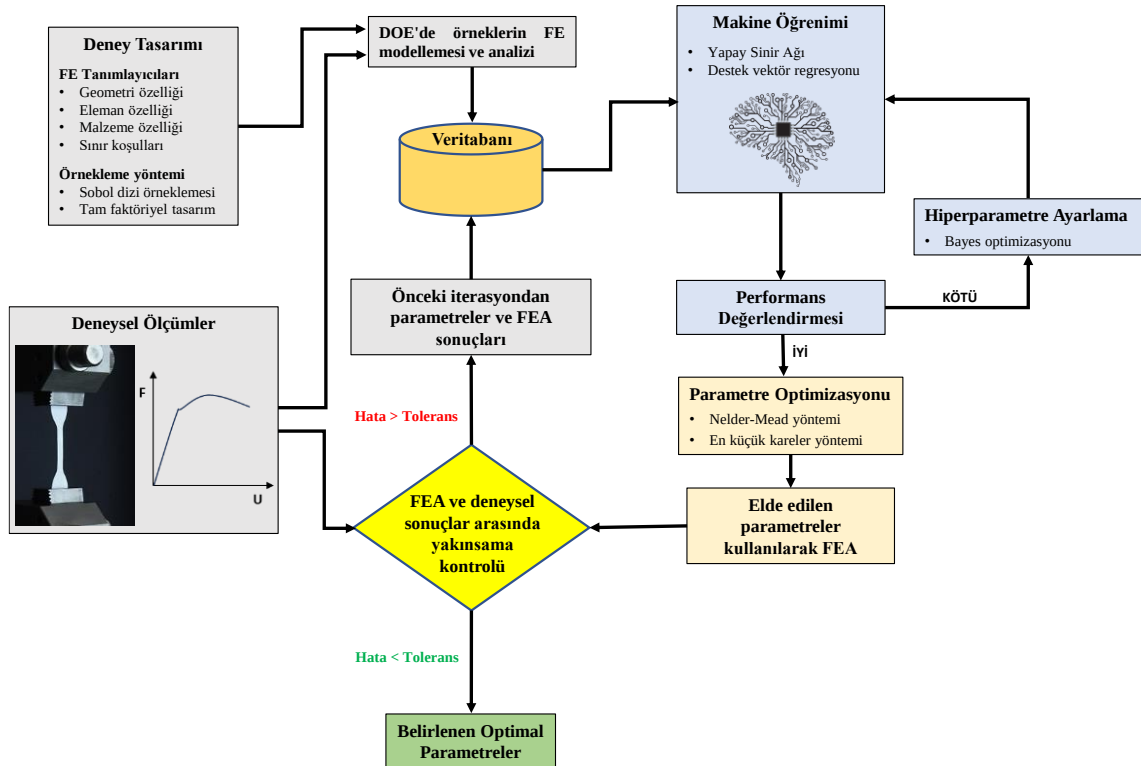
Kessler vd. (2007) alüminyumun reolojik davranışını tahmin etmek için SE analizine YSA tabanlı bir malzeme modeli uygulamıştır. Farklı sıcaklıklarda basınç altında 6061 alüminyumun deneysel verileri kullanılarak eğitilen YSA modelini iki geleneksel malzeme modeliyle (güç yasası ve tablo verileri) karşılaştırmıştır. Geliştirilen YSA modelinin SE koduna (ABAQUS) entegrasyonu kullanıcı tanımlı VUMAT alt rutini ile gerçekleştirilirken, diğer iki geleneksel model ABAQUS'un yerleşik modelleri ile analiz edilmiştir. Sonuçlar, YSA tabanlı SE modelinin deneysel verileri yansıtırma konusunda geleneksel malzeme modellerinden daha iyi performans gösterdiğini ortaya koymuştur.

Yun vd. (2008) malzemelerin döngüsel davranışını modellemek için YSA tabanlı bir yaklaşım önermiştir. Malzemelerin histeretik davranışında, bir gerinim değeri birden fazla gerilme değerine karşılık gelebilir ve bu durum YSA'ların histeretik ve döngüsel davranışları öğrenmesini engelleyen ana sebep olabilir. Bu sorunun aşılması ve YSA'ların histeretik ve döngüsel davranışları öğrenmesine yardımcı olmak için, diğer genel girdilere ek olarak iki yeni iç değişken tanıtmışlardır. Eğitilen YSA modeli, döngüsel davranışların öğrenilmesinde makul bir genelleme yeteneği göstermiştir.

3. MATERYAL ve YÖNTEM

3.1. SmartFIT Hibrit Parametre Tanımlama Yaklaşımının Çerçevesi

Bu bölümde, sonlu eleman (SE) problemlerinde bir malzeme modelinin parametrelerini belirlemek için SE simülasyonları, makine öğrenimi (MÖ) teknikleri ve gelişmiş optimizasyon yöntemlerini entegre eden hibrit bir yaklaşım olan SmartFIT tanıtılmaktadır. Önerilen bu ters metodoloji, SE analizlerinden elde edilen sayısal sonuçların deneysel verilerle doğru bir şekilde örtüşmesini sağlayan bir model kalibrasyon aracıdır. SmartFIT, deneysel bir eğriye en uygun uyumu elde etmek için gereken pahalı SE simülasyonlarının sayısını önemli ölçüde azaltmaktadır. SmartFIT yaklaşımı ile kolaylaştırılan parametre belirleme süreci Şekil 3.1'de verilen akış diyagramı ile görselleştirilmiştir. Bu diyagram temel olarak dört aşamayı içermektedir; deney tasarımı (DoE) kullanılarak kullanışlı ve verimli bir veri havuzunun hazırlanması, SE modeli oluşturularak analizlerin yapılması, MÖ tekniklerinin ve optimizasyon yöntemlerinin uygulanması ve son olarak bu bileşenler arasında entegrasyon oluşturularak parametrelerin belirlenmesi.



Şekil 3.1. SmartFIT'te uygulanan metodolojinin genel iş akışı

3.1.1. Hibrit yaklaşım için deney tasarımı tekniğinin oluşturulması

Veriye dayalı malzeme modelinin geliştirilmesinde ve parametrelerinin belirlenmesinde en kritik adımlardan biri, çok boyutlu parametre uzayını etkili bir şekilde karakterize eden bir deney tasarımının (DoE) uygulanmasıdır. Ancak, ayrıntılı literatür çalışmasında, bu adımın sıklıkla göz ardı edildiği görülmektedir. Bu adımın atlanması, hem model parametrelerinin doğru ve güvenilir şekilde belirlenmesini zorlaştırmakta hem de hesaplama süresini önemli ölçüde artırmaktadır.

Dolayısıyla, SmartFIT ile çözülecek problem tanımlandıktan sonra, ilk adım SE tanımlayıcılarını kullanarak çok boyutlu parametre uzayını etkili bir şekilde karakterize etmek için bir DoE gerçekleştirmektir. Şekil 3.1'de gösterildiği gibi bu süreç, optimizasyon için hedeflenen parametrelere dayalı olarak çeşitli SE tanımlayıcılarının belirlemekle ilgilenir. Bu tanımlayıcılar, geometrik tanımlayıcıları, eleman özellik tanımlayıcıları, malzeme özellik tanımlayıcıları ve sınır koşulları tanımlayıcıları kapsamaktadır. Örneğin, problemin malzeme özelliği tanımlayıcıları Young modülü, Poisson oranı, akma gerilmesi, gerinim sertleşme ve hasar değişkenleri gibi parametreleri içerebilir. Eleman özellik tanımlayıcıları normal ve teğetsel yönlerde kohezif mukavemet, entegrasyon noktalarının sayısı olabilir. Sınır koşulları tanımlayıcıları ise sistemin farklı bileşenleri boyunca uygulanan kuvvetler ve gerilmeler olabilir. Problem için tanımlayıcılar belirlendikten sonra, bunlar topluca bir girdi tasarım parametreleri listesi (χ) oluşturur ve şu şekilde temsil edilir:

$$\chi = [\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2, \mathcal{A}_3, \dots, \mathcal{A}_n] \quad (1)$$

Burada, n optimizasyon için toplam girdi tasarım parametre sayısını ifade eder. Ardından, optimum değerlerin kendi sınırları içinde kalmasını sağlamak için bu tanımlayıcılara üst ve alt sınırlar atanır. Girdi tasarım parametrelerinin üst sınırı, tanımlayıcıların maksimum değerlerini içerirken, alt sınır minimum değerleri içermektedir:

$$\begin{aligned}\chi_{up} &= [\mathcal{A}_{1_{max}}, \mathcal{A}_{2_{max}}, \mathcal{A}_{3_{max}}, \dots, \mathcal{A}_{n_{max}}] \\ \chi_{low} &= [\mathcal{A}_{1_{min}}, \mathcal{A}_{2_{min}}, \mathcal{A}_{3_{min}}, \dots, \mathcal{A}_{n_{min}}]\end{aligned}\tag{2}$$

Girdi tasarım parametrelerinin belirlendikten ve bunlara karşılık gelen limitlerin atandıktan sonraki adım, deney tasarımı teknikleri kullanarak parametre uzayını sistematik olarak taramaktır. Girdi parametrelerinin uzayını tamamen kapsamak için, Lin vd. (2001) tarafından önerilen uzay doldurma tasarımlarını kullanmak tavsiye edilmektedir. Bu tasarımlar, girdi parametrelerinin uzayındaki farklı bölgeleri eşit derecede önemli kabul eder. Burhenne vd. (2011) tarafından vurgulanan geleneksel rastgele ve tabakalı örnekleme yöntemleri, veri noktalarının kümelenmesine veya parametre uzayında boşluklar bırakılmasına neden olabilir. Santiago vd. (2012), düşük iyi kafes noktaları, Latin hiperküp örnekleme (LHS) ve tutarsızlık dizileri gibi çeşitli uzay doldurma tekniklerini kapsamlı bir şekilde incelemiştir. Sobol dizisinin, rastgele dağılım ile düzenli ızgara yöntemleri arasında iyi bir denge sağladığı için etkili bir tercih olduğunu bulmuşlardır.

Sobol dizisi örnekleme (Saltelli vd., 2010), düşük tutarsızlık dizileri olarak da adlandırılan yarı-rastgele örnekleme teknikleri ailesi içinde sınıflandırılmaktadır. Bu örnekleme yöntemi duyarlılık analizleri için yaygın olarak kullanılmaktadır. Renardy vd. (2021), Saltelli vd. (2010) ve Dige ve Diwekar (2018) tarafından belirtildiği gibi Sobol örnekleme yöntemi, çok boyutlu parametre uzayında birden fazla parametreyi olabildiğince düzgün bir şekilde dağıtır. Sobol dizisi örneklemesinin en belirgin özelliği, örnekleme yaparken önceki noktaları dikkate alarak yeni değerler seçmesidir. Bu yaklaşım, örneklenen verilerde kümelerin ve boşlukların oluşmasını önlemeye yardımcı olur (Burhenne vd, 2011). Bu özellik, örnekleme sürecinin verimliliğini ve etkinliğini artırarak, daha sağlam ve kapsamlı analizler yapılmasına katkıda bulunur.

SmartFIT çerçevesinde, çok boyutlu parametre uzayını etkili bir şekilde karakterize etmek için Sobol örnekleme yöntemi kullanılarak bir deney tasarımı (DoE) gerçekleştirilmektedir. Sobol örnekleme yöntemi, SmartFIT sistemine entegre edildikten sonra her parametre için üst ve alt sınırların belirlenmesini gerektirmektedir. Genellikle bu sınırlar, mühendislik sezgisiyle veya literatürde yer alan maksimum ve minimum

değerlere referansla belirlenmektedir. Optimizasyon sürecinde bu sınırlar, optimal parametre değerlerinin belirlenen aralıklar içinde kalmasını sağlamaktadır. SmartFIT'te mevcut olan bir diğer örnekleme yöntemi tam faktöriyel tasarımıdır. Bu yöntemde, her parametre için üst ve alt sınırlar belirlenmektedir. Tam faktöriyel deney tasarımı yöntemi, belirlenen sınırları kullanarak parametre seviyelerinin her olası kombinasyonunu sistematik olarak değerlendirmektedir. Toplam örnek sayısı, L^P formülü ile hesaplanmaktadır. Bu formülde L incelenen seviye sayısını (belirtilen sınırlarla ilişkili) ve P ise parametre sayısını ifade etmektedir. Örneğin, iki seviyede (üst ve alt sınırlar) optimize edilmesi gereken dört parametre varsa, tam faktöriyel tasarım kullanılarak 16 örnek elde edilir. Ancak, parametre sayısı arttıkça, deney tasarımında toplanan örnek sayısı üstel olarak artmaktadır. Dolayısıyla, bu yöntemin hesaplama açısından pahalı olması nedeniyle, tanımlanacak parametre sayısının nispeten az olduğu durumlarda kullanılması önerilmektedir. Aksi takdirde, tüm olası kombinasyonların ayrıntılı örneklemesini gerektirmeden parametre alanını verimli bir şekilde keşfetme yeteneği nedeniyle Sobol örnekleme tercih edilmektedir.

3.1.2. Hibrit yaklaşımda başlangıç örneklerinin SE modellemesi ve analizleri

SmartFIT'teki ikinci önemli adım, DoE kapsamında her bir girdi tasarım parametresi setine karşılık gelen ilgi duyulan tepkileri içeren bir veri tabanı oluşturmak için SE analizi gerçekleştirmektir. Bu tezde ele alınan ilgi duyulan tepki, nonlinear kuvvet-deplasman eğrisidir. Ancak tepki türü, analiz edilen probleme göre değişiklik gösterebilir. Bu amaçla, deneysel koşullara uygun şekilde problemin SE modeli ABAQUS yazılımında oluşturulmakta ve bu modele ait girdi dosyası (.inp) elde edilmektedir.

Ardından SmartFIT, bu girdi dosyasına erişerek örnekleme yönteminden elde edilen bir tasarım parametresi setini tanımlar ve sonrasında değiştirilmiş girdi dosyasını ABAQUS'u kullanarak çalıştırmaktadır. Tüm örneklerin simülasyonları tamamlandığında, SmartFIT çıktı dosyalarını (.odb) okuyarak her bir tasarım parametre setine karşılık gelen simülasyon sonuçlarını düzenlemektedir. Böylece, her bir model parametre örneğine ve buna karşılık gelen SE simülasyon sonuçlarına dayalı kapsamlı bir

veri tabanı oluşturulmaktadır. Bu veri tabanı, daha sonraki aşamalarda kullanılacak makine öğrenmesi algoritmaları için eğitim verisi olarak hizmet etmektedir.

SmartFIT, ön işlemeden simülasyonların çalıştırılmasına ve sonuçların işlenmesine kadar tüm süreçte ABAQUS yazılımıyla otomatik olarak etkileşime girmektedir. Böylece, süreç boyunca insan müdahalesine gerek kalmadan kesintisiz bir iş akışı sağlanmaktadır.

3.1.3. Hibrit yaklaşımın MÖ modellerinin oluşturulması

Veri tabanı oluşturulduktan sonra, bir sonraki kritik adım, DoE parametrelerinin ilgi duyulan tepki üzerindeki etkisini doğru bir şekilde yakalayabilen bir makine öğrenimi (MÖ) modelinin geliştirilmesidir. Şu anda, SmartFIT yapay sinir ağları (YSA) ve destek vektör regresyonu (SVR) iki güçlü makine öğrenimi yöntemlerini desteklemektedir. Bu modeller, Python ortamında yer alan açık kaynak MÖ kütüphaneleri olan Keras ve scikit-learn ile entegre bir şekilde çalışmaktadır. YSA ve SVR modelleri, regresyon problemlerinde birden fazla çıktı değerini yüksek doğrulukla tahmin edebilme yeteneğine sahiptir (Tariq vd., 2024b).

Optimal performansa ulaşmak için her modelin çeşitli hiperparametrelerinin ayarlanması gerekmektedir. Örneğin, YSA modellerinde gizli katman sayısı, her katmandaki nöron sayısı, aktivasyon fonksiyonu seçimi ve öğrenme oranı gibi optimize edilmesi gereklidir. SVR'ler için ise kernel tipi, düzenleme parametresi (C) ve epsilon gibi parametrelerin belirlenmesi önemlidir. Geleneksel olarak, hiperparametre ayarlaması, özellikle küçük veri kümeleri için manuel olarak veya deneme-yanılma, rastgele arama ya da grid arama yöntemleriyle yapılmaktadır. Bu süreci hızlandırmak ve hiperparametreleri otomatik olarak ayarlamak için SmartFIT, gelişmiş bir Bayes optimizasyon tekniğini kullanmaktadır. Bayes optimizasyonu, YSA veya SVR modeli kullanarak parametre uzayını tarayarak en iyi çapraz doğrulama performansını sağlayan parametre kombinasyonunu bulmaktadır. Bu yöntem, modelin en optimal konfigürasyonlarına ulaşma sürecini hızlandırarak verimliliği artırmaktadır.

SmartFIT çok yönlü işlevler sunan veri ön işleme modülleri ile donatılmıştır. Bu modüller, veri kümesindeki hem girdi hem de çıktı değişkenlerini 0 ile 1 aralığında ölçeklendirerek model eğitimi sürecini optimize etmektedir. Ayrıca, veri kümesini bölerek toplam verilerin %90'ı model eğitimi için ve %10'u modelin doğruluğunu test etmek için kullanılmaktadır. Bunun yanı sıra, bu modüller tahmin edilen ve gerçek değerler arasındaki hatayı çeşitli performans metrikleriyle ölçerek modelin performansına ilişkin kapsamlı bir değerlendirme sağlamaktadır.

3.1.4. Hibrit yaklaşımın bileşenlerinin entegrasyon prosedürü

Bir MÖ modeli, karmaşık doğrusal olmayan ilişkileri yaklaşık olarak tahmin edebilen bir kara kutu fonksiyon olarak değerlendirilebilir. MÖ modeli eğitilip doğruluğu test edildikten sonra, hedef ve tahmin edilen çıktı arasındaki farkı en aza indirmeyi amaçlayan bir amaç fonksiyonuna SmartFIT tarafından entegre edilmektedir. Bu amaç fonksiyonu, genellikle en küçük kareler yöntemi kullanılarak şu şekilde formüle edilebilir:

$$Amaç\ fonksiyonu = \min \sum \left(\frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right)^2 \quad (3)$$

$$\hat{y}_i = ML(\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2, \mathcal{A}_3, \dots, \mathcal{A}_n) \quad (4)$$

Burada, y_i ve $\hat{y}_i$, i 'inci veri noktası için hedef ve tahmin edilen değerlerdir. Optimizasyon süreci, belirlenen amaç fonksiyonunun minimizasyonu etrafında yapılandırılmıştır. Bu işlemi kolaylaştırmak için SmartFIT, her parametre için deney tasarımında belirlenmiş maksimum ve minimum değerlere göre otomatik olarak üst ve alt sınırları seçer. Kullanılabilecek çeşitli optimizasyon yöntemleri arasında, geniş kullanım alanı ve sağlamlığı nedeniyle SmartFIT, Nelder-Mead yöntemini tercih etmektedir. Nelder-Mead yöntemi hem tek boyutlu hem de çok boyutlu fonksiyonların optimizasyonunda yaygın olarak kullanılan bir tekniktir ve özellikle fonksiyonun gradyanının bilinmediği ya da hesaplanmasının zor olduğu problemlerde etkilidir. Bu yöntem, bir desen arama optimizasyon algoritması kullanarak, sonlu elemanlar modelinin parametre değerlerini sistematik olarak ayarlamakta ve optimum çözüme doğru yakınsamaktadır.

Optimal parametre deęerleri elde edildikten sonra, bu deęerler sonlu eleman modelinin girdi dosyasına entegre edilmektedir. Gncellenmiř girdi dosyası, SE simlasyonlarının gerekleřtirilmesi iin Abaqus zcsne aktarılmaktadır. Eęer yeni SE analizinden elde edilen sonular ile deneysel veriler arasındaki fark, belirlenen tolerans eřięini ařarsa, elde edilen parametreler ve SE ıktısı veri tabanına eklenmektedir. Ardından, M model bu yeni veri setiyle yeniden eęitilerek gncellenmektedir. SmartFIT, parametreleri srekli olarak optimize ederken M modelini gncelleyerek SE tahminlerinin doęruluęunu kademeli olarak artırmaktadır. Bu yinelemeli dnę, simlasyon sonuları deneysel verilerle uyumlu hale gelene kadar devam etmektedir. Bylelikle SmartFIT, optimize edilmiř modelin analiz edilen fiziksel sistemi doęru bir řekilde temsil etmesini saęlamaktadır.

3.2. Hibrit SmartFIT Yazılımı Kullanılarak eřitli Modellerin Parametrelerinin Belirlenmesi

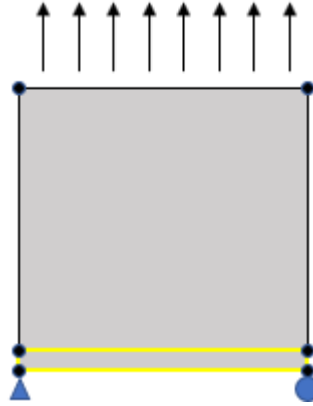
Hibrit SmartFIT yazılım erevesinin etkinlięini kapsamlı bir řekilde deęerlendirmek amacıyla  farklı modelin parametreleri belirlenmiřtir. Bu rnekler, eřitli malzeme ve eleman modellerinin davranıřlarını doęru bir řekilde yakalamaya odaklanmaktadır. İlk hesaplama rneęi, kullanıcı tanımlı eleman alt programı (UEL) ile uygulanan bir kohezif blge modelini kalibre etmeyi amalayan ekme yk altında tek eleman testini iermektedir. Bu baęlamda, kohezif blge modelinin ekiř-ayrılma tepkisini yneten 8 parametrenin belirlenmesi hedeflenmiřtir. Bu sre, kohezif malzemelerin farklı ykleme kořulları altındaki davranıřlarının hassas bir řekilde karakterize edilmesini gerektirmektedir. İkinci rnek, kullanıcı malzemesi alt programını (UMAT) kullanarak gerekleřtirilen bir kompakt ekme testi zerine odaklanmaktadır. Bu rnekte, izotropik pekleřme plastisite modelini tanımlamak iin gerekli drt kritik parametrenin belirlenmesi hedeflenmiřtir. Bu model, karmařık ykleme senaryoları altında plastik deformasyonu simle etme yeteneęine sahiptir ve malzeme davranıřının doęru bir řekilde temsil edilmesi iin hassas parametre tanımlaması gerektirmektedir.

Son hesaplama rneęi, tekrarlı yklemeye maruz kalan bir kiriř-kolon baęlantı modeline odaklanmaktadır. Bu yapısal problemde, malzeme davranıřı klasik Johnson-Cook modeli ile tanımlanmıřtır. Bu baęlamda, malzemenin elastik ve plastik tepkisini yneten beř

parametrenin belirlenmesi amaçlanmıştır. Johnson-Cook modeli, malzeme davranışını doğru bir şekilde temsil etmedeki çok yönlülüğü ile bilinmektedir. Bu nedenle, güvenilir simülasyonlar elde etmek için doğru parametre tanımlaması büyük önem taşımaktadır. Bu hesaplama örnekleri incelenerek, SmartFIT optimizasyon çerçevesinin kapsamlı bir değerlendirmesi yapılmaktadır.

3.2.1. Hibrit SmartFIT yazılımı kullanılarak UEL'ye uygulanan bir kohezif bölge modelinin parametrelerinin belirlenmesi

0.1 mm x 0.1 mm ölçülerinde bir kare levha, dikey yönde tek eksenli yüklemeye tabi tutulmuştur. Bu yükleme, levhanın üst kenarındaki düğüm noktalarına maksimum 0.03 mm'lik bir yer değiştirme uygulanarak gerçekleştirilmiştir. Numune, 4 düğüm noktasına sahip tek bir sürekli kuadratik düzlem gerilme elemanı ile temsil edilmektedir. Ayrıca, Şekil 3.2'de gösterildiği gibi, levhanın alt kısmına bir kohezif elemanı entegre edilmiştir. Levha malzemesinin lineer elastik davranış gösterdiği varsayılmakta olup, bu malzemenin elastik modülü 32 GPa ve Poisson oranı 0,2 olarak belirlenmiştir. Bu özellikler, levhanın uygulanan yükleme koşullarına verdiği tepkiyi belirleyen temel parametreleri sağlamaktadır.



Şekil 3.2. Kohezif elemanlı modelin geometrisi.

Çekiş-ayrılma davranışını simüle etmek için kritik öneme sahip olan kohezif bölgesi modeli, Park vd. (2009) ile Park ve Paulino (2012) tarafından geliştirilen PPR potansiyel tabanlı modelden türetilmiştir. Bu kohezif bölge modeli, ABAQUS'a kullanıcı tanımlı eleman (UEL) alt programı olarak entegre edilmiştir ve bunun için 8 parametrenin doğru

bir şekilde tanımlanması gerekmektedir. Bu parametreler, normal ve teğetsel kırılma enerjileri (ϕ_n ve ϕ_t), normal ve teğetsel kohezif dayanımları (σ_{max} ve τ_{max}), şekil parametreleri (α ve β) ile normal ve teğetsel başlangıç eğimi göstergelerini (λ_n ve λ_t) içermektedir. Bu parametreleri etkin bir şekilde belirlemek için Park ve Paulino (2012) tarafından sunduğu gerilme-yer değiştirme eğrisi, SmartFIT içinde referans eğrisi olarak kullanılmaktadır.

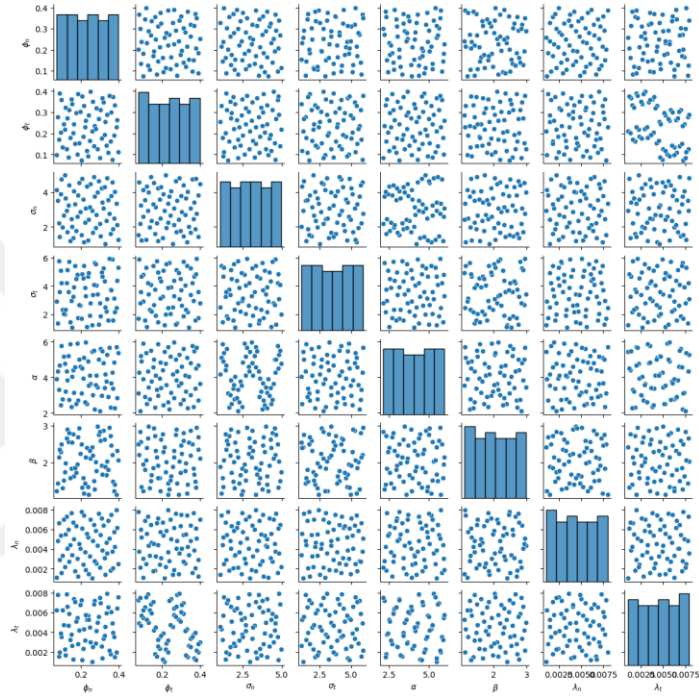
Bu parametrelerin optimizasyon sürecini başlatmak için ilk önemli adım, DoE metodolojisi kullanılarak yeterli sayıda örnek parametreleri üretmektir. Bu bağlamda, Sobol örneklem yöntemi kullanılarak 64 örnek oluşturulmuştur. Bu yöntem, her parametre için minimum ve maksimum değerler tanımlandıktan sonra parametre uzayının sistematik ve verimli bir şekilde araştırılmasını sağlar. Çizelge 3.1’de bu parametrelerin aralıkları ayrıntılı olarak verilmiştir. SmartFIT metodolojisinde, beşten fazla parametrenin tanımlanması gereken durumlarda genellikle 64 örnek kullanılır. Bu örnek sayısı genellikle yeterli olsa da problemin karmaşıklığına ve analiz gereksinimlerine bağlı olarak ayarlanabilir.

Çizelge 3.1. PPR model parametrelerinin üst ve alt sınırları

Parametreler	Min. değer	Max. değer
Normal kırılma enerjisi (ϕ_n)	0.07	0.4
Teğetsel kırılma enerjisi (ϕ_t)	0.07	0.4
Normal kohezif dayanım (σ_{max})	1	5
Teğetsel kohezif dayanım (τ_{max})	1	6
Normal şekil parametre (α)	2.1	6
Teğetsel şekil parametre (β)	1.1	3
Normal başlangıç eğimi göstergesi (λ_n)	0.001	0.008
Teğetsel başlangıç eğimi göstergesi (λ_t)	0.001	0.008

DOE kapsamında üretilen tüm parametre örnekleri arasındaki çift yönlü ilişkiler Şekil 3.3’te gösterilmiştir. Bu şekil, Sobol dizisi yönteminin önemli bir özelliğini, yani örnek noktalarının parametre uzayı boyunca düzgün bir şekilde yayılmasını ve örtüşmeyen

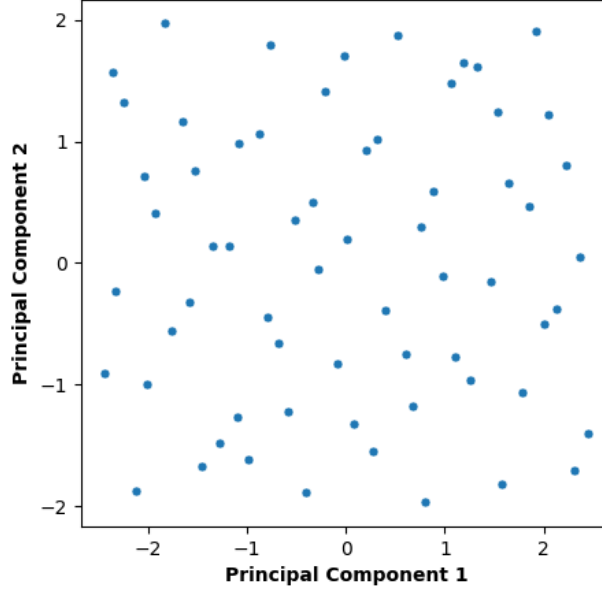
projeksiyonları görsel olarak temsil eder. Ayrıca, Sobol dizisi yöntemi kullanılarak tüm örnekler için 0.016'lık bir tutarsızlık (discrepancy) değeri hesaplanmıştır. Bu düşük tutarsızlık değeri, örnek noktalarının uzayda oldukça eşit bir şekilde dağıldığını ve boşlukların çok az olduğunu göstermektedir. Bu gözlem, örnekleme stratejisinin parametre uzayını etkili bir şekilde kapsadığını ve optimizasyon sürecinde kapsamlı bir araştırmayı kolaylaştırdığını işaret etmektedir.



Şekil 3.3. DOE'deki örnekler için dağılım grafiği

Temel Bileşen Analizi (PCA), genel veri kümesinin iki boyutlu bir uzayda dağılımını incelemek için kullanılmaktadır. PCA, karmaşık ve yüksek boyutlu veri kümelerini işlemek için denetimsiz bir doğrusal boyut azaltma ve veri görselleştirme tekniğidir. PCA'nın arkasındaki kavram, orijinal vektör kümesini 'temel bileşenler' olarak adı verilen yeni bir kümeye dönüştürerek yüksek korelasyonlu verilerin boyutluluğunu azaltmayı içermektedir. Bu süreçte PCA, veri kümesinin özünü yakalamayı ve global yapısını korumayı amaçlamaktadır. Ancak bu dönüşüm sırasında verilerin lokal yapılarının kaybolabileceği unutulmamalıdır. Bu örnekteki sekiz boyutlu veri kümesinin PCA ile iki boyuta indirgenmiş hali Şekil 3.4'te gösterilmektedir. Bu görsel, indirgenmiş iki boyutlu

uzayda veri noktalarının gözle görülür bir örtüşme veya kümelenme göstermediğini, dolayısıyla verilerin nispeten uniform bir dağılıma sahip olduğunu ortaya koymaktadır.



Şekil 3.4. Veri setinin boyut indirgemesinden sonra PCA dağılım grafiği

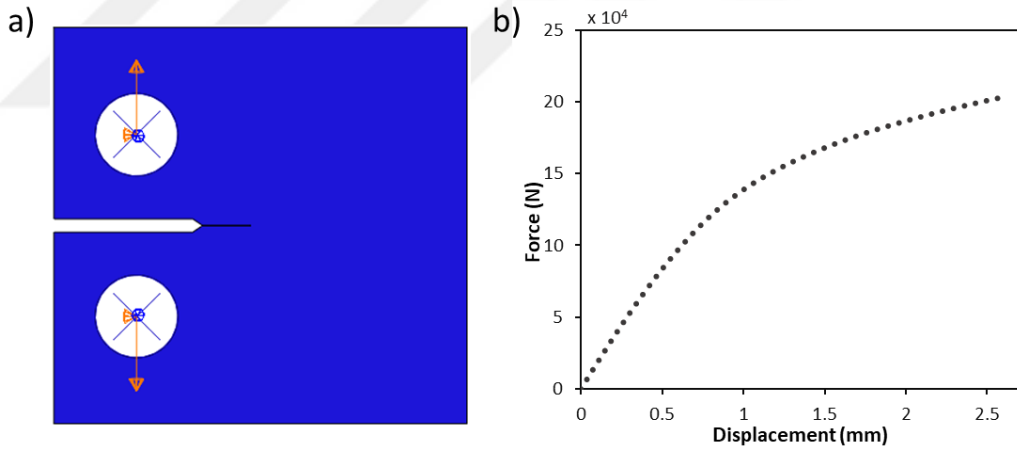
3.2.2. Hibrit SmartFIT yazılımı kullanılarak UMAT'a uygulanan izotropik sertleşme plastisite modelinin parametrelerinin belirlenmesi

Bu örnekte amaç, Martínez-Pañeda vd. (2019) tarafından geliştirilen kullanıcı malzeme modeli (UMAT) alt rutininin parametrelerini belirlemektir. Bu alt rutin, güç yasası izotropik sertleştirme ile klasik von Mises plastisitesinin uygulanmasını kolaylaştırmaktadır. Bu UMAT alt rutinde, malzeme davranışı etkili bir şekilde tanımlamak için dört temel parametrenin doğru bir şekilde tanımlanması gerekmektedir. Bu parametreler Young modülü, Poisson oranı, akma gerilme ve gerinim sertleştirme üssünü içermektedir. Bu parametreleri kalibre etmek için, Şekil 3.5 (a)'da gösterildiği gibi 62,5 mm genişliğe ve 60 mm yüksekliğe sahip olan kompakt çekme testi numunesinin SE modeli oluşturulmaktadır. Numunenin deliklerine zıt dikey yönlerde 2,5 mm'lik yer değiştirme yüklemesi uygulanmaktadır. Optimize edilmesi gereken parametrelerin nispeten düşük sayıda olması (toplamda dört parametre), DOE'de tam faktöriyel yöntemin benimsenmesini sağlamıştır. Çizelge 3.2'de her bir parametre için minimum ve maksimum değerler özetlenmektedir. Bu nedenle, dört parametrelili model için tam

faktöriyel yöntem toplam 2^4 kombinasyon kullanarak 16 benzersiz örnek oluşturmuştur. Ardından, tam faktöriyel yöntemle oluşturulan tüm örnekler için sonlu elemanlar analizleri gerçekleştirilmiştir. Elde edilen veriler, daha sonraki analizler ve MÖ modelinin eğitimi için veri tabanına kaydedilmiştir. Nihai hedef, SmartFIT optimizasyon çerçevesi aracılığıyla optimum malzeme parametrelerini elde ederek SE eğrisini referans eğrisine uydurmaktır.

Çizelge 3.2. UMAT model parametrelerinin alt ve üst sınırları

	Young Modülü	Poisson Oranı	Akma Gerilme	Gerilim Sertleştirme Üssü
<i>Min. Değeri</i>	120000	0.2	400	0.2
<i>Max. Değeri</i>	360000	0.4	800	0.6

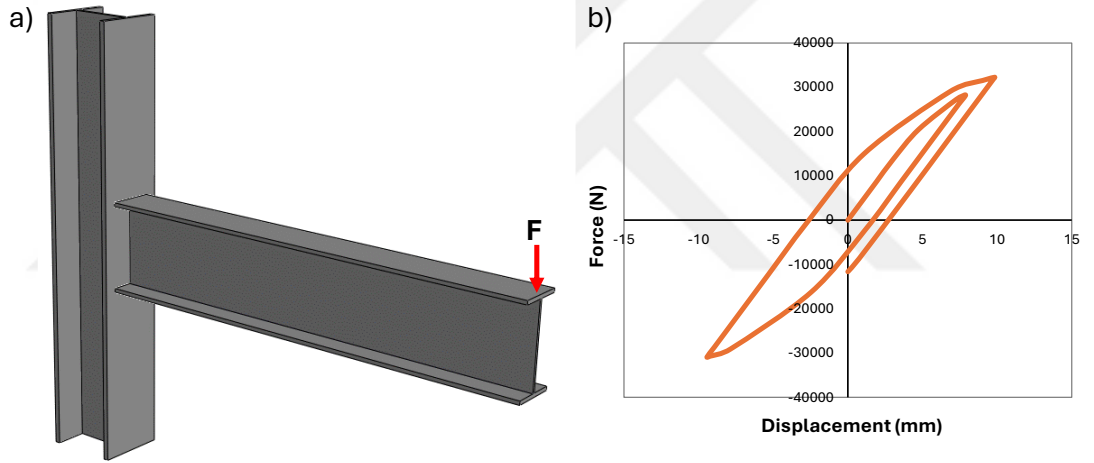


Şekil 3.5. a) Kompakt çekme numunesinin SE modeli ve b) referans kuvvet-yer değiştirme eğrisi

3.2.3. Hibrit SmartFIT yazılımı kullanılarak Johnson-Cook modelinin parametrelerinin belirlenmesi

SmartFIT'in dayanıklılığını göstermek amacıyla, kiriş-kolon bağlantısının tekrarlı yükleme altındaki daha gerçekçi ve karmaşık bir yükleme koşullarına sahip bir analizi

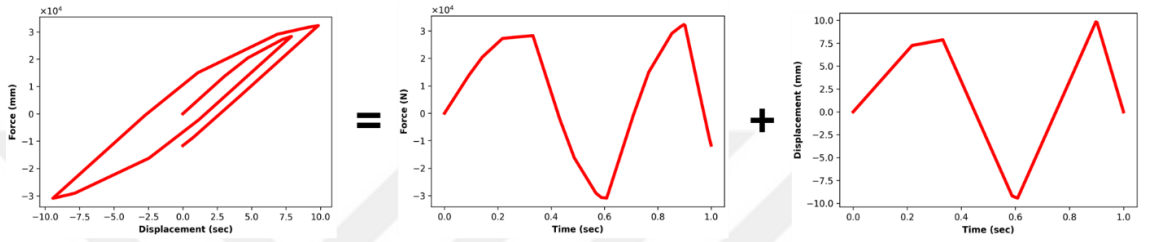
gerçekleştirilmiştir. Bu örnek, malzeme davranışında histerezis oluşturan tekrarlı yüklemenin dahil edildiği daha doğrusal olmayan bir yükleme senaryosunu içermektedir. Kiriş-kolon bağlantıları yapısal sistemlerin kritik bileşenleridir ve bu tür doğrusal olmayan koşullar altında davranışlarını doğru bir şekilde modellemek, karmaşık gerilme-şekil değiştirme ilişkileriyle uğraşmayı gerektirmektedir. Bu örnek SmartFIT'in gerçek dünya, doğrusal olmayan ve çok eksenli yükleme koşullarını ele alma kapasitesini daha iyi ortaya koyacaktır. Bu örnekte kullanılan kiriş-kolon bağlantı modeli, Swati ve Gaurang (2014) tarafından gerçekleştirilen deneysel çalışmadan esinlenmiştir. Onlar tekrarlı yükleme altındaki çelik moment bağlantılarında azaltılmış kiriş kesitinin etkisini incelemişlerdir. Kiriş-kolon bağlantısının sonlu eleman modeli ve kirişin serbest ucuna uygulanan tekrarlı yükleme Şekil 3.6'da gösterilmektedir.



Şekil 3.6. a) Kiriş-kolon bağlantısının SE modeli b) Kirişin serbest ucuna uygulanan tekrarlı yük

Tekrarlı yükleme altında kuvvet-yer değiştirme grafiğine bakıldığında, histerezis etkisi nedeniyle belirli bir yer değiştirme değeri birden fazla kuvvet değerine karşılık gelebilir. Bu karmaşık özellik, kuvvet-yer değiştirme histerezis eğrisinin MÖ modelleri tarafından doğrudan yorumlanmasını zorlaştırmaktadır. Bu zorluğu aşmak için, histerezis kuvvet-yer değiştirme eğrisi, kuvvet-zaman ve yer değiştirme-zaman eğrilerine ayrılmıştır. Şekil 3.7'de bu ayrıştırma gösterilmektedir. Bu yaklaşım aşağıdaki hususlara dayanmaktadır:

- Kiriş-kolon bağlantı modelinin tüm SE analizlerinde yer değiştirme kontrollü tekrarlı yükleme uygulanmaktadır. Bu, yer değiştirme-zaman eğrisinin tüm simülasyonlarda aynı kalmasını sağlamaktadır.
- Karmaşık kuvvet-yer değiştirme histerezis eğrisini kullanmak yerine, MÖ modelinin çıktısı olarak kuvvet-zaman eğrileri kullanılmaktadır. Bu yaklaşım optimizasyon görevi basitleştirecektir, çünkü her bir zaman noktası yalnızca bir kuvvet değerine karşılık gelmektedir.



Şekil 3.7. Kuvvet-zaman ve yer değiştirme-zaman eğrilerine ayrıştırılmış döngüsel kuvvet-yer değiştirme histerezis eğrileri

Malzemenin doğrusal olmayan davranışını karakterize etmek için Johnson-Cook plastisite modeli kullanılmıştır. Bu fenomenolojik bünye model, malzemenin davranışını tanımlamak için çeşitli parametrelerin belirlenmesine dayanmaktadır. Başlangıçta Young modülü (E), Poisson oranı (ν) gibi elastik özellikler ve akma gerilmesi (A), sertleşme sabiti (B) ve sertleşme üssü (n) dahil olmak üzere sertleşme etkileri için plastik parametreler bilinmemektedir. Parametre seviyelerinin her bir kombinasyonunu oluşturmak için tam faktöriyel tasarım yöntemi kullanılmaktadır. Bunun için her parametrenin alt ve üst sınırları Çizelge 3.3'te verilmiştir. Bu örnekleme yöntemi, 32 örnekten oluşan bir veri seti oluşturmuştur. Her bir numune, kiriş-kolon bağlantı modelinin SE analizinde kullanılmış ve elde edilen kuvvet-zaman eğrileri veri tabanında depolanmıştır.

Çizelge 3.3. Tasarım parametrelerinin üst ve alt sınırları.

	E (MPa)	ν	A (MPa)	B (MPa)	n
Alt Sınır	150000	0.2	150	300	0.2

Üst Sınır	300000	0.4	300	600	0.6
-----------	--------	-----	-----	-----	-----

3.3. Hibrit SmartFIT Yazılımın Performansının Geleneksel Optimizasyon Yöntemi ile Karşılaştırılması

Bu bölümde, SmartFIT yöntemi ile geleneksel optimizasyon yaklaşımları arasındaki ayrıntılı bir karşılaştırma sunulmaktadır. Bu amaç doğrultusunda, Bölüm 3.2.1 ve Bölüm 3.2.2'de sunulan ve UEL ve UMAT modellerinin parametrelerinin belirlenmesine odaklanan iki örnek, geleneksel bir optimizasyon algoritması kullanılarak çözülmüştür. Bu geleneksel optimizasyon algoritması, en küçük kareler yöntemine dayanmaktadır ve amaç fonksiyonu, simülasyon sonuçları ile deneysel veriler arasındaki farkların karelerinin toplamını hesaplamak üzere formüle edilmiştir. SmartFIT'ten farklı olarak, bu yöntemde ne DoE yoluyla bir simülasyon veri tabanı oluşturulmakta ne de herhangi bir MÖ modeli kullanılmaktadır. Bunun yerine, optimizasyon süreci parametrelerin başlangıç tahmini ile başlatılır ve bu değerler simülasyon sonuçları ile deneysel veriler arasındaki hatayı minimize etmek için iteratif olarak ayarlanmaktadır.

SmartFIT tarafından kullanılan Nelder-Mead yönteminin aynısı karşılaştırma amacıyla burada da uygulanmıştır. Parametrelerin üst ve alt sınırları, SmartFIT için seçilen değerlerle aynı olacak şekilde belirlenmiştir. Simülasyon sonuçları ile deneysel veriler arasındaki hata belirlenen bir tolerans seviyesine ulaştığında optimizasyon sürecini sonlandıran durdurma kriteri de her iki yaklaşımda tutarlı tutulmuştur. Optimizasyon sürecinin süresiz olarak devam etmesini veya erken sona ermesini önlemek amacıyla, maksimum fonksiyon değerlendirme sayısı 1000 ve fonksiyon toleransı 0.0001 olarak seçilmiştir.

Sonuçlar bölümünde hem UEL hem de UMAT modelleri için geleneksel optimizasyon yöntemiyle elde edilen parametre tanımlama sonuçlarının kapsamlı bir analizi sunulmaktadır. Bu sonuçlar, hesaplama verimliliği ve doğruluk açısından iki yaklaşım arasındaki farkları göstermek amacıyla SmartFIT tarafından üretilen sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Bu karşılaştırma özellikle her iki yöntemin gerektirdiği hesaplama süresini ve simülasyon ile deneysel veriler arasındaki uyumun kalitesini vurgulamaktadır.

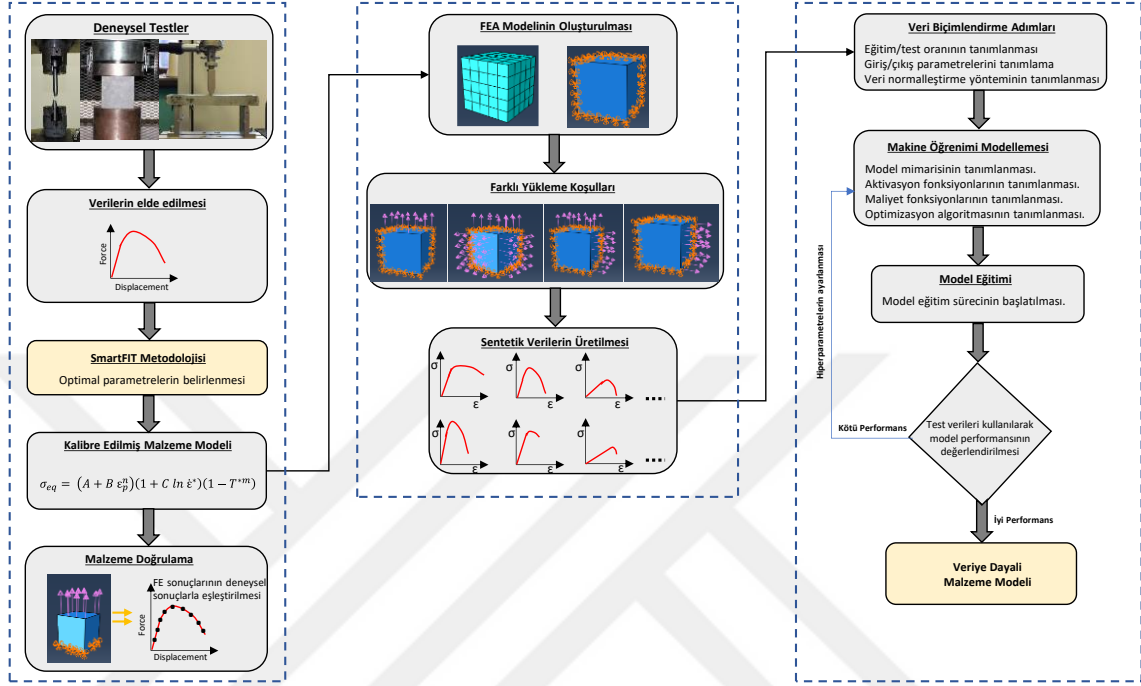
3.4. Yapısal Test Kullanılarak Veriye Dayalı Malzeme Modelinin Geliştirilmesi

3.4.1. Genel iş akışı

Bu yaklaşımın çerçevesi, malzeme modeli parametre tanımlama ve veriye dayalı elastoplastik malzeme modeli (DD-ECM) geliştirme süreçlerini bir araya getirmektedir. Üç temel modülden oluşmaktadır: ilk modül parametre tanımlamaya, ikincisi veri üretimine, üçüncüsü ise DD-ECM'nin geliştirilmesine ve FEA çözücüsüne entegre edilmesine odaklanmaktadır. Bu çerçevenin ayrıntılı bir şeması Şekil 3.8'de gösterilmiştir.

Parametre tanımlama süreci, çekme, basma veya üç nokta eğilme testleri gibi deneylerden elde edilen kuvvet-yer değiştirme sonuçları kullanılarak başlatılmaktadır. Bu deneysel sonuçları SmartFIT ile gerçekleştirilen parametre tanımlama prosedürü için girdi olarak kullanılmaktadır. SmartFIT, malzeme modelin parametrelerini doğru bir şekilde belirlemek için ML, FEA ve optimizasyon algoritmalarını birleştirmektedir. Malzeme modeli kalibre edildikten sonra, doğruluğunu değerlendirmek için malzeme doğrulaması yapılmaktadır. Kalibre edilmiş model, fiziksel testlerle yakalanması zor olan çeşitli koşullar altında malzeme davranışını simüle etmek için FEA çözücüsüne uygulanabilir. Malzeme model başarılı bir şekilde kalibre edildikten sonra, sentetik malzeme davranışının büyük bir veri kümesini oluşturmak için kullanılmaktadır. Bu, çeşitli yükleme koşulları altında FEA simülasyonları gerçekleştirilerek sağlanmaktadır. Simülasyon sonuçları, ilgi alanındaki her bir entegrasyon noktasından ayrıntılı gerilme ve gerinim verileri sağlamaktadır. Daha sonra bu veriler veriye odaklı malzeme modelin eğitimi için temel oluşturur. Üçüncü modül, veritabanında kaydedilen verilerin ön işlenmesiyle başlamaktadır. Bu süreç, verilerin normalleştirilmesini, girdi ve çıktı değişkenlerinin tanımlanmasını ve verilerin eğitim ve test kümelerine ayrılmasını içermektedir. Ardından, aktivasyon fonksiyonlarının, maliyet fonksiyonlarının ve optimizasyon algoritmalarının seçimi de dahil olmak üzere sinir ağı modelinin mimarisi tanımlanmaktadır. Sinir ağı daha sonra belirli sayıda epoch ve batch boyutlarıyla eğitilmektedir. Eğitim başarıyla tamamlandığında, model girdi olarak verilen gerinim vektörlerinden gerilme vektörlerini tahmin edebilir ve malzeme rijitlik matrisi (Jacobian)

hesaplanabilir. Son olarak, eğitilen sinir ağı modeli ve malzeme sertlik matrisi, kullanıcı malzeme alt programı UMAT'a uygulanarak SE simülasyonlarında kullanılacak bir DD-ECM oluşturulmaktadır.



Şekil 3.8. DD-ECM'i oluşturmak için şematik diyagram

3.4.2. Malzeme modellerin kalibrasyonu için veriye dayalı ters analiz yöntemi

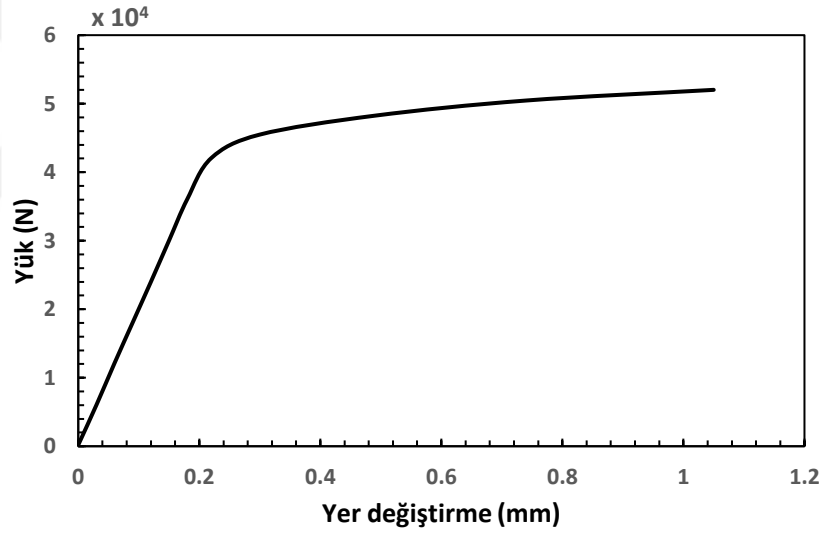
Çoğu mühendislik uygulamasında, yapısal testler aracılığıyla yük ve yer değiştirme verilerinin elde edilmesi yaygın bir uygulamadır. Ancak, malzemenin yapısal davranışı genellikle iyi bilinmemekte ya da belirsiz kalmaktadır. Bu durumu ele almak için, bünye model parametrelerini optimize ederek malzemenin davranışını belirlemek amacıyla ters analiz yöntemleri kullanılmaktadır. Bu yöntemler, malzemenin bilinmeyen özelliklerini, simüle edilen kuvvet veya deplasman değerleri deneysel verilerle yakından eşleşene kadar ayarlamayı içermektedir. Schnur ve Zabarar (1992) tarafından önerilenler gibi geleneksel parametre optimizasyon teknikleri, hataları en aza indirmek amacıyla sıkça kullanılmaktadır.

Bu çalışmada, bünye modeli kalibrasyonunu verimli ve doğru bir şekilde gerçekleştirmek için makine öğreniminin gücünden yararlanan veri odaklı bir ters analiz metodolojisi

SmartFIT kullanılmıştır. Bu metodoloji, parametre belirleme sürecine başlamadan önce deneyden elde edilen eğrinin tanımlanması ve bir malzeme modelinin seçilmesiyle başlamaktadır. Bu metodolojinin ayrıntıları ve uygulamaları, sonraki bölümlerde detaylandırılmıştır.

3.4.2.1 Deneysel testler ve sonlu eleman modellemesi

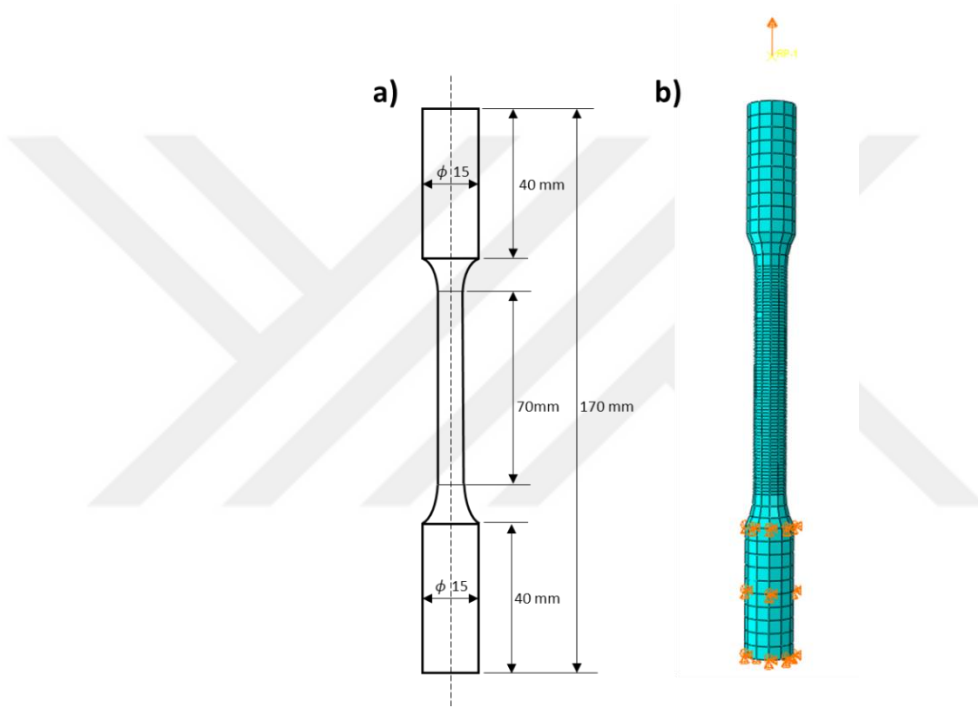
Cao ve ark. (2020) tarafından X80 boru çeliği üzerinde gerçekleştirilen tek eksenli çekme testlerinden elde edilen yük-yer değiştirme eğrisi, parametre belirleme için referans eğrisi olarak seçilmiştir. Bu çekme testleri, WDW-100D elektronik evrensel malzeme test cihazı kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Şekil 3.9'da gösterilen yük-yer değiştirme eğrisi hem elastisite hem de gerinim sertleşmesi özelliklerini yansıtan bir davranış sergilemektedir.



Şekil 3.9. Tek eksenli çekme testinden elde edilen yük-yer değiştirme eğrisi

Tek eksenli çekme deneyinin sonlu elemanlar simülasyonu, ticari yazılımı Abaqus kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Deneysel düzeni doğru bir şekilde modellemek için, Şekil 3.10 (a)'da gösterildiği gibi test standartlarına uygun olarak yuvarlak çubuk numunesinin üç boyutlu bir SE modeli oluşturulmuştur. Modele, azaltılmış entegrasyonlu 3D sekiz düğümlü izoparametrik elemanlar(C3D8R) atanmıştır. Simülasyon sonuçlarının doğruluğunu sağlamak amacıyla bir ağ yakınsama (mesh convergence) çalışması yapılmıştır. Kritik deformasyonların meydana geldiği numunenin ölçüm bölümünde daha

ince ağ elemanları kullanılırken, hesaplama süresini en aza indirmek için numunenin kenetleme bölgesinde daha kaba elemanlar tercih edilmiştir. Numunenin üst kenetleme bölgesine bağlanmış bir referans noktası tanımlanmıştır. Bu referans noktası, deney koşullarını taklit eden 1.05 mm'lik toplam yukarıya doğru bir yer değiştirme uygulamak için kullanılmaktadır. Aynı anda, alt kısım sabit tutularak simülasyon sırasında stabilite sağlanmıştır. Numunenin sonlu elemanlar modeli Şekil 3.10 (b)'de gösterilmiştir. Malzemenin elastoplastik davranışı, sonraki bölümde tartışılan Johnson-Cook malzeme modeli ile tanımlanmıştır.



Şekil 3.10. a) Numunenin boyutları ve b) SE modeli

3.4.2.2. Johnson-Cook malzeme modeline genel bakış

Johnson ve Cook (1983), sürekli hasar mekaniği ve viskoplastik mekaniği kavramlarına dayanarak, yüksek gerinim hızlarının, sıcaklığın ve büyük deformasyonların etkilerini kapsamlı bir şekilde incelemiştir. Akma gerilmesi matematiksel olarak üç faktörün çarpımı olarak temsil edilmiştir: gerinim sertleşmesi $f_1(\epsilon)$, gerinim hızı sertleşmesi $f_2(\dot{\epsilon})$, ve sıcaklık yumuşama $f_3(T)$. Bu ilişki şu şekilde ifade edilmiştir:

$$\sigma_{eq} = f_1(\epsilon)f_2(\dot{\epsilon})f_3(T) \quad (5)$$

Bu denklemin spesifik formu ise aşağıdaki verilmiştir:

$$\sigma_{eq} = (A + B \varepsilon_p^n)(1 + C \ln \dot{\varepsilon}^*)(1 - T^{*m}) \quad (6)$$

Bu denklemde, A , B , n , C ve m sırasıyla malzemenin başlangıç akma gerilimi, gerinim sertleşme modülü, sertleşme indisi, gerinim hızı sertleşme parametresi ve sıcaklık yumuşama katsayısını temsil etmektedir. Burada, σ_{eq} eşdeğer akma gerilimini, ε_p birikmiş plastik gerinimi ve $\dot{\varepsilon}^* = \dot{\varepsilon}/\dot{\varepsilon}_0$ boyutsuz gerinim hızını ifade etmektedir. Burada $\dot{\varepsilon}_0$ referans gerinim hızıdır. Ayrıca, $T^* = (T - T_r)/(T_m - T_r)$, burada T çalışma sıcaklığını, T_r oda sıcaklığını ve T_m erime sıcaklığını temsil etmektedir. İlk parantez içindeki fonksiyon, $\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}_0$ ve $T^* = 0$ olduğunda gerilimi gerinim cinsinden tanımlamaktadır. İkinci ve üçüncü parantezlerdeki fonksiyonlar ise sırasıyla artan gerinim hızlarının ve sıcaklığın etkilerini hesaba katmaktadır.

Bu çalışmada, termal değişiklikler göz ardı edilerek bir yarı-statik model geliştirilmesi hedeflenmiştir. Bu nedenle, malzemenin bünye ilişkisindeki ikinci ve üçüncü parantezler dikkate alınmamıştır. Toplamda, malzemenin davranışını doğru bir şekilde karakterize edebilmek için belirlenmesi gereken beş parametre vardır: Young modülü, Poisson oranı, akma gerilimi, sertleşme modülü ve sertleşme indisi. Bu parametreler, aşağıdaki bölümlerde ayrıntılı olarak açıklandığı üzere, veriye dayalı ters analiz metodolojisi (SmartFIT) kullanılarak belirlenecektir.

3.4.2.3. SmartFIT kullanılarak veriye dayalı ters analiz optimizasyon prosedürü

Sayısal optimizasyon, değişkenlerine getirilen kısıtlamalara bağlı kalarak belirli bir amaç fonksiyonunu maksimuma çıkarmak veya minimuma indirmek için kullanılan bir yöntemdir (Nocedal ve Wright, 1999). Bu amaç fonksiyonu, parametreler ya da bilinmeyenler olarak adlandırılan bazı değişkenlere bağlıdır. Optimizasyon sürecinin çoğu, parametrelerin, amaç fonksiyonunun ve kısıtlamaların tanımlanmasını gerektirmektedir. Bu çalışmada, SE analizinden elde edilen sayısal kuvvet-yer değiştirme eğrisinin deneysel verilerle örtüşmesini sağlayarak malzeme model parametrelerini

belirlemek için SmartFIT adı verilen yeni bir parametre optimizasyon prosedürü kullanılmıştır. SmartFIT, Abaqus ile yapılan sonlu elemanlar analizlerini, makine öğrenme tekniklerini (Yapay Sinir Ağları ve Destek Vektör Regresyonu) ve gelişmiş optimizasyon yöntemlerini birleştirerek Python dili ile geliştirilmiştir. SmartFIT kullanılarak gerçekleştirilen parametre tanımlama prosedürü aşağıdaki adımlarda özetlenmiştir:

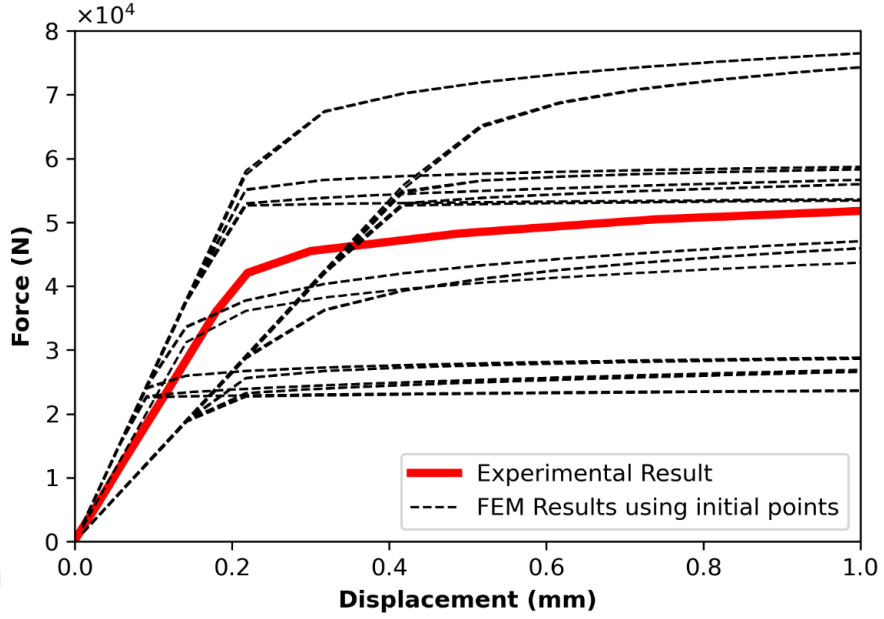
- Belirlenecek her parametre için minimum ve maksimum değerler kümesi tanımlanmaktadır. Bu değerler, optimizasyon sırasında alt ve üst sınırlar olarak kullanılmakta ve en uygun değer bu aralıkta yer alması sağlanmaktadır. Young modülü, Poison oranı, başlangıç akma gerilimi, gerinim sertleşme modülü ve sertleşme indeksi için bu üst ve alt sınırlar rastgele seçilmiştir. Çizelge 3.4, tasarım değişkenlerine atanan başlangıç değerlerini ve bu değişkenler için belirlenen alt ve üst sınırları göstermektedir. Bu problemde, tasarım değişkenleri arasındaki tüm etkileşimleri değerlendirmek için tam faktöriyel deney tasarımı (DOE) kullanılmıştır. Tam faktöriyel DOE'de, tasarım değişken seviyelerinin her olası kombinasyonu için sonuçlar değerlendirilmektedir. Tam faktöriyel DOE'deki toplam örnek sayısı L^v formülü ile belirlenmektedir. Burada L incelenen seviye sayısını (genellikle sınır sayısı ile ilişkilendirilir) ve v değişken sayısını temsil etmektedir. Mevcut problemde beş değişken ve iki düzey (üst ve alt sınır) bulunmaktadır ve bu da tam faktöriyel DOE için toplam 32 örnek anlamına gelmektedir.
- Test numunesinin Şekil 3.10 (b)'de gösterildiği gibi sonlu elemanlar modeli Abaqus'ta oluşturulup ve giriş dosyası SmartFIT'e aktarılmaktadır. SmartFIT, Abaqus'u arka planda çözücü olarak kullanarak DOE'deki tüm örnekler için modelin sonlu elemanlar analizini gerçekleştirmektedir. Her bir tasarım değişkenine ait sonlu elemanlar kuvvet- yer değiştirme sonuçları çıkarılarak veritabanında saklanmaktadır. Şekil 3.11, sonlu elemanlar simülasyonlarından elde edilen kuvvet- yer değiştirme eğrilerinin deneysel eğri ile karşılaştırmasını göstermektedir. Beklendiği gibi, DOE'deki parametre örnekleri henüz optimal olmadığı için simülasyon eğrileri deneysel eğri ile uyuşmamaktadır.
- Daha sonra SmartFIT, yapay sinir ağı veya destek vektör regresyonu gibi bir makine öğrenmesi modeli oluşturmakta ve bunu veritabanındaki simülasyon verilerini

kullanarak eğitmektedir. Makine öğrenimi modeli eğitilip test edildikten sonra, verilen bir dizi giriş parametresi ile çıktıların tahmin edilmesinde kullanılmaktadır. SmartFIT, makine öğrenimi tahminleri ile gerçek deneysel sonuçlar arasındaki farkı en aza indirmek için Nelder-Mead optimizasyon algoritmasını kullanmaktadır.

- Optimizasyon algoritmasından elde edilen optimize edilmiş parametreler daha sonra simülasyonları gerçekleştirmek için sonlu elemanlar modeline aktarılmaktadır. Eğer yeni SE analizinin sonuçları ile deneysel veriler arasındaki farklar, önceden tanımlanmış bir tolerans seviyesinden yüksekse, mevcut yinelemeye ait yeni veriler veritabanına dahil ederek makine öğrenim modeli yeniden eğitilmektedir. Her yinelemede, optimizasyon algoritması sonlu elemanlar modeli içindeki parametre değerlerini ayarlamaktadır. Bu yinelemeli süreç, istenilen doğruluk seviyesine ulaşılan kadar devam etmektedir.

Çizelge 3.4. Tasarım değişkenlerinin alt ve üst sınırları ve başlangıç tahmin değerleri

Değişken	Alt Sınır	Üst sınır	Başlangıç tahmini
<i>E</i> (MPa)	150000	300000	250000
<i>v</i>	0.2	0.4	0.22
<i>A</i> (MPa)	300	700	400
<i>B</i> (MPa)	200	800	700
<i>n</i>	0.2	0.6	0.3



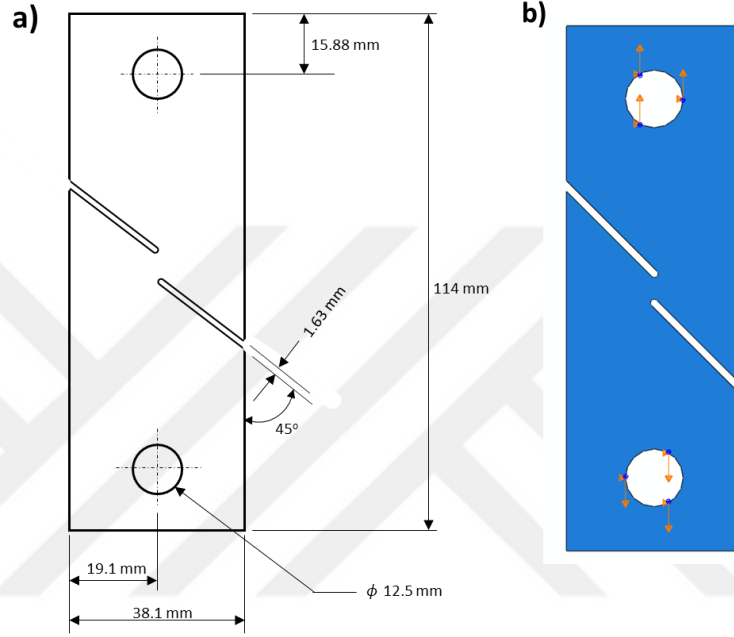
Şekil 3.11. Deneysel ve SE simülasyonlu kuvvet-yer değiştirme eğrilerinin karşılaştırılması

3.4.3. Veriye dayalı elastoplastik malzeme modelinin (DD-ECM) geliştirilmesi

3.4.3.1. Sentetik verilerin oluşturulması

Basit kesme testleri için Amerikan Test ve Malzeme Topluluğu standardı ASTM B831'i takip eden bir SE modeli oluşturulmuştur. Bir kesme bölgesine sahip olan bu düzlemsel kesme testi, düz numunelerin mekanik özelliklerini değerlendirmek için oldukça etkili bir yöntem olduğunu kanıtlamaktadır (Rauch, 1998). Numunenin geometrik konfigürasyonları ve SE modeli Şekil 3.12'de gösterilmiştir. Kesme numunesi ABAQUS yazılımında düzlem gerilme elemanları (CPS4R) kullanılarak ayrıklaştırılmıştır. İzotropik elasto-plastik malzeme davranışını karakterize etmek için SE modeline bir Johnson-Cook modeli atanmıştır. Bu amaçla, SmartFIT yöntemi kullanılarak belirlenen optimal Johnson-Cook modeli parametreleri kullanılmıştır. Yükleme koşullarını simüle etmek için, gerçek deneysel testlere uygun olarak, üst ve alt kenetlenmiş düğümlere dikey bir yer değiştirmesi uygulanmıştır. Sınır koşullarındaki gerilme yer değiştirmesi değiştirilerek çoklu SE simülasyonları gerçekleştirilmiştir. Bu işlem, veritabanını yeterli miktarda veri ile zenginleştirmek ve sınır ağı modelinin eğitimini kolaylaştırmak için yapılmaktadır. Her bir sonlu eleman analizinde, numunedeki tüm elemanların

entegrasyon noktalarından iki asal gerilme (S11, S22), iki asal gerinim (E11, E22), bir kayma gerilmesi (S12) ve bir kayma gerinimi (E12) elde edilmiştir. Tüm sonlu eleman analizleri tamamlandıktan sonra, S11, S22, S12, E11, E22 ve E12'ye ait toplam 171259 veri örneği veritabanında kaydedilmiştir. Ayrıca, DD-ECM sonuçlarıyla karşılaştırma yapmak için 0.2 mm çekme yer değiştirmesine sahip bir referans model oluşturulmuştur.



Şekil 3.12. a) Kesme testi numunesinin boyutları ve (b) SE modeli

3.4.3.2. YSA eğitilmeden önce verilerin ön işlenmesi

Veri ön işleme, yapay sinir ağı (YSA) modelinin eğitilmesinden önce verilerin düzgün bir şekilde biçimlendirildiğinden emin olmak için önemli bir adımdır. Veri ölçeklendirme YSA uygulamalarında yaygın olarak kullanılan bir ön işleme yöntemidir. Sinir ağlarında veriyi normalleştirmek, öğrenme sürecini hızlandırır ve modelin tahmin doğruluğunu artırmaktadır. Normalize edilmemiş veri setleri, bir girdi değişkeni diğerlerine göre büyük ölçüde farklılık gösterdiğinde öğrenme sürecini orantısız şekilde etkileyebilir ve doğru bir yakınsamayı engelleyebilir. Veri normalizasyonu, farklı girdilerin boyutlarından, birimlerinden ve aralıklarından kaynaklanabilecek bias ortadan kaldırarak sinir ağlarının genel performansını önemli ölçüde artırmaktadır. Bu çalışmada, tüm girdi ve çıktı

değerleri, 0 ile 1 arasında benzer ölçekte olmalarını sağlamak için normalleştirilmiştir. Normalizasyon işlemi, aşağıda verilen denkleme göre gerçekleştirilmiştir:

$$x_{scaled} = \frac{x - \min(x)}{\max(x) - \min(x)} \quad (7)$$

Burada, x gerçek değeri, $\max(x)$ ve $\min(x)$ sırasıyla değişkenlerin maksimum ve minimum değerleridir.

Veri normalizasyonunun ardından, veri tabanındaki tekrar eden verileri kaldırılmış. Veri tabanı başlangıçta 171.259 veri örneği içeriyordu ve tekrarlanan örnekler çıkarıldıktan sonra bu sayı 150000'e düşürülmüştür. Daha sonra, veri tabanı eğitim veri kümesi ve test veri kümesi olmak üzere iki ayrı veri kümesine bölünmüştür. Eğitim veri kümesi, çıktı değerlerini hedef değerlerle karşılaştırarak ağırlıkların ve bias'larını ayarlamak için kullanılmıştır. Test veri kümesi, ağırlık performansını tarafsız bir şekilde değerlendirmek için kullanılmıştır. Bu değerlendirme, veri örneklerinin rastgele seçilmesiyle gerçekleştirilir ve ağırlık gelecekteki performansını tahmin etmenin bir yoludur. Eğitim verileri toplam 137007 veri örneği ile tüm veri tabanının yaklaşık %80'ini oluştururken, test verileri 34252 veri örneği ile yaklaşık %20'sini kapsamaktadır.

3.4.3.3. DD-ECM'in geliştirilmesi

Bu bölümde, Johnson-Cook modeli tarafından tanımlanan elastoplastik malzeme denklemlerin yerini alacak bir YSA'nın mimarisi ve eğitim süreci tanıtılmaktadır. Evrensel yaklaşım teoremine göre, yeterli karmaşıklığa sahip ileri beslemeli YSA'lar ve uygun aktivasyon fonksiyonlarıyla herhangi bir sürekli fonksiyonu yaklaşık olarak ifade etme yeteneğine sahiptir (Hornik, 1991). Bu nedenle, daha önce farklı malzemeler için önerilen çeşitli fonksiyonel ilişkiler bir DD-ECM gibi YSA tabanlı mimarisi ile değiştirilebilir. Bu mimari, belirli bir malzemenin davranışını modellemek amacıyla ilgili verilerle kolayca eğitilebilir.

Bu çalışmada geliştirilen DD-ECM, Python'da yazılmış açık kaynaklı bir sinir ağı kütüphanesi olan Keras (Gulli ve Pal, 2017) kullanılarak eğitilmiştir. Keras, TensorFlow,

CNTK ve Theano gibi çeşitli derin öğrenme çerçeveleri üzerinde çalışma yeteneğine sahiptir. DD-ECM mimarisi girdi olarak bir gerilme vektörü alır ve çıktı olarak buna karşılık gelen gerilme vektörünü üretir. DD-ECM, her biri 32 nörondan oluşan iki gizli katman ile yapılandırılmıştır. Sinir ağlarındaki katman ve nöron sayısı hiperparametre olarak kabul edilmektedir. Bu hiperparametreleri belirlemenin en basit yollarından biri manuel aramadır, ancak (Hutter vd., 2015) tarafından detaylandırıldığı gibi daha karmaşık hiperparametre optimizasyon teknikleri de mevcuttur. Bu örnekte, doğrulama sürecinde doğruluk ve kayıp ölçütleri karşılaştırılarak optimal katman ve nöron sayısını belirlemek için manuel arama yapılmıştır. Gizli katmanlarda Doğrultulmuş Lineer Birim (ReLU) aktivasyon fonksiyonu, çıktı katmanında ise doğrusal bir aktivasyon fonksiyonu kullanılmıştır. Optimizasyon için Adam algoritması, 0.0005 öğrenme oranı ile kullanılmış ve kayıp fonksiyonu olarak MSE seçilmiştir. Eğitim süreci, 32 veri grubu (batch size) ile 1000 iterasyonda gerçekleştirilmiştir. DD-ECM'in özeti Çizelge 3.5'te verilmiştir.

Çizelge 3.5. Johnson-Cook modelini öğrenmek için DD-ECM'nin yapısı

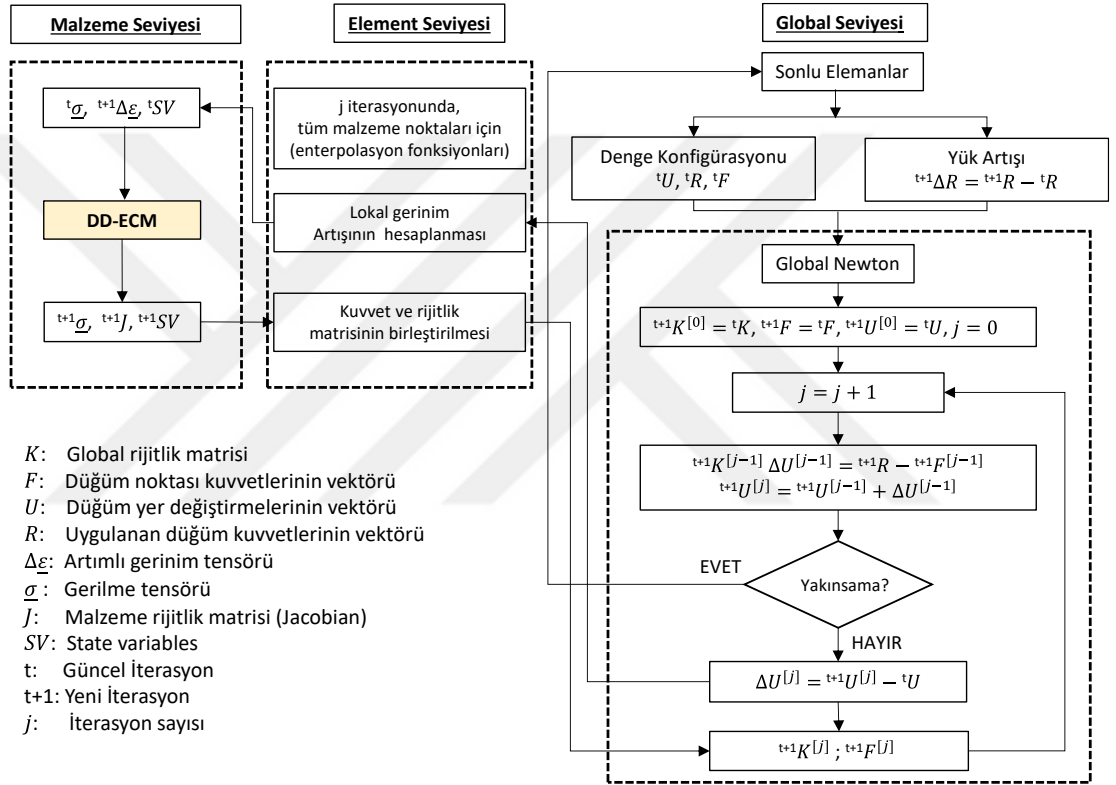
Girdi Katmanı	Gizli Katman 1	Gizli Katman 2	Çıktı Katmanı	Kayıp Fonksiyonu	Optimizasyon fonksiyonu
$[\epsilon_{11}, \epsilon_{22}, \epsilon_{12}]^T$	32 x ReLU	32 x ReLU	$[\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{12}]^T$	MSE	Adam

3.4.4. Abaqus çözücüsüne DD-ECM uygulaması

DD-ECM ile SE analizinde denge denklemlerinin çözümü arasındaki bağlantı Şekil 3.13'te gösterilmektedir. Bu yaklaşım dikkate alındığında, DD-ECM malzeme seviyesinde uygulanmaktadır. SE modelinde, DD-ECM her elemanın entegrasyon noktasında gerilme durumu ve malzeme rijitlik matrisini güncellemek için sorgulanmaktadır. Bu bilgiler, mevcut gerilme durumu, gerinim durumu ve gerinim artışına dayalı olarak güncellenmektedir. Güncellenen gerilme durumu, düğüm kuvvetleri vektörünün hesaplanmasında kullanılırken, güncellenen rijitlik matrisi, küresel rijitlik matrisinin hesaplanmasında kullanılmaktadır.

Geleneksel malzeme modellerinde, diferansiyel denklemler kullanılarak sonsuz küçük gerinim artışları ile sonsuz küçük gerilme artışları arasında bir bağlantı kurulmaktadır.

Sonlu bir gerinim artışı boyunca bir malzemenin tepkisini tanımlamak için bünye modele ihtiyaç vardır. Malzeme modeli, bünye denklemleri entegre ederek belirli bir gerinim artışı için tepkiyi tanımlamaktadır. Ancak, bu çalışmada kullanılan DD-ECM, bünye denklemlerine ihtiyaç duymadan doğrudan gerinim durumuna dayalı olarak bir gerilme durumu hesaplamaktadır. Bu yaklaşım, belirli sayısal entegrasyon yöntemlerinden kaynaklanabilecek hataları ortadan kaldırarak ve hesaplama süresini azaltarak bir avantaj sunmaktadır.



Şekil 3.13. DD-ECM entegre Newton-Raphson yöntemi kullanılarak FEA çözüm stratejisi

3.4.4.1. Malzeme rijitlik matrisinin (Jacobian) oluşturulması

Sonlu elemanlar analizlerinde, genellikle artımlı malzeme rijitlik matrisi olarak adlandırılan tutarlı Jacobian matrisi (C), malzeme entegrasyon noktasında malzemenin deformasyonunu karakterize etmektedir. Bu nedenle, her iterasyonda malzemenin davranışını tanımlar ve aşağıdaki gibi ifade edilebilir:

$$\mathbf{C} = \frac{\partial \Delta \underline{\sigma}}{\partial \Delta \underline{\varepsilon}} \quad (8)$$

Burada, $\Delta \underline{\sigma}$ artımlı gerilme vektörü, $\Delta \underline{\varepsilon}$ ise artımlı gerinim vektörü temsil etmektedir. Bu formülasyon hem küçük deformasyon problemlerine hem de hacim değişiminin sınırlı olduğu büyük deformasyon problemlerine uygulanabilir. DD-ECM, eleman tepkisini hesaplamak için genellikle malzeme rijitlik matrisini göz ardı etmektedir. DD-ECM, herhangi bir rijitlik matrisi formülasyonu kullanmak yerine, doğrudan artımlı gerilmeleri hesaplamaktadır. Hashash vd. (2004), sinir ağlarıyla eğitilmiş bir malzeme modeli için algoritmik malzeme rijitlik matrisini hesaplamak amacıyla bir sayısal uygulama yöntemi önermişlerdir. Gizli katmanlardan gelen aktivasyon değerleri, girdi/çıkıktı değerleri, bağlantı ağırlıkları ve ölçek faktörleri kullanılarak açık bir denklemde NN tabanlı algoritmik rijitlik matrisi türetilmiştir. Bu çalışmada, malzeme sertlik matrisini oluşturmak için iki gizli katmana sahip bir YSA modeline göre metodolojileri uyarlanmıştır. Bu YSA modeli, ReLU aktivasyon fonksiyonlarıyla karakterize edilen iki gizli katman ve doğrusal aktivasyon fonksiyonuna sahip bir çıkıktı katmanından oluşmaktadır.

İlk adım normalize edilmiş girdi ($\bar{\varepsilon}^{ANN}$) ve çıkıktı ($\bar{\sigma}^{ANN}$) vektörlerinin tanımlanmasını içermektedir. Bu vektörler aşağıdaki gibi -1 ile 1 arasında normalize edilmektedir:

$$\varepsilon_i^{ANN} = \frac{\varepsilon_i}{S_i^{\varepsilon}} \quad -1 < \bar{\varepsilon}^{ANN} < 1 \quad (9)$$

$$\sigma_j^{ANN} = \frac{\sigma_j}{S_j^{\sigma}} \quad -1 < \bar{\sigma}^{ANN} < 1 \quad (10)$$

Burada S her bir değişken için normalleştirme parametreleridir ve i, j alt simgeleri vektörlerin bileşenlerini temsil etmektedir. Gizli katmanlardaki B_n ve C_n düğümlerinin yanı sıra YSA çıkış katmanındaki σ_n^{ANN} düğümlerinin değerleri aşağıdaki gibi belirlenebilir:

$$B_n = ReLU \left(\sum_{i=1}^{N_\varepsilon} w^{B_n \varepsilon_i} \varepsilon_i^{ANN} + b_i^{B\varepsilon} \right) \quad (11)$$

$$C_n = ReLU \left(\sum_{i=1}^{N_B} w^{C_n B_i} B_i + b_i^{CB} \right) \quad (12)$$

$$\sigma_n^{ANN} = Linear \left(\sum_{i=1}^{N_C} w^{\sigma_n C_i} C_i + b_i^{\sigma C} \right) \quad (13)$$

Burada N_ε , N_B ve N_C sırasıyla girdi katmanındaki, birinci gizli katmandaki ve ikinci gizli katmandaki düğüm sayısına karşılık gelmektedir. $w^{B_n \varepsilon_i}$, $w^{C_n B_i}$ ve $w^{\sigma_n C_i}$ sembolleri sırasıyla girdi katmanı ile birinci gizli katman arasındaki, birinci gizli katman ile ikinci gizli katman arasındaki ve ikinci gizli katman ile çıktı katmanı arasındaki bağlantı ağırlık matrislerini temsil etmektedir. Ayrıca, $b_i^{B\varepsilon}$, b_i^{CB} ve $b_i^{\sigma C}$ sırasıyla girdi katmanı ile birinci gizli katman arasındaki, birinci gizli katman ile ikinci gizli katman arasındaki ve ikinci gizli katman ile çıktı katmanı arasındaki bias vektörlerini ifade etmektedir.

Denklem (8), i ve j indislerine karşılık gelen rijitlik matrisi ifadesini elde etmek için zincir kuralı kullanılarak türev alınır.

$$\frac{\partial \Delta \sigma_i}{\partial \Delta \varepsilon_j} = \frac{\partial \Delta \sigma_i}{\partial \Delta \sigma_i^{ANN}} \frac{\partial \Delta \sigma_i^{ANN}}{\partial \Delta \varepsilon_j^{ANN}} \frac{\partial \Delta \varepsilon_j^{ANN}}{\partial \Delta \varepsilon_j} \quad (14)$$

Denklem (9) ve (10)'da verilen girdi ve çıktı normalizasyon parametrelerinin tanımı kullanılarak, önceki denklem aşağıdaki gibi yeniden formüle edilebilir:

$$\frac{\partial \Delta \sigma_i}{\partial \Delta \sigma_i^{ANN}} \frac{\partial \Delta \sigma_i^{ANN}}{\partial \Delta \varepsilon_j^{ANN}} \frac{\partial \Delta \varepsilon_j^{ANN}}{\partial \Delta \varepsilon_j} = \frac{S_i^\sigma}{S_j^\varepsilon} \frac{\partial \Delta \sigma_i^{ANN}}{\partial \Delta \varepsilon_j^{ANN}} \quad (15)$$

Şimdi, YSA katman tanımlamalarını kullanarak kalan kısmi türevi parçalara ayırarak türevleyelim.

$$\frac{\partial \Delta \sigma_i^{ANN}}{\partial \Delta \varepsilon_j^{ANN}} = \sum_{k=1}^{N_C} \left(\frac{\partial \Delta \sigma_i^{ANN}}{\partial C_k} \frac{\partial C_k}{\partial \Delta \varepsilon_j^{ANN}} \right) = \sum_{k=1}^{N_C} \left(\frac{\partial \Delta \sigma_i^{ANN}}{\partial C_k} \left[\sum_{l=1}^{N_B} \frac{\partial C_k}{\partial B_l} \frac{\partial B_l}{\partial \Delta \varepsilon_j^{ANN}} \right] \right) \quad (16)$$

Yukarıdaki denklemi hesaplamak için zincir kuralını kullanarak her iki aktivasyon fonksiyonunun türevleri belirlenmiştir.

$$\frac{\partial \text{ReLU}(f(x))}{\partial x} = \text{step}(f(x)) \frac{\partial f(x)}{\partial x} \quad (17)$$

$$\frac{\partial \text{Linear}(f(x))}{\partial x} = \frac{\partial f(x)}{\partial x} \quad (18)$$

Bunlar Denklem (11), (12) ve (13)'e uygulandığında aşağıdaki ifadeler elde edilir.

$$\frac{\partial B_l}{\partial \Delta \varepsilon_j^{ANN}} = \text{step}(B_l) \cdot w^{B_l \varepsilon_j} \quad (19)$$

$$\frac{\partial C_k}{\partial B_l} = \text{step}(C_k) \cdot w^{C_k B_l} \quad (20)$$

$$\frac{\partial \Delta \sigma_i^{ANN}}{\partial C_k} = w^{\sigma_i C_k} \quad (21)$$

Dolayısıyla, Denklem (14)'te tanımlandığı gibi, rijitlik matrisi (Jacobian) için açık formülasyon aşağıdaki gibi ifade edilebilir:

$$C_{ij} = \frac{\partial \Delta \sigma_i}{\partial \Delta \varepsilon_j} = \frac{S_i^\sigma}{S_j^\varepsilon} \sum_{k=1}^{N_C} \left(w^{\sigma_i C_k} \left[\sum_{l=1}^{N_B} (\text{step}(C_k) \cdot w^{C_k B_l}) (\text{step}(B_l) \cdot w^{B_l \varepsilon_j}) \right] \right) \quad (22)$$

Bu denklem, mevcut malzeme durumuna ve gerinim artışına dayanan malzeme rijitlik matrisinin algoritmik bir doğrusallaştırmasını temsil etmektedir. Bu matris, Simo ve Taylor (1986) tarafından yapılan tanıma göre tutarlı bir Jacobian matrisini ifade

etmektedir. YSA'dan türetilen bu rijitlik matrisi, modelin öğrendiği malzeme davranışından etkilenmez. YSA modelinin orta veya yüksek derecede doğrusal olmayan bir malzeme tepkisi tahmin etmesine bakılmaksızın uygulanabilir. Denklem (22)'yi kullanarak rijitlik matrisini hesaplamak için kullanılan sözde kod Şekil 3.14'te verilmiştir.

DD-ECM için malzeme rijitlik matrisi algoritması
Gerekli: N_{dim} (Düzlem gerilme elemanı için 3), S_i^G, S_j^E, ANN mimarisi, Aktivasyon fonksiyonları Çıktı: $\frac{\partial \Delta \sigma_i^{t+1}}{\partial \Delta \varepsilon_j^{t+1}}$ 1. DDSDE rijitlik matrisini (N_d, N_d) boyutları ile başlatın 2. for $i = 1, N_{dim}$ do for $j = 1, N_{dim}$ do $Part_0 = \frac{S_i^G}{S_j^E}$ for $k = 1, N_C$ do $Part_A = \text{Çıktı katmanı aktivasyon fonksiyonunun türevi}$ for $l = 1, N_B$ do $Part_B = Part_B + \text{Gizli katman aktivasyon fonksiyonunun türevi}$ end $Part_AB = Part_A + Part_B$ end $DDSDE_{(i,j)} = Part_0 * Part_AB$ end end 3. $\frac{\partial \Delta \sigma_i^{t+1}}{\partial \Delta \varepsilon_j^{t+1}} = DDSDE_{(i,j)}$

Şekil 3.14. Rijitlik matrisini (Jacobian) hesaplamak için sözde kod.

3.4.4.2. DD-ECM ile entegre edilmiş UMAT alt programı

YSA ile türetilen rijitlik matrisi ve DD-ECM'i, Newton-Raphson yöntemi gibi implicit yöntemler kullanan bir FEA çözücüsüne Şekil 3.13'te gösterildiği gibi entegre edilebilir. Bu metodoloji, belirli bir YSA mimarisine ve eğitim prosedürüne bağımlı değildir. Bu çalışmada geliştirilen DD-ECM ve rijitlik matrisi, kullanıcı tanımlı malzeme modülü UMAT aracılığıyla genel amaçlı FEA çözücüsü olan ABAQUS'a entegre edilmiştir. Bu entegrasyon, belirlenen format gereksinimlerine uyduğu sürece UMAT'ın çok çeşitli genel sınır değer problemlerini çözmesini sağlamaktadır. Sinir ağı fonksiyonu, toplama

ve matris-vektör çarpımı gibi bir dizi işlemten oluşmaktadır. Dolayısıyla, YSA mimarisi ile ilişkili ağırlık matrisleri ve bias vektörleri sağlandığında, eğitilmiş bir sinir ağını UMAT içinde yeniden oluşturmak oldukça basittir. Bu çalışmada, YSA eğitimi başarıyla tamamlandıktan sonra optimal ağırlık matrisinin ve bias vektörünün UMAT alt programına entegrasyon süreci otomatik hale getirilmiştir. Bu otomasyon, Python'da dosya açma ve okuma yöntemleri ile minimum manuel müdahale gerektirecek şekilde gerçekleştirilmiştir. DD-ECM ile entegre UMAT alt programını oluşturmak için kullanılan sözde kod Şekil 3.15'te verilmiştir.

DD-ECM'yi UMAT'a entegre etme algoritması
Gerekli: ANN Mimarisi, Ağırlık matrisi, Bias vektörü, $\bar{S}^\sigma$, $\bar{S}^\varepsilon$, $\bar{\sigma}^t$ Çıktı: Malzeme rijitlik matrisi, Gerilme vektörü 1. Tüm değişkenlerin türünü ve boyutunu tanımlayın. 2. Değişkenlere ağırlıklar ve bias atayın. 3. Girdi gerinim vektörünü normalleştirin. i.e., $\bar{\varepsilon}^{ANN} = \frac{\bar{\varepsilon}^t}{\bar{S}^\varepsilon}$ 4. ANN mimarisi kullanarak çıktıları hesaplayın. for l in layers do // Gizli katmanlar + çıktı katmanı - Ağırlıkları (w^l), bias ($\bar{b}^l$) ve normalleştirilmiş girdi vektörü değerleri ($\bar{\varepsilon}^{ANN}$) atayın. - Çıktıyı hesaplayın $\bar{z}^l = w^l \bar{\varepsilon}^{ANN} + \bar{b}^l$ - Net ANN çıktıyı hesaplayın $\bar{\sigma}^{ANN} = \phi^l(\bar{z}^l)$ end 5. Net ANN çıktı vektörünü denormalize edin. i.e., $\bar{\sigma}^t = \bar{S}^\sigma (\bar{\sigma}^{ANN})$ 6. DDSDE rijitlik matrisini hesaplayın. 7. Hesaplayın $\bar{\sigma}^{t+1} = \bar{\sigma}^t + \text{DDSDE} (\Delta \bar{\varepsilon}^{t+1})$

Şekil 3.15. DD-ECM ile entegre UMAT oluşturmak için sözde kod

3.5. Geliştirilen Makine Öğrenme Tabanlı Tekniklerin Farklı Mühendislik Problemlerinde Uygulamaları

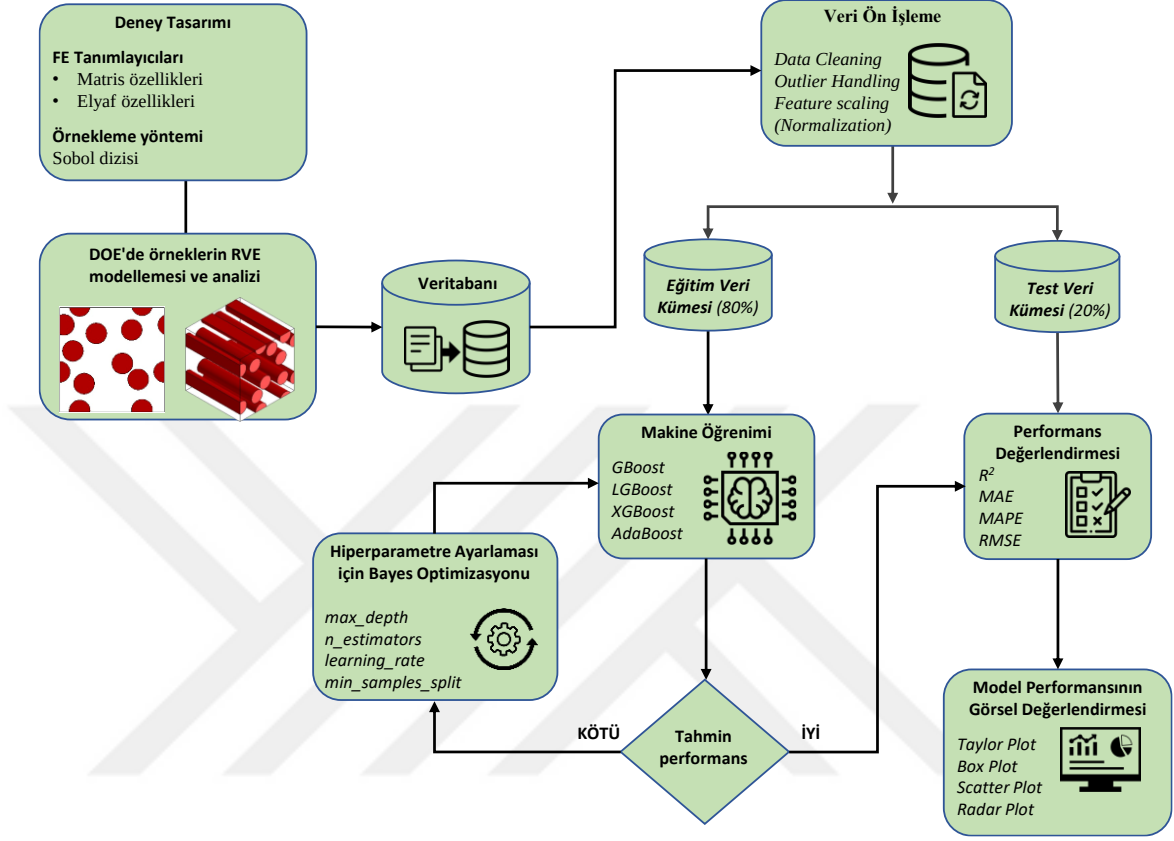
Bu bölümde tez kapsamında geliştirilen deney tasarımı, makine öğrenimi teknikleri, optimizasyon algoritmaları ve simülasyon araçları kullanılarak farklı mühendislik problemleri incelenmiştir. Bu incelemelerden elde edilen sonuçlar Tariq vd. (2024a, b, c, d, e, f) tarafından farklı makalelerde yayınlanmıştır.

3.5.1. Sürekli elyaf takviyeli kompozitin makroskopik davranışını tahmin etmek için boosting makine öğrenimi algoritmalarının geliştirilmesi

Bu alt bölüm, kompozitlerin homojenleştirilmiş makroskopik davranışlarını verimli ve doğru bir şekilde tahmin eden bir veriye dayalı model geliştirme metodolojisini tanıtmaktadır. Geliştirilen veriye dayalı modeller, geleneksel mikromekanik ve çok ölçekli simülasyonlara kıyasla daha düşük hesaplama maliyeti sunarken yüksek doğruluk elde eden gelişmiş boosting makine öğrenimi tekniklerine dayanmaktadır. Bu amaçla kullanılan boosting modelleri arasında adaptive boosting, gradient boosting, light gradient boosting ve extreme gradient boosting bulunmaktadır. Modeller, üç boyutlu kompozitlerin homojenleştirilmiş rijitlik matrisini tahmin edecek şekilde eğitilmiştir. Eğitim verileri, fiber hacim oranı ve matriks ile cam fiberin elastisite modülü ve Poisson oranı gibi malzeme özelliklerinin belirli bir aralıkta değiştirilerek Sobol örnekleme yöntemiyle üretilmiştir. Eğitilmiş modellerin performansı R^2 , MAE, MAPE ve RMSE gibi istatistiksel araçlar ile değerlendirilmiş ve karşılaştırılmıştır. Ayrıca, dağılım grafikleri, Taylor diyagramları, radar ve çubuk grafikler gibi görselleştirme araçları da kullanılmıştır. Bu çalışma, boosting modellerinin malzeme davranışlarını etkin bir şekilde tahmin etme ve mikromekanik simülasyonlar ile analitik tekniklerin yerini alma ya da bu yöntemleri tamamlama potansiyelini göstermektedir. Çalışmanın ana bileşenlerini gösteren bir akış diyagramı Şekil 3.16'da sunulmaktadır. Genel çalışma altı temel sürece ayrılabilir. Her bir sürecin kısa bir açıklaması aşağıda verilmiştir:

1. Örneklem: Bu başlangıç aşaması, çeşitli girdi parametreleri kombinasyonlarını kullanarak Deney Tasarımı (DoE) için örnekler oluşturur.
2. RVE Analizi: Bu adımda Digimat-MF kullanılarak heterojen malzemenin bir RVE modeli oluşturulur, DoE'den örnek parametreler atanır, model analiz edilir ve sonuç veri tabanında saklanır. Bu işlem, örnek sayısı kadar tekrar edilir.
3. Veri Ön İşleme: Bu aşamada, eğitim sırasında boosting modellerinin performansını optimize etmek için veri tabanında çeşitli ön işleme görevleri gerçekleştirilir.
4. Model Eğitimi: Bu aşamada, RVE'nin homojenleştirilmiş sertlik matrisini tahmin etmek için veri tabanını kullanarak çeşitli boosting algoritmaları eğitime başlanır.
5. Optimizasyon: Bu süreçte, boosting modelleri için en iyi hiperparametreleri insan müdahalesi olmaksızın belirlemek üzere Bayesian optimizasyon teknikleri uygulanır.

6. Performans Değerlendirmesi: Son olarak, eğitilen modellerin performansı, çeşitli istatistiksel ve görselleştirme yöntemleri kullanılarak değerlendirilir ve karşılaştırılır.



Şekil 3.16. Kompozit RVE'nin makine öğrenimi ile homojenleştirilmesi için genel çerçeve

3.5.1.1 Boosting MÖ modelinin girdi parametrelerinin seçimi

Bir kompozit RVE modelinin elastik özelliklerini tanımlayan beş ana parametre şunlardır: matrisin elastisite modülü (E_M), matrisin Poisson oranı (ν_M), fiberin elastisite modülü (E_F), fiberin Poisson oranı (ν_F) ve fiber hacim oranı (V_f). Bu parametreler, kompozit malzemelerin mikro-yapısal seviyede mekanik davranışlarını anlamada önemli rol oynamaktadır. Bu nedenle, sürekli fiber takviyeli kompozit RVE'nin makroskopik elastik davranışını incelemek için bu beş parametre girdi olarak seçilmiştir. Her parametrenin minimum ve maksimum değerleri Barbero'ya (2011) göre seçilmiştir ve matris olarak termoplastik malzeme ve takviye olarak cam fiber kullanılan farklı türde RVE'leri kapsayacak bir aralığa sahiptir. Yaygın kullanılan konfigürasyonları temsil etmesi

amacıyla, maksimum fiber hacim oranı 0.3 olarak seçilmiştir. Her bir malzeme özelliği için dikkate alınan minimum ve maksimum değerler Çizelge 3.6'da özetlenmiştir.

Çizelge 3.6. Parametrelerin alt ve üst sınırları

	E_M (MPa)	ν_M	E_F (MPa)	ν_F	V_f (%)
Minimum Değer	350	0.2	7000	0.2	0.05
Maximum Değer	15000	0.45	95000	0.4	0.30

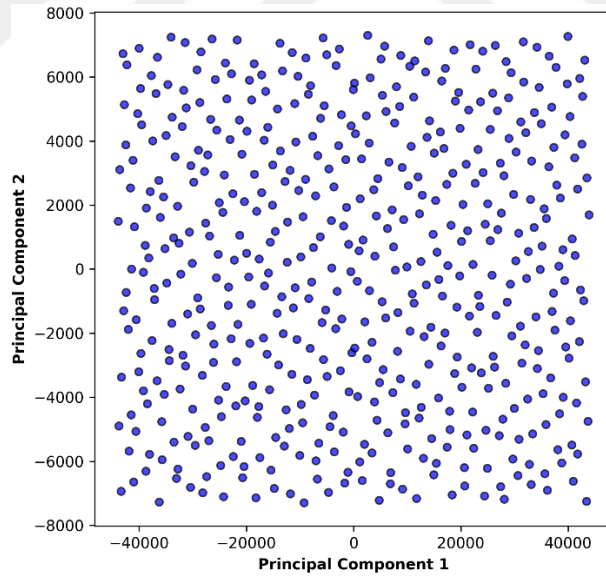
Önerilen yaklaşım, ortotropik lifler için de uyarlanabilir, ancak bu durumda malzeme özelliklerini tanımlamak için gerekli girdi parametrelerinin sayısının artması gerekmektedir. Örneğin, izotropik cam lifler yalnızca iki parametre (elastisite modülü ve Poisson oranı) gerektirirken, ortotropik lifler dokuz parametreye kadar gerektirebilir (üç elastisite modülü, üç Poisson oranı ve üç kayma modülü). Sonuç olarak, toplam girdi parametresi sayısı, üç matris parametresi (elastisite modülü, Poisson oranı, hacim oranı) ve dokuz ortotropik lif parametresi dahil olmak üzere on ikiye yükselir. Ancak, girdi parametrelerinin sayısındaki bu artış, MÖ modellerinde girdiler ile çıktılar arasındaki ilişkileri doğru bir şekilde yakalayabilmek için genellikle daha büyük bir eğitim veri kümesini gerektirmektedir.

3.5.1.2. Deney tasarımı için örnekleme tekniği

MÖ alanında verinin niteliği ve niceliği, sonuçlardan elde edilen çıkarımların geçerliliği üzerinde önemli bir etkiye sahiptir. Bu nedenle, tasarım alanı içinde minimum veri noktası ile dengeli ve düzgün bir örneklem dağılımı sağlayacak güvenilir bir teknik seçmek çok önemlidir. Bu çalışmada, yüksek boyutlu bir alanı eşit şekilde kapsayan örnekler oluşturmak için hesaplama açısından verimli bir yöntem olan Sobol dizisi kullanılmıştır. Bu örnekleme tekniği, Çizelge 3.6'da belirtilen girdi parametrelerinin çeşitli kombinasyonları ile oluşturulan 512 veri örneğinin oluşturulmasını sağlamıştır. Ayrıca, bir nokta kümesinin düzgün bir dağılımdan sapma ölçüsü olarak tanımlanan 'discrepancy' değeri, bu örnekleme yöntemi kullanılarak tüm örnekler için $7.17e-05$

olarak hesaplanmıştır. Bu düşük 'discrepancy' değeri, örneklerin tasarım alanı genelinde kümelenme veya boşluk olmaksızın eşit bir dağılım sergilediğini göstermektedir.

Yüksek boyutlu verilerin görselleştirilmesi (üç boyuttan fazla boyuta sahip veriler gibi) zorluk yaratabilir. Bu nedenle, bu çalışmada boyut indirgeme ve yüksek boyutlu verilerin görselleştirilmesi amacıyla Temel Bileşen Analizi (PCA) kullanılmıştır. PCA, veriler arasındaki temel desenleri veya ilişkileri koruyarak boyutları indirger (Jolliffe ve Cadima, 2016). Bu çalışmada, 5 boyutlu veri kümesi 2 boyuta indirgenmiştir. Boyutun 2D'ye indirilmesi, Sobol örnekleme yöntemi ile oluşturulmuş veri kümesinin yayılımını ve düzgün dağılımını görsel olarak değerlendirmeye olanak tanır. Bu sayede, makine öğrenmesi modellerinin dengeli bir veri kümesi üzerinde eğitildiğinden emin olunacaktır. Şekil 3.17, iki boyuta indirgenen veri kümesinin bir dağılım grafiğini göstermektedir. İlk temel bileşen en fazla varyansı yakalarken, ikinci temel bileşen bir sonraki en yüksek varyansı yakalamaktadır. Grafikteki veri noktalarının düzgün dağılımı, veri kümesinin tüm aralığı boyunca iyi örneklendiğini göstermektedir.

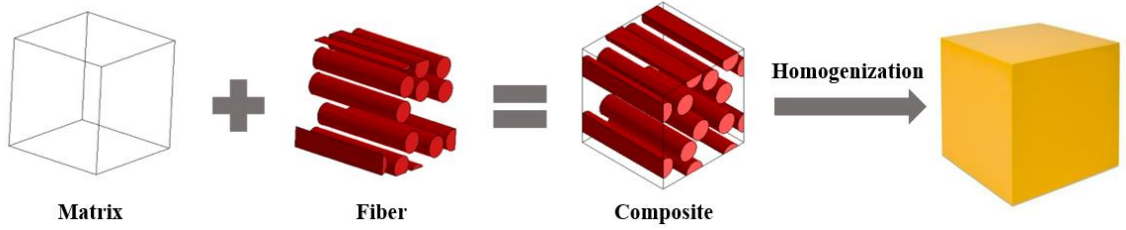


Şekil 3.17. PCA ile 2 boyuta indirgeme sonrası dağılım grafiği

3.5.1.3. Hedef verilerinin oluşturulması ve ön işleme

Farklı girdi parametrelerine sahip 512 örnek oluşturulduktan sonra, her bir örnek sürekli elyaf takviyeli kompozit Temsili Hacim Elemanının (RVE) homojenleştirilmesi için

kullanılmıştır. Homojenleştirme, kompozit malzemelerin mikro yapı ve faz özelliklerine dayanarak makro yapıda etkili mekanik özelliklerin elde edilmesi sürecidir. Homojenleştirme sürecinin genel görünümü Şekil 3.18'de sunulmaktadır.



Şekil 3.18. Sürekli elyaf takviyeli kompozit için RVE homojenleştirme şeması

Bu çalışmada, Mori-Tanaka yöntemi ile ortalama alan homojenizasyon işlemini gerçekleştirmek için DIGIMAT yazılımı kullanılmıştır. Mori-Tanaka, doğruluk ve hesaplama verimliliği arasında iyi bir denge sağladığı için tercih edilen yöntemdir. Tüm örneklerin analizleri, her bir RVE'de sürekli fiber dikkate alınarak doğrusal elastik olarak gerçekleştirilmiştir. En genel haliyle, enine izotropik malzemenin rijitlik matrisi şu şekilde elde edilir.

$$[C] = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{bmatrix} \quad (23)$$

Enine izotropik durumda, aşağıdaki ilişkiler geçerlidir:

$$C_{22} = C_{33}, C_{12} = C_{13}, C_{44} = C_{66}, C_{55} = \frac{C_{22} - C_{23}}{2} \quad (24)$$

Bu nedenle, yalnızca beş bağımsız elemanın (C_{11} , C_{22} , C_{12} , C_{23} , C_{44}) homojenleştirilmiş izotropik kompozit malzemenin davranışını temsil etmek için yeterli olduğu söylenebilir. Bu çalışmada, bu beş elastik sabitin yanı sıra C_{55} değeri de dahil edilmiştir.

DOE ile belirlenen matris ve fiber parametrelerine sahip kompozitin etkin mekanik özellikleri, her bir örnek için DIGIMAT yazılımı kullanılarak hesaplanmıştır. Bu süreci daha verimli hale getirmek için, çeşitli görevlerin otomasyonunu sağlayan bir Python betiği yazılmıştır. Bu betik, DOE'den girdi parametre örneklerinin çıkarılmasını, RVE'lerin oluşturulmasını, analizlerin gerçekleştirilmesini ve sonuçta elde edilen homojenleştirilmiş rijitlik matrisi şeklinde etkili mekanik özelliklerin hesaplanmasını otomatikleştirmiştir. Bu otomasyon sayesinde, DOE'deki her örnek için rijitlik matrisinin altı elemanı (C_{11} , C_{22} , C_{12} , C_{23} , C_{44} , C_{55}) doğrudan veri tabanına kaydedilmiştir. Bu nedenle, kapsamlı veri tabanı girdi örneklerini temsil eden 512x5 matris ve çıktı verilerini içeren 512x6 matrsten oluşmuştur. Veri tabanının ilk beş satırı Çizelge 3.7'de verilmiştir.

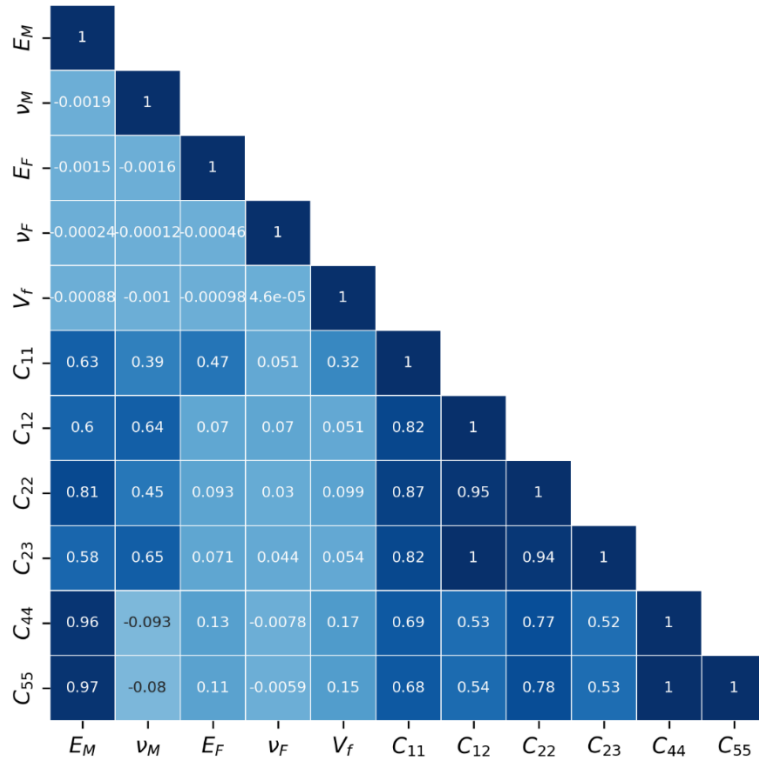
Çizelge 3.7. Son veri tabanının genel görünümü

GİRDİ PARAMETRELERİ					ÇIKTI PARAMETRELERİ					
E_M (MPa)	ν_M	E_F (MPa)	ν_F	ν_f (%)	C_{11} (MPa)	C_{12} (MPa)	C_{22} (MPa)	C_{23} (MPa)	C_{44} (MPa)	C_{55} (MPa)
2770	0.280	41900	0.334	0.083	6940	1580	3970	1540	1250	1220
13500	0.326	9480	0.246	0.299	16700	7190	16400	7110	4670	4660
10300	0.233	10800	0.318	0.245	12700	4350	12700	4360	4160	4160
6250	0.31	11500	0.274	0.203	9810	4130	9520	4160	2700	2680
9470	0.224	56900	0.213	0.119	16700	3590	12500	3640	4590	4450

Pearson korelasyon katsayısı (PCC), veri tabanında depolanan girdi ve çıktı değişkenleri arasındaki doğrusal ilişki derecesini belirlemek için kullanılmıştır. PCC'nin değeri -1 ve 1 arasında değişmekte olup, değişkenler arasındaki doğrusal ilişkinin gücünü ve yönünü göstermektedir. PCC değeri 0 ise doğrusal bir ilişki olmadığını, -0.5'in altındaki değerler güçlü bir negatif korelasyonu, 0.5'in üzerindeki değerler ise güçlü bir pozitif korelasyonu ifade etmektedir. -0.5 ile 0.5 arasındaki değerler daha zayıf veya belirgin olmayan bir doğrusal ilişkiye işaret etmektedir (Grimm ve Nesselroade, 2019). PCC'nin matematiksel formülü aşağıdaki gibi ifade edilmektedir:

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}) (y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}} \quad (25)$$

Bu denklemde n örnek sayısını, y_i ve x_i ise i ile indekslenen bireysel örnek noktalarını göstermektedir. $\bar{x}$, tüm x_i değerlerinin toplamının n 'ye bölünmesi ile hesaplanan örnek ortalamasıdır ve benzer şekilde $\bar{y}$ de y değerlerinin ortalamasını ifade etmektedir. Şekil 3.19'da homojenleştirilmiş rijitlik matrisi elemanları üzerinde malzeme ve yapısal parametrelerin etkisini göstermek için bir PCC matrisi sunulmaktadır. Girdi parametreleri bağımsız değişkenler olarak ele alındığı için aralarındaki PCC değerlerinin sıfıra yakın olduğu ve dolayısıyla doğrusal bir korelasyon bulunmadığı görülmektedir. Bu şekilde, matrisin Young modülünün rijitlik matrisinin C_{44} ve C_{55} elemanları ile oldukça güçlü pozitif korelasyona sahip olduğu (≈ 0.97) anlaşılmaktadır. Matrisin Poisson oranı ise C_{11} , C_{12} , C_{22} ve C_{23} ile dikkat çekici bir pozitif korelasyon göstermektedir. Malzemenin enine izotropik doğası nedeniyle, C_{55} 'in C_{22} ve C_{23} ile güçlü bir ilişki içinde olduğu, $C_{55} = \frac{C_{22} - C_{23}}{2}$ denklemi ile tanımlanmıştır. C_{55} ve C_{22} arasındaki korelasyon katsayısı 0.78, C_{55} ve C_{23} arasındaki korelasyon katsayısı ise 0.53 olarak hesaplanmıştır. Ek olarak, C_{44} ve C_{55} ile C_{12} ve C_{23} gibi bazı elemanların mükemmel bir pozitif korelasyon sergilediği de gözlemlenmiştir.



Şekil 3.19. Girdi parametreleri ve çıktılar arasındaki PCC korelasyon matrisi.

Makine öğrenimi performansını optimize etmek için eğitim verilerini tutarlı bir aralıkta ölçeklendirmek avantajlıdır. Verilerin normalize edilmesi genellikle model eğitimi hızlandırmaktadır. Bu nedenle hem girdi hem de çıktı değerleri, minimum-maksimum ölçekleme yöntemi kullanılarak 0 ile 1 arasında normalize edilmiştir. Bu normalizasyon, tüm özelliklerin benzer bir ölçeğe sahip olmasını sağlar ve değerlerin büyüklüğündeki farklılıklardan kaynaklanabilecek önyargıları azaltmaktadır. Minimum-maksimum ölçekleme yöntemi matematiksel olarak şu şekilde ifade edilmektedir:

$$x_{scaled} = \frac{x - x_{min}}{x_{max} - x_{min}} \quad (26)$$

Burada, x gerçek bir değeri temsil ederken, x_{min} ve x_{max} ilgili parametrenin minimum ve maksimum değerlerini temsil etmektedir. Normalizasyonun ardından veri kümesi eğitim ve test setlerine bölünmüştür. Eğitim seti toplam veri setinin yaklaşık %80'inden (410 örnek), test seti ise veri setinin yaklaşık %20'sinden (102 örnek) oluşmaktadır.

3.5.1.4. Boosting Algoritmalarının Teorik Temeli

Boosting algoritmaları, makine öğreniminde ensemble öğreniminin temel bileşenlerinden biridir. Birden fazla zayıf tahmincinin birleştirilmesiyle daha sağlam bir tahminci oluşturulmakta ve bu sayede toplam hata minimize edilmektedir. Bu yinelemeli süreç, rastgele veri örneklerinin seçilmesiyle başlamaktadır. Ardından, bir makine öğrenme modeli (tahminci olarak adlandırılır) kullanılarak örnekler sıralı şekilde eğitilmekte ve global performansı iyileştirmek için her adımda yeniden düzenlenmektedir. Her bir i adımında, yeni eklenen tahminci $f_i(x)$, önceki tahmin olan $\hat{y}^{(i-1)}$ 'yi düzeltir ve yeni tahmin olan $\hat{y}^{(i)}$ 'yi üretir. Bu yinelemeli yaklaşımla, her bir sonraki tahminci, ensemble modelinin toplam tahmin hatalarını azaltmayı amaçlamaktadır. Bu süreç şu şekilde ifade edilebilir:

$$\hat{y}^{(i)} = \hat{y}^{(i-1)} + f_i(x) \quad (27)$$

Nihai tahmin, tüm zayıf tahmincilerin çıktılarının birleştirilmesi ile hesaplanmakta ve en iyi performans gösterenlere öncelik verilmektedir. Regresyon problemlerinde kullanılan popüler boosting algoritmalarından bazıları Adaptive Boosting, Gradyent Boosting, Extreme Gradyent Boosting ve Light Gradyent Boosting'dir. Bu modeller, karmaşık tahmin görevlerini ele alma yetenekleri, sağlamlıkları ve farklı veri setlerinde iyi genelleme yapabilmeleri gibi kendilerine özgü güçlü yönleri sahiptir. Bu modeller kısaca şu şekilde tanımlanmaktadır:

Adaptive Boosting (AdaB): Freund ve Schapire (1999) tarafından geliştirilen en eski boosting algoritmalarından biridir. AdaB, zayıf tahmincilerin performansını artırma konusundaki basitliği ve etkinliği ile bilinmektedir. Bu algoritma, zayıf tahmincilerin yaptığı hataları Bayesyen bir yaklaşımla yinelemeli olarak öğrenmekte ve bunları birleştirerek sağlam bir tahminci oluşturmaktadır. Bu yinelemeli süreç, belirli bir sayıda zayıf tahminci eklenene kadar devam etmektedir. Son tahmincinin tahmin performansı, bireysel tahmincilerin performansını aşmaktadır.

Gradyent Boosting Regressor (GBR): Friedman (2001) tarafından geliştirilen bu algoritma, önceki zayıf tahmincilerin kalan hata değerlerine dayalı olarak yeni zayıf tahmincileri belirlemekte ve eklemektedir. AdaB'den farklı olarak, yanlış sınıflandırılan verilerin ağırlıklarını ayarlamak yerine doğrudan kayıp fonksiyonunu minimize etmektedir. Bu özellik, GBR'yi aşırı öğrenmeye (overfit) karşı daha dayanıklı hale getirmektedir. GBR, zayıf tahmincilerin yinelemeli olarak eklendiği bir gradyan iniş çerçevesinde, artımlı bir model yaklaşımı ile çalışmaktadır. Her bir yinelemede hedef, parametreleri ayarlayarak kayıp fonksiyonunu minimize etmek olup, gradyan sıfıra ulaştığında eğitime son verilmektedir. Bu süreçte öğrenme oranı, gradyan inişindeki adım büyüklüğünü belirleyen önemli bir parametre olarak rol oynamaktadır.

Extreme Gradyent Boosting (XGB): Bu model, gelişmiş GBR tekniklerinin uygulandığı son derece verimli ve sağlam bir boosting algoritması olarak öne çıkmaktadır. XGB, denetlenen (supervised) makine öğrenmesi alanına giren ağaç tabanlı bir algoritmadır. Aşırı öğrenmeyi (overfitting) önlemek için gelişmiş düzenleme teknikleri kullanmaktadır ve model performansını iyileştirmek için ayarlanabilen çeşitli hiperparametreler

içermektedir. Dikkate değer özellikleri arasında paralel ağaç yapımı, geri budama ile ağaç derinliğinin optimizasyonu, hesaplama süresini azaltmak için bellek dışı hesaplama ve eksik verilerin etkili bir şekilde işlenmesi bulunmaktadır. XGB modelinin matematiksel formülasyonları ve temel kavramları hakkında daha ayrıntılı bilgi Zhang vd. (2019) ile Chen ve Guestrin'in (2016) çalışmalarında verilmiştir.

Light Gradyent Boosting (LGB): Microsoft tarafından 2016 yılında tanıtılan bu algoritma, hız ve yüksek performansıyla gradyent boosting alanında bilinmektedir. LGB, geleneksel karar ağaçlarının derinlik tabanlı büyüme stratejisini kullanmak yerine, yaprak bazlı bir strateji kullanmaktadır. Bu yaklaşım, en fazla kayıpları olan yapraklara öncelik vererek daha verimli bir kayıp azaltma sağlamaktadır. LGB, en iyi bölünmeyi bulmak için histogram tabanlı bir yöntem kullanmakta olup, bu durum onu geleneksel gradyent boosting yöntemlerinden daha hızlı ve bellek açısından daha verimli hale getirmektedir. LGB, yüksek boyutlu özelliklere sahip büyük ölçekli verileri etkili bir şekilde işlemek için Gradyent Tabanlı Tek Taraflı Örnekleme (GOSS) ve Özel Özellik Demetleme (Exclusive Feature Bundling - EFB) olmak üzere iki yenilikçi tekniği içermektedir. Ke vd. (2017) tarafından yapılan karşılaştırmalı bir çalışma, LGB'nin geleneksel gradyent boosting modellerine göre yaklaşık 20 kat daha hızlı eğitim hızıyla üstün verimlilik sunduğunu göstermektedir.

3.5.1.5. Bayes optimizasyonuna genel bakış

Hiperparametre ayarı, bir modelin tahmin performansını artırmak için hiperparametrelerin optimum değerlerini belirlemeyi içermektedir. Hiperparametre ayarlaması için genel olarak dört ana yöntem kullanılmaktadır: manuel ayarlama, ızgara (grid) arama, rastgele arama ve Bayes arama optimizasyonu. Manuel, ızgara arama ve rastgele arama yöntemleri hiperparametre kümelerini bağımsız olarak ele alırken, Bayes optimizasyonu (BO) bilinçli bir arama tekniği olarak öne çıkmaktadır. BO, diğerlerinden farklı olarak önceki yinelemelerden öğrenmekte olup daha gelişmiş ve verimli bir yaklaşım sunmaktadır. İlk kez Snoek (2012) tarafından tanıtılan BO, Wu vd. (2019) tarafından da vurgulanan hesaplama gücü ve zaman verimliliği ile bilinmektedir. BO

kullanılarak hiperaparametre optimizasyonu işlemi, matematiksel olarak şu şekilde ifade edilmektedir:

$$x^* = \arg \min_{x \in S} f(x) \quad (28)$$

Bu bağlamda, $f(x)$, kök ortalama kare hatasını (RMSE) minimize etmeyi hedefleyen bir amaç skorunu ifade etmektedir. x^* , amaç skorunun en düşük değerini sağlayan hiperaparametreler kümesini temsil etmektedir. x , arama uzayı S içinde herhangi bir değeri alabilmektedir. Bu çalışmada tüm güçlendirme modellerinin hiperparametrelerini optimize etmek için Bayes optimizasyon algoritması kullanılmıştır. Bu optimizasyon algoritması Python'daki Scikit-optimize kütüphanesi kullanılarak uygulanmıştır.

3.5.1.6. Eğitilmiş boosting modellerinin performans değerlendirmesi için istatistiksel metrikler

Eğitilen boosting modellerinin performansı dört farklı metrik kullanılarak kapsamlı bir şekilde değerlendirilmektedir. Bu ölçütler, belirleme katsayısı (R^2), ortalama mutlak hata (MAE), ortalama mutlak yüzdelik hata (MAPE) ve kök ortalama karesel hatayı (RMSE) olup, modelin tahmin yetenekleri ve hata düzeyleri hakkında bilgi vermektedir. R^2 metriği 0 ile 1 arasında değişmekte ve bağımlı değişkendeki varyansın bağımsız değişkenler kullanılarak tahmin edilen oranını ölçmektedir. Yüksek bir R^2 değeri, modelin gerçek verilere daha iyi uyum sağladığını belirtmektedir. MAE, tahmin edilen ve gerçek veriler arasındaki hataların ortalama büyüklüğünü ölçerek tahmin doğruluğunun basit bir ölçek sağlamaktadır. MAPE, hataların ortalama büyüklüğünü gerçek verilere göre yüzde olarak ölçerek modelin performansını yüzde cinsinden gösteren bir metriktir. RMSE, tahmin edilen ve gerçek veriler arasındaki ortalama kare farklarının karekökünü alarak hesaplanmaktadır. Bu metrik, hataların karesini alarak daha büyük hataları cezalandırır, dolayısıyla aykırı değerlere karşı hassaslıdır ve önemli tahmin hatalarını vurgulayan bir ölçü sağlamaktadır. MAE, MAPE ve RMSE değerlerinin düşük olması daha doğru tahminler anlamına gelmektedir. y_i gerçek değerler, $\hat{y}_i$ tahmin edilen değerler ve $\bar{y}$ gerçek değerlerin ortalaması olmak üzere, bu metrikler şu şekilde hesaplanmaktadır:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (29)$$

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i| \quad (30)$$

$$MAPE = 100 \times \frac{1}{n} \times \sum_{i=1}^n \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right| \quad (31)$$

$$RMSE = \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \right]^{1/2} \quad (32)$$

3.5.2. Kısa elyaf takviyeli polimerlerin doğrusal olmayan elastoplastik davranışını tahmin etmek için makine öğrenmesi yaklaşımı

Literatürde kısa elyaf takviyeli polimer kompozitlerin mekanik davranışını hesaplamak için çeşitli homojenleştirme teknikleri bulunmaktadır. Ancak bazı durumlarda, kısa elyaf takviyeli polimer kompozitlerin karmaşık modellenmesi hesaplama açısından maliyetli olmaktadır. Bu çalışmada, kısa elyaf takviyeli polimer kompozitlerin elastoplastik davranışını tahmin etmek için Yapay Sinir Ağları (YSA) ve Extreme Gradyent Boosting (XGB) gibi makine öğrenimi (MÖ) modelleri geliştirilmektedir. MÖ modellerinin eğitimi için veri kümeleri, Digimat ticari yazılım kullanılarak Mori-Tanaka ortalama alan homojenleştirme ile elde edilmektedir. Eğitilen MÖ modellerinin verimliliğini göstermek için tahmin edilen elastoplastik tepki, simülasyon sonuçları ile karşılaştırılmaktadır. Ayrıca, kısa elyaf takviyeli polimer kompozitlerin davranışı üzerindeki önemli parametrelerin etkisi MÖ modelleri kullanılarak kapsamlı bir şekilde incelenmektedir.

3.5.2.1. RVE simülasyonları için deney tasarımı

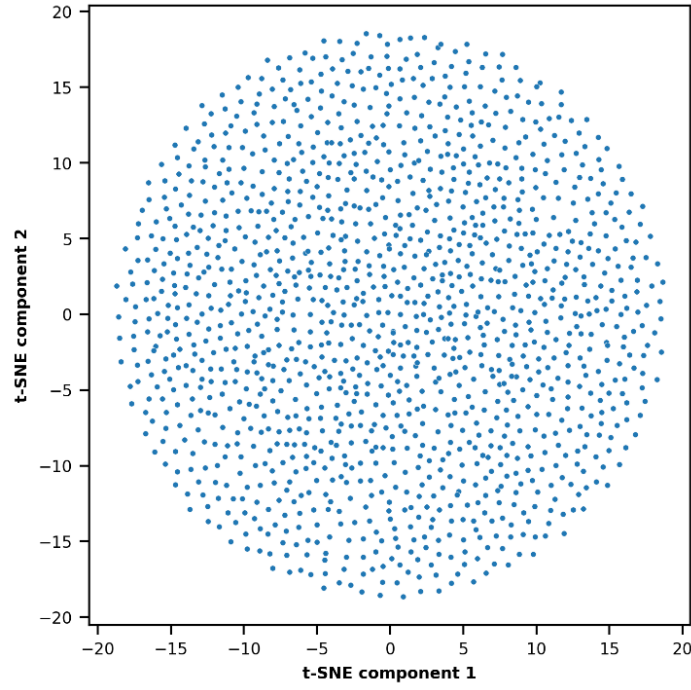
Bu problemde, cam elyaf takviyeli polipropilen malzeme için bir RVE modelinin yapısal ve mikroskobik parametrelerini tanımlayan dokuz parametre MÖ modeline girdi olarak seçilmiştir. Bu parametreler matrisin Young modülü (E_M), matrisin Poisson oranı (ν_M), fiberin Young modülü (E_F), fiberin Poisson oranı (ν_F), fiber hacim oranı (V_f), en-boy

oranı (λ), fiber oryantasyon tensörleri (a_{11} , a_{22} , a_{33}). Dikkate alınan malzemenin parametrelerinin minimum ve maksimum değerleri Çizelge 3.8'de verilmiştir.

Çizelge 3.8. Cam elyaf takviyeli polipropilen malzeme parametrelerinin minimum ve maksimum değerleri

	E_M (MPa)	ν_M	E_F (MPa)	ν_F	V_f (%)	λ	a_{11}	a_{22}	a_{33}
Minimum	1300	0.3	70000	0.14	0.1	10	0	0	0
Maximum	1800	0.45	95000	0.26	0.6	30	1	1	1

Ardından, Sobol örnekleme yöntemi kullanılarak 4096 örnek oluşturulmuştur. Her örnekteki a_{11} , a_{22} ve a_{33} değerlerinin toplamı bire eşit olacak şekilde seçilmiştir. Bu yöntem kullanılarak tüm örnekler için $7.17e-05$ 'lik düşük bir tutarsızlık hesaplanmıştır. Yüksek boyutlu girdi parametrelerini iki boyutta görselleştiren t-SNE grafiği Şekil 3.20'de gösterilmektedir. Bu grafik, örnek noktalarının alan üzerinde daha eşit ve düzenli bir şekilde dağıldığını, noktalar arasında minimum kümelenme veya boşluk olduğunu ortaya koymaktadır. Bu grafik, örnek noktalarının uzayda daha düzgün ve eşit bir şekilde dağıldığını ve noktalar arasında minimum kümelenme veya boşluklar olduğunu göstermektedir.



Şekil 3.20. Örnek verilerin t-SNE dağılımı

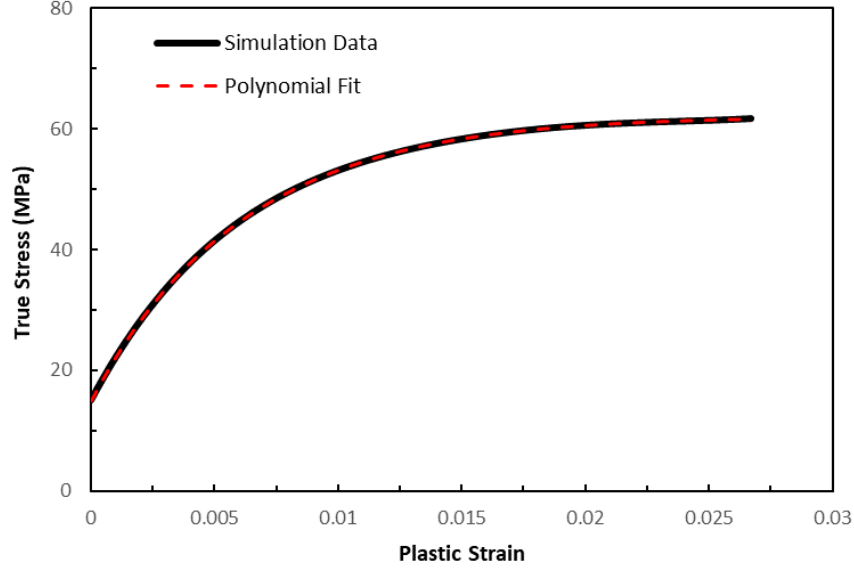
3.5.2.2. Hedef verilerin oluşturulması ve ön işleme

DoE çalışmasında oluşturulan 4096 örneğin homojenizasyon analizleri Digimat MF programı kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Belirli bir malzeme örneği için simülasyondan elde edilen gerilme-gerinim davranışı plastisiteyi de içermektedir. Homojenize edilmiş RVE'nin ilgili elastoplastik gerilim- gerinim eğrileri, MÖ modellerinin eğitimi için veritabanında saklanmaktadır. Simülasyonlardan elde edilen 4096 elastoplastik gerilim-gerinim eğrisinin her biri, polinomsal regresyon beşinci dereceden bir polinom ile karakterize edilmektedir. Bu denklem aşağıdaki gibi ifade edilmektedir:

$$f(x) = ax^5 + bx^4 + cx^3 + dx^2 + ex + f \quad (33)$$

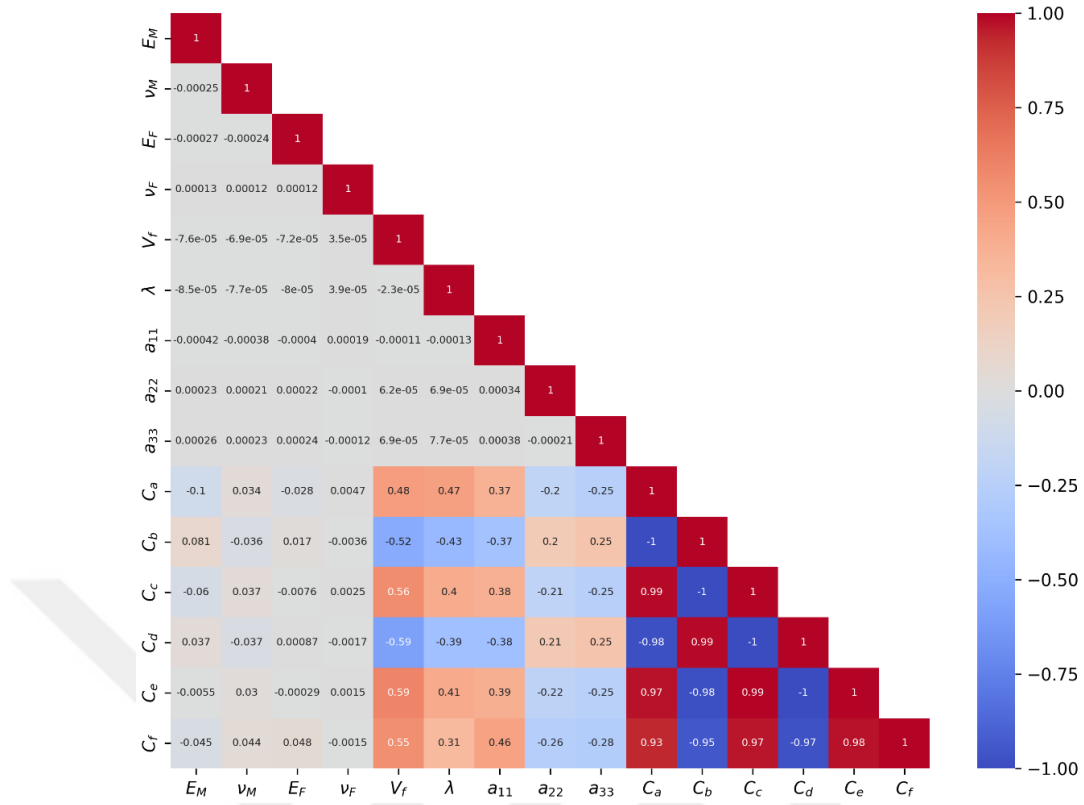
Bu polinom, her eğriyi tanımlayan altı katsayı (a 'dan f 'ye kadar) içermektedir ve bu katsayılar MÖ modellerinin hedef çıktıları olarak seçilmektedir. Simülasyondan elde edilen gerilme-gerinim eğrisi ve buna karşılık gelen beşinci dereceden polinom eğrisi Şekil 3.21'de gösterilmektedir. Eğrilerin iyi bir uyum gösterdiği görülmektedir. Bu nedenle, veri tabanı her bir simülasyon için dokuz girdi parametresi ve altı polinom

katsayısından oluşmaktadır. Eğitilmiş MÖ modellerinin çıktısı olan bu katsayılar, gerilme-gerinim eğrisini yeniden oluşturmak için kullanılacaktır.



Şekil 3.21. Beşinci dereceden polinom fit ile simülasyon eğrisi arasındaki karşılaştırma.

Pearson korelasyon katsayısı (PCC), girdi değişkenleri ile veri tabanında depolanan çıktılar arasındaki doğrusal korelasyon derecesini ölçmek için kullanılmıştır. Şekil 3.22'de hacim oranı ve en-boy oranının diğer malzeme özelliklerine kıyasla çıktı katsayıları ile kayda değer bir pozitif korelasyona sahip olduğu görülebilir. Girdi ve çıktıların tanımlayıcı (descriptive) istatistikleri Çizelge 3.9'da sunulmuş olup, geniş bir değer aralığını ve parametreler arasında önemli bir varyasyonu ortaya koymaktadır. Bu çizelge girdi uzayının kapsamlı bir temsilini sunmakta ve sağlam model eğitimi için gerekli olan veri setindeki çeşitliliği vurgulamaktadır.



Şekil 3.22. Giriş değişkenleri ile çıktılar arasındaki PCC değerlerinin matrisi.

Çizelge 3.9. Giriş değişkenleri ve çıktılarının tanımlayıcı istatistikleri

Parametreler	Min. Değer	Max. Değer	Ortalama	Standart Sapma
E_M (MPa)	1300	1800	1550.04	144.35
v_M	0.3	0.45	0.375	0.043
E_F (MPa)	70000	95000	82501.78	7217.74
v_F	0.14	0.26	0.199	0.034
V_f (%)	0.1	0.6	0.35	0.144
λ	10	30	20	5.77
a_{11}	5.01E-05	1	0.5	0.288
a_{22}	7.42E-05	1	0.499	0.288
a_{33}	3.77E-05	1	0.499	0.288
C_a	1.12E+09	1.7E+11	1.73E+10	1.6E+10
C_b	-1.7E+10	-1.3E+08	-1.8E+09	1.62E+09
C_c	6430000	6.51E+08	71949621	61661957
C_d	-1.1E+07	-182503	-1398030	1083259
C_e	3050.89	88101.9	13727.73	8588.535
C_f	11.342	108.436	23.13489	9.508907

3.5.2.3. Makine öğrenimi modelinin hiperparametre ayarlaması ve eğitilmesi

Cam elyaf takviyeli polipropilen malzemenin homojenize edilmiş elastoplastik gerilme-gerinim eğrilerini tahmin etmek için Extreme Gradyent Boosting (XGB) ve Yapay Sinir Ağı (YSA) gibi yaygın olarak kullanılan iki makine öğrenimi modeli kullanılmıştır. Bu problemde, XGB ve YSA'nın hiperparametre ayarı, Bayes optimizasyonu gibi herhangi bir otomatik teknik kullanmak yerine manuel olarak gerçekleştirilmiştir. Bu çalışmada tanımlanan MÖ modellerinin optimum hiper parametreleri Çizelge 3.10 ve Çizelge 3.11'de sunulmuştur.

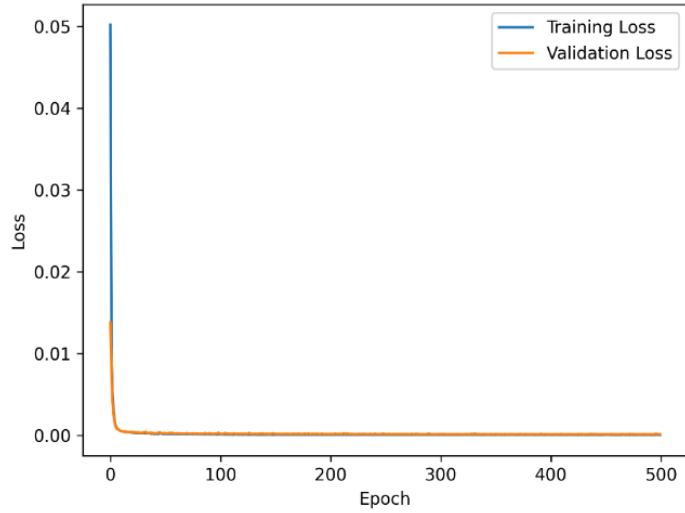
Çizelge 3.10. XGB modelinin optimum hiperparametreleri

Booster	Maksimum derinlik	Öğrenme oranı	Tahmin edicilerin sayısı	Subsample
Gbtree	6	0.1	400	1

Çizelge 3.11. YSA modelinin optimum hiperparametreleri

Optimizer	Öğrenme oranı	Gizli katman sayısı	Katman nöron sayısı	Aktivasyon fonksiyonu	Kayıp fonksiyonu	Epok	Batch boyut
Adam	0.001	3	64	ReLU	MSE	500	64

Eğitim ve doğrulama veri kümeleri için YSA kayıp eğrileri Şekil 3.23'te gösterilmektedir. Bu grafik, modelin 500 epok boyunca herhangi bir dalgalanma olmaksızın düzgün öğrenme sürecini göstermektedir. Bu, modelin girdi ve çıktı verileri arasındaki temel ilişkileri etkili bir şekilde yakaladığı anlamına gelmektedir. Eğitim ve doğrulama kayıp eğrilerinin örtüşmesi, aşırı uyumun (overfitting) olmadığını ve modelin görülmeyen verilere iyi genelleme yaptığını göstermektedir.



Şekil 3.23. YSA modelinin eğitim grafiği.

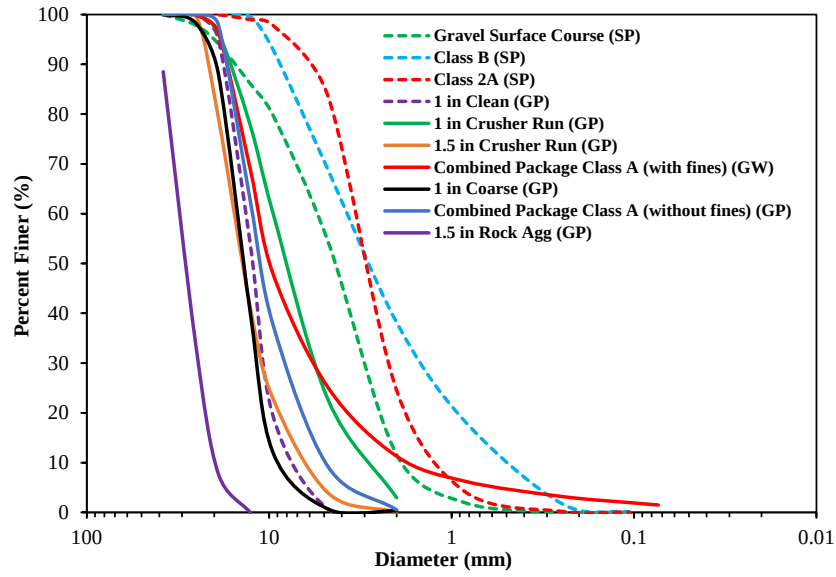
3.5.3. Erozyona dayanıklı otoyol kenar taşları için YSA tabanlı değerlendirme sistemi

Otoyol kenarındaki taşlar, bir dereceye kadar küresel ısınmanın neden olduğu aşırı yağışlar nedeniyle sürekli erozyon kuvvetine maruz kalmaktadır. Bununla birlikte, erozyona dayanıklı otoyol kenarı için mantıklı tasarım yöntemi henüz iyi araştırılmamıştır. Bu çalışmada, otoyol kenar taşların erozyon özelliklerini incelemek için 7.6 cm nozul genişliğine ve 4000 cm³ / sn akış hızına sahip büyük ölçekli bir UNLETB (Nebraska Üniversitesi Lincoln-Erozyon Test Yatağı) kullanılmıştır. Test sonuçları, halihazırda kullanılan farklı otoyol kenarı malzemelerinin çok farklı erozyon dayanıklılığına sahip olduğunu göstermiştir. Ancak, erozyona dayanıklı gradasyon ile diğer gradasyonlar arasındaki net kriterler açıkça belirlenememiştir. Daha sonra bu çalışma, taşların erozyon dayanıklılığını diğer taşlardan kolayca ayırt etmek için test sonuçlarıyla YSA tabanlı bir MÖ model geliştirmiştir. Geliştirilen YSA modeli, üç gradasyon parametresine (D₁₀, D₃₀ ve D₆₀) dayanarak otoyol kenar taşlarının kabul edilebilir/kabul edilemez erozyon özelliklerini %99'a yakın doğrulukla tahmin etmiştir.

3.5.3.1. UNLETB kullanılarak erozyon testi sonuçları

Nebraska Ulaştırma Bakanlığı'nın (NDOT) tavsiyelerine dayanan dokuz farklı taş türü, otoyol kenar taşları için potansiyel adaylar olarak seçilmiştir. Bu taş malzemelerin

gradasyon eğrileri Şekil 3.24'te gösterilmiştir. D_{10} , D_{30} ve D_{60} gibi gradasyon parametreleri sırasıyla %10, %30 ve %60 geçiş karşılık gelen parçacık boyutlarını temsil etmektedir. Ayrıca, homojenlik katsayısı (C_u) ve eğrilik katsayısı (C_c) genellikle zemin karakterizasyonu ve sınıflandırmasında kullanılmaktadır. Bu parametrelerin, otoyol banketi için kullanılanlar gibi nispeten büyük boyutlu parçacıkların erozyonunu etkileyebileceği düşünülmektedir. Test edilen malzemeler için gradasyon parametreleri Çizelge 3.12'de sunulmuştur.



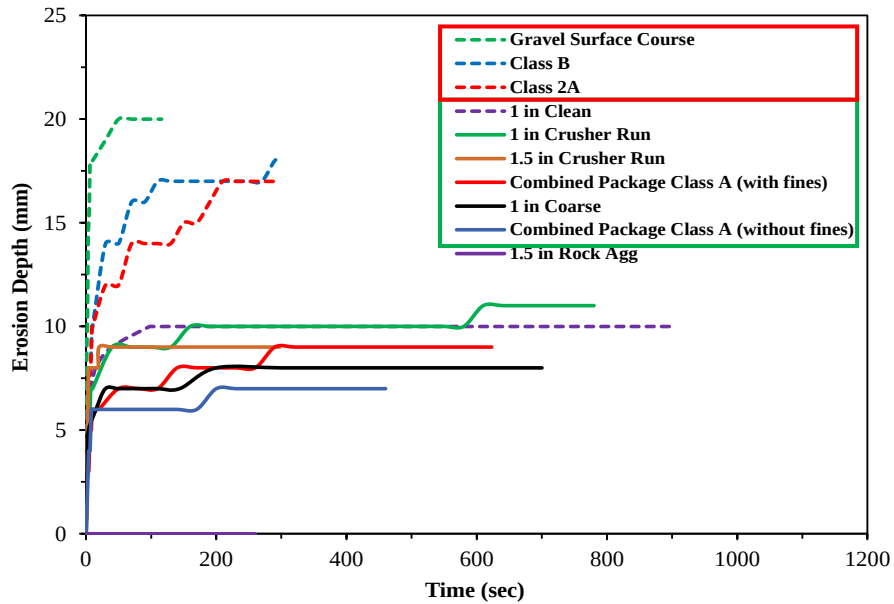
Şekil 3.24. Test edilen malzemeler için gradasyon eğrileri

Çizelge 3.12. Test edilen malzemelerin gradasyon parametreleri

Malzemeler	Gradasyon Parametreleri				
	D_{10} (mm)	D_{30} (mm)	D_{60} (mm)	C_u	C_c
1.5 in Rock Agg (GP)	19.69	24.33	30.7	1.56	0.99
Combined Package Class A (without fines) (GP)	4.76	8.29	12.5	2.63	1.15
Combined Package Class A (with fines) (GW)	1.73	5.77	11.43	6.61	1.68
1.5 in Crusher Run (GP)	6.3	10.96	15.35	2.44	1.24
1 in Crusher Run (GP)	2.84	5.53	9.45	3.33	1.14
1 in Clean (GP)	7.18	10.7	13.4	1.87	1.19
1 in Coarse (GP)	8.9	11.74	15.01	1.69	1.03

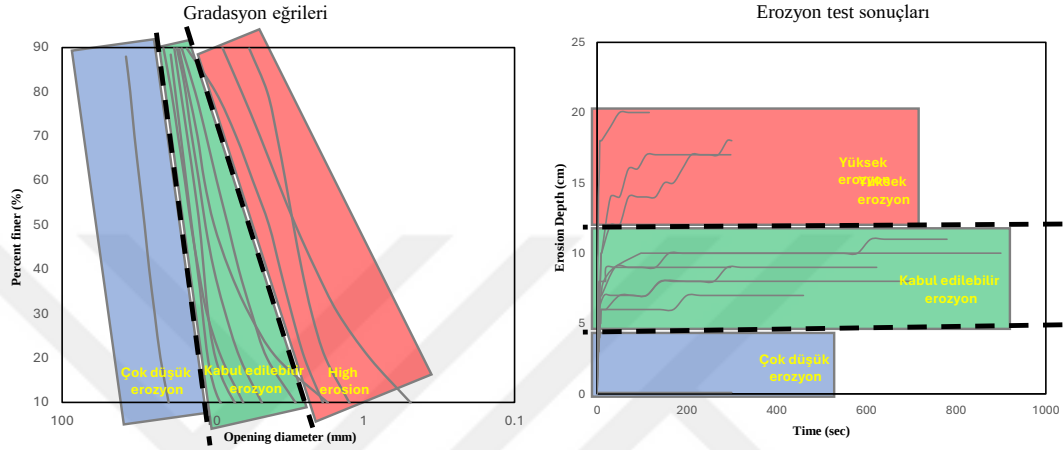
Gravel Class 2A (SP)	1.24	2.21	3.31	2.67	1.19
Gravel Class B (SP)	0.49	1.49	3.74	7.63	1.21
Gravel Surface Course (SP)	1.87	3.01	5.43	2.9	0.89

Seçilen malzemeler için UNLETB kullanılarak gerçekleştirilen erozyon testi sonuçları Şekil 3.25'te gösterilmektedir. Erozyon eğrileri, erozyon hızı ve erozyon derinliğine göre sunulmuştur. Bu şekilden de anlaşılacağı üzere, Çakıl Yüzey Tabakası (Gravel Surface Course) gibi bazı malzemeler 20 cm'ye kadar ulaşan erozyon derinlikleri sergilerken, 1.5 inç Kaya Agregası (Rock Aggregate) gibi diğerleri ihmal edilebilir erozyon göstermektedir. Malzeme erozyonunun ihmal edilebilir düzeyde olması büyük boyutlu kırılmış agregalara dayandırılabilir. Ancak bu büyük boyutlu agregalar, araç lastiğine zarar verme riskinden dolayı otoyol kenarları için uygun olmayabilir. Şekil 3.25'te gösterilen erozyon derinliğine bağlı olarak, iki grup erozyon eğrisi gözlemlenmektedir. Birinci grupta (Şekil 3.25'teki yeşil kutu) numunelerin erozyon derinliği 5-10 cm arasında değişirken, ikinci grupta (Şekil 3.25'teki kırmızı kutu) erozyon derinlikleri 10-20 cm arasında değişmektedir. Daha düşük erozyon derinliğine sahip malzemeler daha yüksek erozyon direncine işaret ederken, daha yüksek erozyon derinliğine sahip malzemeler daha düşük erozyon direncine işaret etmektedir.



Şekil 3.25. UNLETB kullanılarak elde edilen erozyon testi sonuçları

Dolayısıyla bu çalışma, deneysel sonuçlara göre gradasyon eğrilerini üç kategoride sınıflandırmaktadır. Şekil 3.26'da gösterildiği gibi önerilen gradasyon eğrisi kategorileri, erozyon direnci performanslarına göre iyi performans gösteren (Well Performing - WP), kötü performans gösteren (Poor Performance - PP) ve kabul edilemez (Not Appropriate - NA) olarak adlandırılmıştır.



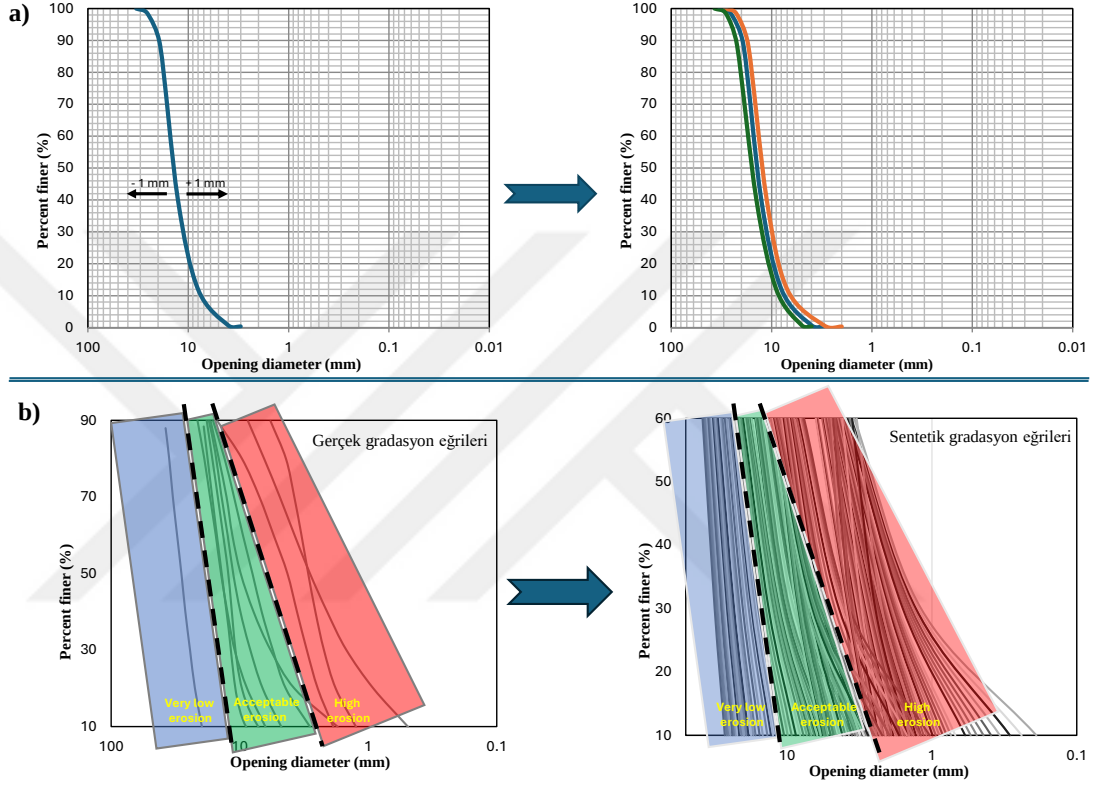
Şekil 3.26. Erozyon davranışları için önerilen sınıflandırma kategorileri

Şekil 3.26'nın sol tarafında önerilen üç kategori gösterilmektedir; iyi performans gösteren eğriler yeşil kutuda, kötü performans gösteren eğriler kırmızı kutuda ve kabul edilemez eğriler mavi kutuda yer almaktadır. Bu kutulardaki gradasyon eğrilerinin karşılık gelen erozyon sonuçları sağdaki şekilde benzer bir renkle vurgulanmıştır. Görsel olarak gözlemlendiğinde, yeşil kutu içindeki gradasyon eğrilerinin erozyon derinliğinin kabul edilebilir bir aralıkta kaldığı, kırmızı kutu içindekilerin fazla erozyon derinliği gösterdiği ve mavi kutu içindeki gradasyon eğrilerinin büyük boyutları nedeniyle kabul edilemez olduğu görülmektedir. Önerilen sınıflandırma yöntemi, bir malzemenin erozyon performansını kategorize etmek için basit ancak etkili bir yaklaşım sunmaktadır.

3.5.3.2. Sentetik Verilerin Oluşturulması

Denetimli (supervised) makine öğrenimi metodolojileri, girdileri çıktılarla eşleyen bilinmeyen fonksiyonu doğru bir şekilde öğrenmek için zengin bir veri kümesine dayanmaktadır. Testlerden elde edilen sınırlı veri, YSA modelini eğitmek için bir zorluk teşkil etmektedir. Bu nedenle, sentetik veriler üreterek veri tabanındaki verileri artırmak

için bir şema önerilmiştir. Sentetik veriler, deneysel bir gradasyon eğrisinin logaritmik ölçekte daha büyük partikül boyutu (sol) ve daha küçük partikül boyutu (sağ) yönüne doğru küçük bir aralıkla sistematik olarak kaydırılmasıyla oluşturulmuştur. Bu gradasyon eğrilerinin kaydırılması yeni malzemenin gradasyonunu temsil etmektedir. Sentetik gradasyon eğrisi üretiminin genel süreci Şekil 3.27'de gösterilmektedir.



Şekil 3.27. a) Tek bir eğriden sentetik veri oluşturma süreci ve b) ilgili erozyon performans gruplarındaki tüm sentetik gradasyon eğrileri

Bu strateji kullanılarak, tüm orijinal deneysel gradasyon eğrileri ilave sentetik gradasyon eğrileri oluşturmak için kullanılmış ve böylece eğitim veri setinin çeşitliliği ve miktarı artırılmıştır. Bu strateji kullanılarak çok sayıda sentetik veri noktası oluşturulabilmesine rağmen, bu çalışmada YSA modelinin eğitilmesi amacıyla 364 eğrinin yeterli olduğu düşünülmüştür. Şekil 3.27(b)'de gösterilen sentetik olarak oluşturulan her gradasyon eğrisi, sırasıyla mavi, yeşil ve kırmızı renklerle NA, WP ve PP erozyon performans gruplarına ayrılmıştır. Sentetik derecelendirme eğrilerinin aralığı Şekil 3.27(b)'de görüldüğü gibi, YSA modelini eğitmek için gerekli olan girdi parametrelerini (D_{10} , D_{30} , D_{60} , C_c , C_u) kapsadığından %10 ile %60 arasına kadar uzanmaktadır.

3.5.3.3. YSA modeli için optimum girdi parametrelerinin belirlenmesi

Gradasyon eğrisini karakterize eden ve bu çalışmada YSA modeli için girdi olarak kullanılabilecek beş parametre (D_{10} , D_{30} , D_{60} , C_u ve C_c) bulunmaktadır. En iyi girdi parametreleri setini seçmek için iki kombinasyon test edilmiştir. İlk kombinasyon, girdi parametreleri olarak D_{10} , D_{30} ve D_{60} çakıl boyutu parametrelerini içermiştir. Buna karşılık, ikinci kombinasyonda D_{10} , D_{30} ve D_{60} 'a ek olarak homojenlik katsayısı (C_u) ve eğrilik katsayısı (C_c) da girdi olarak dahil edilmiştir. Erozyon direnci performansını tahmin etmek için en etkili kombinasyonun belirlenmesi, eğitilmiş modellerin doğruluğuna dayanacaktır.

3.5.3.4. Deneysel ve sentetik verilerin ön işlenmesi

Daha iyi model performansı elde etmek için eğitime başlamadan önce veri kümesindeki girdi özelliklerini normalleştirmek genellikle iyi bir uygulamadır. Bu nedenle, veri tabanındaki tüm veriler orijinal aralıktan 0 ile 1 arasında ortak bir aralığa ölçeklendirilmiştir. YSA modelinin çıktıları kategorik verilerdir (WP, PP, NA), bu nedenle eğitimde kullanılmadan önce sayısal değerlere kodlanmaları gerekmektedir. Bu amaçla, her bir kategorinin ikili bir vektörle eşleştirildiği tek sıcak (one-hot) kodlama adı verilen popüler bir teknik kullanılmıştır. Bunu yapabilmek için önce kategorik değerler tamsayı değerlerine dönüştürülür ve ardından her bir tamsayı değeri bir ikili vektör olarak temsil edilir. Bu ikili vektörün tüm elemanları sıfıra ayarlanır, ancak tamsayı değerine karşılık gelen indeksteki eleman bire ayarlanır. Tek sıcak kodlama Şekil 3.28'de gösterilmiştir.

Kategorik Veriler	WP	PP	NA
	↓	↓	↓
Tamsayı Dönüşümü	0	1	2
	↓	↓	↓
Tek Sıcak Kodlama	[1, 0, 0]	[0, 1, 0]	[0, 0, 1]

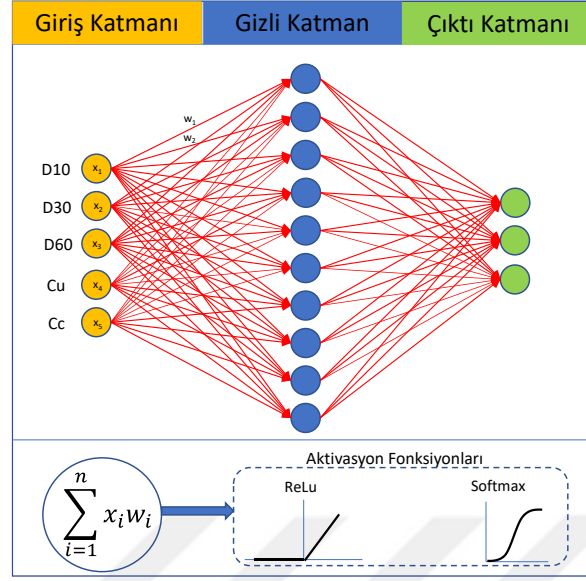
Şekil 3.28. Kategorik verilerin tek sıcak (one-hot) kodlaması

3.5.3.5. YSA modelinin mimarisi ve eğitim süreci

Çok sınıflı bir sınıflandırma YSA modeli, otoyol kenar kayalarının farklı derecelerinin erozyon direnci performansını tahmin etmek için denetimli bir makine öğrenimi modeli olarak kullanılmıştır. YSA modeli, D_{10} , D_{30} , D_{60} , C_u ve C_c değerlerini ve bunların gradasyon grafiğindeki ilgili konumlarını (yani, iyi performans gösteren (WP), kötü performans gösteren (PP) veya kabul edilemez (NA) kategorisine girip girmediklerini) içeren deneysel ve sentetik veriler kullanılarak verimli bir şekilde eğitilmiştir. YSA modeli üç aşamalı bir süreçte oluşturulmuştur: (1) verilerin %70'i kullanılarak eğitim, (2) verilerin %15'i kullanılarak test ve (3) veri tabanındaki verilerin kalan %15'i kullanılarak doğrulama. Model ilk adımda eğitim kriterlerini karşıladıktan sonra, daha önce görülmemiş bir test veri kümesi kullanılarak performansının değerlendirildiği test adımına geçilir. YSA modeli eğitim kriterlerini karşılamadığında daha fazla eğitim için ilk adıma geri döner. Geliştirilen sinir ağı modelinin gizli katmanında, hızı ve iyileştirilmiş performansı ile bilinen Doğrultulmuş Lineer Birim (Rectified Linear Unit - ReLU) aktivasyon fonksiyonu kullanılmıştır. Bu çok sınıflı sınıflandırma YSA modelinin çıkış katmanı vektör sınıfını temsil edecek şekilde tasarlanmıştır. Bu amaçla softmax aktivasyon fonksiyonu çıkış katmanına uygulanmıştır. Stokastik gradiyent iniş yöntemine dayalı ADAM optimizeri, ağırlıkları ve biasları ayarlayarak YSA modelini eğitmek için kullanılmıştır. Bir sınıflandırma modelinin tahmin edilen olasılıkları ile gerçek çıktılar arasındaki farkı hesaplayan kategorik çapraz entropi (categorical cross-entropy) kayıp fonksiyonu bu modelde tanımlanmıştır. Kategorik çapraz entropi kayıp fonksiyonunun denklemi şu şekilde ifade edilmektedir:

$$Kayıp = - \sum_{i=1}^{çıkış\ boyut} y_i * \log(\hat{y}_i) \quad (34)$$

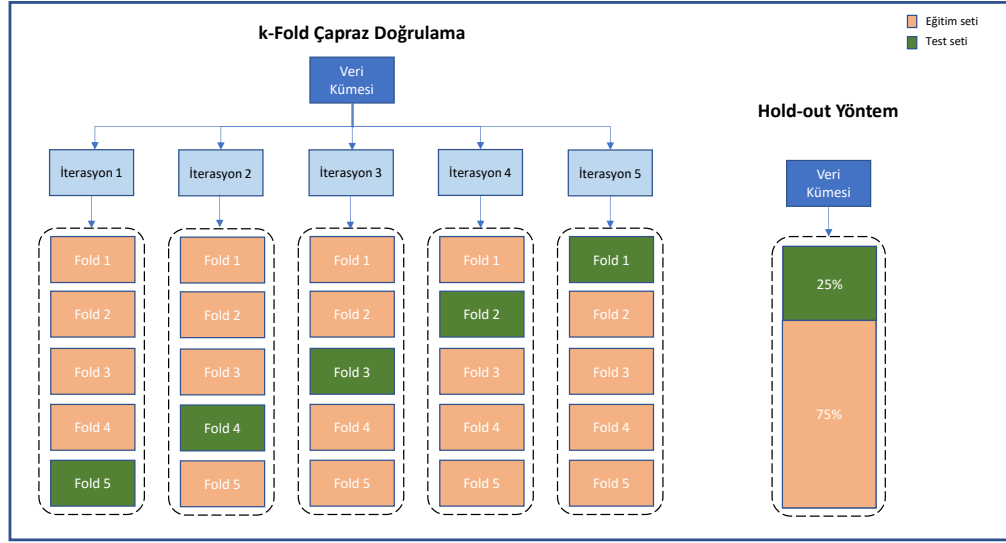
Burada, y belirli bir girdi için gerçek çıktıyı ve $(\hat{y}_i)$ bu girdi için tahmin edilen olasılığı göstermektedir. Önerilen YSA modelinin mimarisi Şekil 3.29'da gösterilmektedir. Giriş parametrelerinin, ağ mimarilerinin ve diğer hiperparametrelerin farklı kombinasyonlarının modelin doğruluğu üzerindeki etkisi de test edilmiştir.



Şekil 3.29. Önerilen yapay sinir ağı modelinin mimarisi

3.5.3.6. Eğitilmiş YSA modeli için doğrulama teknikleri

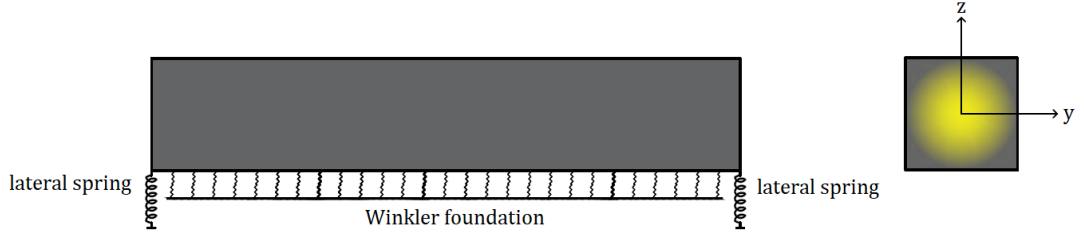
Modelin performansını değerlendirmek için iki doğrulama tekniği kullanılmıştır. İlk teknik, verilerin eğitim ve test için iki farklı sete bölündüğü hold-out yöntemidir. Ancak bu teknik bazen yanlış bir model performansına yol açabilir. Bu nedenle ikinci doğrulama tekniği olan k -Fold çapraz doğrulama da kullanılmıştır. k -Fold çapraz doğrulama tekniği, veri setini k alt kümeye böler ve model eğitimi k kez yinelenir. Her iterasyonda, modeli eğitmek için $k-1$ alt küme kullanılır ve kalan bir alt küme test kümesi (doğrulama kümesi) olarak hizmet eder. Modelin performans ölçütü (örneğin doğruluk), kapsamlı bir değerlendirme sağlamak için tüm k iterasyonun ortalaması alınmaktadır. Bu çalışmada k değeri beş olarak seçilmiş ve tüm k testten elde edilen ortalama performans hesaplanmıştır. Her iki doğrulama tekniği de Şekil 3.30'da gösterilmektedir.



Şekil 3.30. YSA modeli için kullanılan doğrulama teknikleri.

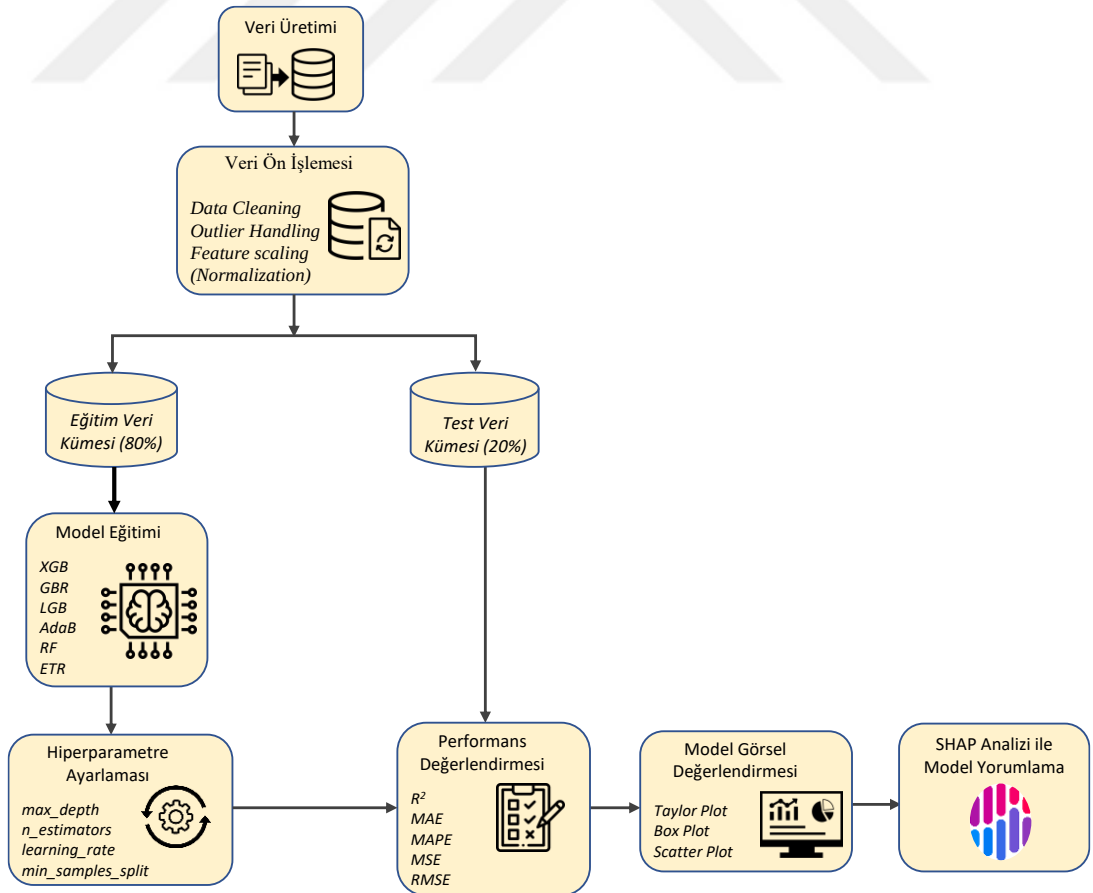
3.5.4. İki yönlü fonksiyonel derecelendirilmiş bir nanokirişin doğrusal olmayan stabilite davranışının ensemble makine öğrenme algoritmaları kullanılarak belirlenmesi.

Bu çalışmada, iki yönlü fonksiyonel derecelendirilmiş nanokirişlerin doğrusal olmayan burkulma analizi altı farklı ensemble MÖ tekniği kullanılarak incelenmiştir. Bunlar arasında Extreme Gradyent Boosting (XGB), Gradyent Boosting Regression (GBR), Light Gradyent Boosting (LGB) ve Adaptive Boosting (AdaB) gibi dört boosting algoritması ve Random Forest (RF) ve Extra Trees Regressor (ETR) olmak üzere iki bagging algoritması bulunmaktadır. Bu topluluk modelleri, farklı girdi parametreleri ile nano kirişlerin burkulma yükleri arasındaki karmaşık ilişkiyi araştırmaktadır. Bu modeller için eğitim verileri yerel olmayan gerinim gradyanı teorisinden (nonlocal strain gradient theory - NLSGT) türetilmiştir. Altı ensemble modelinin performansı R^2 , MAE, MAPE, MSE ve RMSE gibi çoklu istatistiksel metrikler ve Taylor grafikleri, dağılım grafikleri ve kutu grafikleri gibi görsel teknikleri kullanılarak değerlendirilmiştir. Son olarak, her bir girdi parametresinin nano kirişin burkulma davranışı üzerindeki etkisini ve önemini incelemek için SHAP analizi kullanılmıştır. Bu çalışmada ele alınan nano kiriş, metal ve seramik bir bileşenden oluşmaktadır ve Şekil 3.31'de gösterildiği gibi her iki ucunda yanal yaylarla kısıtlanmıştır.



Şekil 3.31. Yanal yaylarla kısıtlanmış iki yönlü fonksiyonel derecelendirilmiş nanokiriş.

Yazarın bilgisine göre, MÖ yöntemleri henüz iki yönlü fonksiyonel derecelendirilmiş nano kirişlerin burkulma analizini incelemek için uygulanmamıştır. Bu amaçla ensemble MÖ tekniklerinin kullanılması, geleneksel analitik çözümlere kıyasla hesaplama maliyetlerini önemli ölçüde düşürebilir ve problem çözme sürecini basitleştirebilir. Ayrıca, makine öğrenimi modelleri son derece doğrusal olmayan problemleri ele alabilir ve burkulmayı etkileyen çeşitli faktörler arasındaki gizli korelasyonları ortaya çıkarabilir. Bu çalışmada kullanılan ensemble MÖ yöntemlerinin tüm iş akışının görsel bir temsili Şekil 3.32'de verilmiştir.



Şekil 3.32. Ensemble MÖ metodolojisinin akış şeması.

3.5.4.1. Zengin bir veri kümesinin oluşturulması ve ön işleme

Makine öğrenimi modellerini etkili bir şekilde eğitmek için gerekli olan optimum eğitim verisi miktarını ve girdi değişkenlerinin sayısını belirlemek bir ön zorluk teşkil etmektedir. Gerekli veri miktarı, eldeki sorunun karmaşıklığına bağlıdır. Sağlam bir model için, veri kümesinin problem alanındaki girdi değişkenlerinin tüm olası varyasyonlarını içermesi çok önemlidir. Çeşitli önemli değişkenlerin kapsamlı bir şekilde ele alınması, modelin farklı senaryoları daha iyi tahmin edebilmesini sağlamaktadır. Bu nedenle bu çalışmada, eğitim verileri çeşitli değişkenler kullanan yerel olmayan gerinim gradyan teorisi kullanılarak oluşturulmuştur. Bu teori ile burkulma yüklerinin hesaplanması için matematiksel formülasyon aşağıdaki denklemde sunulmuştur. Bu teori ile burkulma yüklerini hesaplamak için matematiksel formülasyonu aşağıdaki denklemde sunulmuştur:

$$P_n = \frac{k_w(e_o a)^2 \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 + k_w + D_{yz} \left[l^2 \left(\frac{n\pi}{L}\right)^6 + (e_o a)^2 \frac{\mu}{L^2} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^4 + \frac{\mu}{L^2} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 + 1 \right]}{(e_o a)^2 \left(\frac{n\pi}{L}\right)^4 + \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2} \quad (35)$$

Bu denklem, Civalek vd. (2023b) tarafından yerel olmayan gerinim gradyan teorisine dayalı gözenekli nano kirişlerin doğrusal olmayan burkulması için sunulan formülasyondan iki yönlü fonksiyonel olarak derecelendirilmiş nano kirişlere uyarlanmıştır. Bu analiz için önemli parametreler sırasıyla yerel olmayan parametre ($e_o a$), malzeme uzunluk ölçeği parametresi (l), zemin parametresi ($\bar{K}$), doğrusal olmayan parametre (μ), y ve z yönlerinde malzeme derecelendirme katsayıları (g) ve (p)'dir. Bu çalışmada zemin parametresi $\bar{K}$ aşağıdaki gibi tanımlanmıştır:

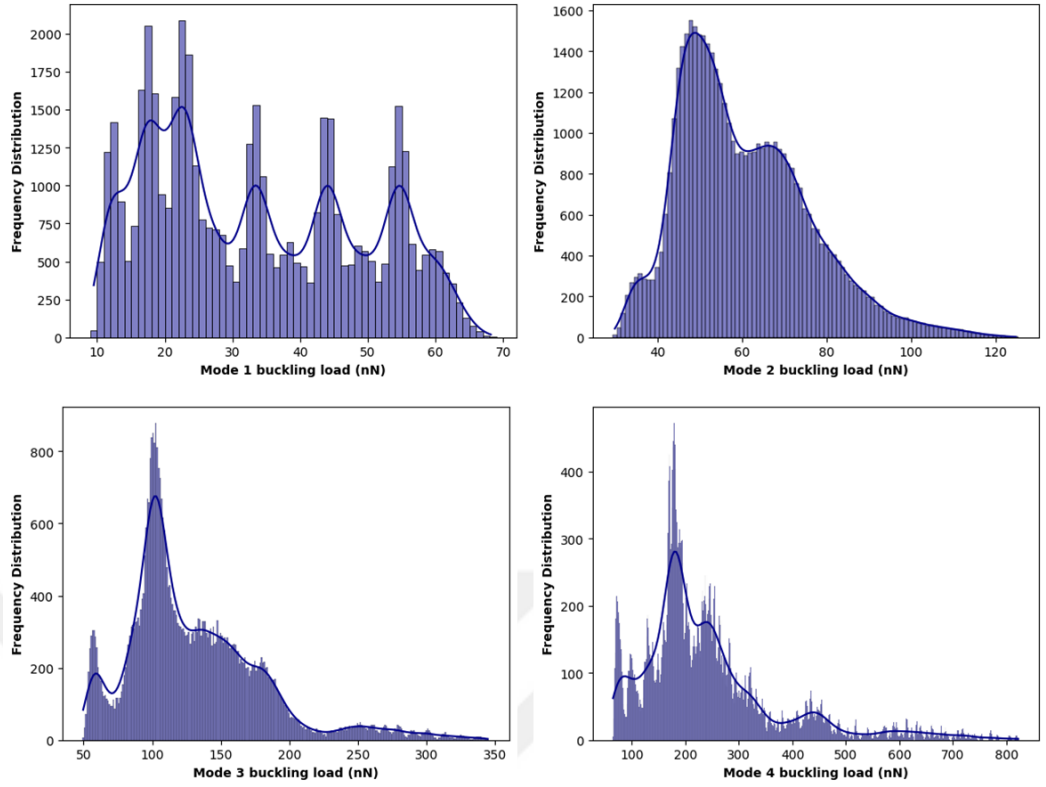
$$\bar{K} = \frac{k_w L^4}{E_m I} \quad (36)$$

Bu parametreler girdi değişkenleri olarak kullanılarak çeşitli burkulma modları için burkulma yükleri incelenmiştir. Makine öğrenimi modellerini eğitmek ve test etmek için kullanılan veri seti, bu değişkenlerin Çizelge 3.13'te özetlenen belirli aralıklarda sistematik olarak değiştirilmesiyle oluşturulmuştur. Ele alınan iki yönlü fonksiyonel derecelendirilmiş nanokiriş 100 nm uzunluğunda, 5 nm genişliğinde ve 5 nm yüksekliğindedir. Ayrıca, metal ve seramik için Young modülü sırasıyla 201.04 ve 384.43 GPa olarak kullanılmıştır.

Çizelge 3.13. Burkulma yüklerinin hesaplanması için farklı değişkenlerin değerleri.

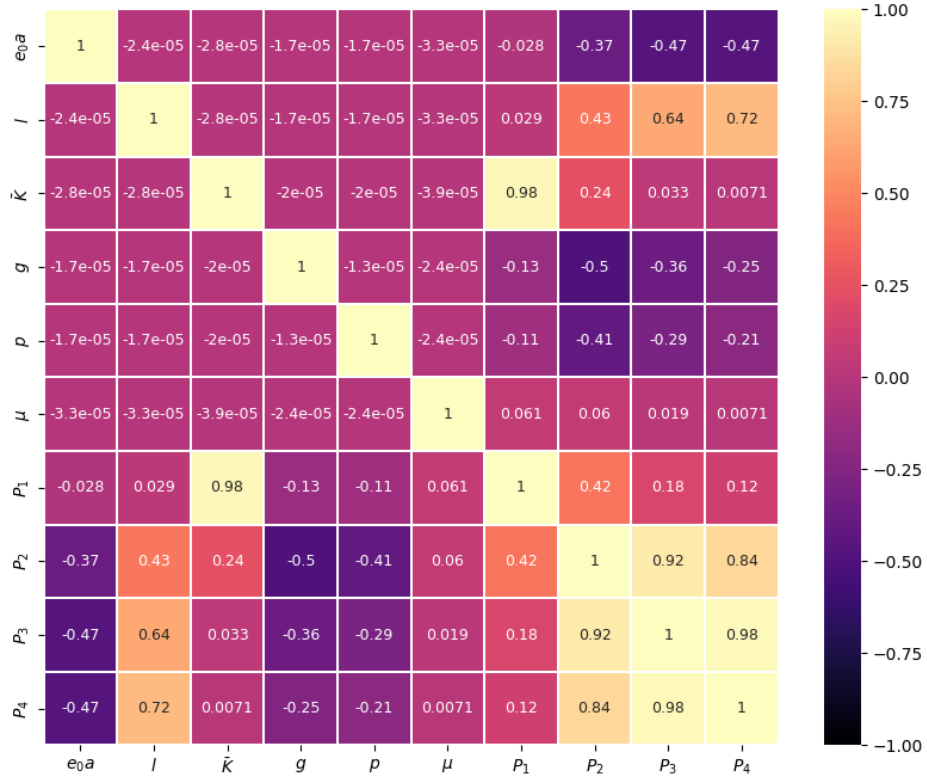
Değişkenler		Değerler					
e_0a	0	1	2	3	5	10	
l	0	1	2	3	5	10	
$\bar{K}$	10^{-20}	50	100	200	300	400	
g	0	0.3	0.6	1	10	15	
p	0	0.3	0.6	1	10	15	
μ	0	0.4	0.8	1.2	1.6	2	

Toplam veri kümesi, girdi değişkenlerinin tüm olası kombinasyonlarını kullanan 46656 veri noktasından oluşmaktadır ($\text{Değişkenler}^{\text{Değerleri}} = 6^6 = 46656$). Veri setindeki her bir veri noktası, girdi ve çıktı değişkenlerinden oluşan bir vektörü temsil etmektedir. Bu vektörde girdi değişkenleri olarak e_0a , l , $\bar{K}$, g , p ve μ , çıktı değerleri olarak da ilk dört burkulma modu (yani P_1 , P_2 , P_3 ve P_4) yer almaktadır. MÖ modelleri eğitmek için kullanılacak veri setindeki P_1 , P_2 , P_3 ve P_4 dağılımlarını Şekil 3.33'te göstermektedir.



Şekil 3.33. İlk dört burkulma modu için frekans dağılımı

Bu çalışmada, Şekil 3.34'te gösterildiği gibi veri kümelerindeki girdi ve çıktı değişkenleri arasındaki korelasyonu değerlendirmek için Pearson korelasyon katsayısı (PCC) kullanılmıştır. Bu istatistiksel ölçüt, model girdi parametrelerinin burkulma yükleri üzerindeki etkisini tanımaya yardımcı olmaktadır. Bu şekil, zemin parametresinin ($\bar{K}$) birinci moddaki (P_1) burkulma yükü ile 0,98'lik önemli bir korelasyon katsayısına sahip olduğunu göstermektedir. İlginç bir şekilde, malzeme uzunluk ölçeği parametresi (l) diğer parametrelere kıyasla ikinci, üçüncü ve dördüncü modlardaki burkulma yükü ile en yüksek korelasyonu sergilemektedir. l ile burkulma yükleri arasındaki korelasyon katsayısı yüksek modlarda artmaktadır. Buna karşılık, e_0a , g ve p gibi parametreler burkulma yükleri ile negatif bir korelasyon göstermektedir.



Şekil 3.34. Giriş ve çıkış değişkenleri arasındaki Pearson korelasyon katsayısı

3.5.4.1. MÖ modelinin yorumlanması için SHAP analizi

Ensemble metodolojisi tabanlı makine öğrenimi modellerinin yorumlanması, kara kutu yapıları ve yüksek karmaşıklıkları nedeniyle zorlu bir görevdir. Bu sorunu ele almak için, bu çalışmada Lundberg (2017) tarafından sunulan SHAP (SHapley Additive exPlanations) yöntemi kullanılmıştır. SHAP yöntemi, her bir girdi değişkeninin modelin çıktılarını tahmin etmeye yönelik göreceli önemi ve katkıları hakkında bilgiler sunarak ensemble MÖ model sonuçlarını analiz etmektedir. Girdi değişkeninin model çıktısına katkıları, ilgili değişkenin ağırlıklı toplamının hesaplanmasıyla elde edilmektedir. Bu, aşağıdaki şekilde formüle edilebilir:

$$\varphi_j(val) = \sum_{S \subseteq \frac{\{x_i, \dots, x_p\}}{\{x_j\}}} \frac{|S|! (p - |S| - 1)!}{p!} \left(val(S \cup \{x_j\}) - val(S) \right) \quad (37)$$

Burada val girdi değişkeninin model çıktısı için önemini, S modelde kullanılan değişkenlerin bir alt kümesini, x açıklama için amaçlanan örneklerin girdi değerlerini içeren bir vektörü ve p tüm veri kümesindeki girdi değişkenlerinin sayısını, $\frac{|S|!(p-|S|-1)!}{p!}$ terimi S alt kümesinin ağırlığını ve $val(S)$, S alt kümesiyle ilişkili tahmin edilen değeri ifade etmektedir. Tüm girdi değişkenleri için SHAP değerleri elde edildikten sonra, model açıklaması girdi değişkenlerinin doğrusal bir fonksiyonu şeklini alır ve aşağıdaki gibi ifade edilir:

$$f(x) = g(x') = \phi_0 + \sum_{i=1}^N \phi_i x'_i \quad (38)$$

Model açıklaması $g(x')$ olarak gösterilmektedir. x' olarak temsil edilen basitleştirilmiş girdi, $x = h_x(x')$ fonksiyonu aracılığıyla orijinal girdiye geri eşlenebilir. Bu modelde ϕ_0 , bir örneğin tüm girdi değişkenleri olmadığında sabit değeri temsil etmektedir. N girdi değişkenlerinin sayısını gösterirken, ϕ_i orijinal modelin davranışına yaklaşmayı amaçlayan i 'inci girdi değişkeninin atfını ifade etmektedir.

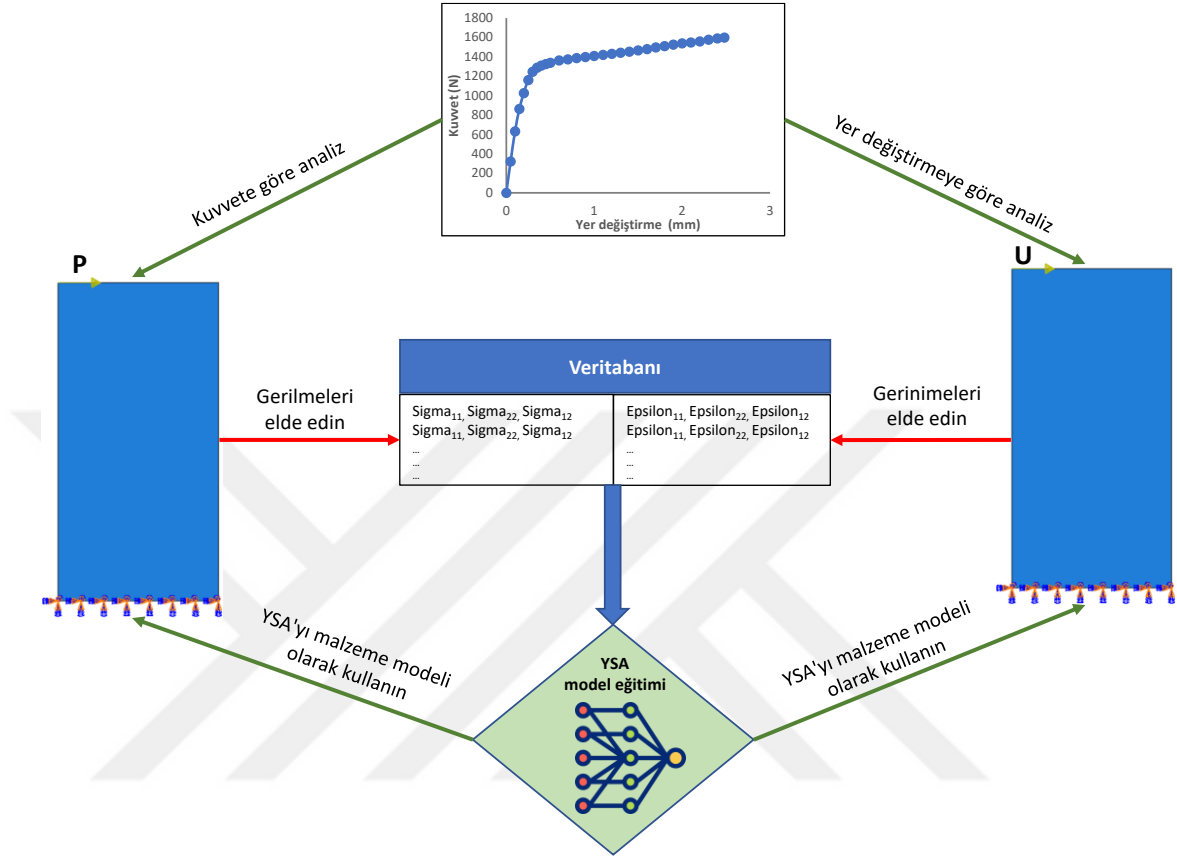
3.6. Malzemelerin Doğrusal Olmayan Davranışını Tahmin Etmek için Ters Analiz Tabanlı Kendi Kendine Öğrenme Algoritması

Bu bölümde, SE analizinde YSA malzeme modellerinin kullanımını uygulayan ters analiz tabanlı bir kendi kendine öğrenme çerçevesi sunulmaktadır. Kendi kendine öğrenme çerçevesi, gözlemlenen davranışlardan öğrenmekte ve testlerden elde edilen ölçümler ile malzeme modellemesi arasında doğrudan bir bağlantı kurmaktadır. Bu çerçeve, tek bir malzeme modelinin geliştirilmesine odaklanmak yerine, malzeme davranışını bir veritabanı şeklinde çıkarmaktadır. Bu çerçevesi, malzeme davranışı hakkında ek bilgiler elde edildiğinde yeni bir malzeme modeli geliştirme gibi zor bir görevi ortadan kaldırmaktadır. Kendi kendine öğrenme çerçevesinin algoritması bir bilgisayar programı şeklinde uygulanmakta ve sınır değer problemini analiz etmek için piyasada bulunan FE kodu ABAQUS'u kullanmaktadır. Bir YSA malzeme modeli, ABAQUS'ta bir kullanıcı malzeme alt programı olarak uygulanmaktadır.

Kendi kendine öğrenme algoritması, kuvvetler ve yer değiştirmeler gibi sınır ölçümlemlerini kullanarak malzeme davranışını çıkarmak için kullanılmaktadır. Bu çerçeve, geleneksel malzeme modellerinin özelliklerini kalibre etmek yerine, sürekli gelişen bir YSA malzeme modelinin kullanılmasıyla kolaylaştırılan malzemelerin davranışlarını çıkarmaktadır. Çerçevesi Şekil 3.35'te gösterilmektedir. Başlangıçta bir YSA malzeme modeli kullanılarak yapılan bir SE analizi, ölçülen yüklerin belirli bir aşamada kuvvet sınır koşulu olarak uygulanmasıyla gerçekleştirilmektedir. Genellikle, hesaplanan deformasyonlar ölçülen deformasyonlarla eşleşmez. Bu kendi kendine öğrenme algoritması, doğru sınır kuvvetleri kullanıldığından ve SE çözümündeki denge gereksinimleri karşılandığından, hesaplanan gerilme alanının gerçek gerilme alanının kabul edilebilir bir yaklaşımını sağladığını öngörmektedir. Hesaplanan ve ölçülen deformasyonlar arasındaki tutarsızlık nedeniyle hesaplanan gerinim alanının gerçek gerinim alanının zayıf bir yaklaşımı olduğu kabul edilmektedir. Daha sonra, ölçülen deformasyonlar yer değiştirme sınır koşulları olarak uygulanarak aynı YSA malzeme modeli kullanılarak ikinci bir SE analizi gerçekleştirilmektedir. Bu algoritma, ölçülen sınır yer değiştirmeleri kullanıldığından ve SE çözümündeki uyumluluk gereklilikleri karşılandığından, hesaplanan gerinim alanının gerçek gerinim alanının kabul edilebilir bir yaklaşımını sağladığını öngörmektedir. Bu adımda hesaplanan gerilme alanının, hesaplanan ve gerçek sınır kuvvetleri arasındaki olası tutarsızlık nedeniyle gerçek gerilme alanının zayıf bir yaklaşımı olduğu varsayılmaktadır. Kuvvet tabanlı analizden elde edilen gerilmeler ve yer değiştirme tabanlı analizden elde edilen gerinimler, malzeme davranışına yaklaşan gerilme-gerinim çiftleri oluşturmak için tüm entegrasyon noktalarındaki ikili SE analizlerinden çıkarılmaktadır. Bu gerilme-gerinim çiftleri YSA malzeme modelini yeniden eğitmek için kullanılmaktadır.

İkili FE analizleri ve ardından gelen YSA malzeme modeli eğitimi bir öğrenme döngüsü (cycle) olarak adlandırılmaktadır. Her yükleme aşaması için birkaç öğrenme döngüsü gerçekleştirilir. SE analizleri güncellenmiş YSA malzeme modeli kullanılarak tekrarlanmakta ve YSA malzeme modelini yeniden eğitmek için yeni bir gerilme-şekil değiştirme verisi seti çıkarılmaktadır. Kuvvet tabanlı ve yer değiştirme tabanlı analizler benzer sonuçlar verdiğinde çözüm belirli bir yükleme adımları için yakınsar. Öğrenme döngüleri, mevcut tüm yükleme adımları için sırayla gerçekleştirilir ve bu da bir öğrenme

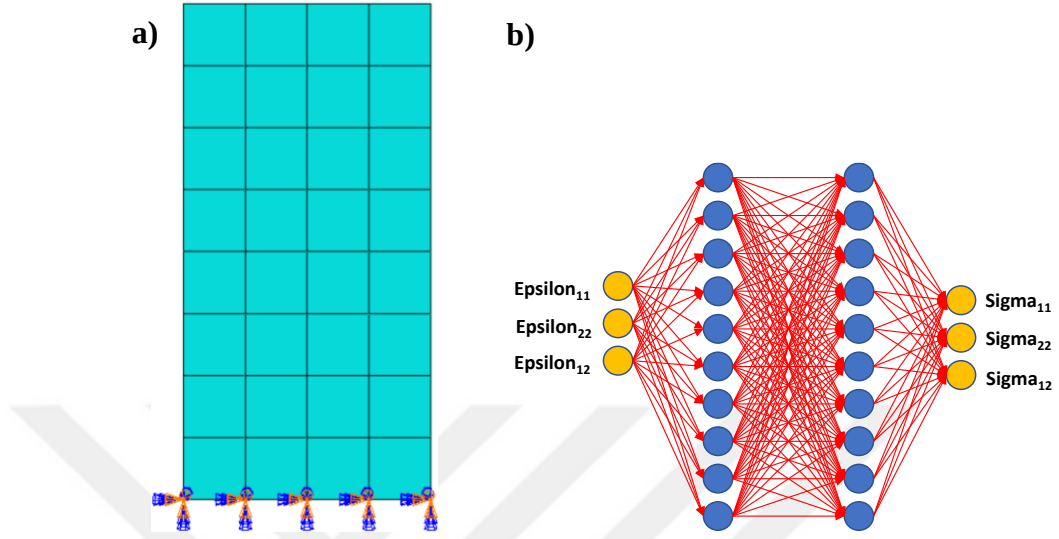
geçiş (pass) oluşturmaktadır. Ölçülen bir davranışı yeterince yakalayacak bir YSA malzeme modeli geliştirmek için birkaç öğrenme geçişi gereklidir.



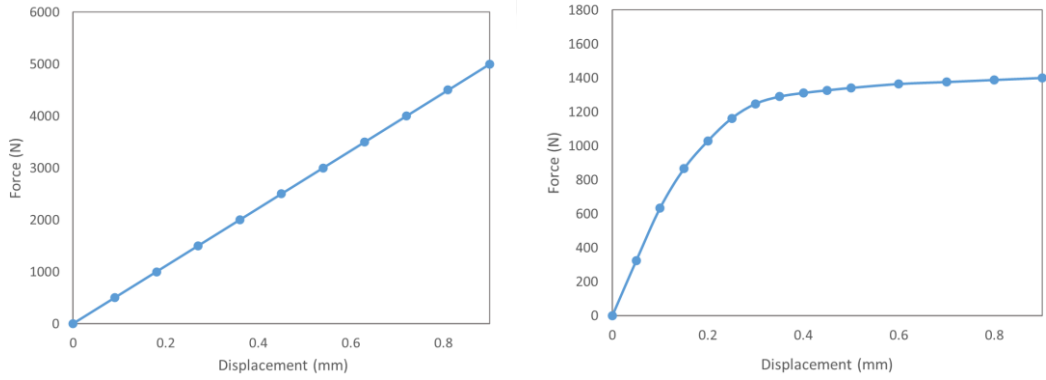
Şekil 3.35. Kendi kendine öğrenen malzeme davranışının hesaplamalı çerçevesi

Bu algoritma, düzlem gerilme izotropik metal davranışını tahmin etmek için simüle edilmiş bir yapısal teste uygulanmıştır. Konsol yapısının geometrisi ve sınır koşulları ile SE ağı Şekil 3.36(a)'da gösterilmiştir. Yapının düzlem dışı kalınlığı 1 mm ve alt kısmı sabittir. Yapıda kullanılan malzemenin Young modülü 200 GPa, Poisson oranı 0,3 ve yaklaşık akma gerilmesi 450 MPa olan çelik olduğu varsayılmıştır. Düzlem gerilme metal davranışını çıkarmak için Şekil 5.36(b)'de gösterilen YSA malzeme modeli mimarisi kullanılmıştır. YSA malzeme modelinde gerinim için üç giriş düğümü, gerilme için üç çıkış düğümü ve 10 gizli düğümden oluşan iki katman bulunmaktadır. Bu çalışmada, farklı karmaşıklık seviyeleri için malzeme modelini oluşturmak üzere kendi kendine öğrenme algoritması kullanılmıştır. İlk örnekte malzemenin doğrusal elastik davranışı,

ikinci örnekte ise malzemenin doğrusal olmayan elastoplastik davranışı Şekil 3.37'de gösterilen referans kuvvet-yer değiştirme verileri kullanılarak tahmin edilmiştir.



Şekil 3.36. a) Sınır koşullarına sahip konsol yapısı b) YSA malzeme modelinin mimarisi



Şekil 3.37. Referans doğrusal ve doğrusal olmayan yükleme koşulları

Konsol yapısının sol üst köşesine kademeli olarak artan bir yük uygulanarak üst-orta noktada yer değiştirme ölçümleri elde edilmektedir. Uygulanan yükler ve ölçülen yer değiştirmeler metal davranışını çıkarmak için kullanılmaktadır. Üç öğrenme döngüsü gerçekleştirilmekte ve her döngüde YSA modelini eğitmek için maksimum 150 eğitim epok kullanılmaktadır.

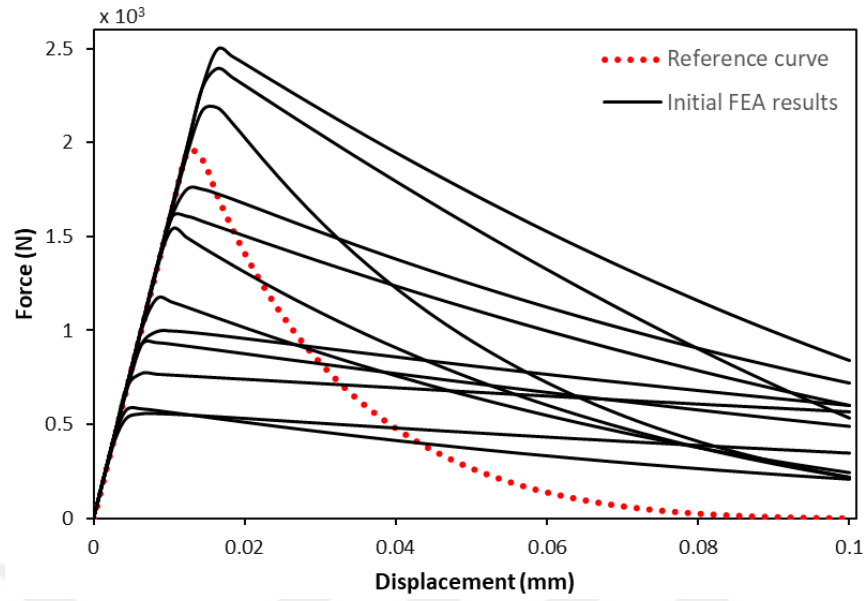
4. BULGULAR ve TARTIŞMA

4.1. Hibrit SmartFIT Yazılımı Kullanılarak Parametre Tanımlama Sonuçları

Aşağıdaki alt bölümlerde, sırasıyla Bölüm 3.2.1, Bölüm 3.2.2 ve Bölüm 3.2.3'te ayrıntılı olarak açıklanan üç farklı örnek için SmartFIT parametre tanımlama programının sonuçları sunulmaktadır. Bu alt bölümler, hata-iterasyon eğrisi kullanılarak SE sonuçlarının optimizasyon süreci boyunca referans verilere nasıl aşamalı olarak yaklaştığını kapsamlı bir şekilde göstermektedir. Ardından, SmartFIT tarafından belirlenen optimum parametreler sunulmakta ve bu parametreler kullanılarak bir SE analizi yapılmaktadır. Optimum parametreler ile elde edilen uyumun doğruluğu, SE sonuçlarının referans verilerle karşılaştırılmasıyla değerlendirilmektedir. Her bir örneğin sonuçları ayrıntılı olarak tartışılmaktadır.

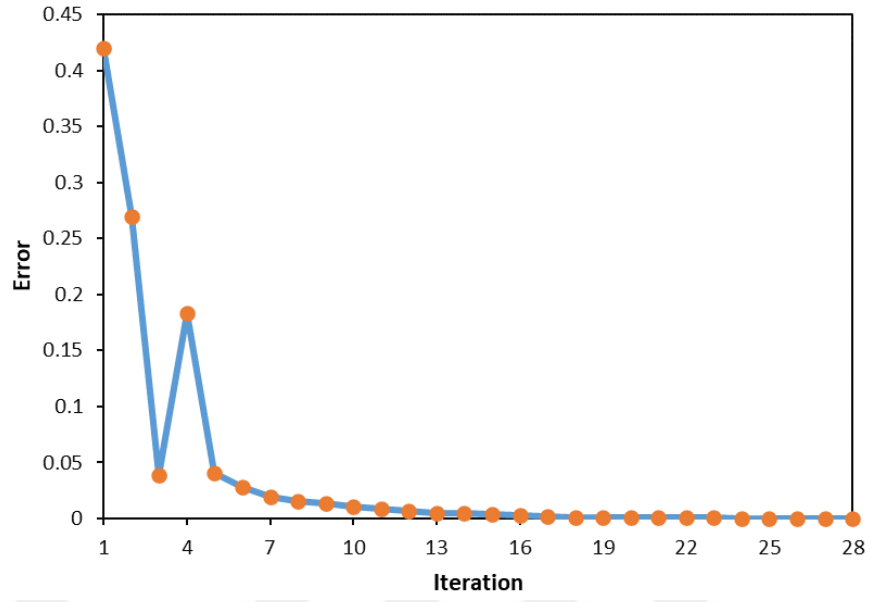
4.1.1. UEL'e uygulanan kohezif bölge modelinin optimizasyon sonuçları

DOE'de üretilen her bir numune için Abaqus'ta kohezif eleman modelinin sonlu eleman analizi gerçekleştirilmiştir. Her bir örneğe karşılık gelen SE çıktı verileri veri tabanında saklanmıştır. Bu SE çıktılarından bazıları Şekil 4.1'de referans eğri ile karşılaştırmalı olarak gösterilmektedir. Parametre değerlerinin hatalı olması nedeniyle SE sonuçları, referans eğrisinden önemli ölçüde sapmaktadır. Veriler elde edildikten ve ön işleme adımları tamamlandıktan sonra SmartFIT bir MÖ modelini eğitmeye başlamıştır. Bu eğitim süreci, modelin tahmin performansı iyi bir seviyeye ulaşana kadar iteratif olarak devam etmiştir. En iyi MÖ model hiperparametrelerini bulma sürecini hızlandırmak için Bayesian optimizasyonu kullanılmıştır. Model iyi bir şekilde eğitildikten sonra, optimizasyon algoritmasının amaç fonksiyonuna entegre edilmiştir. Bu, Bölüm 3'te açıklandığı gibi, SE sonuçları ile referans eğrisi arasındaki uyumsuzluğu en aza indirmeyi amaçlayan optimum parametrelerin belirlenmesini sağlamaktadır.



Şekil 4.1. DoE örneklerine dayalı ilk FEA sonuçlarıyla referans kuvvet-yer değiştirme eğrisinin karşılaştırılması

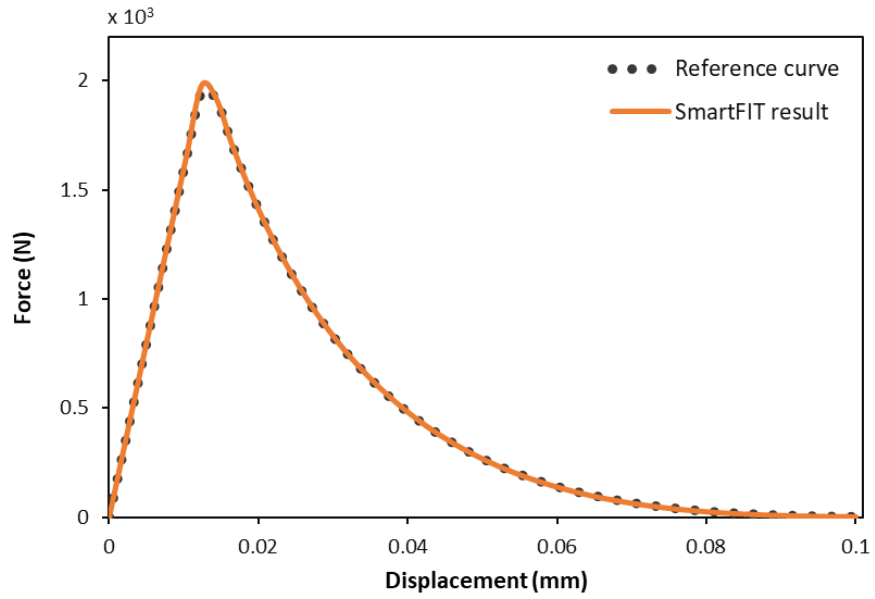
SmartFIT çerçevesindeki her iterasyonun sonunda, optimizasyon algoritmasıyla belirlenen optimum değerler kullanılarak SE analizi gerçekleştirilir ve kuvvet-deformasyon eğrisi elde edilmiştir. Eğer referans eğrisi ile SE eğri arasındaki hesaplanan hata, önceden tanımlanan tolerans eşliğini aşarsa, parametre tahminini daha da iyileştirmek için bir sonraki iterasyon başlatılmaktadır. Şekil 4.2’de görüldüğü üzere, hatanın önceden tanımlanmış tolerans seviyesinin altına düştüğü bir yakınsamaya ulaşmak için 28 iterasyon gerekmiştir. İterasyonlar ilerledikçe hata değerlerinde belirli bir desen fark edilmiştir. Özellikle dördüncü iterasyondan sonra, her iterasyonda kademeli bir hata azalma eğilimi gözlenmiştir. Hata oranındaki bu sistematik azalma, SmartFIT çerçevesindeki iyileştirme sürecini vurgular ve parametre değerlerinin etkin bir şekilde optimize edilmesine yönelik istikrarlı bir iyileşmeye işaret etmektedir. 28. iterasyonun sonunda elde edilen optimal parametreler Çizelge 4.1’de sunulmuştur. Bu parametreler, daha önce tanımlanan ilgili minimum ve maksimum değerleri aralığındadır. Daha sonra, bu optimal parametreler kullanılarak bir SE analizi yapılmış ve sonuçlar referans eğrisi ile karşılaştırılmıştır. Şekil 4.3’te gösterilen bu karşılaştırma, iki eğri arasında mükemmel bir uyum olduğunu ortaya koymaktadır. Bu sonuç, SmartFIT kullanılarak belirlenen optimize edilmiş parametrelerin etkinliğini vurgulamaktadır.



Şekil 4.2. Optimizasyon süreci boyunca hata ve iterasyon eğrisi.

Çizelge 4.1. PPR UEL kohezif modeli için optimum parametre değerleri.

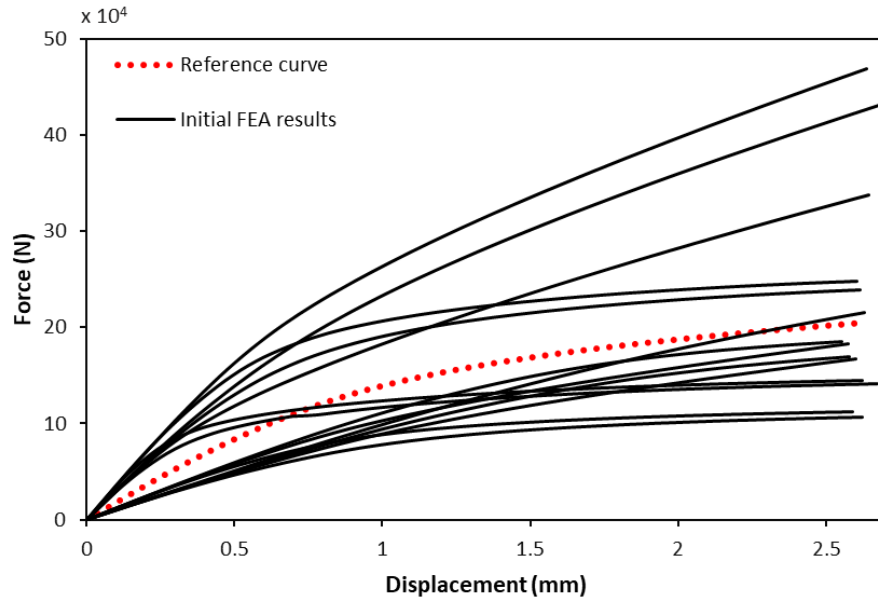
ϕ_n	ϕ_t	σ_{max}	τ_{max}	α	β	λ_n	λ_t
0.1	0.114	4.1	5	4.8	2.36	0.0014	0.0058



Şekil 4.3. Referans kuvvet-yer değiştirme eğrisinin optimum parametreler kullanılarak elde edilen sonuçlarla karşılaştırılması

4.1.2. UMAT'a uygulanan plastisite modelinin optimizasyon sonuçları

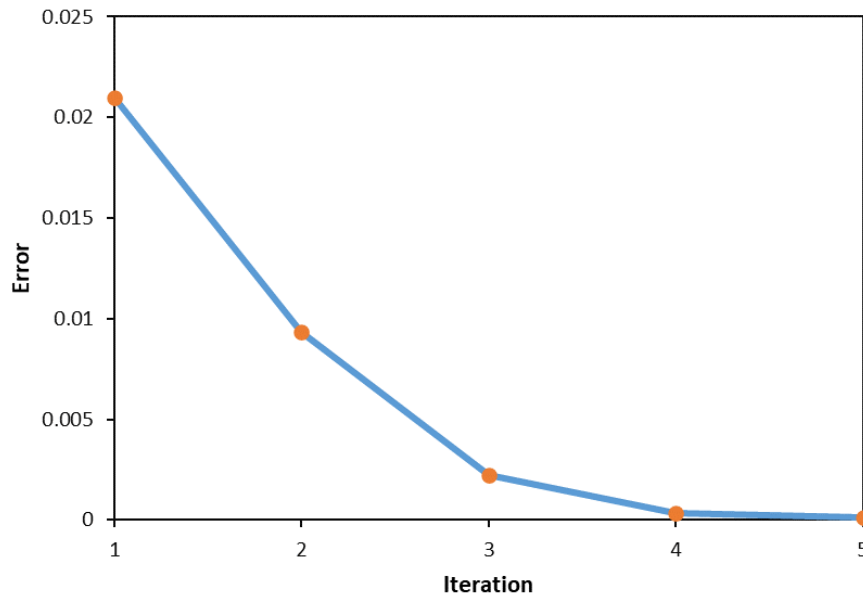
Şekil 4.4, referans deneysel eğri ile veri tabanında kaydedilen ilk SE simülasyon eğrileri arasındaki bir karşılaştırmayı sunmaktadır. Elde edilen SE eğrileri ile referans eğri arasındaki belirgin sapmalar, SE analizlerinde kullanılan malzeme parametrelerindeki yanlışlıklarını göstermektedir. Bu farklılıklar, başlangıç parametreleri kullanılarak malzemenin davranışının gerçek malzeme davranışından ne kadar saptığını göstermektedir. SE simülasyon verileri toplandıktan sonra SmartFIT, bünye modeli parametrelerini optimize etmek için kullanılmaktadır. SmartFIT, simüle edilen eğriler ile referans eğri arasındaki hatayı en aza indirmek amacıyla parametreleri iteratif olarak ayarlamaktadır.



Şekil 4.4. Referans kuvvet-yer değiştirme eğrisinin DoE'ye dayalı ilk FEA sonuçları ile karşılaştırılması

SmartFIT prosedürü ile sadece beş iterasyonda, referans ve SE eğrisi arasındaki hesaplanan hata önceden tanımlanmış tolerans eşiğinin altına ulaşmıştır. Şekil 4.5'te gösterildiği gibi, her iterasyonda hatanın kademeli olarak azalması iyileştirme sürecini göstermektedir. Özellikle ilk iterasyonda hesaplanan 0,021'lik hata değeri son iterasyonda 0,0002'ye düşmüştür. Bu, sadece beş kademedeki neredeyse %99 oranında kayda değer bir

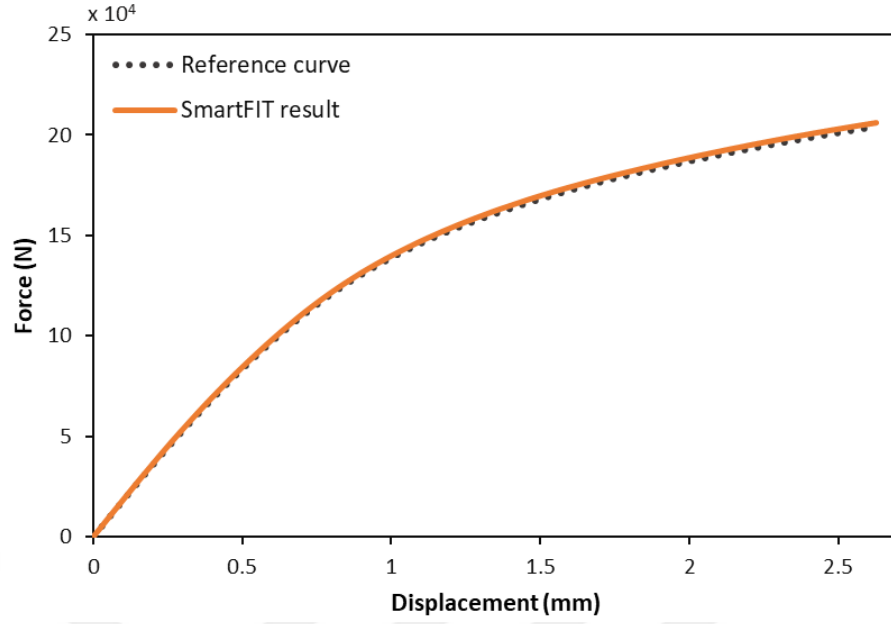
hata azaltımı anlamına gelmektedir. Çizelge 4.2'de sunulan optimize edilmiş parametre değerleri, her parametre için belirlenen alt ve üst sınırlar içinde kalmaktadır. Bu optimal değerler kullanılarak yapılan sonlu elemanlar analizi sonucunda, Şekil 4.6'da gösterildiği gibi, SE çıktısı ile referans eğri arasında büyük bir benzerlik gözlemlenmiştir. Bu benzerlik, optimize edilen parametrelerin gerçek malzeme davranışını etkili bir şekilde temsil etmesini sağlamaktadır.



Şekil 4.5. Optimizasyon süreci boyunca hataya-iterasyon eğrisi.

Çizelge 4.2. Sertleşme modeli için optimum parametre değerleri.

Young Modülü	Poisson Oranı	Akma Gerilme	Gerinim Sertleştirme
216675.4	0.21	615.6	0.291



Şekil 4.6. Referans kuvvet-yer değiştirme eğrisinin SmartFIT optimum değerleri kullanılarak elde edilen sonuçlarla karşılaştırılması

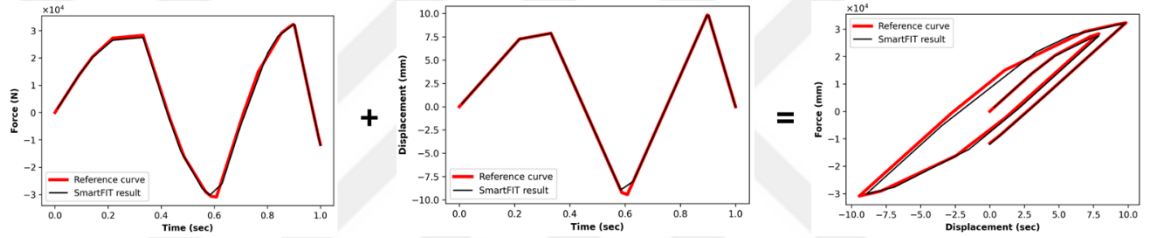
4.1.3. Tekrarlı yükleme altında kiriş-kolon birleşiminde kullanılan malzeme modelinin optimizasyon sonuçları

DoE'deki ilk örnekler model parametrelerinin minimum ve maksimum değerleri kullanılarak elde edildiğinden, ortaya çıkan kuvvet-zaman eğrileri referans eğrisi ile önemli ölçüde farklılık göstermektedir. SmartFIT, deneysel eğriye benzer bir yapısal davranış sergileyen en uygun parametreleri belirlemek için başlatılmıştır. SmartFIT kalibrasyon süreci sırasında, MÖ modeli çeşitli zaman noktalarındaki kuvvet değerlerini tahmin etmek üzere eğitilmiştir. Bu problemde SVR modelinin epsilon değeri 0.0001 ve düzenlilik parametresi 5 olarak seçilmiştir. Diğer hiperparametreler varsayılan ayarlarında bırakılmıştır. Bölüm 3'te açıklanan sonraki adımlar, optimum parametre değerlerini belirlemek için SmartFIT'in yetenekleri kullanılarak gerçekleştirilmiştir. SmartFIT optimizasyon prosedürünün sonunda, SE sonucu ile referans eğri arasındaki hatayı önceden tanımlanmış toleransın altına düşürmek için on dört iterasyon gerçekleştirilmiştir. On dördüncü iterasyonun sonunda elde edilen malzeme modeli için optimal parametre değerleri Çizelge 4.3'te sunulmuştur. Optimum parametreler kullanılarak kiriş-kolon bağlantı modelinin SE analizinden elde edilen kuvvet-zaman ve deplasman-zaman eğrilerinin ilgili referans eğrileri ile uyumlu olduğu gözlemlenmiştir.

Kuvvet-yer deęiřtirme iliřkisi yeniden oluřturulduęunda, řekil 4.7'de gsterildięi gibi referans histerezis davranıřıyla olduka yakın bir sonu vermiřtir. Histerezis davranıřının daha ynetilebilir bileřenlere ayrıřtırılmasına ynelik bu strateji, SmartFIT'in tekrarlı ykleme altında doęrusal olmayan malzeme davranıřını etkili bir řekilde ynetmesini saęlamıřtır.

izelge 4.3. Kiriř-kolon baęlantısı iin optimum Johnson Cook model parametreleri

E (MPa)	ν	A (MPa)	B (MPa)	n
196554.6	0.26	200.9	500	0.42



řekil 4.7. Referans eęrilerin SmartFIT'ten elde edilen eęrilerle karřılařtırılması

4.2. Hibrit SmartFIT Yazılımın Geleneksel Optimizasyon Yntemiyle Karřılařtırılmasının Sonuları

Ařaęıdaki blmlerde hem UEL hem de UMAT modelleri iin geleneksel optimizasyon yntemi ile elde edilen parametre tanımlama sonularının ayrıntılı bir analizi sunulmaktadır. Bu sonular, SmartFIT tarafından retilen ıktılarla karřılařtırılarak her iki yaklařımın verimlilięi ve doęruluęu vurgulanmaktadır. zellikle, her iki yntem iin hesaplama sresi ve simlasyon ile deneysel sonular arasındaki uyumun kalitesi ne ıkarılmaktadır.

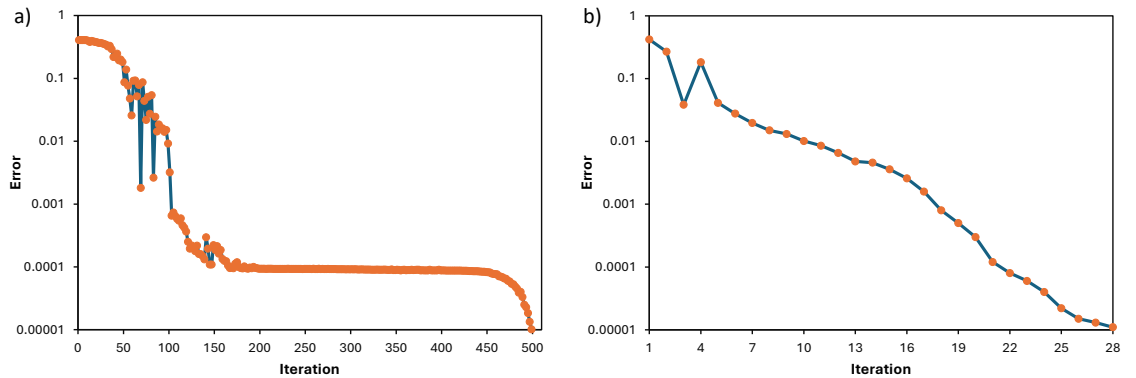
4.2.1. UEL kohezif blge modeli kullanılarak karřılařtırma sonuları

Bu blmde, UEL alt programında uygulanan PPR potansiyel tabanlı kohezif blge modelinin sekiz parametresinin geleneksel optimizasyon yntemi ile tanımlanması ele alınmaktadır. SE simlasyonla referans kuvvet-yer deęiřtirme eęrisi arasındaki hatayı

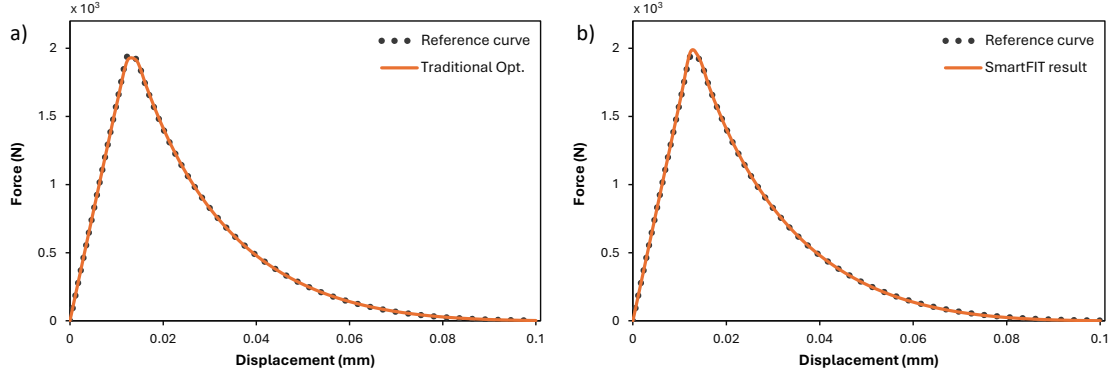
belirtilen tolerans seviyesinin altına indirmek için optimizasyon süreci toplamda 503 fonksiyon değerlendirmesi gerektirmiştir. Her bir fonksiyon değerlendirmesi bir SE simülasyonu gerektirdiği için bu yaklaşım hesaplama açısından oldukça maliyetli olmuştur. Geleneksel optimizasyon yöntemi toplamda 106 dakika sürerek UEL modeli için optimal parametreleri elde etmiştir. Elde edilen kuvvet-yer değiştirme eğrisi, referans eğri ile oldukça iyi bir uyum göstermiştir.

Öte yandan SmartFIT, MÖ modelini eğitmek için DoE'den elde edilen 64 başlangıç SE simülasyonunu gerçekleştirmiştir. Optimizasyon sürecinde ise ek olarak 28 SE simülasyonu yapılmış ve toplamda 92 simülasyon ile süreç tamamlanmıştır. SmartFIT tarafından elde edilen kuvvet-yer değiştirme eğrisi, geleneksel optimizasyon yöntemi ile elde edilen sonuçlarla oldukça yakındır. Ancak SmartFIT bunu sadece 35 dakikada başardı. Özellikle, başlangıç SE simülasyonları 24 dakika ve optimizasyon sürecindeki parametre tanımlama 11 dakika sürmüştür.

Logaritmik ölçekte hata- iterasyon eğrileri kullanılarak her iki optimizasyon yönteminin yakınsama davranışı Şekil 4.8'de gösterilmiştir. Bu logaritmik ölçek, özellikle hataların çok küçük olduğu ilerleyen aşamalarda yapılan kademeli iyileştirmeleri daha görünür hale getirerek optimizasyon süreci hakkında daha iyi bilgi sağlamaktadır. Şekil 4.9, her iki yöntemden elde edilen optimal parametreler kullanılarak oluşturulan kuvvet-yer değiştirme eğrilerini karşılaştırmaktadır. Bu şekillerden de açıkça görüldüğü gibi, her iki yöntem doğruluk açısından benzer sonuçlar üretmesine rağmen, SmartFIT çok daha verimlidir. SmartFIT, geleneksel optimizasyon yöntemine göre yaklaşık üç kat daha hızlı olup, aynı doğruluk seviyesini yakalamak için yaklaşık beş kat daha az SE simülasyonu gerektirmektedir.



Şekil 4.8. a) Geleneksel optimizasyon yöntemi ve b) SmartFIT optimizasyonu için hata-iterasyon eğrisi



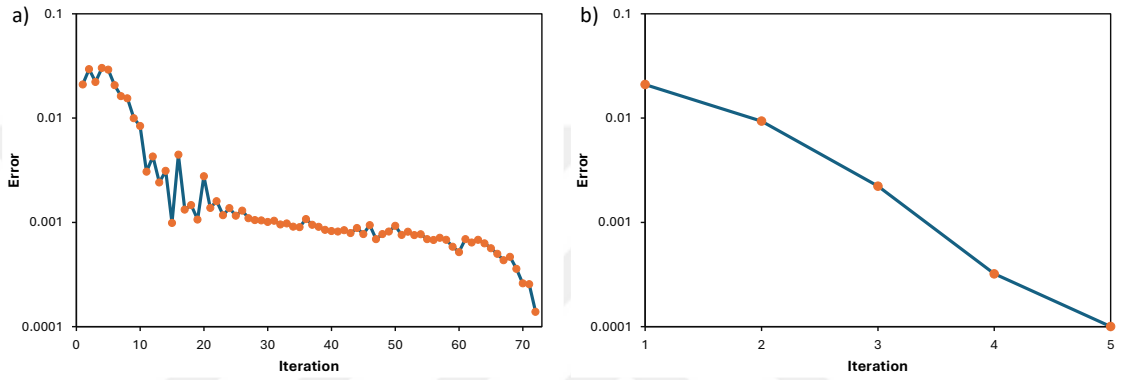
Şekil 4.9. Kuvvet-yer değiştirme referans eğrisinin a) geleneksel optimizasyon ve b) SmartFIT sonucu ile karşılaştırılması

4.2.2. UMAT plastisite modeli kullanılarak karşılaştırma sonuçları

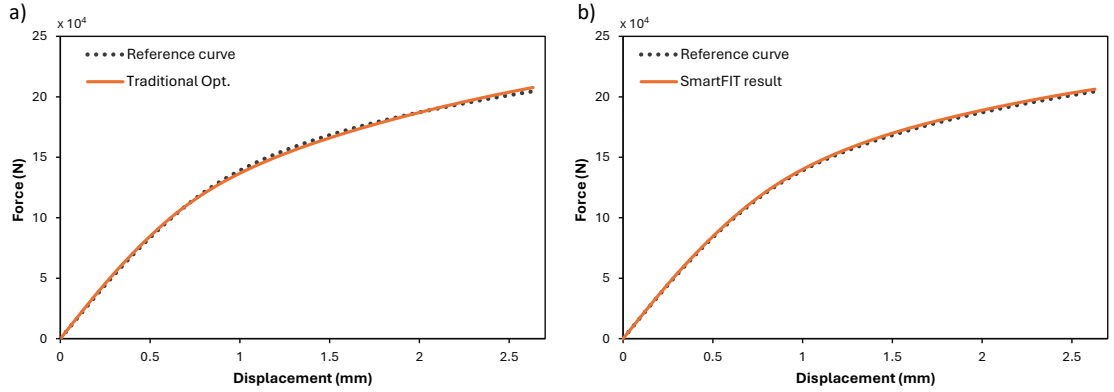
Bu bölümde, UMAT alt programında izotropik güç yasası sertleşme plastisite modelini karakterize eden dört temel parametrenin tanımlanması için geleneksel optimizasyon yöntemi uygulanmıştır. Optimizasyon sürecinde, referans ve simülasyon kuvvet-yer değiştirme eğrileri arasındaki hatayı belirtilen toleransın altına düşürmek için 72 fonksiyon değerlendirmesi yapılmıştır. Geleneksel optimizasyon süreci 52 dakikada optimal bir çözüme ulaşmıştır. Optimal parametre seti belirlendikten sonra bu değerler kullanılarak SE analizi gerçekleştirilmiş ve elde edilen kuvvet-yer değiştirme eğrisi referans eğri ile mükemmel bir uyum göstermiştir.

Aynı parametre tanımlama problemi için SmartFIT toplamda sadece 22 SE simülasyonu gerektirerek daha verimli bir süreç sunmuştur. Bu 22 simülasyondan 17'si MÖ modelini eğitmek için yapılan başlangıç SE analizlerine, kalan 5 simülasyon ise optimizasyon aşamasında gerçekleştirilmiştir. SmartFIT, tüm optimizasyon sürecini sadece 25 dakikada tamamlamıştır. Bu sürenin ilk 19 dakikası başlangıç SE analizleri için, ek 6 dakikası ise parametre tanımlama aşaması için kullanılmıştır.

Şekil 4.10, her iki yöntem için hata-iterasyon eğrilerini göstermektedir. Ayrıca, her bir yöntemde elde edilen optimal parametreler kullanılarak oluşturulan kuvvet-yer değiştirme eğrileri Şekil 4.11’de karşılaştırılmaktadır. Her iki şekilden de görüldüğü üzere, doğruluk açısından nihai sonuçlar her iki yöntem için benzer düzeydedir. Ancak, SmartFIT, geleneksel yöntemin yarısı kadar sürede tamamlanmış ve yalnızca üçte biri kadar SE simülasyonu gerektirmiştir. Bu durum, UMAT modeli için parametre optimizasyonunda SmartFIT’in üstün hesaplama verimliliğini vurgulamaktadır.



Şekil 4.10. a) Geleneksel optimizasyon ve b) SmartFIT optimizasyonu için hataya-iterasyon grafiği

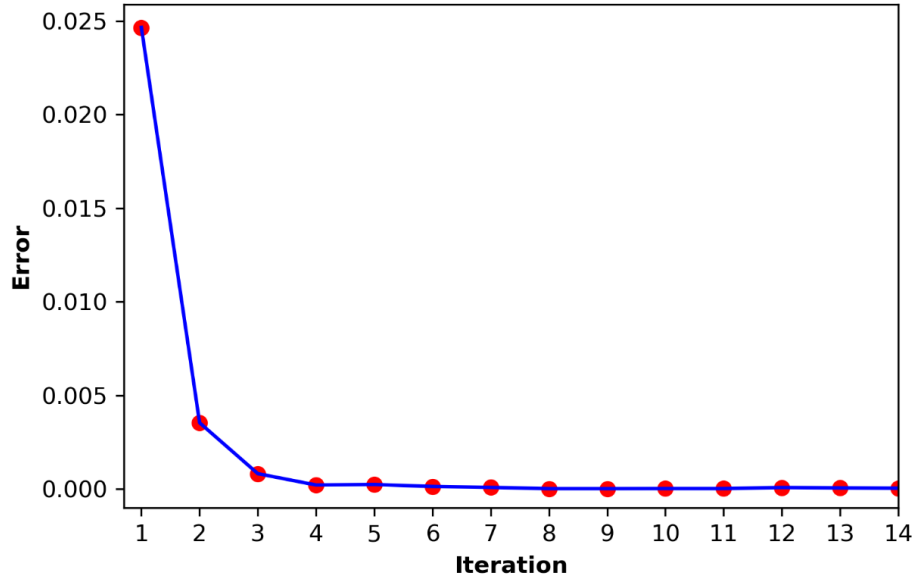


Şekil 4.11. Kuvvet-yer değiştirme referans eğrilerinin a) geleneksel optimizasyon ve b) SmartFIT optimizasyonundan elde edilen sonuçlarla karşılaştırılması

4.3. Yapısal Test Kullanılarak Geliştirilen Veriye Dayalı Malzeme Modelinin Sonuçları

4.3.1. Malzeme modeli kalibrasyon sonuçları

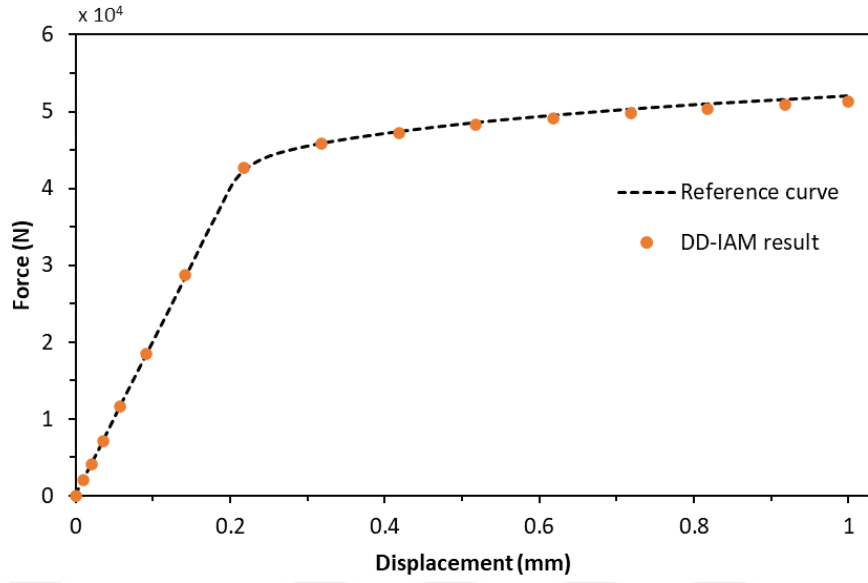
Parametre tanımlama süreci, SE analizi ile deneysel veriler arasındaki hesaplanan hata önceden belirlenmiş tolerans eşiği olan $10e^{-5}$ 'in altına düştüğünde tamamlanmıştır. SmartFIT bu yakınsamaya ulaşmak için toplam on dört SE iterasyonu gerektirmiştir. Her SE yinelemesinde hesaplanan hata Şekil 4.12'da gösterilmiştir. Bu şekil, yineleme sayısının artmasıyla hata değerinde sürekli bir azalma olduğunu açıkça göstermektedir. Bu eğilim, tasarım değişkenlerinin (malzeme parametrelerinin) gerçek değerlerine doğru yakınsadığı anlamına gelmektedir. Optimizasyon sürecinin tamamlanmasının ardından SmartFIT tarafından belirlenen her bir parametre için optimum değerler Çizelge 4.4'te verilmiştir. Bu parametreler, SE analizi gerçekleştirilerek yapısal davranışın doğrulanması amacıyla kullanılmıştır. Simülasyonlardan ve deneysel verilerden elde edilen kuvvet-yer değiştirme tepkileri arasındaki karşılaştırmalar, Şekil 4.13'de gösterildiği gibi yüksek bir korelasyon ortaya koymaktadır.



Şekil 4.12. Optimizasyon iterasyonları sırasında hataya karşı iterasyon eğrisi

Çizelge 4.4. SmartFIT tarafından belirlenen optimum parametreler

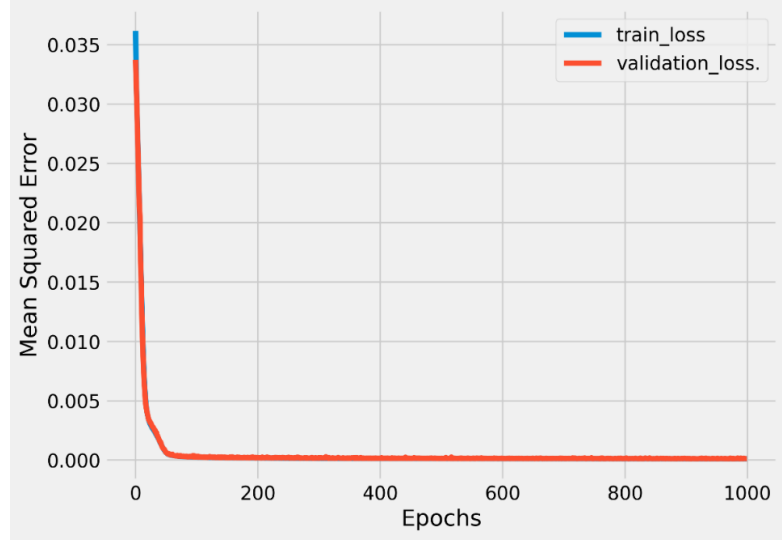
E (MPa)	ν	A (MPa)	B (MPa)	n
229169.4	0.25	543	729	0.36



Şekil 4.13. SE simülasyonu ve referans eğrisi arasındaki kuvvet-yer değiştirme tepkilerinin karşılaştırılması.

4.3.2. DD-ECM'nin öğrenme performansı

Öğrenme aşamasında sinir ağı modelinin eğitim ve doğrulama ortalama karesel hatası (MSE) Şekil 4.14'te gösterilmektedir. Küçük hata değerleri, tahmin edilen ve gerçek değerler birbirine yakın olduğundan daha iyi model performansını işaret etmektedir. Bu şekilde gösterildiği gibi, iterasyonlar ilerledikçe kayıp hızla azalmaktadır. Sonuç olarak, kayıp fonksiyonu 1000 iterasyondan sonra 0.00011'lik hata değerini hesaplamıştır. Sinir ağı modelinde aşırı uyum (overfitting) riskinden önlemek için, global doğrulama kaybındaki (validation loss) herhangi bir önemli artışın izlenmesi tavsiye edilmektedir. Böyle durumlarda, eğitim sırasında dropout katmanlarının eklenmesi ya da erken durdurma (early-stop) geri çağrılarının uygulanması gibi teknikler kullanılabilir. Ancak bu problemde, doğrulama kaybı Şekil 4.14'te de görüldüğü üzere sabit kalmış ve bu nedenle eğitim sürecinde dropout katmanları veya erken durdurma geri çağrıları uygulanmamıştır.



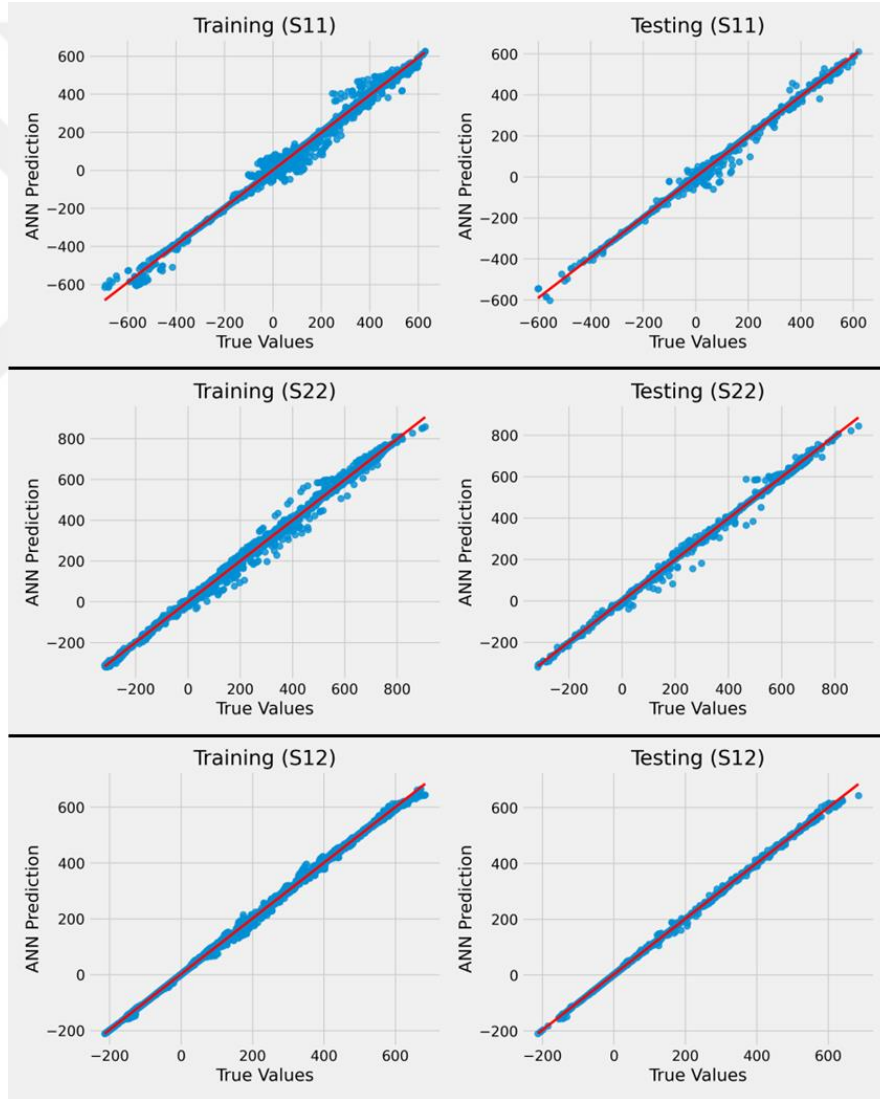
Şekil 4.14. YSA eğitim süreci boyunca kayıp eğrileri

Daha sonra model, eğitim aşamasında görmediği veriler kullanılarak test edilmiştir. Elde edilen test sonuçları, YSA modelinin performansını ve genelleme yeteneklerini göstermektedir. Modelin performansı belirleme katsayısı (R^2), ortalama mutlak hata (MAE) ve kök ortalama kare hata (RMSE) gibi üç farklı ölçüt kullanılarak değerlendirilmiştir. Eğitim aşamasında model, 0.997'lik bir R^2 değeri elde ederek eğitim verilerine iyi bir uyum göstermiştir. Ayrıca u aşamada model, sırasıyla 4.6 ve 10.19 gibi nispeten düşük MAE ve RMSE değerleri elde etmiştir. Bu ölçütler görünmeyen verilerle test edildiğinde bile tutarlı bir şekilde iyiydi. Test aşamasında model 0.996 gibi yüksek bir R^2 değerine ulaşırken, MAE ve RMSE değerleri sırasıyla 4.87 ve 10.93 olarak hesaplanmıştır. Bu sonuçlar, YSA modelinin malzeme davranışlarını doğru bir şekilde tahmin etmedeki güvenilir performansını göstermektedir. Performans metriklerinin değerleri Çizelge 4.5'te sunulmuştur.

Çizelge 4.5. Farklı ölçütlere göre YSA modelinin performansı.

Veri seti	R^2	MAE	RMSE
Eğitim verileri	0.997	4.6	10.19
Test verileri	0.996	4.8	10.93

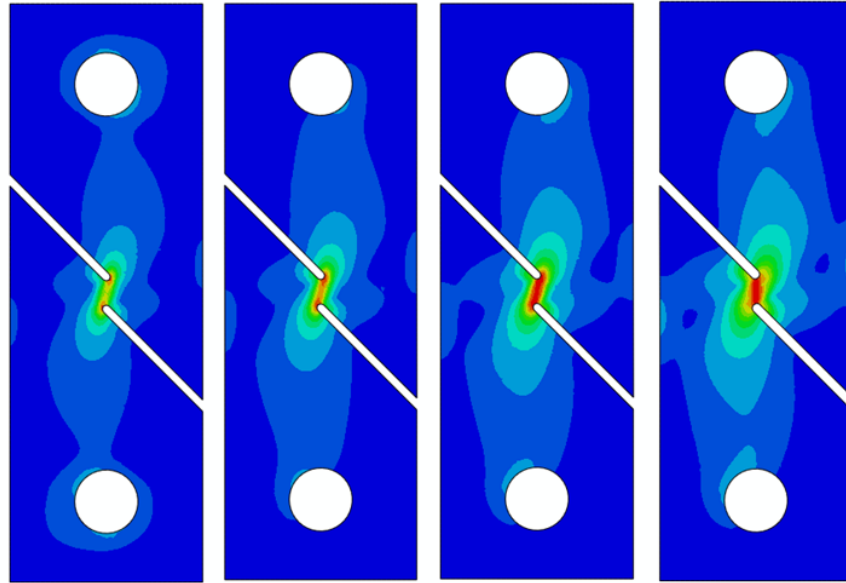
Gerçek ve tahmin edilen gerilmeler (S11, S22 ve S12) için belirleme katsayısı (R^2) diyagramı Şekil 4.15'te verilmiştir. Bu şekil hem eğitim hem de test verisi için R^2 'yi içermektedir. R^2 değerinin 1'e yakın olması, gerçek ve tahmin edilen veriler arasında iyi bir uyum olduğunu göstermektedir. Eğitim ve test aşamalarında S11 gerilmesini tahmin eden YSA modelinden elde edilen R^2 değerleri sırasıyla 0.9941 ve 0.9944'tür. S22 gerilmesi için eğitim ve test aşamalarında elde edilen R^2 değerleri sırasıyla 0.998 ve 0.997'dir. S12 gerilmesi için ise eğitim ve test aşamalarında elde edilen R^2 değerleri 0.999 ve 0.999'dur. Bu sonuçlar, modelin doğru bir şekilde eğitildiğini ve istenilen performansa sahip olduğunu göstermektedir.



Şekil 4.15. Eğitim ve test sürecinde S11, S22 ve S12'nin dağılım grafiği.

4.3.3. DD-ECM kullanılarak SE analiz sonuçları

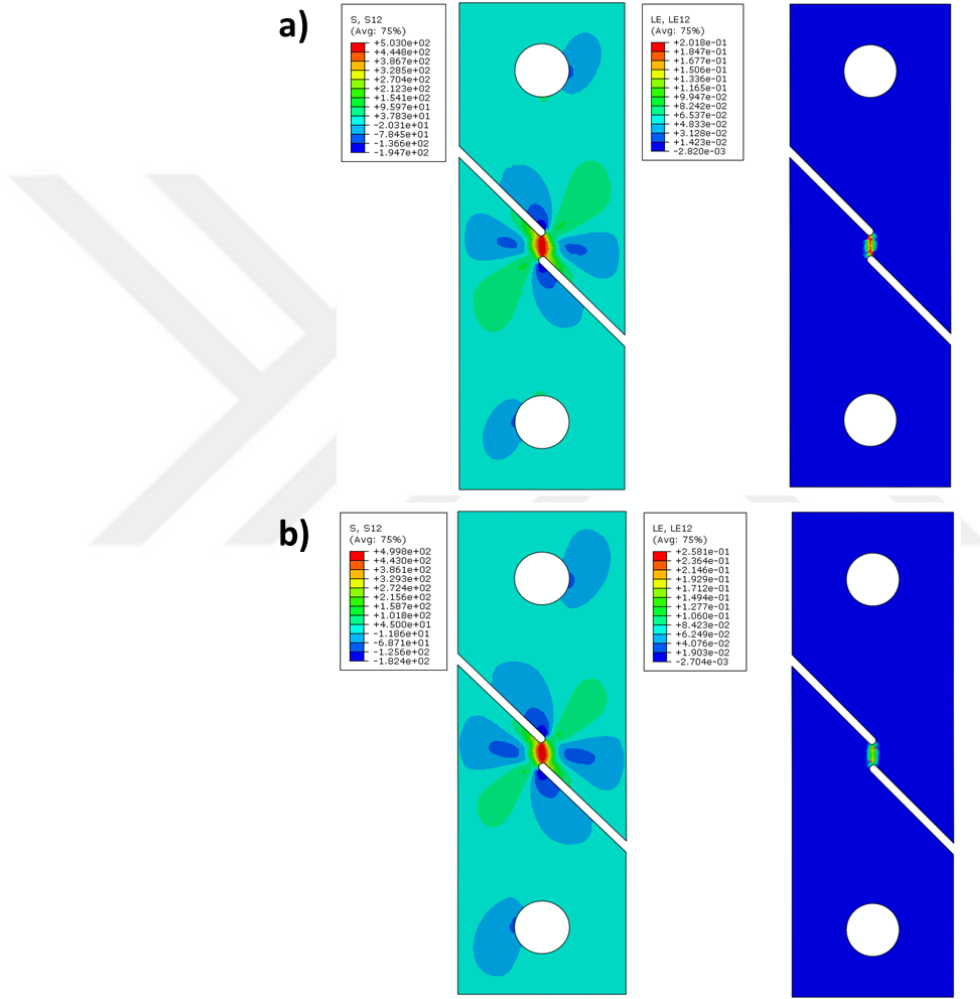
Önerilen metodolojinin simülasyon doğruluğunu değerlendirmek için, Abaqus'ta bir sınır değer probleminin çözümünde DD-ECM entegreli UMAT kullanılmıştır. Bunun için, Bölüm 4.2.1'de anlatılan tek yarıklı kesme testinin SE modeli kullanılmıştır. Plakanın hem üst hem de sıkıştırma bölgelerine 0.2 mm'lik düşey yer değiştirme uygulanarak deplasman kontrollü sonlu elemanlar simülasyonu gerçekleştirilmiştir. Simülasyon sonuçları, gerilme ve gerinimin kesme bölgesinde lokalize olduğunu göstermiştir. Şekil 4.16, dört farklı yer değiştirme seviyesinde ($u_y = 0.002$ mm, 0.028 mm, 0.1 mm ve 0.2 mm) von Mises gerilme konturlarını göstermektedir. Özellikle, plastik gerinimin başlangıcı gerilmelerin yoğunlaştığı bölgede meydana gelmektedir. Uygulanan yük arttıkça karşıt parçalar arasındaki plastik bölge yoğunlaşmaktadır. Sonuç olarak, yüksek gerilme seviyelerine maruz kalan bölgede lokalize noktasal bir desen oluşmaktadır



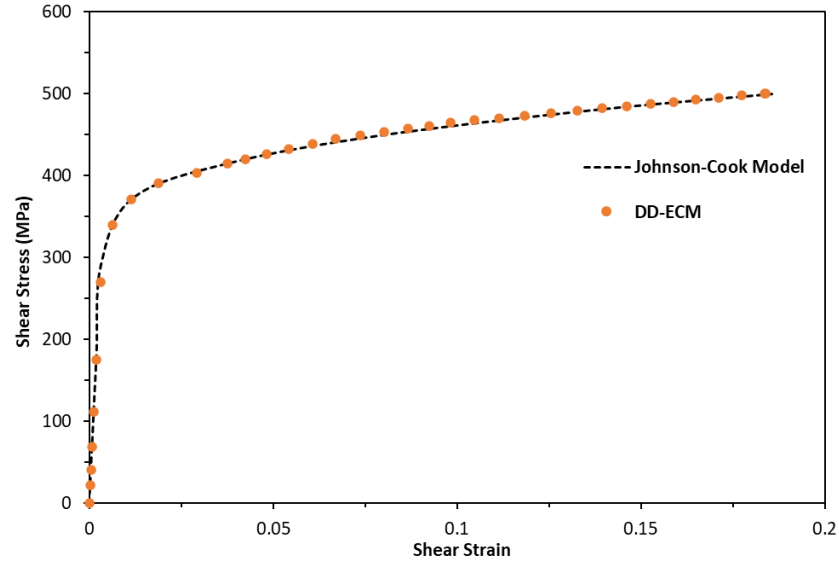
Şekil 4.16. Kesme bölgesindeki gerilim konsantrasyonunun büyümesi

Numunedeki kesme gerilme ve kesme gerinim eğrisi için DD-ECM (üstte) ve Johnson-Cook malzeme modeli (altta) kullanılarak elde edilen kontur çizimleri Şekil 4.17'de sunulmaktadır. Her iki modelin de hem gerilme ve gerinimin mekansal dağılımında hem de bunlara ait maksimum değerlerinde çok az farklılık gösterdiği görülebilir. Maksimum gerilme konsantrasyonuna sahip bölgedeki bir eleman için kesme gerilmesi ve kesme

gerinimin gelişimi Şekil 4.18'de gösterilmiştir. DD-ECM ve Johnson-Cook modelinin benzer davranış sergilediği ve sonuçlarında yüksek düzeyde korelasyon olduğu açıkça görülmektedir. Bu doğrulama, DD-ECM'nin UMAT içinde başarılı bir şekilde uygulandığını teyit etmekte ve bu modelleme çerçevesinin deneysel kuvvet-yer değiştirme verilerini kullanarak malzemenin mekanik davranışını doğru bir şekilde belirleme yeteneğini vurgulamaktadır.



Şekil 4.17. a) DD-ECM ve b) Johnson-Cook modeli kullanılarak üretilen kesme gerilme ve kesme gerinim konturları



Şekil 4.18. Referans modelden ve DD-ECM'den elde edilen kesme gerilme ile kesme gerinim eğrisinin karşılaştırılması

4.4. Sürekli Elyaf Takviyeli Kompozitin Makroskopik Davranışını Tahmin Etmek için Makine Öğrenmesi Algoritmalarının Performans Değerlendirmesi

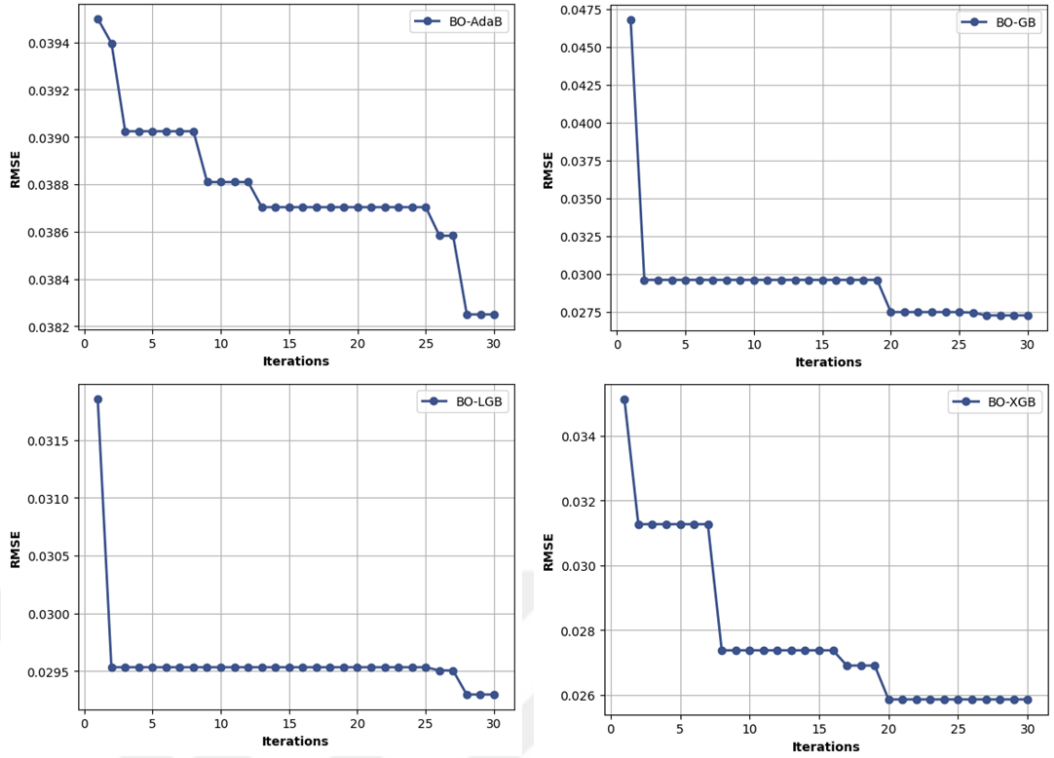
4.4.1 Bayes optimizasyonu ile parametre ayarlama sonuçları

Kompozit RVE'nin homojenleştirilmiş sertlik matrisini tahmin etmek için Bayes optimizasyon (BO) algoritması AdaB, GBR, XGB ve LGB modelleriyle ayrı ayrı entegre edilmiştir. BO'nun boosting modelleriyle bu entegrasyonu, hiperparametrelerin optimizasyonunu kolaylaştırmaktadır. Optimize edilmiş hiperparametreler genellikle varsayılan ayarlara kıyasla tahmin doğruluğunu artırmaktadır. Hiperparametre ayarı için BO, temel tahmin edici (base estimator) olarak Gauss modelini kullanarak 30 ardışık yinelemeyi çalıştıracak şekilde ayarlanmıştır. Bu süreç, temel tahmin ediciyle yaklaştırmadan önce boosting modellerinin 10 ilk değerlendirmesini gerçekleştirmektedir. Boosting modellerinin her bir hiperparametresi için üst ve alt sınırlar Çizelge 4.6'da özetlenmiştir. Model, eğitimden sonra beş kat çapraz doğrulama (5 fold cross validation) ile elde edilen RMSE değerleri ile değerlendirilmiştir. Daha sonra, en düşük çapraz doğrulama RMSE değerine dayalı olarak boosting modelleri için optimum hiperparametreler belirlenmiştir. Şekil 4.19, her bir boosting modeli için optimizasyon sürecinin sonucunu göstermekte ve artan iterasyonlarla RMSE'de kademeli

bir düşüş olduğunu ortaya koymaktadır. Boosting modelleri için belirlenen optimum hiperparametreler Çizelge 4.6'da ayrıntılı olarak verilmiştir.

Çizelge 4.6. Parametre arama uzayı ve optimum değerler

Boosting modeli	Hyperparameter	Alt sınır	Üst limit	Optimal değerler
AdaB	Max. derinlik	3	15	13
	Tahminci sayısı	50	400	340
	Öğrenme oranı	0.1	0.8	0.56
GBR	Max. derinlik	2	8	4
	Tahminci sayısı	100	500	135
	Öğrenme oranı	0.1	1	0.15
XGB	Max. derinlik	3	15	3
	Tahminci sayısı	50	400	393
	Öğrenme oranı	0.01	0.8	0.18
LGB	Tahminci sayısı	50	400	206
	Yaprak sayısı	10	100	10
	Öğrenme oranı	0.1	0.8	0.06



Şekil 4.19. Hiperparametre optimizasyonu sırasında boosting modellerinin RMSE değerleri.

4.4.2 Boosting modellerinin performans değerlendirmesi

Boosting modellerini etkili bir şekilde eğitmek için gereken optimum veri örneği sayısını bir yakınsama çalışması gerçekleştirilerek belirlenmiştir. Bu çalışma için 128, 256 ve 512 örnek içeren veri kümeleri kullanılmıştır. 128 ve 256 örnek üzerinde eğitilen modeller yetersiz uyum (underfitting) belirtileri göstermiş ve daha düşük doğruluk sağlamıştır. Buna karşılık, 512 örnek üzerinde eğitilen modeller daha yüksek R^2 değerleri ve daha iyi performans elde etmiştir. Bu da 512 örneğin modellerin temel ilişkileri yakalaması için yeterli veri sağladığını ve bu problem için uygun bir veri kümesi boyutu olduğunu göstermektedir.

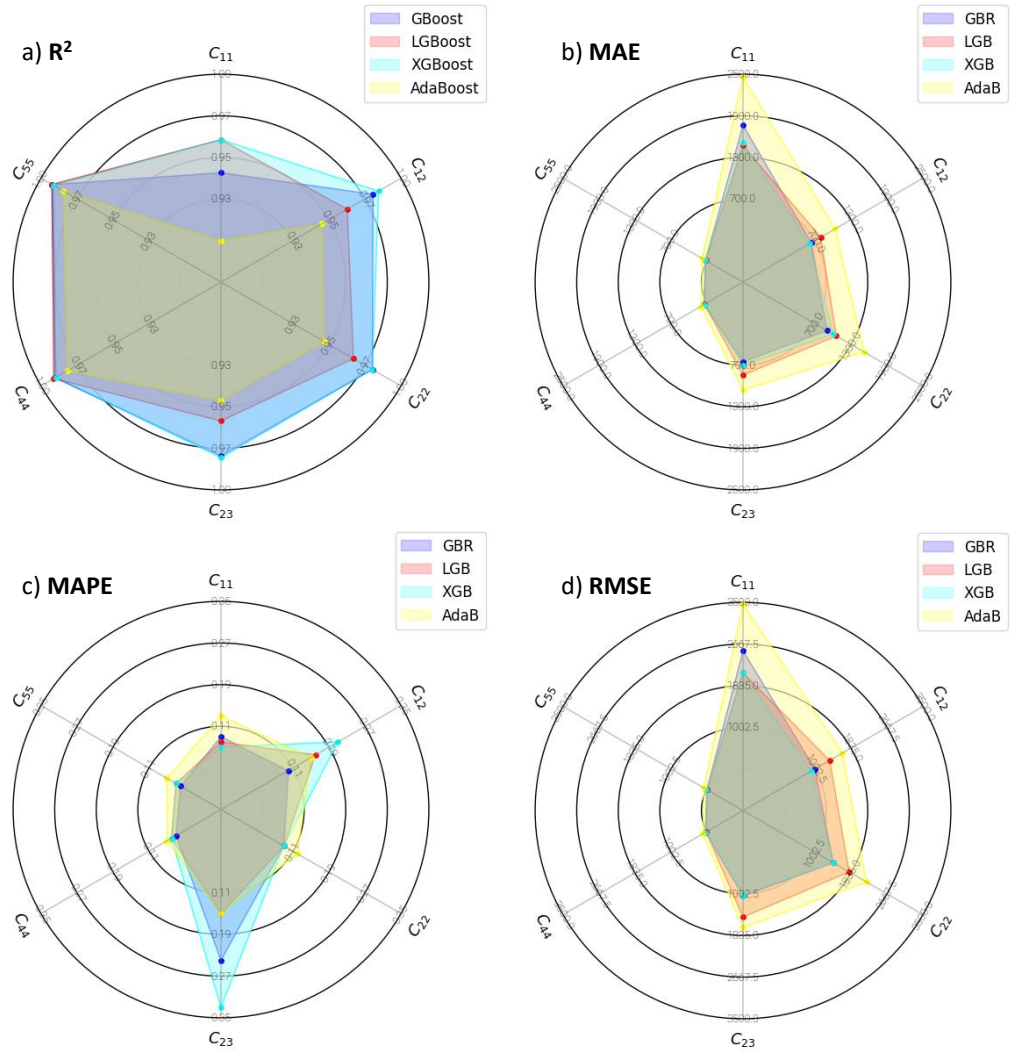
R^2 , MAE, MAPE ve RMSE metrikleri üzerinden eğitim ve test verileri için boosting modellerinin tahmin performansı Çizelge 4.7'de özetlenmiştir. Tüm modeller arasında XGB hem eğitim hem de test veri kümeleri için yaklaşık 0.99 ile en yüksek R^2 değerini elde etmiştir. Bu yüksek R^2 değeri, XGB modelinin verilere çok iyi uyduğunu ve

çıktılardaki varyansın %99'unu açıkladığını göstermektedir. Test aşamasında, XGB modeli sırasıyla 599.6, 0.125 ve 1027.7 ile en düşük MAE, MAPE ve RMSE değerlerini göstermiştir. Bu metrikler XGB modelinin doğruluğunu ve güvenilirliğini göstermektedir. XGB modeli tarafından üretilen tahminler gerçek sonuçlarla yakından eşleşmektedir. Buna karşılık AdaB, bir RVE'nin homojenleştirilmiş rijitlik matrislerini tahmin etmede en düşük performansı sergilemektedir. AdaB'nin R^2 değeri daha düşük, MAE ve RMSE değerleri ise test aşamasındaki tüm boosting modellerinden daha yüksektir. Bu, AdaB modelinin tahminlerinin gerçek verilerle daha az tutarlı olduğunu göstermektedir. GBR ve LGB modelleri AdaB'den daha iyi performans gösterse de XGB'nin performansının gerisinde kalmaktadır. GBR ve LGB yüksek R^2 değerleri elde etse de diğer hata metrikleri (MAE, MAPE, RMSE) XGB'den daha yüksektir.

Çizelge 4.7. Tüm boosting modellerinin performans değerleri

Model	Eğitim aşaması				Test aşaması			
	R^2	MAE	MAPE	RMSE	R^2	MAE	MAPE	RMSE
AdaB	0.999	95.1	0.031	259.58	0.945	1077.9	0.114	1936.0
GBR	0.999	54.6	0.007	91.38	0.977	709.2	0.101	1330.0
XGB	0.999	45.1	0.008	70.09	0.985	599.6	0.125	1027.7
LGB	0.993	255.2	0.05	637.5	0.971	744.4	0.138	1405.9

Şekil 4.20 (a-d), AdaB, GBR, XGB ve LGB modellerini sırasıyla R^2 , MAE, MAPE ve RMSE metrikleri açısından görsel olarak karşılaştırmak için bir radar grafiği sunmaktadır. Bu şekildeki her bir alt grafik, homojenleştirilmiş rijitlik matrisindeki elemanların tahmin edilen ve gerçek değerleri arasındaki karşılaştırmayı gösteren bir hata metriğini vurgulamaktadır. Şekil 7 ayrıntılı olarak incelendiğinde, XGB'nin değerlendirilen tüm metriklerde diğer boosting modellerinden sürekli olarak daha iyi performans gösterdiği ve üstün tahmin doğruluğuna işaret ettiği görülmektedir. İlginç bir şekilde, GBR performans açısından XGB'yi yakından takip ederek, bir RVE'nin homojenleştirilmiş rijitlik matrisini verimli bir şekilde tahmin etmede karşılaştırılabilir sağlamlık göstermektedir.



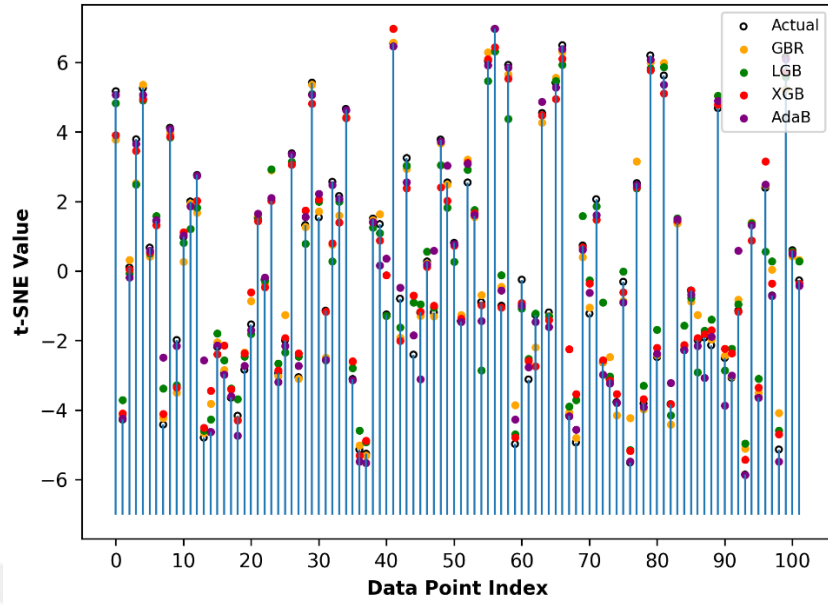
Şekil 4.20. R^2 , MAE, MAPE ve RMSE değerlerini karşılaştıran tüm boosting modellerinin radar grafikleri

En iyi performans gösteren model olan XGB, daha önce görülmemiş veriler üzerinde tahminler yapmak için kullanılmış ve bu tahminler DIGIMAT'tan elde edilen RVE analizi sonuçlarıyla karşılaştırılmıştır. Çizelge 4.8, Digimat'tan elde edilen rijitlik matrisi elemanlarının tahmin edilen değerlerle karşılaştırılmasını sunmaktadır. Sonuçlar, XGB modeli tarafından üretilen tahmini değerler ile farklı malzeme konfigürasyonlarındaki gerçek değerler arasında çok yakın bir uyum olduğunu göstermektedir. Her bir gerçek ve tahmin edilen rijitlik matrisi elemanı arasındaki fark tüm RVE örnekleri için %1'den azdır. Bu, XGB modelinin malzeme rijitlik matrisi için doğru tahminler yapmadaki etkinliğini göstermektedir.

Çizelge 4.8. Digimat ve XGB tahmininden elde edilen rijitlik matrisinin elemanları.

E_M (MPa)	ν_M	E_F (MPa)	ν_F	V_f (%)		C_{11} (MPa)	C_{12} (MPa)	C_{22} (MPa)	C_{23} (MPa)	C_{44} (MPa)	C_{55} (MPa)
13000	0.32	32200	0.29	0.25	Gerçek	23000	8850	21400	9210	6210	6090
					Tahmin	23041	8797	21381	9180	6196	6081
3770	0.426	69200	0.249	0.22	Gerçek	24800	8580	13100	9270	1980	1910
					Tahmin	24753	8541	12966	9243	1992	1914
2440	0.374	23900	0.34	0.27	Gerçek	10900	3520	6180	3519	1400	1330
					Tahmin	10933	3461	6179	3550	1391	1308
7220	0.432	77300	0.266	0.23	Gerçek	37200	17600	26100	18900	3740	3630
					Tahmin	37182	17475	26126	18873	3731	3619

Van der Maaten ve Hinton (2008) tarafından tanıtılan t-SNE analizi, boosting modelleri tarafından tahmin edilen yüksek boyutlu veri kümelerini görselleştirmek için kullanılan bir araçtır. Öncelikle veri varyansını korumaya odaklanan PCA'nın aksine, t-SNE daha düşük boyutlu bir uzayda veri noktaları arasındaki ilişkileri korumaktadır. Bu özellik, t-SNE'yi karmaşık çok boyutlu verileri iki boyutlu bir grafik üzerinde görselleştirmek için ideal hale getirmektedir. Şekil 4.21'de test veri setindeki çeşitli endekslerde gerçek ve tahmin edilen verilerin t-SNE dağılım grafiği sunulmaktadır. Grafikteki boosting modellerine ait t-SNE değerleri, yüksek boyutlu tahmin verilerin t-SNE algoritması kullanılarak iki boyutlu uzaya indirgenmesiyle elde edilmiştir. Grafikte, tahmin edilen t-SNE değerlerinin endekslerin çoğu için gerçek değerler etrafında yakın bir şekilde kümелendiği gözlemlenebilir. Bu yakınlık, boosting modellerinin gerçek verilerin altındaki ilişkileri etkili bir şekilde yakaladığını ve veri setindeki karmaşık örüntüleri temsil etme kabiliyetlerini gösterdiğini ortaya koymaktadır.



Şekil 4.21. Tüm boosting modelleri için gerçek ve tahmin t-SNE değerlerinin karşılaştırılması.

4.5. Kısa Elyaf Takviyeli Polimerlerin Elastoplastik Davranışını Tahmin Etmek için Eğitilmiş Makine Öğrenimi Modellerinin Performans Değerlendirmesi

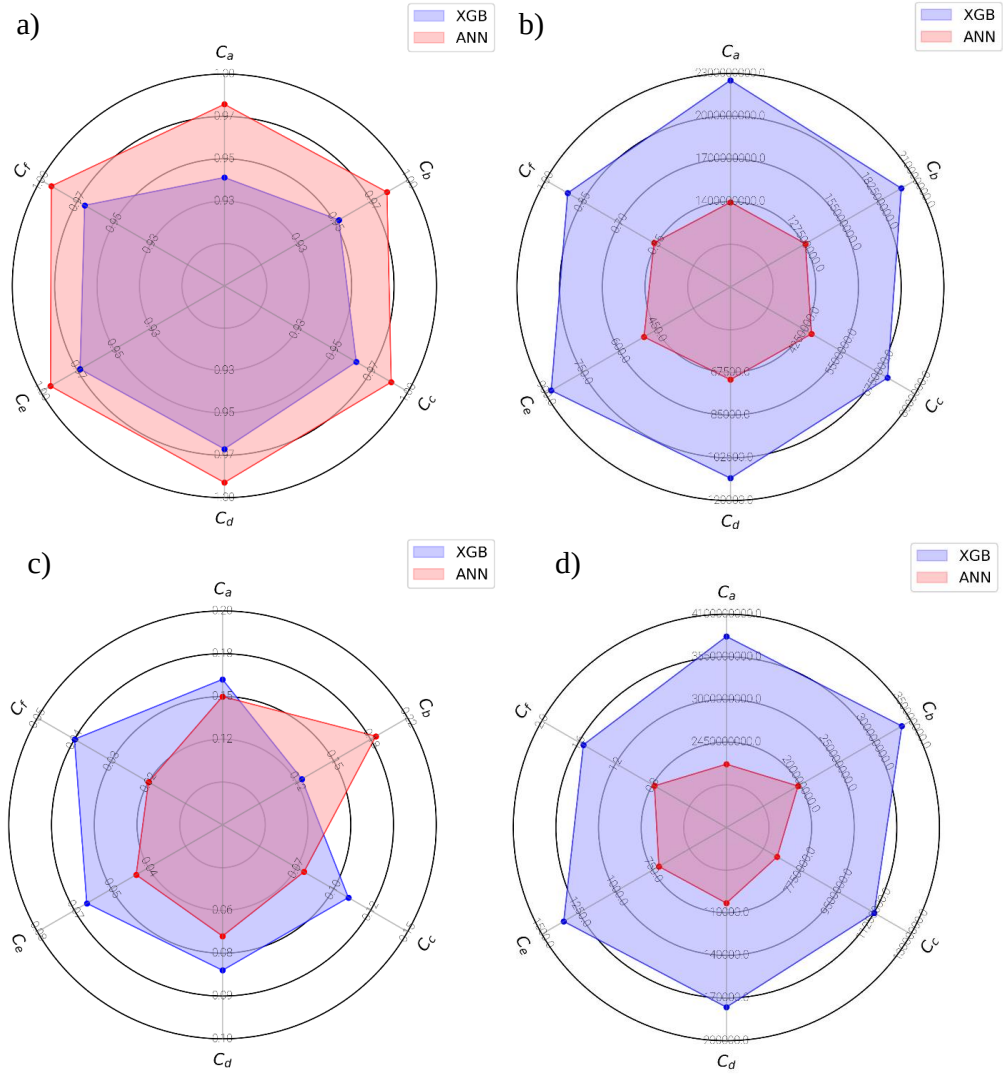
Bu alt bölümde, optimum hiperparametreler kullanılarak eğitilen XGB ve YSA modelinin performansı hem eğitim hem de test veri kümeleri üzerinde değerlendirilmektedir. Buradaki amaç, cam elyaf takviyeli polipropilen kompozit malzemelerin doğrusal olmayan davranışını tahmin etmede bu MÖ modellerin doğruluğunu ve genelleme yeteneklerini değerlendirmektir. Modellerin performansı R^2 , MAE, MAPE ve RMSE olmak üzere dört istatistiksel metrik kullanılarak değerlendirilmiştir. Çizelge 4.9, eğitim ve test setlerinde her iki MÖ modeli için değerlendirme metriklerini sunmaktadır. Bu çizelgeden YSA'nın her bir değerlendirme metrikte güçlü performans gösterdiği ve daha iyi genelleme kabiliyetine sahip olduğu gözlemlenebilir. Buna karşılık, XGB'nin test verilerinde daha düşük R^2 ve daha yüksek MAE, MAPE, RMSE değerleriyle gösterildiği gibi aşırı uyum (overfitting) sergilemektedir.

Çizelge 4.9. Farklı istatistiksel metriklerle göre modellerin performansı

Model	Eğitim aşaması	Test aşaması
-------	----------------	--------------

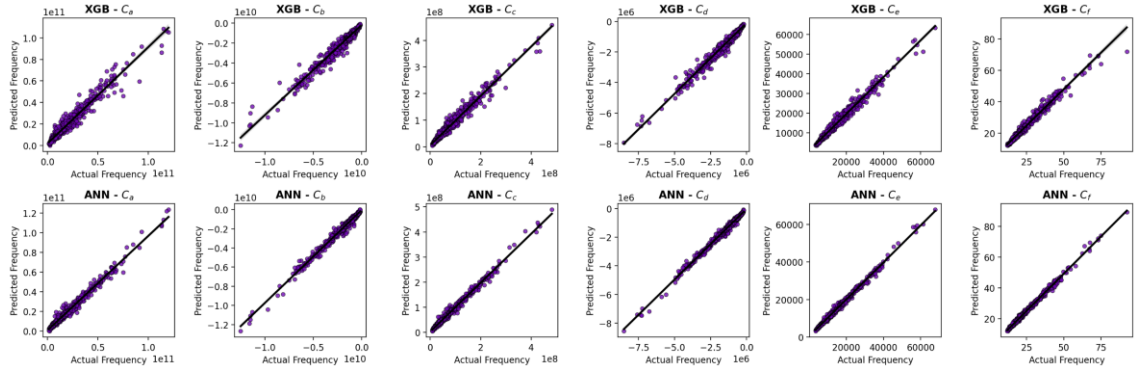
	R^2	MAE	MAPE	RMSE	R^2	MAE	MAPE	RMSE
XGB	0.999	38935180	0.013	127550013	0.962	409550872	0.096	1562067438
YSA	0.997	140348130	0.049	406386218	0.989	254506585	0.090	887571275

XGB ve YSA modellerinin farklı performans metrikleri üzerinde bütünsel (holistic) bir karşılaştırması Şekil 4.22 (a-d)'de radar grafikleri kullanılarak gösterilmiştir. Bu grafiklerde, daha küçük bir kapalı alan daha iyi model performansını temsil etmektedir. Bu şekillerden, YSA modelinin çevrelediği alanın dört metriğin hepsinde XGB'den daha küçük olduğu açıkça görülmektedir. Bu da YSA modelinin beşinci dereceden polinom fonksiyonunun katsayılarına ilişkin daha doğru tahminler sunduğunu göstermektedir. Dolayısıyla, YSA tahmin doğruluğunda XGB'den daha iyi performans gösterdiği anlaşılmaktadır.



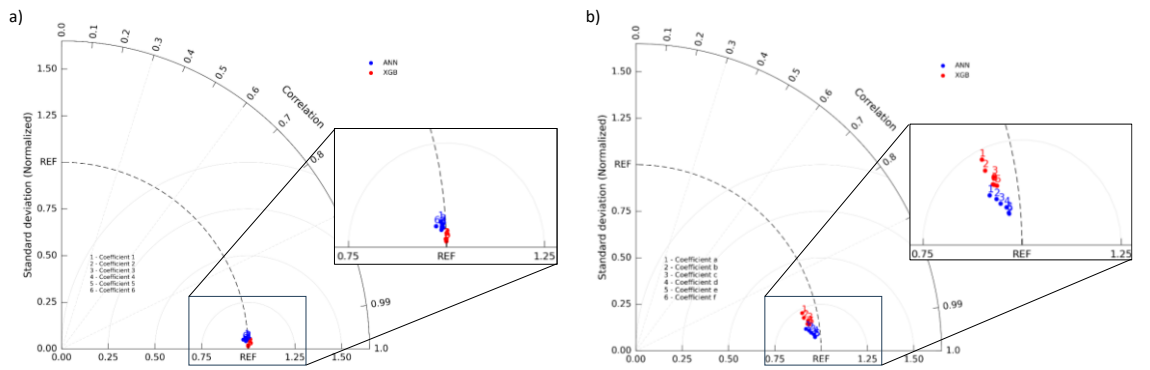
Şekil 4.22. MÖ modellerin a) R^2 , b) MAE, c) MAPE ve d) RMSE değerlerini karşılaştıran radar grafikleri

Beşinci dereceden polinom denkleminin her bir katsayısı için dağılım grafikleri Şekil 4.23'te verilmiştir. Bu şekil, gerçek ve tahmin edilen değerlerin birbirlerinden ne kadar saptığını görsel olarak göstermektedir. YSA modeli için, çoğu veri noktasının polinom denkleminin tüm katsayılarında 45 derecelik diyagonal çizgiye yakın olduğu görülebilir. Bu, tahmin edilen ve gerçek değerlerin birbiriyle iyi bir uyum içinde olduğu anlamına gelmektedir. Dolayısıyla, YSA modeli test verileri üzerinde katsayıları çok iyi bir doğrulukla tahmin etmiştir. Bununla birlikte, XGB tarafından sergilenen veri noktalarında önemli bir dağılım vardır. Bu, XGB tarafından yapılan tahminlerin altı katsayının tümü için gerçek değerlerinden büyük ölçüde saptığı anlamına gelmektedir.



Şekil 4.23. Polinom denkleminin altı katsayısı için XGB (üst sıra) ve YSA (alt sıra) modellerinin dağılım grafikleri

Taylor diyagramı, korelasyon katsayısı ve standart sapma gibi metrikleri kullanarak makine öğrenimi modellerini değerlendirmek için etkili bir araçtır. Şekil 4.24'te hem eğitim hem de test veri kümeleri için XGB ve YSA modelinin Taylor diyagramları gösterilmektedir. Eğitim verilerinde (Şekil 4.24a), tüm modeller referans noktasına yakın bir şekilde kümelenmiştir, bu da düşük standart sapmalar ve 1'e yakın korelasyon değerleri ile yüksek doğruluğa işaret etmektedir. Test verilerinde (Şekil 4.24b), XGB biraz daha yüksek standart sapmalar ve daha düşük korelasyonlar göstererek hafif bir aşırı uyuma işaret etmektedir. Bununla birlikte, YSA'nın tahmin ettiği katsayılar referans noktasına yakın kalarak güçlü genelleme ve yüksek doğruluk sergilemektedir.



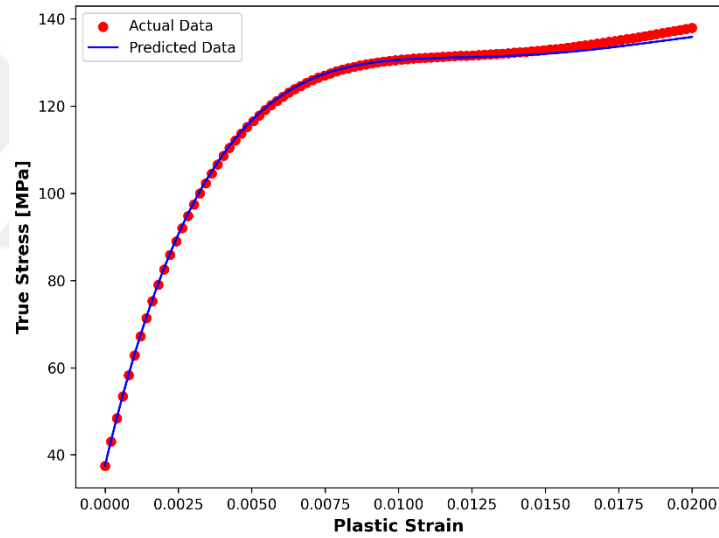
Şekil 4.24. a) Eğitim ve b) test veri kümesi için XGB ve YSA modellerin Taylor diyagramları.

YSA modelinin yüksek doğruluğu ve sağlam performansı nedeniyle, cam elyaf takviyeli polipropilen kompozitin doğrusal olmayan analizini gerçekleştirmek için kullanılmıştır.

Bu amaçla, Çizelge 4.10'da verilen özelliklere sahip kompozit malzeme, bir polinom fonksiyonunun katsayılarını tahmin etmek için YSA modelinin girdisi olarak kullanılmıştır. YSA modeli tarafından tahmin edilen katsayılar, homojenleştirilmiş elastoplastik gerilme-gerinim eğrisini temsil etmek üzere yeniden yapılandırılmıştır. Şekil 4.25'te gösterildiği gibi tahmin edilen gerilme-gerinim eğrisi digimat sonuçlarıyla karşılaştırıldığında çok iyi bir uyum sağlamıştır. Bu sonuç, YSA modelinin doğruluğunu ve güvenilirliğini daha da kanıtlamaktadır.

Çizelge 4.10. Cam elyaf takviyeli polipropilen kompozitin malzeme parametreleri

E_M	ν_M	E_F	ν_F	V_f	λ	a_{11}	a_{22}	a_{33}
1500	0.42	72000	0.21	0.25	0.25	0.333	0.333	0.333

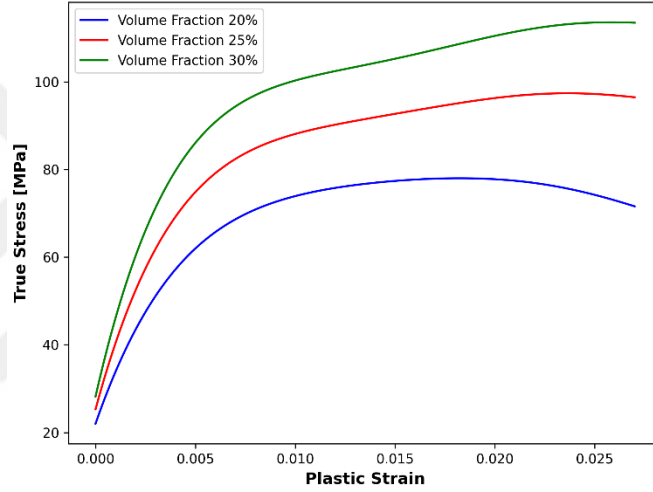


Şekil 4.25. Digimat ve YSA'dan elde edilen gerilme-gerinim eğrisinin karşılaştırılması

YSA tarafından tahmin edilen gerilme-gerinim eğrisinin doğrulanmasının ardından, YSA modeli kullanılarak hacim oranı ve en-boy oranının elasto-plastik davranış üzerindeki etkileri ile ilgili parametrik bir çalışma yapılmıştır. Parametrik çalışmanın amacı iki yönlüdür. Birincisi, YSA modelinin sağlamlığını kontrol etmektir. İkincisi, kompozit malzemenin bileşen parametrelerinin değişimi nedeniyle mukavemet özelliklerindeki değişiklikleri anlamaktır. Bir cam elyaf takviyeli polipropilen kompozitin tüm yöneten

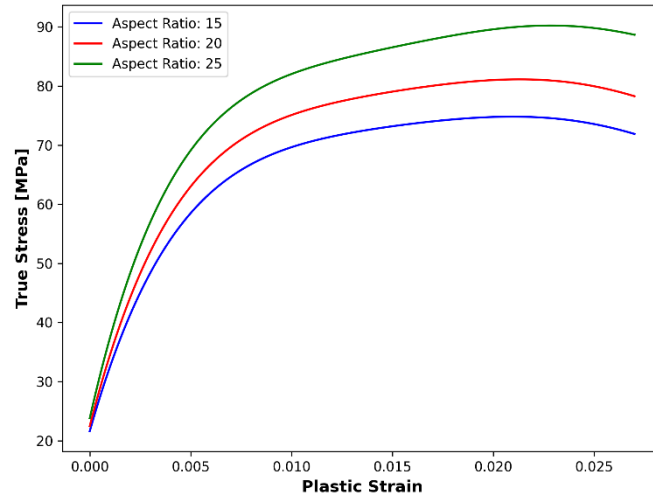
parametreleri arasında, hacim oranı mukavemet özelliklerine önemli ölçüde katkıda bulunur.

Bu çalışmada, Şekil 4.26'da gösterildiği gibi, farklı hacim oranlarında YSA'dan elde edilen gerilme-gerinim eğrilerinin değişimleri incelenmiştir. Hacim oranları %20, %25 ve %30 olarak alınmıştır, çünkü bu değerler SFRP literatüründe yaygın olarak bulunmaktadır. Şekil 4.26'da hacim oranının artmasıyla birlikte malzemenin elastik rijitliğinin, akma gerilmesinin ve nihai mukavemetinin önemli ölçüde arttığı görülmektedir.



Şekil 4.26. Farklı hacim oranları için YSA tarafından tahmin edilen gerilme-gerinim eğrileri

Cam elyaf takviyeli polipropilen kompozit malzemenin bir diğer belirgin parametresi ise elyaf en-boy oranıdır. Bu malzemeler, daha küçük en-boy oranlarına sahip liflerle partiküllü kompozitler gibi davranırken, bir yönde aşırı en-boy oranlarına sahip liflerle sürekli kompozitler gibi davranmaktadır. Bu çalışmada, cam elyaf takviyeli polipropilen kompozitin 15, 20 ve 25 gibi yaygın olarak kullanılan en-boy oranlarının değişimi ile elastoplastik tepkisi Şekil 4.27'de gösterilmiştir. Sonuçlar, daha küçük gerinimlerde, gerilme-gerinim eğrilerinin elastik modüllerde önemli bir değişiklik göstermediğini ortaya koymaktadır. Ancak, akma noktası en-boy oranındaki artışla birlikte yükselmektedir. Ayrıca gerilme- gerinim eğrilerinin plastik rejimlerinde nihai mukavemetinin önemli ölçüde arttığı anlaşılmaktadır.



Şekil 4.27. Farklı en-boy oranları için YSA tarafından tahmin edilen gerilme-gerinim eğrileri

4.6. Erozyona Dayanıklı Otoyol Kenar Taşları için Geliştirilen YSA Tabanlı Değerlendirme Sisteminin Sonuçları

YSA eğitimi başlangıçta 1000 iterasyon için ayarlanmıştır, ancak 300 iterasyondan sonra kayıp değerinde çok az iyileşme olduğu gözlemlenmiştir. Sonuç olarak, öğrenme ve doğrulama çalışmaları boyunca model 300 epok için eğitilmiştir. En iyi performans gösteren YSA modeli, iki girdi parametresi kombinasyonu, farklı gizli katman nöronları ve iki farklı doğrulama yöntemi ile denemeler yapıldıktan sonra belirlenmiştir. Çizelge 4.11'de çeşitli modeller ve doğrulama performansları hakkında bilgi verilmektedir.

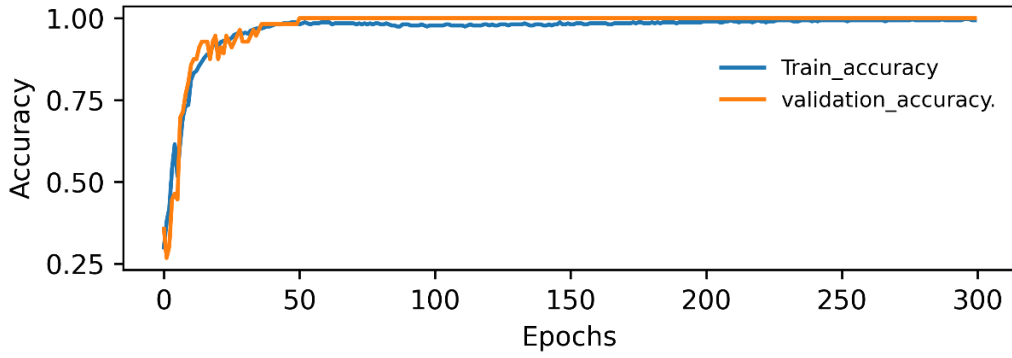
Çizelge 4.11. Farklı parametrelere dayalı YSA modeli eğitimi.

Girdi parametreleri	Gizli katman nöronları	Epok sayısı	Hold-out doğrulama		k-Fold doğrulama	
			Eğitim doğruluğu (%)	Test doğruluğu (%)	Eğitim doğruluğu (%)	Test doğruluğu (%)
D ₁₀ , D ₃₀ , D ₆₀	3	32	63.4	66.0	68.0	67.1
	5	64	95.0	92.8	97.5	97.3
	7	128	98.4	98.2	98.7	98.3
	8	300	99.6	100.0	99.0	99.0

	3	32	78.5	71.4	65.3	65.7
$D_{10}, D_{30}, D_{60},$	5	64	96.8	96.4	95.8	95.1
C_u, C_c	7	128	98.4	98.2	98.5	97.5
	8	300	99.6	98.2	99.3	99.4

Çizelge 4.11’de görüldüğü üzere girdi katmanına C_u ve C_c parametreleri dahil edildiğinde doğruluk değerlerinde çok fazla fark oluşmamaktadır. Bu nedenle, YSA modelinin boyutunu ve ilgili hesaplama süresini azaltmak için, üç değişkenli ilk kombinasyondaki giriş parametreleri (D_{10}, D_{30}, D_{60}) seçilmiştir. Hold-out doğrulaması ve k-Fold çapraz doğrulama kullanılarak elde edilen doğruluk değerleri küçük bir farklılık göstermiştir. Bu farklıklar Hold-out doğrulaması özellikle veri küçükse varyansa karşı hassastır. Bu fark, eğitim verileri küçük olduğunda Hold-out doğrulamasının değişkenliğe duyarlı olmasından kaynaklanmaktadır. Bu nedenle, k-Fold çapraz doğrulama, aşırı uyumu daha iyi tespit etmesi nedeniyle modelin performansını değerlendirmek için doğru bir araç olarak kabul edilmiştir. Farklı gizli katman nöronları ve epokların bir kombinasyonu kullanılarak çeşitli YSA modelleri eğitilmiştir. Başlangıçta, gizli katmanda üç nöron bulunan bir model üzerinde eğitime başlanmış ve 32 epok için eğitilmiştir. Bu model kullanılarak yaklaşık %67’lik bir doğruluk elde edilmiştir. Nöron ve epok sayısı arttıkça modelin performansının arttığı gözlemlenmiştir. Gizli katmanda sekiz nöron bulunan ve 300 epokta eğitilen model, tüm modeller arasında en iyi performansı göstermiştir.

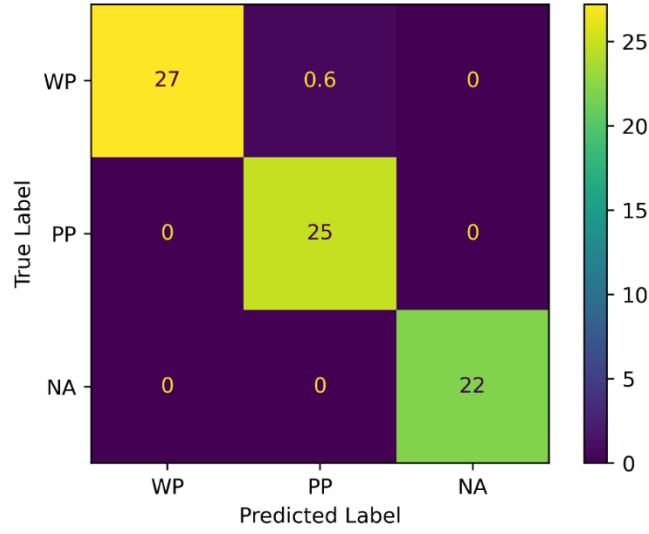
Dolayısıyla, en iyi performans gösteren YSA modelinin mimarisi üç giriş parametresine (D_{10}, D_{30}, D_{60}) sahip bir giriş katmanı, sekiz nörona sahip bir gizli katman ve son olarak üç çıkışa sahip bir çıkış katmanından oluşmuştur. Bu YSA modelinin doğruluğu hem eğitim hem de test verilerinde %99’a ulaşarak modelin aşırı uyumdan etkilenmediğini göstermektedir. Sonuç olarak, modelin doğruluğundaki genel iyileşme ilk modele göre %48 olarak kaydedilmiştir. Bu eğitilmiş YSA modeli ile elek analizinden elde edilen D_{10}, D_{30} ve D_{60} değerlerine dayanarak taşların erozyon direnci %99 doğrulukla tahmin edilebilmektedir. Epok sayısı arttıkça modelin doğruluğundaki iyileşme Şekil 4.28’de gösterilmektedir.



Şekil 4.28. Eğitim sırasında YSA modelinin tahmin doğruluğundaki iyileşme.

4.6.1. Eğitilmiş YSA modelinin performans değerlendirmesi

Doğrulama veri kümesi kullanılarak eğitilen YSA modelinin karışıklık matrisi Şekil 4.29'da gösterilmektedir. Bu matris, gerçek hedef değerleri YSA modeli tarafından tahmin edilenlerle karşılaştırmakta ve sınıflandırma modelinin ne kadar iyi çalıştığına ve ne tür hataların mevcut olduğuna dair bütünsel bir görünüm sunmaktadır. Ana köşegen hücreler (sol üstten sağ alta) doğru tahmin edilen çıktıların sayısını temsil ederken, köşegen olmayan hücreler yanlış tahmin edilen çıktıların sayısını temsil etmektedir. Şekil 4.29'da görüldüğü gibi köşegen dışı değerlerin büyük çoğunluğu sıfır olup, bu da YSA modelinin mükemmel sınıflandırma yeteneklerine sahip olduğunu göstermektedir. Doğrulama veri setindeki 75 örnekten, köşegende gösterildiği gibi 74 ($27 + 25 + 22$) doğru tahmin yapılmıştır. Birinci satır ve ikinci sütunda yer alan hücre, 0.6 (veya 1) örneğin gerçekte WP sınıfına ait olmasına rağmen yanlışlıkla PP sınıfına ait olarak tahmin edildiğini göstermektedir. YSA modeli, PP ve NA sınıfı ile ilgili diğer örnekleri doğru bir şekilde tahmin etmiştir.



Şekil 4.29. Doğrulama veri seti kullanılarak elde edilen karışıklık matrisi.

YSA modelinin performansı, kesinlik (precision), geri çağırma (recall), F1-skoru ve genel doğruluk (overall accuracy) gibi değerlendirme metrikleri kullanılarak hesaplanmıştır. Hesaplanan bu metriklerin değerleri Çizelge 4.12’de sunulmaktadır.

Çizelge 4.12. Karışıklık matrisinin çeşitli performans metrikleri kullanılarak değerlendirilmesi

Sınıf	Performans metrikler			Genel doğruluk
	Kesinlik	Geri çağırma	F1-skoru	
WP	$\frac{27}{27 + 0} = 1$	$\frac{27}{27 + 1} = 0.96$	0.98	99%
PP	$\frac{25}{25 + 1} = 0.96$	$\frac{25}{25 + 0} = 1$	0.98	
NA	$\frac{22}{22 + 0} = 1$	$\frac{22}{22 + 0} = 1$	1	

WP, PP ve NA sınıfları için kesinlik metrikleri sırasıyla 1, 0.96 ve 1 olarak belirlenmiştir. Bu, YSA modelinin WP ve NA sınıfları için örneklerin %100’ünü doğru tahmin ettiğini, PP sınıfı için ise %96 doğruluk elde ettiğini göstermektedir. WP, PP ve NA sınıfları için geri çağırma metrikleri sırasıyla 0.96, 1 ve 1 olarak belirlenmiştir. Bu, WP sınıfı için

pozitif durumların %96'sının model tarafından doğru tahmin edildiği anlamına gelirken, PP ve NA için tüm pozitif durumların doğru tahmin edildiğini ve mükemmel bir geri çağırma olduğunu göstermektedir. WP, PP ve NA sınıfları için F1 skorları sırasıyla 0.98, 0.98 ve 1 olarak belirlenmiştir. WP ve PP için 0.98'lik bir F1 skoru, modelin hassasiyet ve geri çağırma arasında iyi bir denge sağladığı anlamına geliyor. Ayrıca, NA için F1 skorunun 1 olması, bu sınıf için mükemmel hassasiyet ve geri çağırma göstermektedir. Son olarak, YSA modelinin genel doğruluğu %99 olarak hesaplanmıştır. Bu, tüm tahminlerin %99'unun doğru olduğunu teyit etmektedir.

4.7. Çift Yönlü Fonksiyonel Derecelendirilmiş Nano Kiriş'in Doğrusal Olmayan Stabilite Davranışını Tahmin Eden Ensemble Makine Öğrenimi Algoritmalarının Değerlendirilmesi.

4.7.1. Ensemble makine öğrenimi modellerinin optimum konfigürasyonu

Her bir ensemble makine öğrenmesi (MÖ) modeli için yinelemeli manuel ayarlamalar yoluyla kapsamlı hiperparametre ayarlaması gerçekleştirilmiştir. Bu süreç, optimum model performansı sağlayan en uygun hiperparametre değerlerini belirlemeyi amaçlayan deneme yanılma yöntemini içermiştir. Her model için elde edilen optimum hiperparametreler aşağıda sunulmuştur. Modelin varsayılan değerleri belirtilmeyen hiperparametrelere atanmıştır.

- **XGBoost (XGB)**
 - Booster türü: gbtrees
 - Temel tahmin edicinin maksimum ağaç derinliği (max_depth): 5
 - Öğrenme oranı (eta): 1
 - Ensemble modelindeki maksimum ağaç sayısı (n_estimators): 300
 - Bir yaprak düğümde daha fazla bölümlere yapmak için minimum kayıp (gamma): 0
- **Gradyant Boosting Regresyonu (GBR)**
 - Her ağacın katkısını küçültmek için öğrenme oranı (learning_rate): 0.5
 - Boosting aşamalarının sayısı (n_estimators): 200
 - İç düğümü bölmek için gereken minimum örnek sayısı (min_samples_split): 2
 - Her bir regresyon tahmin edicisinin maksimum derinliği (max_depth): 3
 - Bir yaprak düğümdeki minimum örnek sayısı (min_samples_leaf): 1
- **Light Gradient Boosting (LGB)**

- Temel tahmin ediciler için maksimum ağaç yaprakları (num_leaves): 50
- Öğrenme oranı (learning_rate): 0.1
- Temel tahmin ediciler için maksimum ağaç derinliği (max_depth): -1
- Uydurulacak boosting ağaç sayısı (n_estimators): 250
- **Adaptive Boosting (AdaB)**
 - Boosting'in sonlandırıldığı maksimum tahmin edicinin sayısı (n_estimators): 200
 - Her tahmin ediciye boosting yinelemesinde uygulanan ağırlık (learning_rate): 0.1
 - Boosting ensemble için temel tahmin edici (base_estimator): Decision Tree
 - Temel tahmin edici için maksimum ağaç derinliği (max_depth): 10
 - Ağırlıkları güncellemek için kayıp fonksiyonu (loss): Square
- **Random Forest (RF)**
 - Ağacın maksimum derinliği (max_depth): 20
 - Ormandaki ağaç sayısı (n_estimators): 30
 - Bir yaprak düğüm için minimum örnek sayısı (min_samples_leaf): 1
 - İç düğümü bölmek için gereken minimum sayı (min_samples_split): 2
- **Extra Trees Regressor (ETR)**
 - Ormandaki ağaç sayısı (n_estimators): 50
 - Ağacın maksimum derinliği (max_depth): 15
 - Bölme kalitesini ölçen fonksiyon (criterion): squared_error
 - İç düğümü bölmek için minimum örnek sayısı (min_samples_split): 2

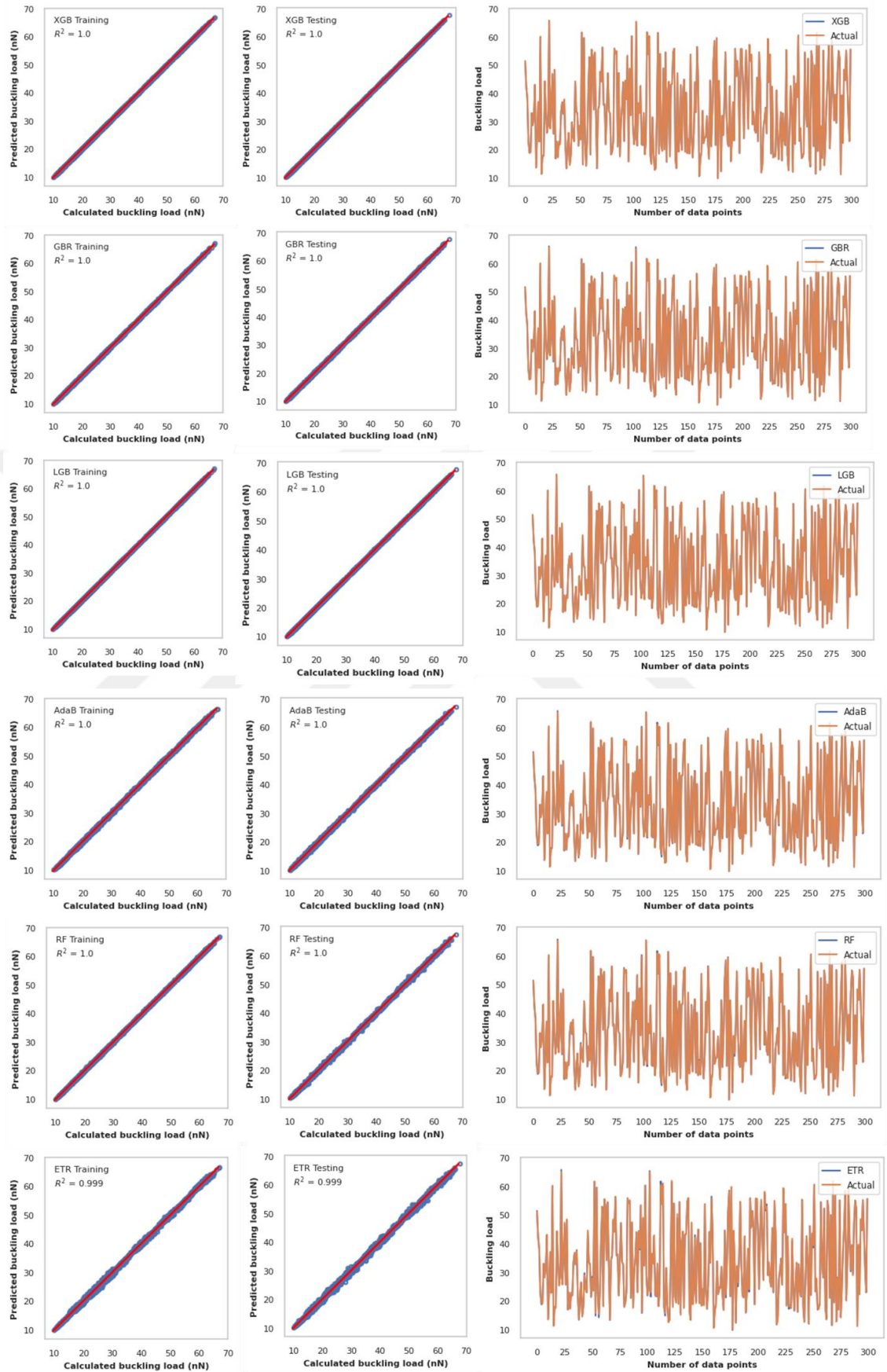
4.7.2. Eğitilmiş modellerin performans değerlendirilmesi ve karşılaştırılması

Bu çalışmanın amacı, iki yönlü fonksiyonel derecelendirilmiş bir nanokiriş'in burkulma analizini çeşitli modern ağaç tabanlı ensemble makine öğrenme (MÖ) modelleri kullanarak incelemektir. Bu modeller, bir nanokirişin ilk dört burkulma modu için burkulma yüklerini tahmin etmek üzere eğitilmiştir. Her bir MÖ modeli için tahminlerin kalitesi, belirleme katsayısı (R^2), ortalama mutlak hata (MAE), ortalama mutlak yüzde hata (MAPE), ortalama kare hata (MSE) ve kök ortalama kare hata (RMSE) olmak üzere beş metrik kullanılarak değerlendirilmiştir.

Birinci burkulma modundaki 300 veri noktası için gerçek ve tahmin edilen değerlerin dağılım grafikleri Şekil 4.30'da gösterilmektedir. Bu grafik, tahmin edilen ve gerçek yükler arasındaki uyum derecesinin görsel olarak doğrulanmasını sağlamaktadır. Bu dağılım grafikleri, AdaB, RF ve ETR tahminlerinde gözlemlenen küçük tutarsızlıklarla birlikte, çoğu modelin burkulma yüklerini doğru bir şekilde tahmin etmedeki etkin

performansını vurgulamaktadır. Tüm modeller hem eğitim hem de test aşamalarında tahmin edilen ve gerçek değerler arasındaki güçlü ilişkilere işaret eden yüksek R^2 katsayıları elde etmiştir. Daha yüksek bir R^2 değeri genellikle modelde daha iyi tahmin kapasitesine işaret etmektedir.





Şekil 4.30. MÖ modelleri tarafından tahmin edilen burkulma yüklerinin analitik sonuçlarla dağılım grafikleri kullanılarak karşılaştırılması

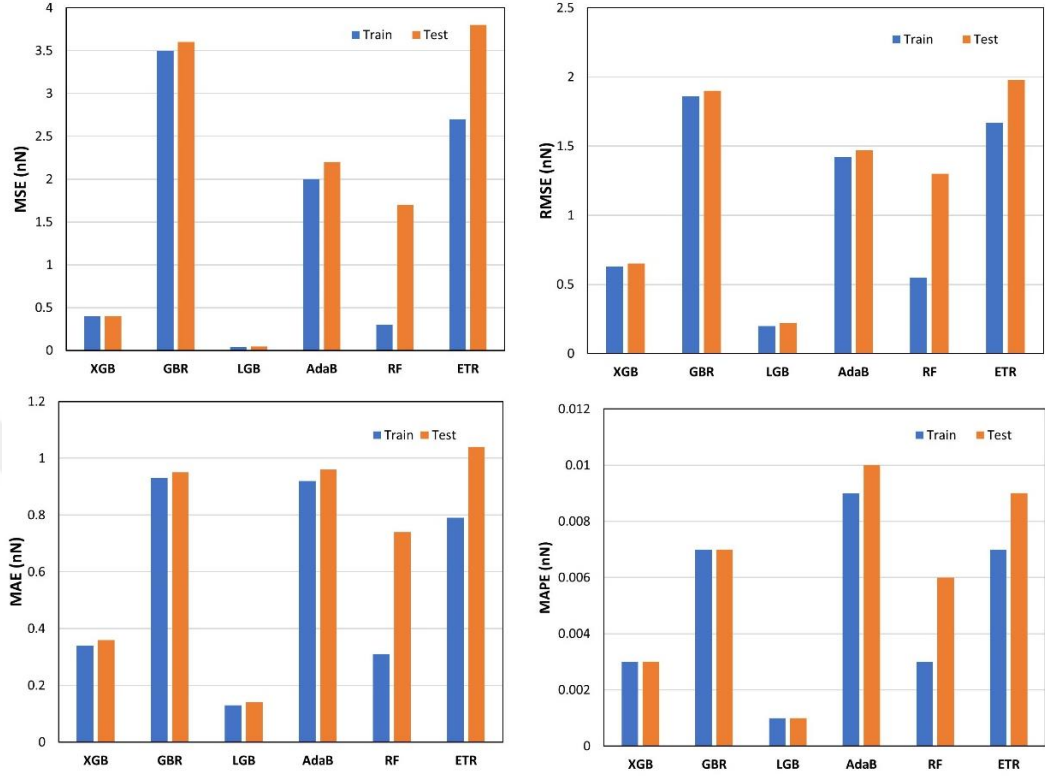
Eğitim ve test verilerini kullanarak ensemble MÖ algoritmaları tarafından yapılan tahminlere dayalı tüm performans metrikleri Çizelge 4.13'te özetlenmektedir. Bu sonuçlara göre, LGB tüm değerlendirme metriklerinde en iyi performansı gösteren model olarak ortaya çıkarken, onu sırasıyla XGB, AdaB, GBR, RF ve ETR takip etmektedir. Özellikle, LGB, XGB, AdaB ve GBR gibi boosting modeller, RF ve ETR gibi bagging modellerine kıyasla üstün tahmin yetenekleri sergilemiştir. Ayrıca, R^2 , MAE, MAPE, MSE ve RMSE dahil olmak üzere tüm performans metriklerinde boosting modelleri eğitim ve test verileri arasında iyi bir tutarlılık göstermiştir. Bununla birlikte, bagging modelleri eğitim ve test veri kümeleri arasında bu metriklerde tutarsızlıklar sergilemiş ve bu da bagging modellerinde potansiyel aşırı uyuma (overfitting) işaret etmektedir.

Çizelge 4.13. Ensemble MÖ modellerinin performans değerleri.

Model	Eğitim Veri Seti (80%)					Test Veri Seti (20%)				
	R^2	MAE	MAPE	MSE	RMSE	R^2	MAE	MAPE	MSE	RMSE
XGB	1	0.34	0.003	0.4	0.63	1	0.36	0.003	0.4	0.65
GBR	0.999	0.93	0.007	3.5	1.86	0.999	0.95	0.007	3.6	1.9
LGB	1	0.13	0.001	0.04	0.2	1	0.14	0.001	0.045	0.22
AdaB	0.999	0.92	0.009	2.0	1.42	0.999	0.96	0.01	2.2	1.47
RF	1	0.31	0.003	0.3	0.55	1	0.74	0.006	1.7	1.3
ETR	0.999	0.79	0.007	2.7	1.67	0.999	1.04	0.009	3.8	1.98

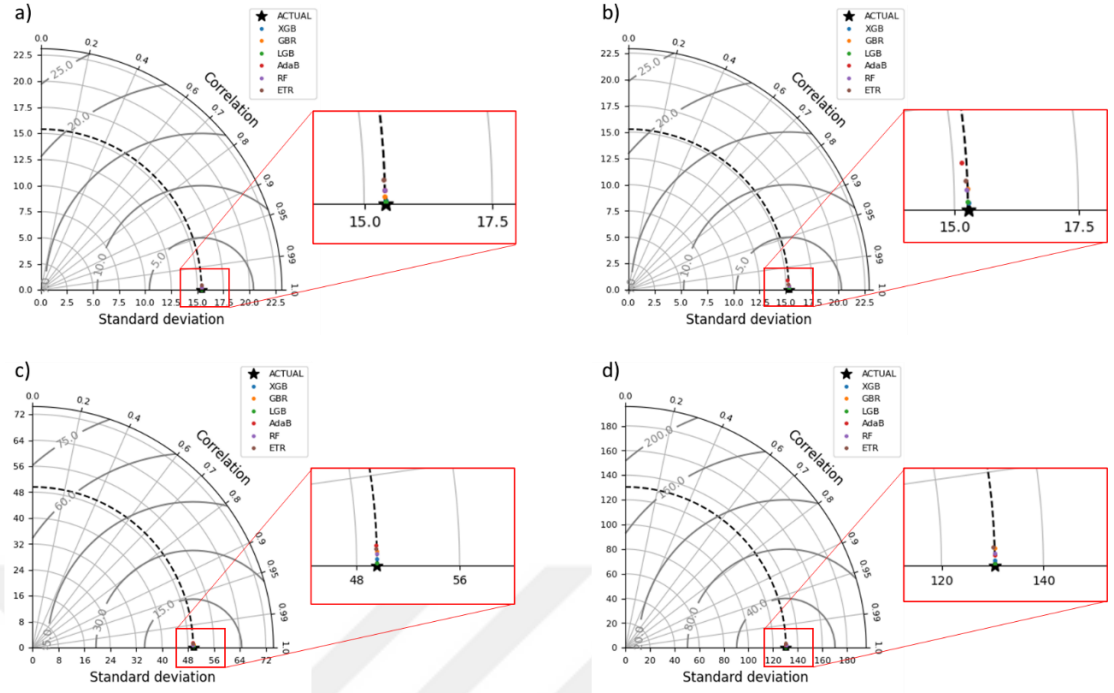
Çizelge 4.13'ten elde edilen bulgular, LGB'nin burkulma yüklerinin tahmininde en iyi performans gösteren model olduğunu açıkça ortaya koymaktadır. En düşük MAE, MAPE, MSE ve RMSE performans değerlendirme metrikleri sırasıyla 0.14, 0.001, 0.045 ve 0.22 değerleri ile LGB'de hesaplanmıştır. Ardından XGB, sırasıyla MAE, MAPE, MSE ve RMSE için 0.36, 0.003, 0.4 ve 0.65 değerlerini elde ederek nano giriş burkulma yüklerini tahmin etmek için en iyi ikinci MÖ modeli olarak ortaya çıkmıştır. Bu modellerin her bir performans metriğinde görsel karşılaştırması Şekil 4.31'de verilmiştir.

Bu şekil, LGB ve XGB'nin üstün performansını vurgulamakta ve özellikle RF ve ETR modellerindeki potansiyel aşırı uyum sorunlarını göstermektedir.



Şekil 4.31. Tüm ensemble modellerinin performans istatistikleri.

Taylor diyagramı, MÖ modellerini korelasyon katsayısı ve standart sapma gibi kriterleri kullanarak değerlendirme kabiliyeti nedeniyle etkili bir grafik araç olarak kabul edilmektedir. Bu diyagram, MÖ modellerinin performanslarını gerçek verilere göre değerlendirerek kapsamlı bir karşılaştırma sunmaktadır. Şekil 4.32(a-d)'de gösterilen Taylor diyagramı, LGB'nin siyah yıldızla temsil edilen hedef noktaya en yakın olduğunu vurgulamaktadır. Bu, LGB'nin tahmin ettiği verilerin gerçek verilerle en iyi uyumunu göstermektedir. Özellikle, LGB'nin verimliliğinin XGBoost'a çok yakın olması, her iki modelin de çift yönlü fonksiyonel derecelendirilmiş nanokiriş'in dört modundaki burkulma yüklerini doğru bir şekilde tahmin etmedeki sağlamlığını göstermektedir.



Şekil 4.32. İlk dört burkulma modu için tüm MÖ modellerinin Taylor diyagramları.

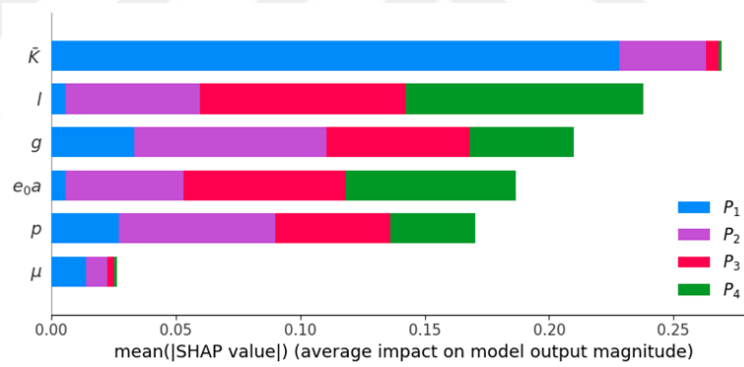
4.7.3. SHAP analizi kullanılarak geliştirilen makine öğrenimi modelinin açıklanması

Ensemble MÖ modelleri üstün doğruluk elde etmesine rağmen, çıktıları için şeffaf açıklamaların olmaması “kara kutu” teriminin kullanılmasına yol açmıştır. Bunu ele almak için araştırmacılar, her girdi değişkeninin nihai sonuçlar üzerindeki etkisini değerlendiren açıklama yöntemleri geliştirmeye odaklanmışlardır. Geliştirilen yöntemlerden biri olan Shapley eklemeli açıklamalar (Shapley Additive exPlanations - SHAP) bu çalışmada kullanılmıştır. SHAP, MÖ modelinin tahmin mekanizmalarını anlamak için özel olarak tasarlanmış matematiksel bir tekniktir ve girdi değişkenlerinin modelin tahminlerine bireysel katkıları hakkında bilgiler sunmaktadır.

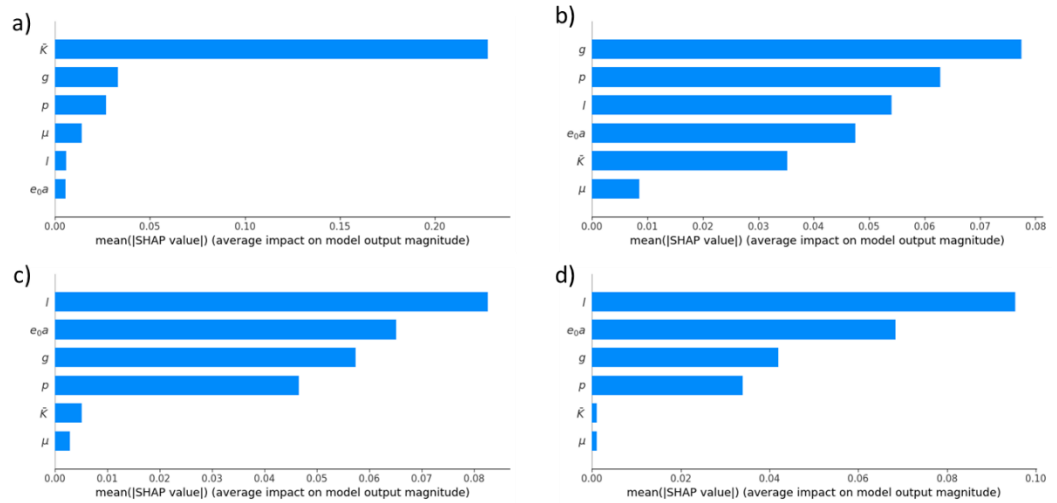
XGB modeli tarafından tahmin edilen burkulma yüklerini etkileyen girdi parametrelerinin incelenmesi SHAP analizi kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Şekil 4.33, nano kirişin burkulma yükü üzerindeki girdi parametrelerinin global önem faktörünü göstermektedir. Bu global önem faktörü, veri kümesindeki her bir parametre için mutlak Shapley değerlerinin ortalaması alınarak hesaplanmıştır. Şekil 4.33'teki girdi parametrelerinin sıralaması, ilk dört burkulma modundaki önemlerine göre

oluşturulmuştur. Sıfıra yakın SHAP değerleri parametrenin katkısının daha az olduğunu gösterirken, daha yüksek değerler tahmin üzerinde daha önemli bir etkiye sahip olduğunu göstermektedir. Bu şekil, her bir parametrenin burkulma yüklerinin tahmin edilmesi üzerindeki etkisinin genel olarak anlaşılmasını sağlamaktadır.

İlk dört burkulma modunda her bir girdi parametresinin önemi Şekil 4.34'te ayrı ayrı gösterilmiştir. Her bir parametrenin nanokiriş'in burkulma moduna katkıları hakkında fikir vermektedir. Şekil 4.34(a), $\bar{K}$ 'nın en yüksek önemi sergilediğini ve ilk burkulma modu üzerinde maksimum etkiye sahip olduğunu göstermektedir. Bununla birlikte, bu etki daha yüksek burkulma modlarında azalmakta ve dördüncü modda en az önemli hale gelmektedir. Şekil 4.34(b)'deki ikinci modda, g en etkili parametre olarak ortaya çıkmakta ve bunu azalan sırayla p , l , e_0a , $\bar{K}$ ve μ takip etmektedir. Girdi parametrelerinin etki sırası Şekil 4.34(c-d)'deki üçüncü ve dördüncü modlar için tutarlı kalmakta, l en fazla etkiyi göstermekte ve bunu sırasıyla e_0a , g , p , $\bar{K}$ ve μ izlemektedir.



Şekil 4.33. Her bir girdi parametresinin global önem faktörü sıralaması

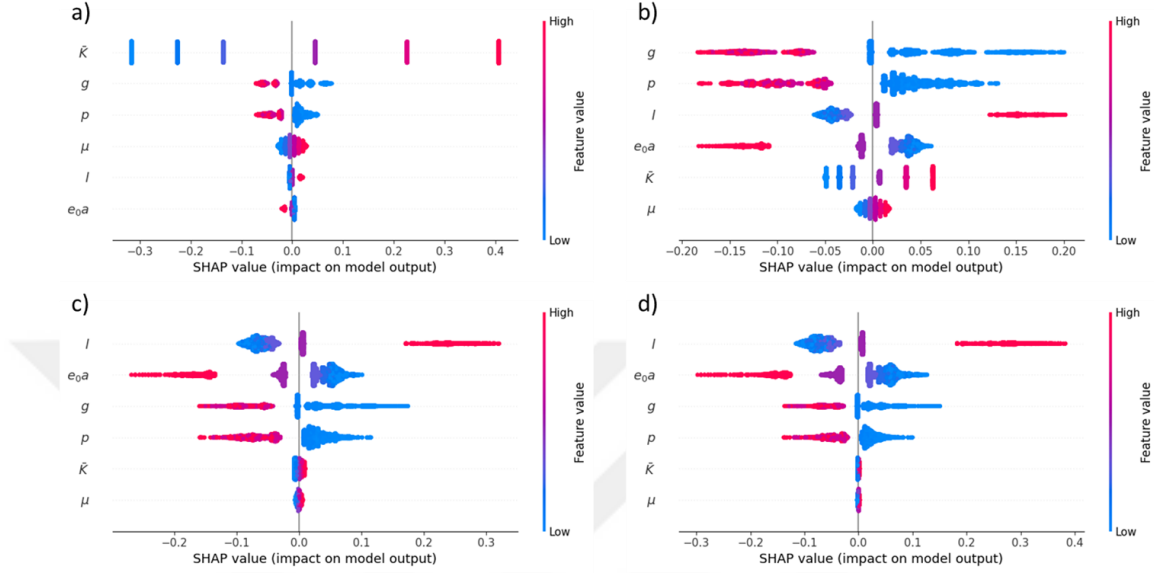


Şekil 4.34. Her bir burkulma modu için parametrelerin önem faktörü sıralaması.

Önem faktörü sıralaması parametrelerin katkısını vurgularken, belirli bir parametrenin model tahminlerini olumlu veya olumsuz yönde etkileyip etkilemediğini net bir şekilde ortaya koymamaktadır. Bu amaçla, Şekil 4.35'te sunulan özet grafikler (summary plot), girdi parametresinin bağımlı değişken (burkulma yükü) üzerindeki olumlu veya olumsuz etkisinin derecesini göstermektedir. Özet grafiğindeki her veri noktası, orijinaldeki yüksek değeri kırmızıyla ve düşük değeri ise maviyle göstermektedir. Y eksen, girdi parametrelerini nano kırıının burkulma yükünü tahmin etmedeki önemlerine göre sıralamaktadır. X eksen, her bir parametrenin modelin tahminleri üzerindeki etki miktarını gösteren SHAP değerlerini temsil etmektedir.

Şekil 4.35(a-d), daha yüksek K , μ ve l değerlerinin daha yüksek SHAP değerleri ile sonuçlandığını ve model tahminleri ile pozitif bir korelasyon olduğunu göstermektedir. Buna karşılık, daha yüksek g , p ve e_{oa} değerleri daha düşük SHAP değerlerine yol açarak model tahminleriyle negatif bir korelasyona işaret etmektedir. Bu ters ilişki, değişen parametre değerlerinin tahminleri nasıl olumlu ya da olumsuz etkilediğini göstermektedir. Her bir parametrenin dört burkulma modu boyunca modelin tahmini üzerindeki etkisi Şekil 4.35(a-d)'de ayrıca verilmiştir. Bu şekil aynı zamanda her bir parametrenin dört burkulma modu boyunca modelin tahmini üzerindeki etkisini de göstermektedir. Doğrusal olmayan parametre (μ), birinci moddaki burkulma yüklerinin tahminine katkıda bulunan dördüncü en etkili faktör olarak öne çıkmaktadır. Modelin tahmini üzerindeki

etkisi μ 'nün yüksek değerleri ile artmakta ve düşük değerleri ile azalmaktadır. Bununla birlikte, μ 'nün katkısı yüksek burkulma modlarında azalmakta ve dördüncü mod üzerinde en az etkiye sahip olmaktadır.



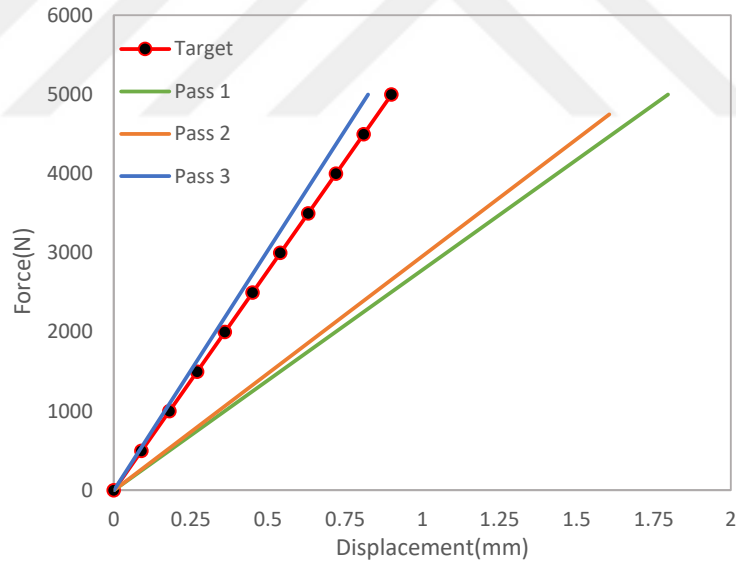
Şekil 4.35. İlk dört burkulma modu için özet grafikler.

4.8. Malzemelerin Doğrusal Olmayan Davranışını Tahmin Etmek için Ters Analiz Tabanlı Kendi Kendine Öğrenme Algoritmasının Sonuçları

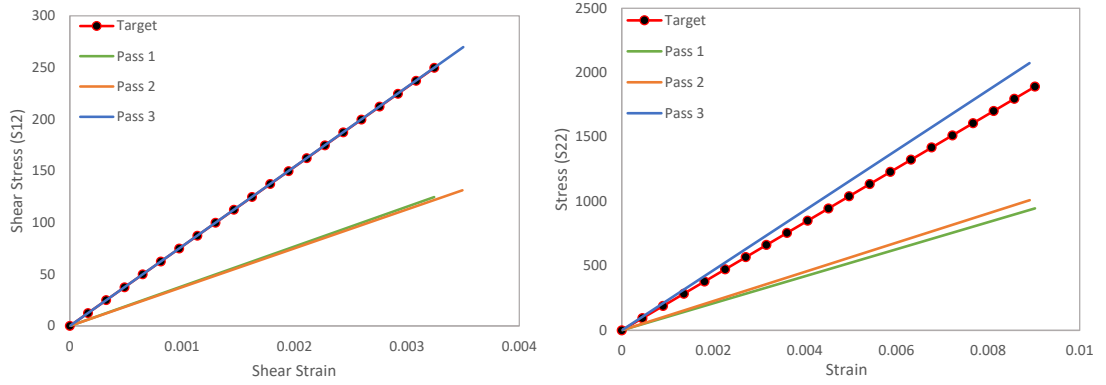
Bu çalışmada, doğrusal yükleme koşulları altında malzeme davranışını karakterize etmek için toplam 10 kuvvet-yer değiştirme çifti kullanılmıştır. Bu amaçla, kendi kendine öğrenme algoritması başlatılmadan önce bir YSA modeli başlangıçta 100 GPa varsayılan elastisite modülü ile eğitilmiştir. Algoritmanın nihai amacı 200 GPa'lık hedef elastisite modülünü belirlemektir. Şekil 4.36'da gösterildiği gibi, model sadece üç iterasyonda yakınsamayı başarmıştır. İlk iki geçiş sırasında, eğitilen YSA modeli algoritma tarafından belirlenen hata payının altında sonuçlar vermemiş ve hedef performanstan önemli ölçüde uzak tahminlere yol açmıştır. Bu tutarsızlık, ilk aşamalardaki eğitim verilerinin yetersizliğini vurgulamıştır. Ancak üçüncü geçişte, veri tabanı YSA modelini etkili bir şekilde eğitmek için yeterli bilgi içeriyordu. Bu aşamada, YSA tahminleri hedef malzeme davranışına başarılı bir şekilde yakınsamış ve 200 GPa'lık istenen Young modülünü yakalamıştır. Üçüncü geçişin sonunda elde edilen gerilme-gerinim sonuçları Şekil 3.37'de

sunulmuştur. Bu sonuçlar, YSA tarafından tahmin edilen eğri ile hedef eğri arasında güçlü bir uyum olduğunu göstermektedir. S22 gerilme bileşeninde hafif bir sapma olsa da kayma gerilmeleri (S12) ilgili hedef değerleriyle neredeyse mükemmel bir örtüşme sergilemektedir. Bu da algoritmanın sadece tek bir kuvvet-yer değiştirme eğrisi kullanarak gerçek malzeme davranışını etkili bir şekilde öğrendiğini göstermektedir.

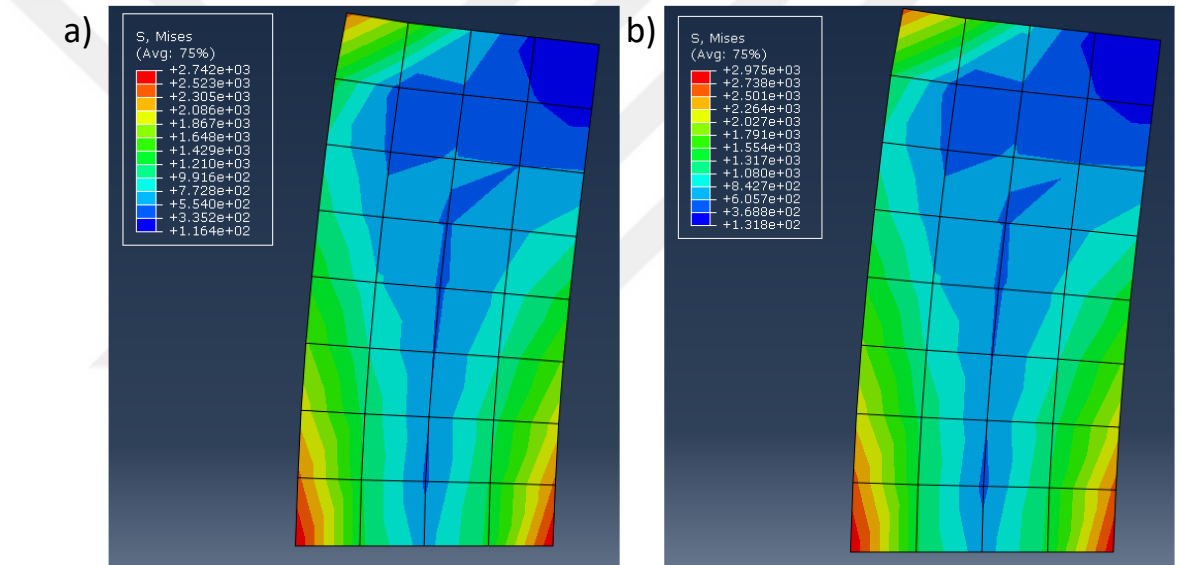
Ayrıca, hedef ve YSA tabanlı simülasyonlardan elde edilen von Mises gerilimi ve ilgili gerilme konturları Şekil 4.39'da gösterilmektedir. Bu karşılaştırma, gerilme konturlarının yanı sıra maksimum ve minimum gerilme değerlerinin iki simülasyon arasında oldukça tutarlı olduğunu ortaya koymaktadır. Bu bulgular, kendi kendine öğrenme algoritmasının sağlamlığını ve hedef malzeme davranışını yüksek doğrulukla belirleme yeteneğini vurgulamaktadır. Sonuçlar, algoritmanın minimum deneysel veri kullanarak Young modülü gibi malzeme özelliklerini otomatik olarak belirleme kabiliyetini doğrulamaktadır.



Şekil 4.36. Her geçişin sonunda elde edilen kuvvet-deplasman eğrileri



Şekil 4.37. YSA ile tahmin edilen gerilme-gerinim eğrilerinin hedef eğri ile karşılaştırılması

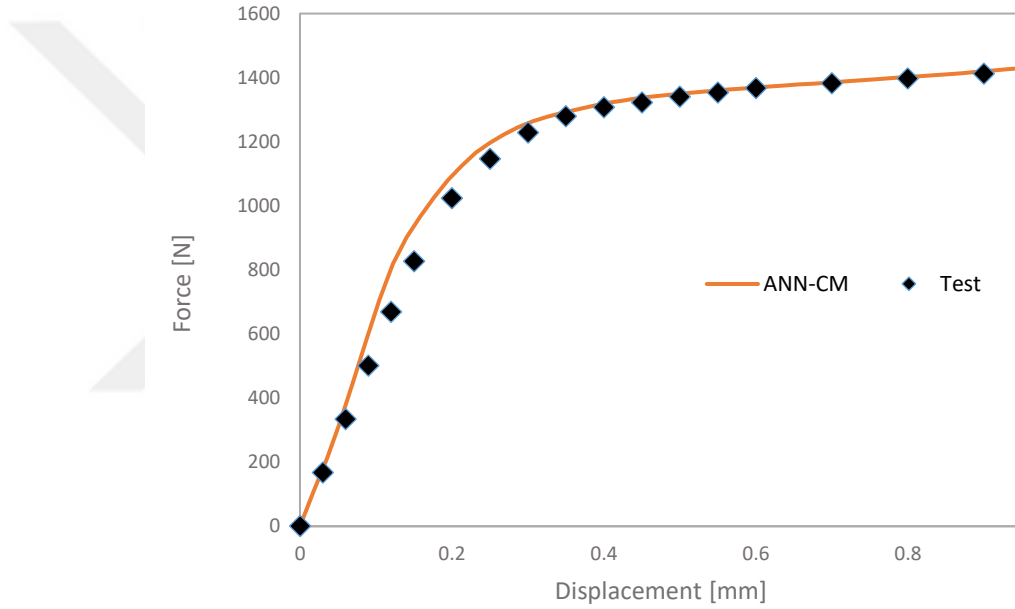


Şekil 4.38. a) Geleneksel malzeme modeli kullanılarak elde edilen hedef davranış ve b) YSA tabanlı malzeme modeli ile tahmin edilen davranış

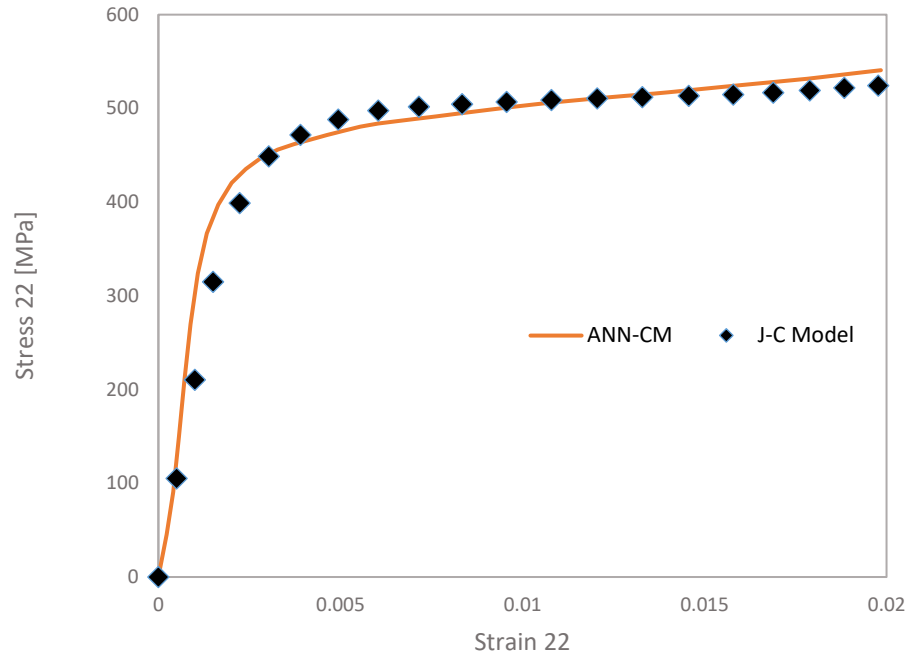
Doğrusal malzeme davranışı için kendi kendine öğrenme metodolojisinin başarılı sonuçlarından sonra, bu yaklaşım kuvvet-deplasman verilerini kullanarak doğrusal olmayan malzeme davranışını modellemek için de uygulanmıştır. Şekil 4.40'ta sunulan sonuçlar, SE analizinden hesaplanan yük-yer değiştirme tepkisinin deneysel olarak ölçülen yük-yer değiştirme eğrisiyle yakından uyumlu olduğunu gösterdiğini ortaya koymaktadır. Ayrıca, Şekil 4.41, Johnson-Cook modeli tarafından karakterize edilen gerçek gerilme-gerinim tepkisine kıyasla YSA tabanlı malzeme modeli tarafından tahmin edilen gerilme-gerinim davranışını göstermektedir. Küçük farklılıklar gözlemlense de

YSA modeli doğrusal olmayan malzeme davranışının temel özelliklerinin çoğunu başarıyla yakalamaktadır. Bu durum, geliştirilen YSA tabanlı malzeme modelinin tahmin kabiliyetini ve sağlamlığını vurgulamaktadır.

Ters analiz tabanlı kendi kendine öğrenme çerçevesi, yük-deplasman tepkisinin global ölçümlerini kullanarak metalin doğrusal olmayan malzeme davranışını sistematik olarak çıkarmıştır. Bu, çerçevenin karmaşık malzeme özelliklerini karakterize etmedeki etkinliğini göstermekte ve onu malzeme modellemesi için güçlü bir araç haline getirmektedir.



Şekil 4.39. Eğitim sonunda global kuvvet-yer değiştirme eğrisinin test eğrisi ile karşılaştırılması



Şekil 4.40. YSA modeli ile tahmin edilen eğrinin Johnson-Cook modeli kullanılarak elde edilen sonuçlarla karşılaştırılması.

5. SONUÇ

Bu tezde sunulan çalışmalar, bu gereksinimi karşılamak için geliştirilmiş, parametre tanımlama ve veri odaklı malzeme modelleme süreçlerini büyük ölçüde iyileştiren yeni yöntemler sunmaktadır.

Bu tezde sunulan çalışma, geleneksel malzeme modeli oluşturma tekniklerinin ve sonlu elemanlar (SE) analizinde parametre tanımlamanın beraberinde getirdiği önemli zorlukları ele almak için yenilikçi bir yaklaşım geliştirmiş, uygulamış ve değerlendirmiştir. Mevcut endüstriyel ve akademik literatürde, malzemelerin gerilme-şekil değiştirme davranışlarını yansıtacak modellerin parametrelerinin tanımlanmasının zorluğu sıklıkla belirtilmiştir. Bu tezin sunduğu yaklaşımlar, bu eksikliklerin giderilmesine yönelik önemli adımlar atmıştır.

Bu bağlamda, bu tezde SE simülasyonlarında kullanılan bünye modellerin parametre belirlenmesi için SmartFIT adı verilen ters bir metodoloji sunmaktadır. Bu metodoloji, YSA ve SVR gibi makine öğrenimi tekniklerini, hibrit sayısal-deneysel verileri kullanan optimizasyon algoritmalarıyla sistematik olarak entegre etmektedir. SmartFIT malzeme modelinin en uygun parametrelerini kullanıcı müdahalesine ihtiyaç duymadan, tamamen otomatik bir şekilde belirleyebilmektedir. SmartFIT'in temel görevi, doğru parametre tanımlamasını sağlarken hesaplama süresini azaltarak model kalibrasyon sürecini kolaylaştırmaktır. SmartFIT'in uygulanabilirliği ve etkinliği, tez kapsamında üç farklı örnek üzerinde test edilmiştir. İlk örnekte, kullanıcı elemanı alt programında (UEL) uygulanan kohezif bölgesi modelinin karakterizasyonu için sekiz temel parametreyi başarıyla belirlenmiştir. İkinci örnekte, kullanıcı malzeme alt programında (UMAT) sertleşme davranışını tanımlamak için gerekli dört parametre belirlenmiştir. Üçüncü örnekte, SmartFIT'in sağlamlığını göstermek için döngüsel yüklemeye maruz kalan daha karmaşık bir kiriş-kolon bağlantı modelini analiz edilmiştir. Bu metodoloji, zorlu histerezis tabanlı yükleme koşullarına rağmen Johnson-Cook plastisite modelinin optimum parametrelerini başarıyla belirlemiştir. Bu numunelerin her birinde SmartFIT tarafından belirlenen parametreler kullanılarak gerçekleştirilen SE analizlerinin sonuçları deneysel verilerle karşılaştırılmış ve yüksek düzeyde doğruluk elde edildiği görülmüştür.

SmartFIT'in hesaplama verimliliğini ve doğruluğunu daha ayrıntılı olarak değerlendirmek için, yalnızca SE analizi ve sayısal optimizasyon algoritmalarına dayanan geleneksel bir uyarlama yöntemi ile karşılaştırma yapılmıştır. Bu karşılaştırma, SmartFIT ve geleneksel yöntem kullanılarak hem UEL hem de UMAT alt programlarının malzeme parametreleri belirlenerek gerçekleştirilmiştir. Sonuçlar, her iki yaklaşımın benzer eğri uydurma doğruluğuna ulaşmasına rağmen, SmartFIT'in önemli ölçüde daha yüksek bir hesaplama verimliliği sunduğunu ve geleneksel yöntemle kıyasla gerekli süreyi 2 ila 3 kat azalttığını ortaya koymuştur. UEL tabanlı yapışma bölgesi modeli için SmartFIT en uygun parametre setini sadece 35 dakikada belirlemiş ve toplamda 92 SE simülasyonu yapmıştır. Buna karşılık, geleneksel yöntem aynı parametre setine ulaşmak için 106 dakika ve 503 simülasyon gerektirmiştir. Benzer şekilde, UMAT tabanlı plastisite sertleşme modeli için de SmartFIT, verimlilik açısından geleneksel yöntemi geride bırakmıştır. SmartFIT, optimizasyonu sadece 25 dakikada ve 22 SE simülasyonu ile tamamlarken, geleneksel yaklaşım 52 dakika sürmüş ve 72 simülasyon gerektirmiştir. Bu karşılaştırma sonuçları, yalnızca hesaplama süresini azaltmakla kalmamakta, aynı zamanda yüksek doğrulukta sonuçlara ulaşmak için gereken simülasyon sayısını da önemli ölçüde azaltarak, araştırmacılar için malzeme modellerini verimli bir şekilde optimize etmelerini sağlayan avantajlı bir araç sunmaktadır.

Ayrıca bu tez kapsamında, deneysel testlerden elde edilen yük-deplasman ölçümleri kullanarak veriye dayalı bir malzeme modeli oluşturmak için kapsamlı bir metodoloji geliştirilmiştir. Bu metodoloji, önce bilinen bir malzeme modeli için en uygun parametreleri belirlemek amacıyla SmartFIT'i kullanarak başlamaktadır. Optimum parametreler belirlendikten sonra, malzeme davranışının tüm aralığını yakalayan sentetik bir veri tabanı oluşturmak amacıyla SE simülasyonları gerçekleştirilmiştir. Kalibre edilmiş Johnson-Cook modeli tarafından üretilen simülasyon verileri kullanılarak, elastoplastik gerilme-gerinim ilişkisini öğrenmek için YSA gibi veriye dayalı bir model eğitilmiştir. Veriye dayalı elastoplastik malzeme modeli (DD-ECM), çeşitli istatistiksel ölçütlerle değerlendirilmiştir. DD-ECM, eğitim ve test aşamasında sırasıyla 0,997 ve 0,996 gibi çok yüksek bir R^2 değerine ulaşarak malzeme davranışını yakalamadaki başarısını göstermiştir. Ayrıca, MAE eğitim ve test veri setleri için sırasıyla 4,6 ve 4,8

olarak hesaplanmıştır. Bu istatistiksel hesaplamalar, DD-ECM'nin malzeme modellemesini yüksek doğrulukla gerçekleştirme kabiliyetini açıkça göstermektedir. Geliştirilen DD-ECM'nin, geleneksel malzeme modelleri yerine SE analizine sorunsuz bir şekilde entegre edilebilmiştir. Bu entegrasyon, tek yarıklı kesme numunesinin analizi için test edilmiş ve sonuçlar Johnson-Cook malzeme modeli ile elde edilenlerle karşılaştırılmıştır. Karşılaştırma sonuçları iki model arasında güçlü bir uyum olduğunu göstermiş ve DD-ECM'nin elastoplastik davranışı doğru bir şekilde yeniden üretebildiğini doğrulamıştır. Her iki modelden elde edilen gerilme ve gerinim konturları birbirine yakın olup, veriye dayalı yaklaşımın etkinliğini kanıtlamıştır.

Gelecek Çalışmalar ve Öneriler:

- Şu anda SmartFIT, simüle edilen ve deneysel değerlerden elde edilen kuvvet-yer değiştirme eğrileri arasındaki farkı en aza indirmek için yalnızca tek bir amaç fonksiyonu kullanmaktadır. Ancak, gelecekte farklı deneysel koşullardan elde edilen birden fazla test verisi (eğriler) mevcut olduğunda, SmartFIT'in çok amaçlı optimizasyon fonksiyonları içerecek şekilde geliştirilmesi gerekmektedir. Bu yaklaşım, farklı yükleme durumları ve sınır koşullarını dikkate alarak daha kapsamlı bir parametre seti belirlenmesine olanak sağlayacaktır.
- Veriye dayalı malzeme modeli yalnızca elastoplastik malzemelerle sınırlı olmamalıdır. SmartFIT'in, modellenmesi daha zor olan hiperelastik, viskoplastik ve kompozit malzemeler gibi karmaşık malzemeler üzerinde test edilmesi, modelin güvenilirliğini artıracaktır. Dijital ikiz teknolojilerinin ve akıllı üretim süreçlerinin gelişmesiyle birlikte, bu tür veriye dayalı yaklaşımların endüstriyel süreçlere entegrasyonu büyük bir önem kazanacaktır.
- Makine öğrenimi metodolojisinin sürekli gelişmesiyle birlikte, malzeme modellemesi için büyük potansiyele sahip sınır ağı tabanlı modellerin kullanımı artmaktadır. Özellikle, Uzun Kısa Süreli Bellek (LSTM) ve Kapalı Tekrarlayan Birim (GRU) gibi son zamanlarda popüler olan sınır ağı modellerinin test edilmesi, klasik yapay sınır ağı yaklaşımlarına kıyasla performans iyileştirmeleri sağlayabilir. Ayrıca, Raissi vd. (2019) tarafından önerilen fizik tabanlı sinir ağlarının kullanımı hem genel performans hem de ekstrapolasyon yetenekleri üzerinde olumlu etkilere sahip olabilir.

Bu modeller, fiziksel yasalara dayalı kısıtlamalar ile öğrenme süreçlerini iyileştirerek, daha gerçekçi ve güvenilir sonuçlar sunabilir.



KAYNAKLAR

- Al-Haik, M. S., Hussaini, M. Y., & Garmestani, H. (2006). Prediction of nonlinear viscoelastic behavior of polymeric composites using an artificial neural network. *International journal of plasticity*, 22(7), 1367-1392.
- Andrade-Campos, A., Bastos, N., Conde, M., Gonçalves, M., Henriques, J., Lourenço, R., ... & Rumor, L. (2022, May). On the inverse identification methods for forming plasticity models using full-field measurements. In *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* (Vol. 1238, No. 1, p. 012059). IOP Publishing.
- Blaysat, B., Florentin, E., Lubineau, G., & Moussawi, A. (2012). A Dissipation Gap Method for full-field measurement-based identification of elasto-plastic material parameters. *International journal for numerical methods in engineering*, 91(7), 685-704.
- Burhenne, S., Jacob, D., & Henze, G. P. (2011, November). Sampling based on Sobol's sequences for Monte Carlo techniques applied to building simulations. In *Proc. Int. Conf. Build. Simulat* (pp. 1816-1823).
- Cao, Y., Zhen, Y., Song, M., Yi, H., Li, F., & Li, X. (2020). Determination of Johnson-Cook parameters and evaluation of Charpy impact test performance for X80 pipeline steel. *International Journal of Mechanical Sciences*, 179, 105627.
- Chemisky, Y., Meraghni, F., Bourgeois, N., Cornell, S., Echchorfi, R., & Patoor, E. (2015). Analysis of the deformation paths and thermomechanical parameter identification of a shape memory alloy using digital image correlation over heterogeneous tests. *International Journal of Mechanical Sciences*, 96, 13-24.
- Chen, T., & Guestrin, C. (2016, August). Xgboost: A scalable tree boosting system. In *Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD international conference on knowledge discovery and data mining* (pp. 785-794).
- Claire, D., Hild, F., & Roux, S. (2004). A finite element formulation to identify damage fields: the equilibrium gap method. *International journal for numerical methods in engineering*, 61(2), 189-208.
- Cooreman, S., Lecompte, D., Sol, H., Vantomme, J., & Debruyne, D. (2008). Identification of mechanical material behavior through inverse modeling and DIC. *Experimental Mechanics*, 48, 421-433.
- Dige, N., & Diwekar, U. (2018). Efficient sampling algorithm for large-scale optimization under uncertainty problems. *Computers & Chemical Engineering*, 115, 431-454.
- Ellis, G. W., Yao, C., & Zhao, R. (1992). Neural network modeling of the mechanical behavior of sand. In *Engineering Mechanics* (pp. 421-424).
- Ellis, G. W., Yao, C., Zhao, R., & Penumadu, D. (1995). Stress-strain modeling of sands using artificial neural networks. *Journal of geotechnical engineering*, 121(5), 429-435.
- Fayad, S. S., Jones, E. M. C., Seidl, D. T., Reu, P. L., & Lambros, J. (2023). On the importance of direct-leveilling for constitutive material model calibration using Digital Image Correlation and finite element model updating. *Experimental Mechanics*, 63(3), 467-484.
- Freund, Y., & Schapire, R. E. (1997). A decision-theoretic generalization of online learning and an application to boosting. *Journal of computer and system sciences*, 55(1), 119-139.

- Friedman, J. H. (2001). Greedy function approximation: a gradient boosting machine. *Annals of statistics*, 1189-1232.
- Furukawa, T., & Hoffman, M. (2004). Accurate cyclic plastic analysis using a neural network material model. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 28(3), 195-204.
- Furukawa, T., & Yagawa, G. (1998). Implicit constitutive modelling for viscoplasticity using neural networks. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 43(2), 195-219.
- Furukawa, T., & Yagawa, G. (1998). Implicit constitutive modelling for viscoplasticity using neural networks. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 43(2), 195-219.
- Ghaboussi, J., Garrett Jr, J. H., & Wu, X. (1991). Knowledge-based modeling of material behavior with neural networks. *Journal of engineering mechanics*, 117(1), 132-153.
- Ghavamian, F., & Simone, A. (2019). Accelerating multiscale finite element simulations of history-dependent materials using a recurrent neural network. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 357, 112594.
- Grédiac, M. (1989). Principe des travaux virtuels et identification. *Comptes rendus de l'Académie des sciences. Série 2, Mécanique, Physique, Chimie, Sciences de l'univers, Sciences de la Terre*, 309(1), 1-5
- Grediac, M., Pierron, F., Avril, S., & Toussaint, E. (2006). The virtual fields method for extracting constitutive parameters from full-field measurements: a review. *Strain*, 42(4), 233-253.
- Grimm, L. G., & Nesselroade Jr, K. P. (2019). Statistical applications for the behavioral and social sciences (No. 175344). John Wiley & Sons.
- Gulli, A., & Pal, S. (2017). Deep learning with Keras. Packt Publishing Ltd.
- Haj-Ali, R., Pecknold, D. A., Ghaboussi, J., & Voyiadjis, G. Z. (2001). Simulated micromechanical models using artificial neural networks. *Journal of Engineering Mechanics*, 127(7), 730-738.
- Hashash, Y. M. A., Jung, S., & Ghaboussi, J. (2004). Numerical implementation of a neural network based material model in finite element analysis. *International Journal for numerical methods in engineering*, 59(7), 989-1005.
- Hashash, Y. M. A., Jung, S., & Ghaboussi, J. (2004). Numerical implementation of a neural network based material model in finite element analysis. *International Journal for numerical methods in engineering*, 59(7), 989-1005.
- Hooke, R. (1675). A description of helioscopes, and some other instruments. John & Martin Printer to the Royal Society, London.
- Hornik, K. (1991). Approximation capabilities of multilayer feedforward networks. *Neural networks*, 4(2), 251-257.
- Hutter, F., Lücke, J., & Schmidt-Thieme, L. (2015). Beyond manual tuning of hyperparameters. *KI-Künstliche Intelligenz*, 29, 329-337.
- Ibáñez, R., Abisset-Chavanne, E., González, D., Duval, J. L., Cueto, E., & Chinesta, F. (2019). Hybrid constitutive modeling: data-driven learning of corrections to plasticity models. *International Journal of Material Forming*, 12, 717-725.
- Johnson, G. R. (1983). A constitutive model and data for metals subjected to large strains, high strain rates and high temperatures. In *Proceedings of the 7th International Symposium on Ballistics*, The Hague, Netherlands, pp. 541-547

- Jolliffe, I. T., & Cadima, J. (2016). Principal component analysis: a review and recent developments. *Philosophical transactions of the royal society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 374(2065), 20150202.
- Jung, S., & Ghaboussi, J. (2006). Neural network constitutive model for rate-dependent materials. *Computers & Structures*, 84(15-16), 955-963.
- Kavanagh, K. T., & Clough, R. W. (1971). Finite element applications in the characterization of elastic solids. *International Journal of Solids and Structures*, 7(1), 11-23.
- Ke, G., Meng, Q., Finley, T., Wang, T., Chen, W., Ma, W., ... & Liu, T. Y. (2017). Lightgbm: A highly efficient gradient boosting decision tree. *Advances in neural information processing systems*, 30.
- Kessler, B. S., El-Gizawy, A. S., and Smith, D. E. (2007). Incorporating Neural Network Material Models Within Finite Element Analysis for Rheological Behavior Prediction. *ASME. Journal of Pressure Vessel Technology*. 129(1): 58–65.
- Ladeveze, P., & Leguillon, D. (1983). Error estimate procedure in the finite element method and applications. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 20(3), 485-509.
- Lehký, D., Keršner, Z., & Novák, D. (2014). FraMePID-3PB software for material parameter identification using fracture tests and inverse analysis. *Advances in Engineering Software*, 72, 147-154.
- Liang, G., & Chandrashekhara, K. (2008). Neural network based constitutive model for elastomeric foams. *Engineering structures*, 30(7), 2002-2011.
- Lin, D. K., Simpson, T. W., & Chen, W. (2001). Sampling strategies for computer experiments: design and analysis. *International Journal of Reliability and applications*, 2(3), 209-240.
- Lourenço, R., Georgieva, P., Cueto, E., & Andrade-Campos, A. (2024). An indirect training approach for implicit constitutive modelling using recurrent neural networks and the virtual fields method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 425, 116961.
- Makhool, L., & Balzani, D. (2024). Unique Identification of Stiffness Parameters in Hyperelastic Models for Anisotropic, Deformable, Thin Materials Based on a Single Experiment-A Feasibility Study Based on Virtual Full-Field Data. *Experimental Mechanics*, 1-23.
- Man, H., & Furukawa, T. (2011). Neural network constitutive modelling for non-linear characterization of anisotropic materials. *International journal for numerical methods in engineering*, 85(8), 939-957.
- Martínez-Pañeda, E., Fuentes-Alonso, S., & Betegón, C. (2019). Gradient-enhanced statistical analysis of cleavage fracture. *European Journal of Mechanics-A/Solids*, 77, 103785.
- Martins, J. M. P., Andrade-Campos, A., & Thuillier, S. (2018). Comparison of inverse identification strategies for constitutive mechanical models using full-field measurements. *International Journal of Mechanical Sciences*, 145, 330-345.
- Moussawi, A., Lubineau, G., Florentin, E., & Blaysat, B. (2013). The constitutive compatibility method for identification of material parameters based on full-field measurements. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 265, 1-14.
- Nocedal, J., & Wright, S. J. (Eds.). (1999). *Numerical optimization*. New York, NY: Springer New York.

- Novák, D., & Lehký, D. (2006). ANN inverse analysis based on stochastic small-sample training set simulation. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 19(7), 731-740.
- Nsengiyumva, G., & Kim, Y. R. (2022). Field Displacement-Based Inverse Method for Elastic and Viscoelastic Constitutive Properties. *Experimental Mechanics*, 62(9), 1553-1568.
- Park, K., & Paulino, G. H. (2012). Computational implementation of the PPR potential-based cohesive model in ABAQUS: Educational perspective. *Engineering fracture mechanics*, 93, 239-262.
- Park, K., Paulino, G. H., & Roesler, J. R. (2009). A unified potential-based cohesive model of mixed-mode fracture. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 57(6), 891-908.
- Primavera, V., Perillo, M., Carofalo, A., Giorgi, M. D., & Nobile, R. (2015). Calibration of Material Models for the Numerical Simulation of Aluminium Foams—MAT 154 for M-PORE Foams@ 3 Loads. In 13th International LS-Dyna Users Conference, Dearborn, MI, June (pp. 8-10).
- Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational physics*, 378, 686-707.
- Rauch, E. F. (1998). Plastic anisotropy of sheet metals determined by simple shear tests. *Materials Science and Engineering: A*, 241(1-2), 179-183.
- Renardy, M., Joslyn, L. R., Millar, J. A., & Kirschner, D. E. (2021). To Sobol or not to Sobol? The effects of sampling schemes in systems biology applications. *Mathematical biosciences*, 337, 108593.
- Réthoré, J. (2010). A fully integrated noise robust strategy for the identification of constitutive laws from digital images. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 84(6), 631-660.
- Roux, É., & Bouchard, P. O. (2010, September). Ductile damage material parameter identification: numerical investigation. In Tenth International Conference on Computational Structures Technology (No. 93, pp. Paper-135). Civil-Comp Press.
- Roux, E., & Bouchard, P. O. (2015). On the interest of using full field measurements in ductile damage model calibration. *International Journal of Solids and Structures*, 72, 50-62.
- Saltelli, A., Annoni, P., Azzini, I., Campolongo, F., Ratto, M., & Tarantola, S. (2010). Variance based sensitivity analysis of model output. Design and estimator for the total sensitivity index. *Computer physics communications*, 181(2), 259-270.
- Santiago, J., Claeys-Bruno, M., & Sergent, M. (2012). Construction of space-filling designs using WSP algorithm for high dimensional spaces. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 113, 26-31.
- Schnur, D. S., & Zabarar, N. (1992). An inverse method for determining elastic material properties and a material interface. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 33(10), 2039-2057.
- Shin, H. S., & Pande, G. N. (2000). On self-learning finite element codes based on monitored response of structures. *Computers and Geotechnics*, 27(3), 161-178.
- Shin, H. S., & Pande, G. N. (2002). Enhancement of data for training neural network based constitutive models for geomaterials. In *Proceeding of The 8th International*

- Symposium on Numerical Models in Geomechanics-NUMOG VIII, Rome, Italy (pp. 141-146).
- Simo, J. C., & Taylor, R. (1986). A return mapping algorithm for plane stress elastoplasticity. *International Journal for numerical methods in engineering*, 22(3), 649-670.
- Snoek, J., Larochelle, H., & Adams, R. P. (2012). Practical bayesian optimization of machine learning algorithms. *Advances in neural information processing systems*, 25.
- Springmann, M., & Kuna, M. (2005). Identification of material parameters of the Gurson–Tvergaard–Needleman model by combined experimental and numerical techniques. *Computational Materials Science*, 33(4), 501-509.
- Sun, C., Lin, Q. L., & Chen, J. B. (2022). An Inverse Identification Method for the Characterization of Elastic Conforming Contact Behavior During Flat Punch Indentation. *Experimental Mechanics*, 62(5), 745-759.
- Swati, A. K., & Gaurang, V. (2014). Study of steel moment connection with and without reduced beam section. *Case Studies in Structural Engineering*, 1, 26-31.
- Tariq, A. (2020). Computational modeling the non-linear behavior of critical members causing progressive collapse in steel lattice towers (Master's thesis, Bursa Uludag University, Turkey).
- Tariq, A., Uzun, B., Deliktaş, B., & Yaylı, M. Ö. (2024). Assessment of machine learning methods predicting the axial vibration frequencies of microbars. *ZAMM-Journal of Applied Mathematics and Mechanics/Zeitschrift Für Angewandte Mathematik Und Mechanik*, 104(3), e202300916.
- Tariq, A., Uzun, B., Deliktaş, B., & Yaylı, M. Ö. (2024a). Vibration analysis of embedded porous nanobeams under thermal effects using boosting machine learning algorithms and semi-analytical approach. *Mechanics of Advanced Materials and Structures*, 1-24.
- Tariq, A., Uzun, B., Deliktaş, B., & Yaylı, M. Ö. (2024b). Application of machine learning methodology for investigating the vibration behavior of functionally graded porous nanobeams. *The Journal of Strain Analysis for Engineering Design*, 03093247241278391.
- Tariq, A., Uzun, B., Deliktaş, B., & Yaylı, M. Ö. (2024c). A machine learning approach for buckling analysis of a bi-directional FG microbeam. *Microsystem Technologies*, 1-22.
- Tariq, A., Uzun, B., Deliktaş, B., & Yaylı, M. Ö. (2024d). An investigation on ensemble machine learning algorithms for nonlinear stability response of a two-dimensional FG nanobeam. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, 46(9), 556.
- Tariq, A., Polat, A., & Deliktaş, B. (2024e). Boosting machine learning algorithms for predicting the macroscopic material behavior of continuous fiber reinforced composite. *Journal of Reinforced Plastics and Composites*, 07316844241292694.
- Tariq, A., Abualshar, B., Deliktas, B., Song, C. R., Al-Nimri, B., Barret, B., ... & Glennie, N. (2024f). ANN-based evaluation system for erosion resistant highway shoulder rocks. *International Journal of Geo-Engineering*, 15(1), 17.
- Tariq, A., & Deliktaş, B. (2025). An inverse parameter identification in finite element problems using machine learning-aided optimization framework. *Experimental Mechanics*.

- Versino, D., Tonda, A., & Bronkhorst, C. A. (2017). Data driven modeling of plastic deformation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 318, 981-1004.
- Wu, J., Chen, X. Y., Zhang, H., Xiong, L. D., Lei, H., & Deng, S. H. (2019). Hyperparameter optimization for machine learning models based on Bayesian optimization. *Journal of Electronic Science and Technology*, 17(1), 26-40.
- Yun, G. J., & Shang, S. (2011). A self-optimizing inverse analysis method for estimation of cyclic elasto-plasticity model parameters. *International Journal of Plasticity*, 27(4), 576-595.
- Yun, G. J., Ghaboussi, J., & Elnashai, A. S. (2008). A new neural network-based model for hysteretic behavior of materials. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 73(4), 447-469.
- Zhang, H., Qiu, D., Wu, R., Deng, Y., Ji, D., & Li, T. (2019). Novel framework for image attribute annotation with gene selection XGBoost algorithm and relative attribute model. *Applied Soft Computing*, 80, 57-79.