



T.C.

ALTINBAŞ ÜNİVERSİTESİ

Lisansüstü Eğitim Enstitüsü

Elektrik ve Bilgisayar Mühendisliği

**MAKİNE ÖĞRENMESİ DESTEKLİ 2D
MALZEMELERİN KARAKTERİZASYONU**

Derya GEMİCİ DEVECİ

Yüksek Lisans Tezi

Danışman

Doç. Dr. Doğu Çağdaş ATILLA

İstanbul, 2025

MAKİNE ÖĞRENMESİ DESTEKLİ 2D MALZEMELERİN KARAKTERİZASYONU

Derya GEMİCİ DEVECİ

Elektrik ve Bilgisayar Mühendisliği

Yüksek Lisans Tezi

ALTINBAŞ ÜNİVERSİTESİ

2025

“Derya GEMİCİ DEVECİ” tarafından hazırlanmış ve 30.06.2025 tarihinde sunulmuş “MAKİNE ÖĞRENMESİ DESTEKLİ 2D MALZEMELERİN KARAKTERİZASYONU” başlıklı tez Elektrik ve Bilgisayar Mühendisliği Ana Bilim Dalında Yüksek Lisans Tezi olarak **oy birliği** ile kabul edilmiştir.

Doç. Dr. Doğu Çağdaş ATİLLA
Danışman

Tez Savunma Sınavı Jüri Üyeleri:

Doç. Dr. Doğu Çağdaş ATİLLA

Elektrik-Elektronik
Mühendisliği Bölümü,
Altınbaş Üniversitesi

Dr. Öğr. Üyesi İncilay YILDIZ

Yönetim Bilişim Sistemleri
Bölümü,
Altınbaş Üniversitesi

Dr. Öğr. Üyesi Cahit KARAKUŞ

Bilgisayar Mühendisliği
Bölümü,
Esenyurt Üniversitesi

Bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak bütün şartları sağladığımı beyan ederim.

Bu tezdeki tüm bilgilerin akademik kurallara ve etik davranışlara uygun olarak edinildiğini ve sunulduğunu beyan ederim. Ayrıca, bu kuralların ve davranışların gerektirdiği şekilde, bu çalışmada, orijinal olmayan tüm materyalleri ve sonuçları tamamen alıntı yaptığımı ve referans gösterdiğimi de beyan ederim.

Derya GEMİCİ DEVECİ

İmza



ÖNSÖZ

Tez çalışmamın her aşamasında bilgi birikimi, yol gösterici yaklaşımıyla yanımda olan çok değerli danışmanım Doç. Dr. Doğu Çağdaş ATILLA'ya, araştırma sürecimde desteğini ve katkılarını esirgemeyen Araş. Gör. Lütviye Özge POLATLI'ya, bilimsel yaklaşımlarıyla bana ilham veren ve her zaman destek veren Prof. Dr. Cem ÇELEBİ, Prof. Dr. Ahmet ORAL ve Dr. Öğr. Üyesi Özhan ÜNVERDİ'ye, veri toplama sürecinde sağladığı destek ve yardımlarıyla yanımda olan Tuana KARAKOYUN BARANDIR'a, teşekkürlerimi ve en içten saygılarımı sunarak teşekkür ediyorum.



ÖZET

MAKİNE ÖĞRENMESİ DESTEKLİ 2D MALZEMELERİN KARAKTERİZASYONU

GEMİCİ DEVECİ, Derya

Yüksek Lisans, Elektrik ve Bilgisayar Mühendisliği, Altınbaş Üniversitesi

Danışman: Doç. Dr. Doğu Çağdaş ATILLA

Tarih: Haziran/2025

Sayfa: 96

Bu tez çalışmasında, Atomik Kuvvet Mikroskobu (AKM) ile elde edilen ardışık görüntüler kullanılarak yüzeydeki konum kaymalarının yön ve hız bakımından analiz edilmesi amaçlanmıştır. Bu doğrultuda hem klasik makine öğrenmesi algoritmaları hem de derin öğrenme yaklaşımları kullanılarak yön tahmini ve kayma hızı tahmini yapılmıştır.

İlk aşamada, X ve Y eksenlerindeki mikrometre cinsinden kayma miktarları giriş değişkeni olarak kullanılarak yön sınıflandırması gerçekleştirilmiştir. Bu sınıflandırma için Random Forest ve Destek Vektör Makineleri (SVM) algoritmaları uygulanmıştır. Random Forest modeli %98.6 test doğruluğu ile yüksek bir başarı gösterirken, SVM algoritması %94.6 doğruluk sağlamıştır. Random Forest modeli, sınıf bazında da daha dengeli F1-score sonuçları vermiştir.

İkinci aşamada ise, ardışık görüntü çiftleri arasındaki zaman farkı ve konum değişimleri kullanılarak kayma hızları hesaplanmış, bu veriler zaman serisi analizi yapabilen LSTM (Uzun Kısa Süreli Bellek) ağı ile modellenmiştir. Model mimarisi iki LSTM katmanından oluşmakta olup sırasıyla 64 ve 32 nöron içermekte ve her iki katmanda da tanh aktivasyon fonksiyonu kullanılmaktadır. Çıkış katmanı ise tek nöronlu yoğun (dense) yapıdadır. Farklı sayılarda eğitim veri çifti ile yapılan denemelerde modelin performansı sistematik olarak değerlendirilmiş ve her konfigürasyonda model 50 epok boyunca eğitilmiştir.

Modelin tahmin başarısı; Ortalama Kare Hata (MSE), Determinasyon Katsayısı (R^2), Kök Ortalama Kare Hata (RMSE) ve Ortalama Mutlak Hata (MAE) metrikleri üzerinden analiz

edilmiştir. Test verisi üzerinde elde edilen sonuçlar, modelin düşük hata oranlarıyla tahminler yapabildiğini ve R^2 değerinin yüksek seviyelerde olduğunu göstermektedir. Bu da LSTM mimarisinin, zaman bağımlı mikroskobik verilerle çalışırken kayma hızlarını başarıyla tahmin edebildiğini göstermektedir.

Anahtar Kelimeler: AKM, Makine Öğrenmesi, LSTM, Random Forest, Kayma Hızı, Sınıflandırma.



ABSTRACT

MACHINE LEARNING-ASSISTED CHARACTERIZATION OF 2D MATERIALS

GEMİCİ DEVECİ, Derya

M.Sc., Electrical and Computer Engineering, Altınbaş University,

Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Doğu Çağdaş ATİLLA

Date: June/2025

Pages: 96

In this thesis study, the aim is to analyze the directional and velocity-based displacement behavior on the surface using sequential images obtained from Atomic Force Microscopy (AFM). For this purpose, both classical machine learning algorithms and deep learning approaches were utilized to perform directional classification and drift velocity estimation. In the first stage, displacements in microns along the X and Y axes were used as input variables for directional classification. For this classification task, Random Forest and Support Vector Machine (SVM) algorithms were employed. The Random Forest model achieved a high test accuracy of 98.6%, while the SVM model achieved 94.6%. Moreover, the Random Forest algorithm demonstrated more balanced and robust F1-score results across all classes.

In the second stage, drift velocities were calculated based on the time differences and coordinate changes between successive image pairs, and this data was modeled using a Long Short-Term Memory (LSTM) network, which is suitable for sequential data analysis. The LSTM architecture consisted of two layers with 64 and 32 neurons respectively, both using the tanh activation function. The output layer was designed as a single-neuron dense structure. The model was trained using varying numbers of training pairs and evaluated systematically across each configuration, with training conducted for 50 epochs per case.

The prediction performance of the model was evaluated using metrics such as Mean Squared Error (MSE), Coefficient of Determination (R^2), Root Mean Squared Error (RMSE), and Mean Absolute Error (MAE). Results obtained from the test data revealed that the model was able to make predictions with low error rates, while maintaining high R^2 scores. These findings confirm that the LSTM model can successfully predict drift velocity when working with time-dependent microscopic data.

Keywords: AFM, Machine Learning, LSTM, Random Forest, Drift Velocity, Classification.



İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET	vi
ABSTRACT	viii
TABLO LİSTESİ.....	xi
ŞEKİL LİSTESİ	xii
KISALTMALAR.....	xiv
1. GİRİŞ VE AMAÇ	1
2. GENEL BİLGİLER.....	4
2.1 İKİ BOYUTLU (2D) MALZEMELER VE GENEL ÖZELLİKLERİ.....	4
2.1.1 Grafen: Yapısı, Özellikleri ve Önemi	7
2.2 NANO ÖLÇEKLİ KARAKTERİZASYON YÖNTEMLERİ	9
2.2.1 Atomik Kuvvet Mikroskobu (AKM)	13
2.2.1.1 AKM Çalışma Prensibi	14
2.3 KARAKTERİZASYON YÖNTEMLERİNDE YENİLİKÇİ YAKLAŞIMLAR.....	22
2.3.1 Gelişmiş AKM Modları	22
2.3.2 Hibrit Karakterizasyon Yöntemleri.....	23
2.3.3 Yapay Zeka ve Makine Öğrenmesi Destekli Yaklaşımlar.....	24
3. YAPAY ZEKA (YZ).....	26
3.1 MAKİNE ÖĞRENMESİ (MACHINE LEARNING-ML)	28
3.1.1 Derin Öğrenme (Deep Learning-DL)	40
4. DENEY VE SONUÇLARIN ANALİZİ.....	58
4.1 AKM'DE KARAKTERİZASYON YÖNTEMİNİN ML TABANLI ANALİZİ.....	73
5. TARTIŞMA VE SONUÇ	78
REFERANSLAR	80

TABLO LİSTESİ

	<u>Sayfa</u>
Tablo 3.1: Yapay Zekâ (YZ) Gelişim Süreci.....	26
Tablo 3.2: Makine Öğrenmesi (ML) Şeması.....	29
Tablo 3.3: Yapay Sinir Hücresi Bileşenleri	36
Tablo 3.4: Derin Öğrenme (DL) Paradigmaları.....	41
Tablo 3.5: Konvolüsyonel Sinir Ağı (CNN) Katmanları.....	42
Tablo 3.6: Yaygın Kayıp Fonksiyonları.....	51
Tablo 3.7: LSTM Katmanlarının Yapısı	53
Tablo 4.1: Deney Ölçüm Parametreleri.....	62
Tablo 4.2: AKM Görselleri Nokta Eşleşmesi.....	62
Tablo 4.3: Klasik ML Yöntemi Karşılaştırma.....	69

ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa

Şekil 2.1: Farklı Karbon Bazlı Nanoyapılar: Karbon Noktaları, Fulleren, Karbon Nanotüp, Grafen ve Grafen Oksit.....	4
Şekil 2.2: 2D (İki Boyutlu) Malzemeler.....	6
Şekil 2.3: Grafenin Kristal Yapısı	8
Şekil 2.4: Atomik Kuvvet Mikroskobu (AKM) Çalışma Yöntemi	14
Şekil 2.5: Piezo-Tüp	15
Şekil 2.6: Piezo-Tüp ile AKM Raster Taraması.....	16
Şekil 2.7: AKM Optik Kol Yansıması	18
Şekil 2.8: AKM ile Örnek Topografik Görüntü	19
Şekil 2.9: Örnek Topografik Görüntü Kesit Alma, Yükseklik Analizi ve 3D Görüntü Oluşumu	19
Şekil 2.10: Atomik Etkileşim ve AKM Modları	20
Şekil 3.1: Yapay Zekâ (YZ): Makine Öğrenmesi (ML) ve Derin Öğrenme (DL)'nin Yeri	25
Şekil 3.2: Denetimli Öğrenme	30
Şekil 3.3: Denetimsiz Öğrenme.....	31
Şekil 3.4: Yarı-Denetimli Öğrenme.....	32
Şekil 3.5: Pekiştirmeli Öğrenme.....	33
Şekil 3.6: Çoklu Görevli Öğrenme	33
Şekil 3.7: Topluluk Öğrenmesi.....	34
Şekil 3.8: Yapay Sinir Ağları	37
Şekil 3.9: Aktivasyon Fonksiyonları	38
Şekil 3.10: Örnek Tabanlı Öğrenme.....	40
Şekil 3.11: Evrişim Örnek 2x2'lik Bir Kernel.....	41

Şekil 3.12: Evrişim İşlemi İçin Örnek Adımlar.....	45
Şekil 3.13: Evrişim İşlemi Sonucu	45
Şekil 3.14: Gri Tonlamalı Evrişim İşlemi Örneği	45
Şekil 3.15: RGB Evrişim İşlemi Örneği.....	46
Şekil 3.16: CNN Süreci	49
Şekil 3.17: Tam Bağlantılı Katman (FC).....	50
Şekil 3.18: Vanilla LSTM Yapısı	53
Şekil 4.1: AKM Ardışık Alınmış 20 Topografik Görüntü	60
Şekil 4.2: CV ile Eşleştirme	61
Şekil 4.3: AKM Ardışık Alınmış 20 Topografik Görüntü Karşılaştırması	64
Şekil 4.4: Karşılaştırma Matrisi.....	66
Şekil 4.5: Random Forest, Sınıf Bazında Precision, Recall - F1 Skorları.....	67
Şekil 4.6: SVM: Sınıf Bazında Precision, Recall, F1 Skorları.....	68
Şekil 4.7: Kaymanın Şematik Gösterimi	72
Şekil 4.8: Farklı Eğitim Çiftleriyle Eğitilen LSTM Modeline Ait Performans Metrikleri..	74
Şekil 4.9: LSTM Modelinin tahmin ettiği kayma hızları (v_k) ile hesaplanan değerlerin karşılaştırılması.....	75
Şekil 4.10: LSTM Modeline Ait Eğitim ve Doğrulama Kayıplarının Epokalara Göre Değişimi	76
Şekil 4.11: Farklı Eğitim Çiftlerine Göre Hesaplanan MSE Değerlerinin Logaritmik Ölçekte Gösterimi	76

KISALTMALAR

YZ	:	Yapay Zekâ
AKM	:	Atomik Kuvvet Mikroskobu
ML	:	Makine Öğrenmesi
LSTM	:	Uzun Kısa Süreli Bellek
SVM	:	Destek Vektör Makinesi
CNN	:	Konvolüsyonel Sinir Ağı

1. GİRİŞ VE AMAÇ

İki boyutlu (2D) malzemeler ve bu malzemelere ait van der Waals heteroyapılar, sahip oldukları benzersiz kimyasal ve fiziksel özellikler nedeniyle, “Moore Yasası sonrası dönem” için en potansiyel barındıran malzeme sınıflarından biri olarak görülmektedir [1], [2], [3], [4]. Bu yapıların sentezlenmesi, yapısal karakterizasyonu, fiziksel özellikleri ve uygulama alanları; hem akademik camiada hem de sanayi sektöründe yoğun ilgi görmektedir. Özellikle tamamlayıcı metal-oksit yarıiletken (complementary metal-oxide-semiconductor – CMOS) teknolojileriyle uyumlu olacak şekilde homojen 2D malzeme üretimi ve bu malzemelerden oluşan heteroyapıların geliştirilmesi üzerine pek çok kapsamlı çalışma yürütülmüştür [5], [6], [7].

Bunun yanı sıra, bu malzemelere ait tabaka sayısı, kusurlar ve homojen/heterojen yığılma düzenleri gibi yapısal unsurların detaylı olarak araştırılması [8], [9], [10], [11], [12] optik, manyetik ve elektriksel gibi farklı fiziksel özelliklerle birlikte değerlendirilerek, 2D malzemelerin yeni nesil, yüksek yoğunluklu ve performanslı elektronik bileşenlerde kullanımına dair güçlü kanıtlar ortaya koymaktadır [13], [14], [15], [16], [17], [18], [19].

2D malzemelerin temel bilimsel araştırmaları ve sanayiye yönelik uygulamaları için en kritik ve önemli unsurlarından biri, doğru ve güvenilir karakterizasyon tekniklerinin kullanılmasıdır. Yüksek hassasiyet, işlem verimliliği ve otomasyon seviyesi sunan karakterizasyon yöntemleri; araştırmacıların zaman kaybını azaltarak süreci hızlandırmakta, üretim kalitesini artırmakta ve maliyetleri önemli ölçüde düşürmektedir.

Bu amaçla kullanılan başlıca teknikler arasında; optik mikroskopi (OM), taramalı elektron mikroskobu (SEM), taramalı geçirimli elektron mikroskobu (STEM), geçirimli elektron mikroskobu (TEM) ve atomik kuvvet mikroskobu (AKM) yer almaktadır. Bu mikroskopi temelli karakterizasyon yöntemleri, 2D malzemelerin doğrudan ve yüksek çözünürlükte görüntülenmesini mümkün kılmakta; yüzey morfolojisi, tabaka sayısı, kusurlar ve diğer fiziksel özelliklerin hem niteliksel hem de niceliksel olarak analizine olanak tanımaktadır. Özellikle yüzey yapısı ile ilgili mikro ve nano ölçekli detayların belirlenmesi, bu tekniklerin uzaysal çözünürlük kabiliyetleri sayesinde başarıyla gerçekleştirilebilmektedir [20], [21], [22], [23], [24].

Son yıllarda, makine öğrenmesi (Machine Learning – ML) algoritmaları, görüntü tabanlı uygulamalarda özellikle nesne tanıma, semantik segmentasyon ve bireysel nesne ayrımı gibi alanlarda kayda değer ilerleme göstermiştir. Bu algoritmalar, büyük hacimli veri kümeleri üzerinden doğrudan detaylı bilgi çıkarımı yapabilme kapasitesiyle öne çıkmaktadır [25], [26], [27]. Bu teknolojik gelişmeler, açık kaynak kodlu kütüphaneler ve zengin algoritma seçenekleri sayesinde, makine öğrenmesini yalnızca bilgisayar bilimi alanındaki uzmanlara değil, farklı bilim ve mühendislik disiplinlerinden araştırmacıların da rahatlıkla erişebileceği güçlü bir araç haline getirmiştir [28], [29], [30].

ML, mikroskopiye dayalı görüntüleme ile 2D malzeme karakterizasyonu arasında bir köprü görevi görebilir. Mikroskopi teknikleri, bu malzemelere ilişkin yapısal ve fiziksel bilgileri içeren görüntüler üretir. Bu görüntüler, genellikle malzemenin tabaka sayısı gibi özelliklerle ilişkili desenler içerir. ML algoritmaları, bu desenler ile malzeme sınıfları arasında istatistiksel ilişkiler kurarak görsel veriden yapısal bilgi öğrenme sürecini mümkün kılabilir.

Bu öğrenme süreci sayesinde, daha önce analiz edilmemiş mikroskopi görüntülerinden yola çıkarak, ilgili 2D malzemenin yapısal özelliklerinin tahmin edilmesi veya sınıflandırılması mümkün hale gelmektedir. Böylece, akıllı karakterizasyon yaklaşımı uygulanabilir; aynı zamanda bu karakterizasyon süreçlerinin doğruluğu, güvenilirliği ve tekrarlanabilirliği de sorgulanabilir ve geliştirilebilir hale gelir.

Bu tez çalışmasında, 2D malzemelerin karakterizasyonuna yönelik hem geleneksel hem de yenilikçi yaklaşımlar kapsamlı bir şekilde ele alınacaktır. Literatürde yaygın olarak kullanılan karakterizasyon teknikleri incelendikten sonra, odak noktası olarak AKM yöntemi seçilmiştir. AKM, yüzey topografisi başta olmak üzere malzeme özelliklerinin nanometrik çözünürlükte analizine olanak tanıyan, temassız ve yüksek hassasiyetli bir mikroskopi tekniğidir.

Tezin ilk aşamasında, derinlemesine bir literatür taraması gerçekleştirilerek 2D malzemelerin yapısal ve fiziksel karakterizasyonuna dair mevcut bilgi birikimi ortaya konulacaktır. Bu tarama kapsamında, 2D malzemelerin klasik karakterizasyon teknikleri değerlendirilecek; ardından AKM'nin bu tekniklere değinilecektir.

İzleyen bölümlerde, seçilen 2D malzeme örnekleri üzerinde AKM kullanılarak görüntüleme işlemleri gerçekleştirilecek, elde edilen yüzey verileri üzerinde bazı ML tabanlı analiz

yöntemleri uygulanacaktır. ML algoritmaları, elde edilen AKM görüntülerinden desen tanıma, sınıflandırma ve tahmin gibi işlemleri otomatik olarak gerçekleştirmek üzere yapılandırılacaktır.

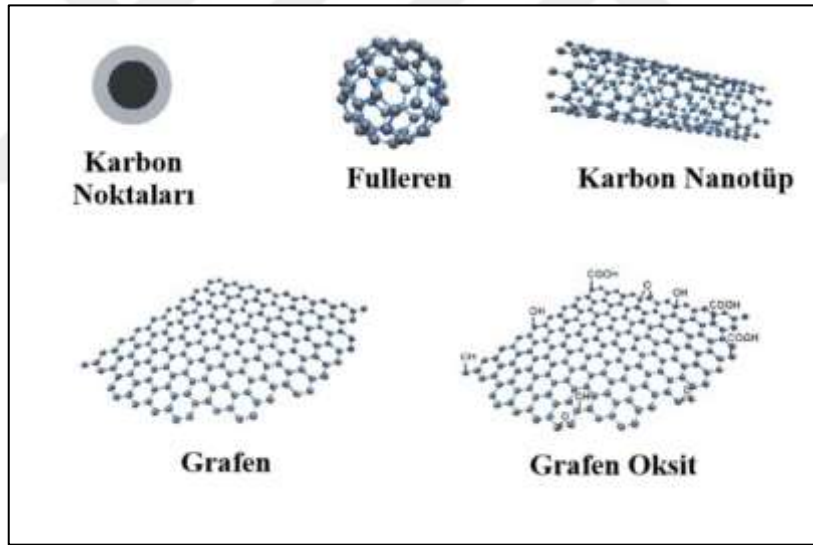
Bu tezde yalnızca görüntü analizi değil, aynı zamanda karakterizasyon yönteminin güvenilirliği de değerlendirilecektir. Bu doğrultuda, AKM'nin 2D malzemelerdeki performansı, ML destekli bir bakış açısıyla irdelenecek; hem mevcut doğruluk ve tekrarlanabilirlik seviyeleri analiz edilecek hem de AKM'nin ML entegrasyonu ile nasıl geliştirilebileceğine dair öneriler sunulacaktır.

Sonuç olarak, bu çalışma AKM'nin sadece bir karakterizasyon aracı olarak değil, aynı zamanda veri odaklı, akıllı analiz yaklaşımlarıyla daha işlevsel hale getirilebilecek bir sistem olarak ele alınmasını amaçlamakta; böylece 2D malzemelerin daha güvenilir, hızlı ve yüksek doğrulukla karakterize edilmesine katkı sağlamayı hedeflemektedir.

2. GENEL BİLGİLER

2.1 İKİ BOYUTLU (2D) MALZEMELER VE GENEL ÖZELLİKLERİ

Nanomalzemeler, boyutsal sınıflandırmalara göre farklı kategorilere ayrılan, boyutları nanometre ölçeğinde (genellikle 1–100 nm arasında) yapısal özelliklere sahip çok sayıda ileri teknoloji uygulamalarında kullanılan malzemelerdir. Bu boyutları inceleyecek olursak: malzeme yalnızca bir yönü nano boyutlardaysa, diğer yönleri ise çok daha büyükse, bu tür bir yapı bir boyutlu (1D) malzeme olarak adlandırılır ve genellikle nanotüp ya da nanotel terimleriyle ifade edilir. Eğer malzeme yalnızca bir boyut nano ölçekteyse, bu durumda malzeme iki boyutlu (2D) olarak adlandırılır [31], [32], [33], [34], [35], [36]. Diğer yandan, hiçbir boyutu nano ölçeğe düşmeyen malzemeler de kütsel (bulk) malzemeler olarak adlandırılır ve günlük yaşamda karşılaştığımız sıradan malzemelerin büyük çoğunluğu bu sınıfa girmektedir.



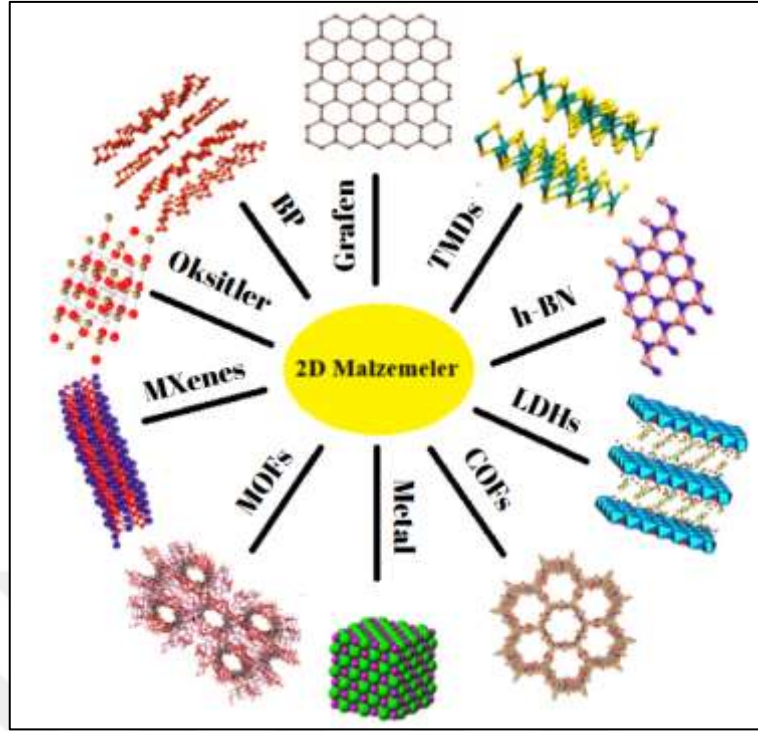
Şekil 2.1: Farklı Karbon Bazlı Nanoyapılar: Karbon Noktaları, Fulleren, Karbon Nanotüp, Grafen ve Grafen Oksit.

Şekil 2.1'de gösterildiği gibi, karbon bazlı nanomalzemeler, ayırt edici fizikokimyasal özelliklerin yanı sıra çeşitli boyutsal morfolojiler sergiler. Karbon noktaları (0D), küresel mimarilerine ve olağanüstü fotoluminesan özellikleri ile, özellikle biyoreferanslama ve sensör uygulamalarında yaygın olarak kullanılır. Fullerenler (0D) ise içi boş kafes oluşumlarında düzenlenmiş karbon atomları ile karakterize edilir ve önemli antioksidan yetenekleri ile tanınırlar. 1D olan karbon nanotüpler olağanüstü mekanik dayanıklılıkları ile

nanoelektronik, enerji depolama ve kompozit malzemelerde yaygın olarak kullanılır. Bu tez kapsamında da ele alacağımız grafen (2D), petek düzenlemesinde yapılandırılmış bir karbon atomu tabakasından oluşmaktadır ve grafen üstün elektriksel, termal ve mekanik özelliklere sahiptir. Grafen oksit (GO), tersine, çeşitli oksijenli fonksiyonel gruplarla (OH, COOH, vb.) entegre edilmiş grafen yüzeyinin işlevsel bir varyantını temsil eder, böylece onu sulu çözeltilerde dağılabilir hale getirir ve biyomedikal, çevresel ve enerji alanlarında uygulanabilir hale getirir. Bu konfigürasyonlar, nanoteknolojinin sayısız sektöründe temel unsurları oluşturur. Bu tez, kapsamında ise özellikle 2D materyallere odaklanacaktır.

Minimum kalınlığa sahip malzemeler gibi 2D malzemelerde atomik ölçekli boyutlarla karakterize edilen ve kalınlığında bir veya birkaç atomdan oluşan düzlemsel konfigürasyonlarla karakterize edilen kristal maddelerdir. Bu konfigürasyon, malzemelerin yalnızca iki uzamsal boyutta (yani uzunluk ve genişlik yönlerinde) genişlemesine izin verir; üçüncü boyutta, boyutları ihmal edilebilir olarak kabul edilecek kadar küçüktür. Bu yaklaşım, klasik katı hal fiziğinin kurallarını aşarak kuantum sınırlayıcı etkilerin baskın olduğu yeni bir davranış ortaya çıkarır. Bu özellikleriyle 2D malzemeler, üç boyutlu (3D) analoglarına kıyasla önemli ölçüde daha belirgin elektronik, optik, mekanik ve kimyasal özellikler gösterebilir.

2D malzeme ailesi, grafenin keşfinden bu yana dikkate değer şekilde değer kazanmış ve genişlemiştir. 2D malzemeler, 3D muadillerinden elektronik özelliklerin ayarlanmasında büyük bir esneklik sunmaktadır. Örneğin, değişen katman sayısı ile bant aralığı mühendisliği yapılabilmekte. Bu malzemelerde gözlemlenen özgün 2D fiziksel davranışları özellikle önemli bir araştırma konusu haline gelmiştir.



Şekil 2.2: 2D (İki Boyutlu) Matzemeler.

Literatürde yaygın olarak araştırılan 2D matzemeler (Şekil 2.2), yalnızca grafen ve TMD’lerle sınırlı kalmayıp, çok çeşitli yapısal ve kimyasal grupları kapsayan geniş bir malzeme ailesine yayılmaktadır (Şekil 2.2). Bu matzemeler; farklı kristal yapılar, elektronik bant özellikleri, yüzey kimyası ve fiziksel dayanım düzeyleriyle çok çeşitli teknolojik uygulamalara olanak tanımaktadır.

En bilinen örneklerden biri olan grafen, olağanüstü elektriksel iletkenliği, yüksek termal iletkenliği ve mekanik dayanımı sayesinde birçok alanda öncü konumdadır. Geçiş Metali Dikalkojenitleri (Transition Metal Dichalcogenides – TMDs) olarak bilinen MoS_2 , WS_2 , MoSe_2 , WSe_2 , TiS_2 gibi matzemeler, özellikle tek katmanlı hâllerinde doğrudan bant aralığına sahip olmaları nedeniyle optoelektronik aygıtlar, transistörler ve fotodetektörler gibi uygulamalarda öne çıkmaktadır. Hekzagonal bor nitrür (h-BN), geniş bant aralığı (~5.9 eV), kimyasal kararlılığı ve mükemmel yalıtkanlığı nedeniyle genellikle ara katman veya dielektrik malzeme olarak tercih edilir. Fosforen (Black Phosphorus – BP), katman sayısına bağlı olarak değişen yarıiletken bant aralığı ile özellikleri sayesinde elektronik aygıt uygulamaları için kullanılır.

Bunlara ek olarak, görselde de yer alan diğer 2D malzeme sınıfları şunlardır:

Oksitler: Genellikle metal oksitlerin 2D formunda olup fotokataliz ve enerji depolama gibi alanlarda kullanılmaktadır.

MXeneler: Geçiş metallerinden türetilmiş karbür veya nitrür yapılı 2D malzemelerdir; yüksek iletkenlikleri sayesinde pil ve süperkapasitör uygulamalarında kullanılır.

MOF'lar (Metal-Organic Frameworks): Gözenekli yapıları sayesinde gaz depolama ve ayırma, sensör ve kataliz uygulamalarında etkilidir.

COF'lar (Covalent Organic Frameworks): Organik yapı taşlarının kovalent bağlarla oluşturduğu düzenli 2D yapılardır; hafif, gözenekli ve işlevselleştirilebilir olmaları avantaj sağlar.

Metalik 2D yapılar: Saf metal atomlarının oluşturduğu atomik düzeyde tabakalı yapılar olarak araştırılmaktadır.

LDH'ler (Layered Double Hydroxides): Katmanlı hidroksit yapılarına sahip bu malzemeler, iyon değişimi ve çevresel uygulamalarda ön plandadır.

Bu geniş çeşitlilik sayesinde 2D malzemeler hem tek başlarına hem de van der Waals heteroyapılar şeklinde birleştirilerek; nanoelektronik, fotonik, enerji dönüşümü ve depolama, biyomedikal uygulamalar gibi çok çeşitli alanlarda çok işlevli cihazların geliştirilmesine olanak sağlamaktadır.

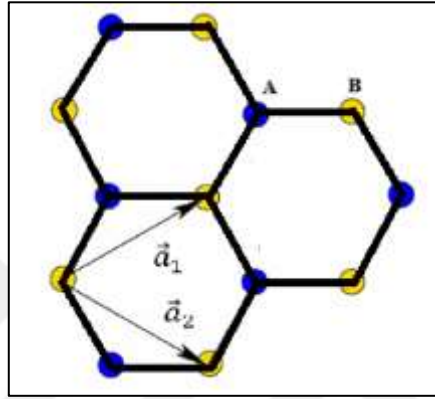
2.1.1 Grafen: Yapısı, Özellikleri ve Önemi

Grafen, bal peteği kafes yapısı oluşturan tek bir karbon atomu tabakasıdır ve 2D malzemelerden biri olarak hem bilimsel araştırmalar hem de teknolojik uygulamalar için yenilikçi bir malzeme olarak kabul edilmektedir [37], [38], [39], [40]. Eşsiz atomik yapısı sayesinde grafen, optik, elektronik, termal ve mekanik gibi birçok benzersiz özelliğe sahiptir. Grafen, altıgen bir düzen oluşturmuş karbon atomlarının sp^2 hibritleşmesi ile birbirine bağlandığı düzlemsel bir yapıdır. Bu düzenleme, elektronların yapıda son derece hızlı ve serbest bir şekilde hareket etmesine olanak tanır. Bu sayede grafen hem yüksek elektriksel iletkenlik hem de mükemmel ısı iletimi gibi özellikleri bir arada sunar. Üstelik yapısının esnekliği ve inanılmaz dayanıklılığı sayesinde, grafen sadece teorik olarak değil, pratik

uygulamalarda da kendini kanıtlamış bir malzeme olarak öne çıkar. Grafenin Şekil 2.3’de yer alan kristal yapısında Bravais kafesi üçgenseldir ve kafes vektörleri şu şekildedir

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3}), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3}), \quad (2.1)$$

Burada $a = 1,42 \text{ Å}$ ’dır ve en yakın komşu mesafesidir. Birim hücre, A ve B olmak üzere iki alt kafese ait iki atom içerir. Alt kafes A’nın her bir atomu, alt kafes B’ye ait üç atom ile çevrilidir, bu durumunda tam tersi de geçerlidir.



Şekil 2.3: Grafenin Kristal Yapısı.

Grafenin oluşturulması için literatürde farklı yöntemler geliştirilmiştir. Bu yöntemler, üretim maliyeti, grafen kalitesi, katman sayısı ve uygulama alanına bağlı olarak önemli farklılıklar göstermektedir. Grafenin üstün özelliklerinden yararlanmak ve onu endüstriyel ölçekte kullanabilmek için doğru üretim tekniğinin seçilmesi kritik öneme sahiptir.

Literatürde farklı grafen üretim teknikleri bulunur, bunlar genellikle laboratuvar ölçeğinden sanayi ölçeğine kadar çeşitli farklı yöntemler içermektedir. Bunların arasında en yaygın kullanılan grafen üretim yöntemleri mekanik eksfoliasyon, kimyasal buhar biriktirme (Chemical Vapor Deposition – CVD), oksidatif eksfoliasyon, kimyasal soyma, epitaksiyel büyüme ve elektrostatik sayılabilir. Mekanik eksfoliasyon yöntemi, karbon atomlarının düzenli olarak altıgen tabakalar halinde dizildiği, yumuşak ve kaygan yapıya sahip olan grafitin yapışkan bir bant veya mikroskop camı gibi mekanik bir yöntemle soyulması sonucu tek katmanlı grafen elde edilmesi yöntemidir. Bu yöntemle elde edilen grafen yüksek kalitededir ancak dezavantajı büyük ölçekli üretim için uygun olmamasıdır. Bir diğer yöntem CVD yöntemidir. Bu yöntemde karbon içeren gazların (örneğin metan) yüksek

sıcaklıkta metal bir katalizör (genellikle bakır veya nikel) üzerine ayrıştırılmasıyla grafen oluşturur. CVD ile üretilen grafen büyük yüzey alanına sahip olup elektronik uygulamalarda sıkça tercih edilmektedir. Oksidatif eksfoliasyon yöntemi ise, grafitin güçlü oksitleyicilerle etki ettirilerek grafen oksit (GO) formuna dönüştürülmesi işlemini içerir. Sonrasında indirgeme işlemiyle indirgenmiş grafen oksit (rGO) elde edilmektedir. Bu yöntem büyük ölçekli üretim için uygundur ancak yapısal kusurlar barındırdığı için iletkenliği düşük olabilir. Kimyasal soyma yöntemi ise grafitin sıvı ortamda yüzey aktif maddeler kullanılarak mekanik olarak soyulması işlemini içerir. Bu yöntemle yüksek miktarda grafen elde edilebilir, ancak elde edilen grafenin saflığı düşük olması dezavantajıdır. Epitaksiyel büyüme yöntemi ise yüksek sıcaklıklarda silikon karbür (SiC) yüzeyinden silikon atomlarının buharlaştırılması yolu ile geride kalan karbon atomlarının yüzeyde grafen tabakası oluşturması prensibine dayanmaktadır. Bu yöntem, yüksek kaliteli ve düzenli grafen tabakaları elde etmek için genellikle idealdir. Elde edilen grafen, özellikle yüksek frekanslı elektronik uygulamalarda kullanılmaktadır. Elektrostatik yöntem, grafit elektrotların çözelti içinde voltaj uygulanarak soyulması ile gerçekleşir. Bu yöntem nispeten kolay ve maliyet etkin olsa da üretilen grafenin yapısal bütünlüğü her zaman yüksek kalitede olmayabilir.

Bu tez çalışmasında, SiC'nin C yüzeyi (C-face of SiC) üzerinde epitaksiyel büyüme yöntemiyle üretilmiş grafen yüzeyinin karakterizasyonu ve bu karakterizasyon yöntemi ile elde edilen verilerin ML tabanlı yaklaşımlar kullanılarak işlenmesi amaçlanmıştır. Bu kapsamda, elde edilen verilerden bir veri seti oluşturulacak ve bu veri seti kullanılarak grafen yüzey kalitesinin otomatik değerlendirilmesi hedeflenecektir.

2.2 NANO-ÖLÇEKLİ KARAKTERİZASYON TEKNİKLERİ

2D malzemelerin benzersiz özellikleri, yapılarının atomik inceliği ve yüzeylerinin yüksek oranda aktif olması nedeniyle, bu malzemelerin doğru şekilde analiz edilmesi oldukça zorlu bir süreçtir. Yapısal özelliklerinin tek atom kalınlığında olması, 2D malzemelerin geleneksel karakterizasyon yöntemleriyle incelenmesini güçleştirmektedir. Bu bağlamda, yüksek çözünürlük ve hassasiyet gerektiren özel tekniklere ihtiyaç duyulmaktadır [41], [42], [43], [44], [45], [46], [47], [48].

Nano-ölçekli karakterizasyon teknikleri, genel olarak malzemelerin yapısal, elektronik, optik ve yüzey özelliklerini yüksek hassasiyetle incelemek için kullanılmaktadır. Bu teknikler yalnızca 2D malzemeler için değil, aynı zamanda diğer nano yapıdaki malzemeler için de kritik öneme sahiptir. Ancak bu tez kapsamında özellikle 2D malzemelerin karakterizasyonu üzerine odaklanılacaktır. 2D malzemelerin katman kalınlığı, yüzey kusurları, kristal yapısı, elektronik bant yapısı ve yüzey pürüzlülüğü gibi özelliklerinin doğru ve güvenilir bir şekilde belirlenmesi, bu malzemelerin uygulama alanlarında kullanılabilirliğini doğrudan etkilemektedir.

2D malzemelerin özellikleri, geleneksel 3D malzemelerden farklı olarak, doğrudan yüzey yapıları ve atomik düzeydeki düzenlilikleri ile ilişkilidir. Bu nedenle, yüzey özelliklerinin doğru ve güvenilir bir şekilde belirlenmesi, bu malzemelerin elektronik, optik ve mekanik performansını doğrudan etkilemektedir. Karakterizasyon yöntemleri ile elde edilen veriler, 2D malzemelerin pratik uygulamalardaki performansını optimize etmek ve malzeme seçim süreçlerini daha verimli hale getirmek için kullanılmaktadır. Bu karakterizasyon yöntemleri, malzeme kalitesinin belirlenmesi, yüzey pürüzlülüğünün ölçülmesi, katman sayısının tespiti, morfolojik kusurların belirlenmesi ve elektriksel iletkenlik gibi özelliklerin değerlendirilmesi açısından kritik öneme sahiptir. Özellikle grafen gibi yüksek iletkenliğe sahip 2D malzemelerde, yüzey kalitesinin doğru değerlendirilmesi, nanoelektronik aygıtlar, şeffaf iletken filmler, sensör uygulamaları ve esnek elektronik sistemler gibi teknolojik alanlarda doğru malzeme seçimini sağlar.

Ayrıca, yüzey pürüzlülüğünün belirlenmesi, malzemenin tribolojik özelliklerini ve mekanik dayanımını anlamada önemli rol oynamaktadır. Bu veriler, grafen tabanlı esnek devreler, biyosensörler ve yüksek hızlı transistörler gibi uygulamalarda malzemenin performansını tahmin etmek için kullanılır. Katman sayısının doğru tespiti ise, 2D malzemelerin bant aralığı mühendisliği ve optoelektronik cihaz tasarımı gibi alanlarda kritik öneme sahiptir.

Morfolojik kusurların belirlenmesi ise, özellikle yüksek taşıyıcı hareketliliği gerektiren elektronik devrelerde malzeme hatalarını önceden tespit etme açısından önemlidir. Elektriksel iletkenlik verileri ise, 2D malzemelerin iletkenlikten yalıtıkana geçiş özelliklerini belirleyerek, özellikle alan etkili transistörler (FET) ve elektrot malzemeleri gibi uygulamalarda doğru yapılandırmanın sağlanmasına katkı sağlar.

Karakterizasyon yöntemlerinden elde edilen veriler, sadece akademik arařtırmalarda deęil, aynı zamanda malzeme geliştirme, cihaz tasarımı, üretim süreçlerinin optimizasyonu ve kalite kontrol gibi endüstriyel uygulamalarda da geniş bir kullanım alanı bulmaktadır. Bu yöntemlerin sağladığı yüksek hassasiyetli ölçümler, 2D malzemelerin gerçek uygulamalarda güvenilir ve verimli bir şekilde kullanılabilmesine olanak tanımaktadır.

Bu karakterizasyon yöntemleri X-Iřını Fotoelektron Spektroskopisi (XPS), Geçirimli Elektron Mikroskobu (TEM), X-Iřını Difraksiyonu (XRD), Yüzey Plazmon Rezonansı (SPR), Taramalı Elektron Mikroskobu (SEM), Raman Spektroskopisi, Taramalı Tünelleme Mikroskobu (STM) ve Atomik Kuvvet Mikroskobu (AFM) şeklinde sayılabilir.

X-Iřını Fotoelektron Spektroskopisi (XPS): XPS, 2D malzemelerin yüzey kimyasını belirlemek amacıyla kullanılır. X-ıřınlarının malzeme yüzeyine çarpmasıyla açığa çıkan fotoelektronların enerjileri ölçülerek, yüzeydeki elementlerin kimyasal bağ durumları analiz edilir. Özellikle grafen oksit (GO) gibi yüzey fonksiyonelleřtirilmiş malzemelerde oksijen içerięi ve bağ yapısının belirlenmesi için kullanılır.

Geçirimli Elektron Mikroskobu (TEM): TEM, atomik düzeyde kristal yapı ve kusur analizi için kullanılan yüksek çözünürlüklü bir tekniktir. Elektron demeti, ultra ince numuneden geçerek görüntü oluşturur. Bu yöntem, grafen ve TMD'ler gibi tek atom kalınlığındaki yapıları analiz etmek için idealdir. Özellikle kusur yoğunluęu, kristal yapısı ve kenar yapıları hakkında bilgi verir.

X-Iřını Difraksiyonu (XRD): XRD, malzemenin kristal yapısını ve faz analizini belirlemek için kullanılır. X-ıřınlarının kristal düzlemlerden kırılması sonucu elde edilen desenler, kristalin düzlemsel aralıkları (d deęerleri) ve yapısal bütünlüęü hakkında bilgi sağlar. Grafenin katmanlar arası mesafesini ve grafit yapısından farklılıęını deęerlendirmede kullanılır.

Yüzey Plazmon Rezonansı (SPR): SPR, özellikle biyosensör uygulamalarında yüzey etkileřimlerinin analiz edilmesi için kullanılır. Yüzeye tutunan biyomoleküllerin plazmonik rezonans üzerindeki etkisi, malzemenin yüzey bağlanma kinetięi ve kimyasal etkileřimleri hakkında bilgi verir. Grafen tabanlı sensörlerin hassasiyetinin artırılmasında önemli rol oynar.

Taramalı Elektron Mikroskobu (SEM): SEM, 2D malzemelerin yüzey morfolojisini yüksek çözünürlükte görüntülemek için kullanılır. Elektron demeti yüzeye çarptığında yayılan sekonder elektronlar kullanılarak yüzey topografyası belirlenir. Katman yapısı, yüzey dokusu ve homojenlik hakkında bilgi sağlar.

Raman Spektroskopisi: Raman spektroskopisi, özellikle grafen ve TMD'ler gibi malzemelerde katman sayısı, kristal yapısı ve yapısal kusurların belirlenmesinde kullanılır. Raman saçılımı ile elde edilen G bandı, D bandı ve 2D bandı grafenin kalitesi ve yapısal bütünlüğü hakkında bilgi verir.

Taramalı Tünelleme Mikroskobu (STM): STM, iletken veya yarıiletken yüzeylerin atomik çözünürlükte görüntülenmesini sağlar. İğne uç ve yüzey arasında uygulanan voltaj ile tünelleme akımı oluşturulur. Bu akımın değişimi, yüzeyin atomik yapısının haritalanmasına olanak tanır. Özellikle grafen üzerinde yüzey atomlarının düzenliliği ve kusur noktalarının belirlenmesi için kullanılır.

Atomik Kuvvet Mikroskobu (AKM): AKM, yüzey topografyasını atomik çözünürlükte belirlemek için kullanılır. İğne uç, yüzeyle etkileşime girerek yükseklik profili, pürüzlülük ve mekanik özellikler hakkında detaylı bilgi sağlar. Grafen gibi tek tabaka malzemelerde katman sayısı ve yüzey düzgünlüğü analizinde kritik rol oynar.

Bu karakterizasyon teknikleri, yüksek hassasiyetle yapısal ve kimyasal bilgi sağlayarak 2D malzemelerin elektronik, optik ve mekanik özelliklerinin analizinde tamamlayıcı roller üstlenmektedir. Farklı tekniklerin bir arada kullanılması, 2D malzemelerin kristal yapısı, yüzey morfolojisi ve kimyasal bileşimi gibi özelliklerin doğru bir şekilde belirlenmesini sağlar. Özellikle grafen gibi tek katmanlı yapılar, karakterizasyon tekniklerinden elde edilen veriler ışığında malzeme kalitesinin artırılması ve optimize edilmesi açısından büyük bir potansiyel taşımaktadır.

Bu teknikler arasında, yüzey pürüzlülüğü ve atomik düzeyde yapısal analiz için AKM öne çıkmaktadır. AKM'nin sağladığı yüksek çözünürlük ve yüzey hassasiyeti, grafen gibi tek tabaka malzemelerin yüzey topografyasını ve pürüzlülüğünü analiz etmede kritik rol oynamaktadır. Diğer tekniklerden farklı olarak AKM, yüzeyle fiziksel temas kurarak yükseklik profili, mekanik özellikler ve yüzey düzgünlüğü hakkında doğrudan bilgi sağlar.

Bu özelliği sayesinde, katman sayısı ve yapısal kusur yoğunluğunun doğru bir şekilde belirlenmesi mümkün olmaktadır.

Bu tez kapsamında, epitaksiyel büyüme yöntemiyle üretilmiş grafen yüzeylerinin yapısal özelliklerinin belirlenmesinde AKM'nin etkinliği değerlendirilecektir. AKM ile elde edilen veriler, ML tabanlı analiz yöntemleri kullanılarak işlenecek ve grafen yüzeyinde AFM görüntülerinde oluşan hizalama hatalarının detaylı olarak incelenmesi amaçlanacaktır. Bu analiz sürecinde, elde edilen veri seti üzerinde hizalama hatalarının belirlenmesi, hataların oluşum mekanizmalarının anlaşılması ve bu süreçlerin grafiksel olarak yorumlanması hedeflenmektedir. Böylece, epitaksiyel büyüme yöntemiyle elde edilen grafen yüzeylerinin kayma davranışının objektif ve sistematik bir şekilde değerlendirilmesi sağlanacaktır.

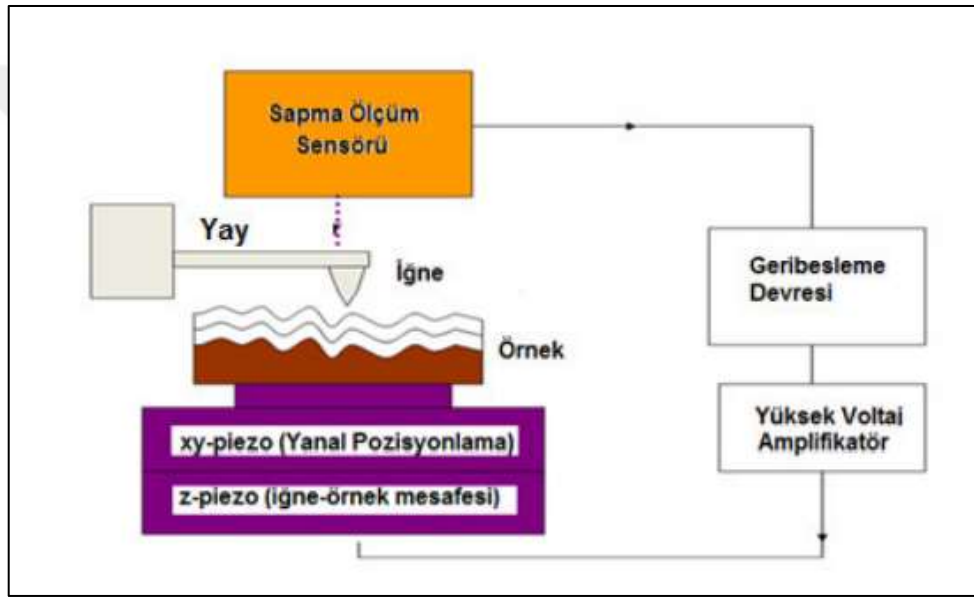
2.2.1 Atomik Kuvvet Mikroskobu (AKM)

Taramalı Uç Mikroskopları (TUM), yüzey görüntüleme ve karakterizasyonu için geliştirilmiş en önemli mikroskopi tekniklerinden biridir. Bu yöntemde, sivri bir iğne (prob) yardımıyla yüzey taranır ve elde edilen sinyaller aracılığıyla yüzeyin topoğrafik yapısı çıkarılır. TUM ailesinin ilk üyesi olan Taramalı Tünelleme Mikroskobu (STM) 1982 yılında geliştirilmiş [49], bunu 1986 yılında Binnig ve arkadaşları tarafından geliştirilen AKM takip etmiştir. STM yalnızca iletken yüzeylerin incelenmesine olanak tanırken, AKM'nin en önemli avantajı iletken veya yalıtkan ayrımı gözetmeksizin çok çeşitli yüzeylerin analizine imkân sağlamasıdır [50], [51], [52], [53], [54]. Bu yönüyle AKM, özellikle biyolojik ve polimer temelli malzemelerin incelenmesinde büyük bir avantaj sunar [55], [56],[57].

TUM ailesinin önemli bir üyesi olan AKM, 1980'lerin sonlarından bu yana nanoteknoloji alanında devrim niteliğinde bir ölçüm ve görüntüleme aracı olarak kullanılmaktadır. Nanoskala malzemelerin yapısal ve fiziksel özelliklerini incelemek, geleneksel mikroskopi teknikleriyle sınırlı ve zahmetli bir süreçken, AKM bu analizleri yüksek hassasiyet, çözünürlük ve tekrarlanabilirlik ile gerçekleştirebilme imkânı sunar. Yalnızca yüzey morfolojisinin değil; aynı zamanda mekanik, elektriksel ve manyetik özelliklerin de nanometre düzeyinde ölçülebilmesi, AKM'yi malzeme bilimi, biyoteknoloji, kimya ve fizik gibi birçok disiplin için vazgeçilmez bir araştırma aracı haline getirmiştir.

2.2.1.1 AKM çalışma prensibi

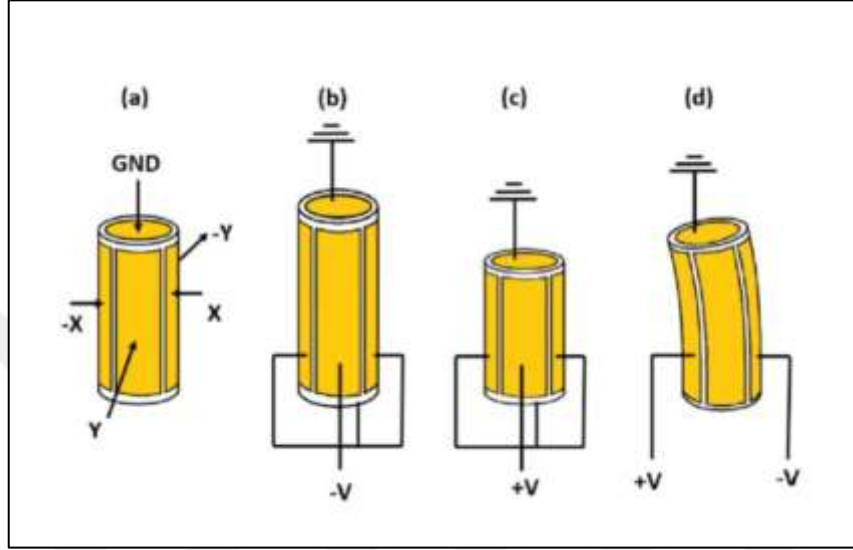
AKM'nin çalışma prensibi, uç kısmında atomik düzeyde sivriltilmiş bir iğne (prob) bulunan mikrofabrikasyon ürünü bir yay (Sensor tutucu-cantilever), örnek yüzeye çok yakın bir mesafede konumlandırılmasına dayanır. Bu prob ile yüzey arasında oluşan etkileşim kuvvetleri örneğin van der Waals, elektrostatik, kapiller ya da kimyasal bağ kuvvetleri yay üzerinde saptamalara neden olur. Bu saptamalar, üzerine yönlendirilmiş bir lazer ışınının yansımalarıyla fotodedektör aracılığıyla algılanır ve yüzeyin topografik haritası yüksek çözünürlükle çıkarılır.



Şekil 2.4: Atomik Kuvvet Mikroskobu (AKM) Çalışma Yöntemi.

Şekil 2.4'te, AKM'nin temel çalışma prensibini gösteren bir şematik diyagram yer almaktadır. Sistemin merkezinde, ucunda atomik düzeyde sivriltilmiş bir iğne bulunan bir yay bulunmaktadır. Bu yay, analiz edilecek yüzeyin hemen üzerinde konumlandırılır. İğne ile yüzey arasındaki atomik kuvvetler yayın saptmasına neden olur. Bu saptamalar, yukarıda yer alan Sapma Ölçüm Sensörü tarafından lazer yansıması aracılığıyla algılanır. Yayın saptmasına göre geribesleme devresi devreye girer. Bu devre, z-piezo'yu kontrol ederek iğne-örnek mesafesini dinamik olarak ayarlar. Bu süreçte gerekli hassas hareketler, Yüksek Voltaj Amplifikatörü tarafından sağlanan gerilimlerle gerçekleştirilir. Elde edilen veriler, her bir yüzey noktasına karşılık gelen sapma miktarlarını içerir. Bu verilerden, yüzeyin üç boyutlu topoğrafik haritası oluşturulur.

Örnek yüzey, piezoelektrik bir platform üzerine yerleştirilmiştir. Bu platform iki ana bileşenden oluşur: xy-piezo (yanal pozisyonlama): İğnenin yüzey üzerinde yatay eksenlerde (x ve y) hassas bir şekilde hareket etmesini sağlar. z-piezo (iğne-örnek mesafesi): İğne ile yüzey arasındaki dikey mesafeyi düzenleyerek, etkileşim kuvvetini sabit tutmak üzere sistemin z ekseninde hareketini kontrol eder.



Şekil 2.5: Piezo-Tüp.

Şekil 2.5'te piezoelektrik tüp tipi pozisyonlayıcının farklı elektriksel gerilim uygulamaları altındaki davranışı gösterilmektedir. Bu tür pozisyonlayıcılar AKM gibi yüksek hassasiyetli sistemlerde, hem dikey (z) hem de yatay (x-y) eksenlerde konumlandırma yapmak için kullanılır.

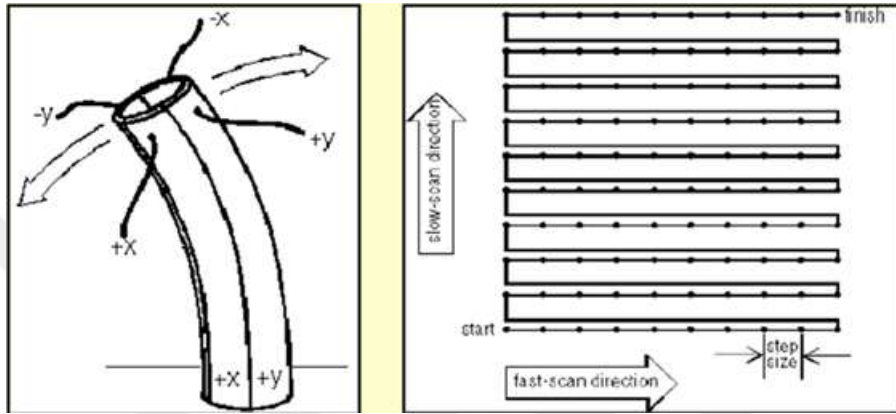
(a) Tüpün gerilim uygulanmadan önceki dengede (nötr) hali gösterilmektedir. Üst kısım toprağa (GND) bağlıdır ve x, y, z yönlerinde herhangi bir deformasyon gözlenmez.

(b) Dış elektrotlara negatif bir gerilim uygulandığında, piezoelektrik malzeme z ekseninde genişler. Bu durumda tüp yukarı yönde (z+) uzar. Bu hareket, probun yüzeyden uzaklaştırılmasını sağlar.

(c) Dış yüzeye pozitif gerilim uygulandığında tüp büzülür; yani z yönünde kısalmıştır. Bu, probun yüzeye yaklaşmasını sağlar.

(d) Tüpün karşılıklı iki yanına birine pozitif, diğerine negatif olacak şekilde gerilim uygulanırsa, piezoelektrik yapı x veya y yönünde eğilir. Bu deformasyon sayesinde prob, yüzey üzerinde yanal tarama yapabilir.

Bu şekil, piezo-tüpün çok eksenli konumlandırma kabiliyetlerini açıkça ortaya koymaktadır. Bu hassas kontrol mekanizması sayesinde AKM, yüzeyleri nanometre ve altı çözünürlükte haritalayabilmektedir.



Şekil 2.6: Piezo-Tüp ile AKM Raster Taraması.

Yüzey taraması, AKM genellikle ızgara (raster) tarama yöntemi ile gerçekleştirilir. Bu yöntemde, prob ile yüzey arasındaki etkileşim kuvveti sabit tutulur ve bu kuvvetin değişimine bağlı olarak sistem, sensörü dikey yönde (z ekseninde) hareket ettirir. Elde edilen veriler iki boyutlu bir matris şeklinde kaydedilir ve bu veriler renklendirilerek yüzeyin üç boyutlu topoğrafik haritası oluşturulur.

Şekil 2.6, AFM sisteminde kullanılan piezoelektrik tüp tipi tarayıcının yanal eksenlerde (x-y) nasıl hareket ettiğini ve yüzeyin hangi düzende tarandığını göstermektedir. Şeklin sol tarafındaki görselde, piezoelektrik tüpün dış yüzeyine uygulanan elektriksel gerilimler sonucunda tüpün x ve y eksenlerinde eğildiği görülmektedir. Bu eğilme, tüpün uç kısmında yer alan probun yüzey üzerinde hassas bir şekilde yönlendirilmesini sağlar. Uygulanan gerilimin büyüklüğü ve yönüne bağlı olarak prob pozisyonu +X, -X, +Y veya -Y doğrultularında hareket ettirilebilir. Böylece AFM probu, yüzey boyunca yüksek hassasiyetle tarama yapabilir.

Şeklin sağ tarafındaki diyagram ise AKM'de kullanılan tipik raster tarama desenini temsil etmektedir. Bu tarama iki eksenli olarak gerçekleştirilir:

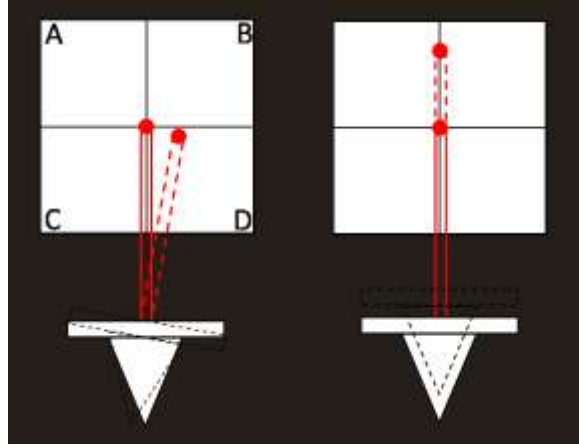
Fast-scan direction: Probu hızlı şekilde ilerlediği, genellikle x eksenini boyunca yapılan yatay taramadır. Her satır boyunca çok sayıda veri noktası toplanır.

Slow-scan direction: Taramanın daha yavaş ilerlediği ve satırların birer birer yukarı doğru kaydırıldığı y eksenidir.

Her yatay satırın tamamlanmasının ardından sistem bir adım yukarı çıkar (step size) ve bir sonraki satır taranır. Bu işlem, yüzeyin tamamı boyunca sistematik bir şekilde devam eder. Sonuç olarak elde edilen iki boyutlu veri matrisi, yüzeyin üç boyutlu görselleştirilmesine olanak tanır.

AKM'nin temel çalışma prensibi, prob ucunun örnek yüzeyle etkileşime girmesi sonucu oluşan kuvvetlerin, yay üzerindeki sapmalar aracılığıyla algılanmasına dayanır. Bu nedenle, yay sapmasının yüksek hassasiyetle ölçülebilmesi, sistemin genel duyarlılığı açısından kritik öneme sahiptir. Sapmadaki en küçük değişimlerin doğru biçimde algılanması, yüzeyin yüksek çözünürlüklü haritalanmasını ve atomik düzeydeki çok küçük kuvvetlerin tespit edilmesini mümkün kılar.

AKM sistemlerinde yay sapmasını algılamak için farklı teknolojiler geliştirilmiştir. İlk olarak 1986 yılında Binnig ve arkadaşları tarafından geliştirilen orijinal AKM sisteminde, sapma ölçümü için tünelleme sensörü kullanılmıştır. Bu yöntemde, yay ucuna yerleştirilen iletken bir tünelleme probu, sabit bir referans elektrot ile çok yakın mesafede konumlandırılır. Yay sapma yaptıkça bu iki nokta arasındaki mesafe değişir ve tünelleme akımında meydana gelen değişim üzerinden sapma miktarı hesaplanır. Bu yöntem, nanometre altı düzeyde duyarlılık sağlasa da, sistemin dışsal gürültülere açık olması ve karmaşık ayar gerektirmesi nedeniyle modern sistemlerde daha az tercih edilmektedir.



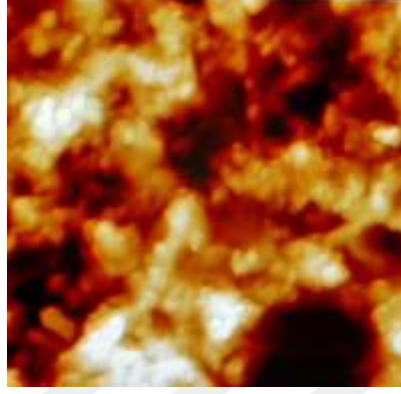
Şekil 2.7: AKM Optik Kol-Yansıma.

Tünelleme yöntemine alternatif olarak geliştirilen ve günümüzde en yaygın kullanılan ölçüm tekniği, optik ışın sapması (Optical Beam Deflection OIS) yöntemidir. Bu yöntem, ilk olarak Meyer ve Amer tarafından geliştirilmiş olup, AKM sistemlerinde standart hale gelmiştir (Şekil 2.7). Bu teknikte, bir lazer ışını yayın arka yüzeyine hafif açılı olarak odaklanır. Yayın arka yüzeyi, ayna gibi davranarak gelen lazer ışını geri yansıtır. Yansıyan bu ışın, pozisyon duyarlı fotodedektör (PDFD) üzerine düşer. Yay sapma yaptığında, lazer noktasının PDFD üzerindeki konumu değişir. PDFD üzerinde yer alan dört fotodiyot elemanı, lazer noktasının hareketini hem dikey (normal kuvvetler) hem de yanal (sürtünme gibi kuvvetler) bileşenleriyle birlikte ölçebilir.

Lazerin PDFD üzerindeki konumundaki değişim, yay sapması ile doğru orantılıdır. Bu sayede femtometre (10^{-15} m) mertebesinde sapmalar dahi algılanabilir. Bu yüksek hassasiyet, AKM'nin yüzey topografisini ve kuvvet etkileşimlerini yüksek doğrulukla ortaya koymasını sağlar.

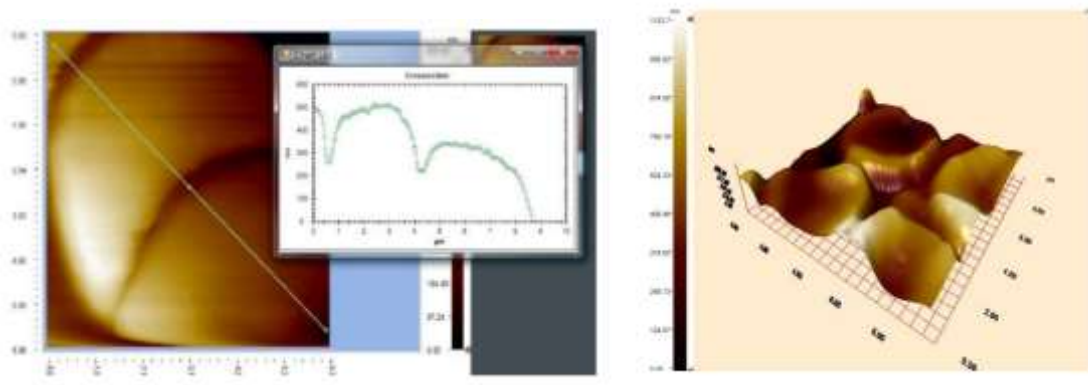
Alternatif olarak geliştirilen diğer yöntemler aşağıdaki gibi sıralanabilir: Fiber optik interferometri, Kapasitif algılama, Piezorezistif algılama ve Manyeto-striktif sensörler yer almaktadır. Bu yöntemler, uygulama alanına, çevresel koşullara (örneğin vakum veya sıvı ortamlar) ve hedeflenen çözünürlük düzeyine göre tercih edilmektedir. Yayın sapmasının doğru ve hassas bir şekilde ölçülmesi, AKM sisteminin performansını doğrudan etkileyen en önemli parametrelerden biridir. Ölçüm doğruluğu arttıkça, hem yüzey morfolojisinin daha detaylı ve güvenilir şekilde modellenmesi hem de malzemenin atomik düzeydeki mekanik ve fiziksel özelliklerinin doğru biçimde analiz edilmesi mümkün hâle gelir.

Sapma sinyali, sistemin kontrol ünitesine iletilir. Burada geribesleme döngüsü devreye girer. Sistem, yay ile yüzey arasındaki kuvveti sabit tutacak şekilde z ekseninde yukarı/aşağı hareket eder. Bu hareket, probun yüzey üzerindeki yükseklik farklarını takip etmesini sağlar. Böylece topografik veriler elde edilir.

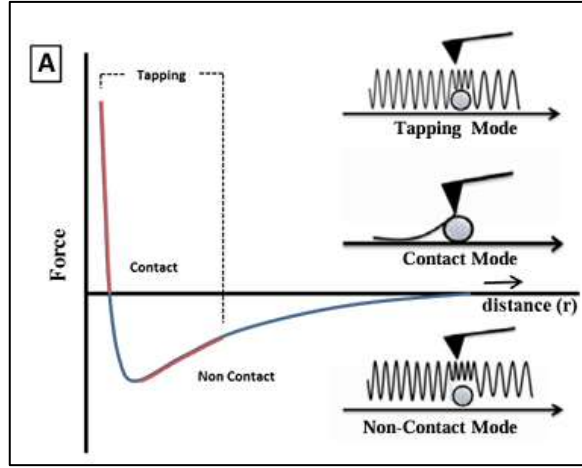


Şekil 2.8: AKM ile Örnek Topografik Görüntü.

Her tarama noktasında elde edilen z ekseni verisi (yükseklik bilgisi), iki boyutlu bir matris olarak kaydedilir. Bu matrisin her hücresi bir veri noktasıdır ve bu noktaların yükseklik değerlerine göre renk tonları atanarak bir üç boyutlu yüzey görüntüsü oluşturulur (Şekil 2.8). Toplanan ham veri, yazılım yardımıyla düzleştirme (flattening), filtreleme veya kontrast ayarlamaları gibi işlemlerden geçirilir. Bu işlem sayesinde yüzeyin gerçek topografik özellikleri daha net ve yorumlanabilir hâle gelir. İsteğe bağlı olarak, kesit alma (line profile), ortalama pürüzlülük (R_a), RMS gibi metrikler de hesaplanabilir (Şekil 2.9).



Şekil 2.9: AKM Örnek Topografik Görüntü Kesit Alma, Yükseklik Analizi ve 3D Görüntü Oluşumu.



Şekil 2.10: Atomik Etkileşim ve AKM Modları.

AKM çalışma modu olarak, prob ucunun örnek yüzeye olan mesafesine bağlı olarak değişen atomik kuvvetleri algılayarak çalışır. Uç ile yüzey arasındaki mesafe değiştikçe, aralarındaki kuvvetin türü ve büyüklüğü de değişir. Bu kuvvet-mesafe ilişkisi, AKM'nin çalışma prensibinin temelini oluşturur ve sistemin farklı modlarda çalışmasına olanak tanır.

Şekil 2.10'da gösterildiği üzere, uç-yüzey etkileşimleri genel olarak üç farklı bölgeye ayrılır:

Çekici Bölge (Attractive Regime): Uç yüzeye yaklaşırken, aradaki mesafe birkaç nanometreye indiğinde van der Waals gibi zayıf çekici kuvvetler etkili olur. Bu kuvvetler negatif yöndedir. Bu bölgede ölçüm, temassız mod (non-contact mode) olarak adlandırılan çalışma şekliyle yapılır. Prob uç, yüzeye temas etmeden çok yakınında rezonans frekansında salınım yapar. Salınım genliği sabit tutularak, yüzeyle etkileşimden kaynaklanan değişiklikler algılanır. Bu mod, özellikle biyolojik ya da hassas örneklerin zarar görmeden analiz edilmesi için tercih edilir.

İtici Bölge (Repulsive Regime): Uç yüzeye daha da yaklaştığında, atomlar arası elektron bulutlarının örtüşmesi nedeniyle güçlü Pauli itici kuvvetleri devreye girer. Bu kuvvetler pozitifdir ve ucu yüzeyden uzaklaştırmaya çalışır. Bu bölgede yapılan ölçümler, temas modu (contact mode) olarak bilinir. Yayın sarması sabit tutulur ve uç sürekli olarak yüzeyle temas hâlinindedir. Bu mod, yüksek çözünürlüklü topografik görüntüler elde etmek için uygundur; ancak yüzeye uygulanan kuvvet nedeniyle hassas örneklerde deformasyona yol açabilir. Kuvvet-indentasyon deneyleri gibi yüzeye mekanik etki uygulayan çalışmalarda yaygın olarak kullanılır.

Geri Besleme Dışında Bölge (Far from Surface): Uç yüzeyden çok uzak olduğunda, aradaki etkileşim kuvveti ihmal edilebilecek kadar zayıftır. Bu durumda sistem yeterli sinyal alamaz ve geri besleme döngüsü çalışmaz. Bu bölgede güvenilir ölçüm yapılamaz.

Bu etkileşim profiline göre AKM; üç ana modda çalışacak şekilde yapılandırılabilir: temas modu (contact mode), temassız modu (non-contact mode) ve yarı temas modu (tapping mode). Bu modlar arasındaki temel fark, sistemin hangi tip geri besleme sinyalini esas aldığıdır. Örneğin bazı modlarda lazerin yay üzerindeki yansımadaki toplam sapma kullanılırken, bazı modlarda salınım genliği ya da faz değişimi analiz edilir.

Temas Modu (Contact Mode): Yayın saptması, probun sürekli yüzeye temas hâlinde kalmasını sağlayacak şekilde kontrol edilir. Saptmadaki değişimler, yüzeyin topografik yapısını ortaya çıkarır. Yüksek çözünürlük sağlar, ancak yüzeye uygulanan kuvvet nedeniyle hassas örneklerde deformasyon riski yüksektir. Mekanik özellik ölçümleri (örneğin kuvvet-indirgeme deneyleri) için uygundur.

Temassız Mod (Non-Contact Mode): Prob uç, yüzeye değmeden çok yakın bir mesafede rezonans frekansında salınıma geçirilir. Salınım genliği sabit tutulur ve uç ile yüzey arasındaki çekici kuvvetler ölçülerek yüzey topografisi belirlenir. Bu mod, örneğe zarar verilmeden görüntüleme yapılmasını sağlar; ancak çözünürlük, temas moduna kıyasla genellikle düşüktür.

Yarı Temas Modu (Tapping Mode / Intermittent Contact): Bu mod, temas ve temassız modun arasında yer alır. Yay rezonans frekansında salınım yaparken, uç yüzeye her salınımda kısa süreli olarak dokunur. Bu aralıklı temas sayesinde hem yüksek çözünürlük sağlanır hem de yüzeye uygulanan kuvvet en aza indirilir. Özellikle biyolojik, yumuşak ya da polimer esaslı örnekler için uygundur. Ayrıca salınım fazındaki değişimler analiz edilerek örneğin mekanik özellikleri hakkında ek bilgi edinilebilir.

Nanometre altı hassasiyete ulaşmak, yalnızca iyi tasarlanmış bir yay ile değil; aynı zamanda pikometre (10^{-12} m) düzeyinde konumlandırma hassasiyetine sahip örnek taşıyıcı sistemler ve femtometre (10^{-15} m) mertebesinde saptmaları algılayabilen sensörlerle mümkündür. Bu teknolojik gelişmeler sayesinde, AKM ile yalnızca yüzey şekli değil; aynı zamanda atomik kuvvetler, fonon etkileşimleri, kapasitif çiftleşme, elektrostatik ve manyetik kuvvetler ile yüzey sürtünmesi gibi birçok fiziksel büyüklük de hassas biçimde ölçülebilmektedir.

Tüm bu özellikleri sayesinde AKM, yüzey karakterizasyonunda çok yönlü ve yüksek çözünürlüklü bir araç olarak öne çıkar. Öyle ki, hem AKM hem de TUM teknikleri ile günümüzde tek bir atomun dahi gözlemlenmesi mümkündür.

2.3 KARAKTERİZASYONDA YENİLİKÇİ YAKLAŞIMLAR

Malzeme bilimi, biyoteknoloji, nanoteknoloji ve yüzey mühendisliği gibi disiplinlerde yürütülen araştırmalarda, karakterizasyon yöntemlerinin hassasiyeti ve çeşitliliği belirleyici rol oynamaktadır. Geleneksel karakterizasyon teknikleri; optik mikroskopi, elektron mikroskopisi, X-ışını kırınımı (XRD) ve spektroskopik yöntemler gibi çeşitli alanları kapsasa da, bu tekniklerin bazı sınırlamaları zamanla daha yüksek çözünürlük, çoklu parametre analizi ve ortam uyumluluğu açısından yetersiz kalmıştır.

Bu noktada, özellikle nanoskala karakterizasyon alanında geliştirilen yenilikçi yaklaşımlar, araştırmacılara atomik düzeyde bilgi edinme imkânı sunmaktadır. AKM bu teknolojik dönüşümün öncülerinden biridir. AKM'nin klasik temas ve temassız modlarının ötesinde, artık elektriksel kuvvet mikroskobu (EFM), manyetik kuvvet mikroskobu (MFM), iletken AKM (C-AFM), kuvvet spektroskopisi gibi birçok fonksiyonel AKM modu da malzeme karakterizasyonunu çok boyutlu hâle getirmiştir.

Bununla birlikte, çoklu görüntüleme sistemleri, in-situ ölçüm teknikleri, YZ destekli veri analizi ve 3D nanotomografi gibi alanlarda da önemli ilerlemeler kaydedilmektedir. Bu yenilikler sayesinde, yalnızca yüzey morfolojisi değil; aynı zamanda yüzeyin mekanik, elektriksel, kimyasal ve hatta biyolojik özellikleri de aynı anda ve yüksek doğrulukla analiz edilebilmektedir.

Bu bölümde, klasik karakterizasyon yöntemlerine kıyasla daha kapsamlı, daha hassas ve çok yönlü veri sağlayan modern karakterizasyon yaklaşımları ele alınacak; bunların sunduğu avantajlar ve potansiyel kullanım alanları değerlendirilecektir.

2.3.1 Gelişmiş AKM Modları

AKM, yalnızca yüzey topografisini elde etmekle kalmayıp, aynı zamanda yüzeyin fiziksel, kimyasal ve elektriksel özelliklerini detaylı biçimde analiz edebilen çeşitli gelişmiş modlarla donatılabilir. Bu modlar sayesinde, nanometrik düzeydeki malzeme karakterizasyonu daha kapsamlı ve işlevsel hale gelmektedir.

KPFM (Kelvin Probe Force Microscopy), yüzey potansiyelini ölçmek için geliştirilmiş bir AKM tekniğidir. Bu mod, yüzeydeki iş fonksiyonu farklarını belirleyerek elektriksel özelliklerin haritalanmasını sağlar. Yarı iletken malzemeler, güneş pilleri ve nanoelektronik uygulamalarında sıklıkla kullanılmaktadır [58], [59].

MFM (Magnetic Force Microscopy) ise yüzeydeki manyetik alan dağılımlarını incelemek için tasarlanmış bir moddur. Özellikle manyetik kayıt ortamları, spintronik malzemeler ve manyetik nanoparçacıkların araştırılması gibi uygulamalarda kullanılır. Bu yöntemde, manyetik kaplamalı özel probalar ile yüzeye etki eden manyetik kuvvetler ölçülerek detaylı görüntüler elde edilir [60], [61].

FFM (Friction Force Microscopy): Yüzeyin sürtünme özelliklerini analiz eder. Bu modda, prob yüzey üzerinde yatay yönde kaydırılarak sürtünme kuvvetleri ölçülür. Moleküler düzeyde sürtünme ve yapışma gibi etkileri anlamak için özellikle nanotriboloji çalışmalarında tercih edilir [62], [63].

PFM (Piezoresponse Force Microscopy): Piezoelektrik özellik gösteren malzemelerin karakterizasyonu için kullanılır. Prob aracılığıyla uygulanan elektrik alan, malzemenin mekanik tepkisini (genleşme, büzülme) ölçer. Ferroelektrik malzemelerin yönelimlerini, domain yapılarını ve polarizasyon davranışlarını incelemek için oldukça yaygındır [64], [65], [66].

Bu gelişmiş AKM modları, sadece yüzeyin topografik yapısını değil; aynı zamanda elektriksel, mekanik ve manyetik özelliklerini de analiz etmeye olanak sağlayarak nanoteknoloji, malzeme bilimi, biyoteknoloji gibi birçok alanda araştırmalara önemli katkılar sunmaktadır.

2.3.2 Hibrit Karakterizasyon Teknikleri

Nanomalzeme analizinde yalnızca tek bir karakterizasyon yöntemi, çoğu zaman yüzeyin yapısal, kimyasal ve fiziksel özelliklerini kapsamlı biçimde ortaya koymak için yeterli olmayabilir. Bu nedenle, farklı tekniklerin bir araya getirilmesiyle oluşturulan hibrit karakterizasyon yöntemleri, daha bütünsel ve detaylı analizler yapılmasına olanak tanır. Bu yaklaşımlar sayesinde hem yüzey morfolojisi hem de kimyasal bileşim, mekanik özellikler ve kristal yapılar aynı anda değerlendirilebilir.

Optik Mikroskop + AKM sistemleri, özellikle büyük yüzey alanlarının hızlı bir şekilde taranmasını ve ilginç bölgelerin seçilerek daha yüksek çözünürlüklü AKM analizi yapılmasını sağlar. Optik mikroskop, geniş alanlı gözlemler ve ön incelemeler için kullanılırken, AKM aynı yüzeyin belirli alanlarında nanometre ölçeğinde detaylı topografik ve fiziksel bilgi sunar. Bu hibrit yaklaşım, biyolojik hücreler, mikro/nano yapıli cihazlar ve mikroeletromekanik sistemler (MEMS) gibi uygulamalarda öne çıkar.

AKM + Raman kombinasyonu, yüzey topografisi ile kimyasal ve moleküler bilgi arasında doğrudan korelasyon kurulmasını sağlar. AKM, nanometre ölçeğinde yüzey morfolojisini sunarken, Raman spektroskopisi aynı bölgedeki moleküler titreşimleri analiz ederek yapısal ve kimyasal bileşim hakkında bilgi verir. Bu hibrit sistem, özellikle grafen, karbon nanotüpler, polimer filmler ve biyomalzemeler gibi karmaşık yapıların detaylı incelenmesinde sıklıkla kullanılır.

SEM (Scanning Electron Microscopy) + EDS (Energy Dispersive X-ray Spectroscopy) ise elektron mikroskobu ile yüksek çözünürlüklü yüzey görüntüleri elde ederken, aynı anda EDS aracılığıyla örneğin elemental bileşimini belirlemeye olanak tanır. SEM ile yüzeyin morfolojik detayları gözlemlenirken, EDS spektrumu sayesinde hangi elementlerin bulunduđu ve bunların yüzeydeki dağılımı analiz edilebilir. Bu kombinasyon, malzeme bilimi, jeoloji, metalurji ve biyomalzeme araştırmalarında yaygın olarak kullanılmaktadır.

Bu tür hibrit sistemler, tekniđe özgü kısıtlamaları aşarak farklı disiplinlerden gelen verilerin birleştirilmesini sağlar. Böylece araştırmacılar, aynı örnek üzerinden hem yapısal hem de fonksiyonel bilgiye erişerek daha doğru ve güvenilir sonuçlar elde edebilirler. Bu bütüncül yaklaşım, özellikle nanoteknoloji ve ileri düzey malzeme karakterizasyon çalışmalarında önemli bir rol oynamaktadır.

2.3.3 Yapay zekâ (YZ) ve Makine Öğrenmesi (ML) Destekli Görüntü Analizi

Gelişen yapay zekâ (YZ) ve ML teknolojileri, görüntü analizinde devrim niteliğinde yenilikler sunarak geleneksel yöntemlerin ötesine geçilmesini sağlamaktadır. Özellikle mikroskopi temelli yüzey karakterizasyonlarında, yüksek çözünürlüklü görüntülerin manuel olarak analiz edilmesi hem zaman alıcı hem de kullanıcıya bağıli olarak değışkenlik gösterebilmektedir. Bu noktada, YZ ve ML tabanlı algoritmalar, görüntü verilerini otomatik, hızlı ve tutarlı biçimde analiz etme kapasitesi sunar.

Makine öğrenmesi algoritmaları, örüntü tanıma, sınıflandırma, segmentasyon ve anomali tespiti gibi işlemler için eğitilmiş modeller oluşturur. Denetimli öğrenme yaklaşımlarında, sistem daha önce etiketlenmiş görüntüler üzerinden eğitilerek yeni gelen görüntülerdeki yapıları tanımlayabilir. Denetimsiz öğrenme ile ise veriler arasındaki benzerlikler kullanılarak gruplama yapılabilir; bu da yeni desenlerin keşfi açısından avantaj sağlar.

Derin öğrenme (Deep Learning – DL) yöntemleri, özellikle konvolüsyonel sinir ağları (CNN) ile birlikte kullanıldığında, mikroskopi görüntülerinde yüzey bozuklukları, malzeme faz ayrımları, kristal yapılar veya biyolojik hücre özellikleri gibi detayları insan gözünün ayırt edemeyeceği hassasiyette tespit edebilir.

YZ destekli analiz sistemleri, yalnızca verilerin işlenmesiyle sınırlı kalmaz; aynı zamanda verinin sınıflandırılması, ölçülmesi, zaman içinde izlenmesi ve hatta karar destek süreçlerinde kullanılması açısından da büyük bir potansiyel sunar. Bu sayede araştırmacılar, büyük hacimli görüntü verilerini daha hızlı ve sistematik bir şekilde analiz edebilir, yorumlayabilir ve daha güvenilir sonuçlara ulaşabilirler.

Sonuç olarak, YZ ve ML teknolojilerinin görüntü analiz süreçlerine entegre edilmesi hem araştırma kalitesini artırmakta hem de malzeme biliminden biyomedikale kadar pek çok alanda yeni uygulama alanlarının doğmasına olanak sağlamaktadır. Bir sonraki bölümde ayrıntılı olarak ele alınacaktır.

3. YAPAY ZEKÂ (YZ)

Yapay zekâ (YZ), yalnızca bilgisayar bilimi alanıyla sınırlı kalmayarak, son yıllarda birçok bilim ve mühendislik disiplinde dönüşüm yaratacak şekilde yaygınlaşmıştır. Özellikle görüntü işleme ve analiz süreçlerinde, YZ ve onun bir alt dalı olan ML, klasik yöntemlerle elde edilmesi güç olan detaylı bilgilerin daha hızlı, hassas ve otomatik olarak çıkarılmasını mümkün kılmaktadır.

Tablo 3.1: Yapay Zekâ (YZ) Gelişim Süreci.

Zaman Aralığı	Öne Çıkan Gelişmeler	Zekâ Türü	İlgili Teknikler / Kavramlar
1930–1940	Gödel'in mantık çalışmaları, Turing makineleri – AI'nin teorik temelleri	Teorik	Turing makinesi, 1. dereceden mantık, otomatik ispat
1943	McCulloch-Pitts nöronu – Yapay nöron modeli	Hesaplamalı	Yapay sinirler, bilgi işleme modelleri
1950–1956	Dartmouth Semineri, LISP dili, ilk genel problem çözücüler	Sembolik	Prolog, mantıksal çıkarım sistemleri
1960	Karar ağaçları, bulanık mantık (Zadeh), olasılıksal çıkarım	Sembolik	ID3, CART, karar ağaçları, bulanık kontrol
1970–1980	Evrimsel programlama, yapay bağışıklık sistemleri, Prolog	Her iki alan	Genetik algoritmalar, olasılıksal mantık, non-monotonic logic
1986–1990	Backpropagation, SVM, sinir ağlarına yeniden ilgi	Hesaplamalı	Backpropagation, connectionism, PDP, SVM
1990–2000	Destek vektör makineleri, Bayes ağları, boosting/bagging	Her iki alan	Boosting, bagging, C4.5, C5.0, Bayes
2000–2010	Random forest, bağlamsal öğrenme, nöro-fuzzy sistemler	Her iki alan	Random forest, granular computing, neuro-fuzzy
2010–2020	Derin öğrenme (CNN), sinirsel hesaplama, çok parametrelili sınıflayıcılar	Hesaplamalı	CNN, deep learning, multiparameter classifiers, neuromorphic computing

Tablo 3.1'de YZ'nin tarihsel gelişim süreci ve önemli dönüm noktaları verilmiştir. Bu gelişim, YZ'nin tarihsel süreçte geçirdiği evrimle de yakından ilişkilidir. 1930'lu yıllarda teorik temelleri atılan YZ, 1950'lerden itibaren sembolik zekâ temelli sistemlerle gelişmeye başlamış, 1980'li yıllardan sonra ise hesaplamalı zekâ yaklaşımlarının (özellikle yapay sinir ağları ve evrimsel algoritmaların) ön plana çıkmasıyla yeni bir ivme kazanmıştır. 1990'lı yıllarda destek vektör makineleri (SVM), karar ağaçları ve olasılıksal ağlar gibi yöntemler ile sembolik ve hesaplamalı zekâ yaklaşımları birleşmeye başlamış; 2000'li yıllardan

itibaren ise paralel dağıtık sistemlerin ve güçlü hesaplama altyapılarının desteğiyle DL temelli sistemler yaygınlaşmıştır. 2010 sonrasında ise yapay sinir ağlarının çok katmanlı ve soyutlama düzeyi yüksek yapılarına dayalı çözümler; görüntü işleme, doğal dil işleme ve öngörü sistemlerinde insanüstü performans sergileyen uygulamaların önünü açmıştır. Bu sebeple, YZ'nin tarihsel gelişimi yalnızca teknik bir ilerleme değil, aynı zamanda disiplinler arası bir dönüşüm süreci olarak da değerlendirilmektedir.

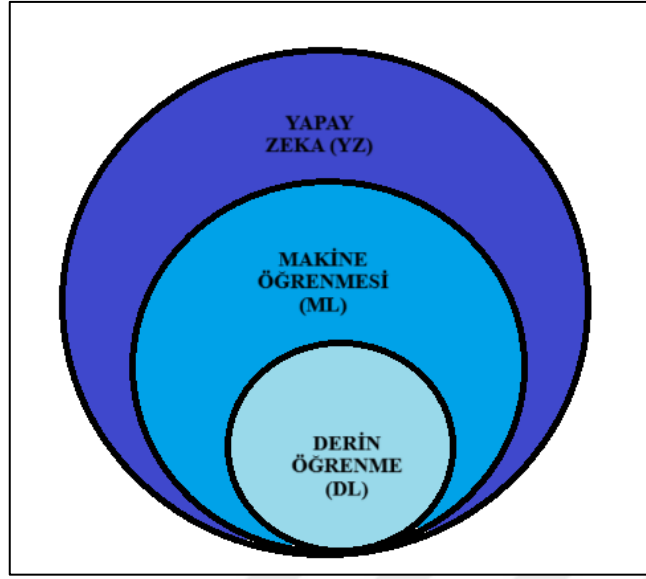
YZ zamanla gelişen teorik alt yapısı sayesinde, artık sadece algoritmik çözümler sunmamakta, aynı zamanda veri dayalı karar verme, örüntü tanıma, anormallik tespiti ve öznitelik çıkarımı gibi işlemlerde bilime etkin bir biçimde hizmet eder hale gelmiştir. Şekil 3.1'de gösterildiği gibi, YZ, ML ve DL kavramları birbirini kapsayan hiyerarşik bir yapı içerisinde yer almaktadır. En dıştaki daire olan YZ, insan benzeri düşünme, öğrenme ve karar verme yetilerini makineler aracılığıyla gerçekleştirmeyi amaçlayan genel bir alanı ifade eder.

Bu alanın bir alt kümesi olan ML, sistemlerin verilerden örüntü ve ilişki öğrenmesini sağlayarak dışarıdan açık şekilde programlanmadan karar verebilmesini mümkün kılar. ML içinde yer alan DL ise, özellikle çok katmanlı yapay sinir ağlarını kullanarak karmaşık veri setlerinden yüksek düzeyde bilgi çıkarımı yapabilen, ML'nin daha ileri düzeydeki alt alanıdır.

Bu yapı sayesinde, özellikle görüntü analizi gibi çok boyutlu ve karmaşık verilerin işlenmesinde derin öğrenme yöntemleri büyük avantaj sağlamaktadır. Şimdi bu kavramlar tek bir bütün olarak ele alınacak, ilgili öğrenme algoritmaları, katman yapıları ve öğrenme süreçleri detaylı biçimde açıklanacaktır. Bu kapsamda: YZ genel ilkeleri, ML'de kullanılan temel algoritmalar, DL çok katmanlı sinir ağı yapıları ve tez kapsamında kullanılacak LSTM ve bu yapıların girdi-veri ile nasıl öğrenme gerçekleştirdiği incelenecektir.

Ayrıca, öğrenmenin denetimli ve denetimsiz türleri, aktivasyon fonksiyonları, kayıp fonksiyonu, ağırlık güncellemeleri ve geri yayılım mekanizmaları gibi teorik ve uygulamalı bileşenler de bu bölümde açıklanacaktır.

Bu yaklaşım, ilerleyen bölümlerde 2D malzemelerin mikroskopik görüntülerinin analizinde kullanılacak olan YZ tabanlı yöntemlerin teorik altyapısını oluşturmak açısından kritik öneme sahiptir.



Şekil 3.1: Yapay Zekâ (YZ): Makine Öğrenmesi (ML) ve Derin Öğrenme (DL)’nin Yeri.

3.1 MAKİNE ÖĞRENMESİ (ML)

ML bilgisayar sistemlerinin açıkça programlanmaksızın verilerden öğrenmesini ve bu öğrenmeye dayanarak tahmin ya da karar vermesini sağlayan bir YZ alt dalıdır. Özellikle büyük veri setlerinden örüntü tanıma, sınıflandırma, kümeleme ve anormallik tespiti gibi görevlerde yüksek başarı göstermesiyle ön plana çıkmaktadır.

ML kavramı, ilk olarak Arthur Samuel tarafından ortaya konulmuştur. Samuel, ML’yi “Makine öğrenmesi, bilgisayarların açıkça programlanmadan öğrenmesini sağlayan bir çalışma alanıdır.” olarak tanımlamıştır ve bu alandaki öncülüğünü, geliştirdiği dama oynayan bilgisayar programıyla göstermiştir. Samuel’in bu yaklaşımı, günümüz ML sistemlerinin temelini oluşturan ilk uygulamalardan biri olarak kabul edilmektedir.

ML temel amacı, veriden öğrenmeyi mümkün kılmaktır [67]. Özellikle verilerin karmaşıklığının arttığı, gürültü içerdiği ya da geleneksel yöntemlerle analiz edilmesinin zorlaştığı durumlarda ön plana çıkar. Yüksek boyutlu ve insan gözüyle kolayca ayırt edilemeyen desenler içeren veri setlerinde, ML otomatik ve verimli analiz imkânı sunar. Bu bölümde ML nin kullanım alanları ve malzeme karakterizasyon sürecine katkısı öncesinde ML’nin algoritmasından bahsedilecektir [68].

Tablo 3.2: ML Şeması.

Öğrenme Türü	Alt Yöntem / Algoritma
Denetimli Öğrenme	Karar Ağacı (Decision Tree)
	Naive Bayes
	Destek Vektör Makineleri (SVM)
Denetimsiz Öğrenme	Temel Bileşenler Analizi (PCA)
	K-Ortalamalar (K-Means)
Yarı-Denetimli Öğrenme	Üretici Modeller (Generative Models)
	Kendi Kendine Öğrenme (Self Training)
	Transductive SVM
Pekiştirmeli Öğrenme	Pekiştirmeli Öğrenme
Çoklu Görevli Öğrenme	Çoklu Görevli Öğrenme
Topluluk Öğrenmesi	Boosting
	Bagging
Yapay Sinir Ağı (Artificial Neural Network- ANN)	Denetimli Sinir Ağı
	Denetimsiz Sinir Ağı
	Pekiştirmeli Sinir Ağı
Örnek Tabanlı Öğrenme	k-En Yakın Komşu (k-NN)

Tablo 3.2’de ML algoritmaları sınıflandırılmıştır. Bu sınıflandırma; denetimli, denetimsiz, yarı denetimli ve pekiştirmeli öğrenme gibi farklı öğrenme türlerini kapsamaktadır. Her bir algoritma grubu, veri türüne, problemin doğasına ve öğrenme hedeflerine uygun çözümler üretmektedir.

ML yalnızca geleneksel sınıflandırma ve regresyon görevleriyle sınırlı kalmaz. Pekiştirmeli öğrenme (reinforcement learning) gibi gelişmiş yaklaşımlar, çevreden gelen geri bildirimlere göre karar süreçlerinin dinamik olarak optimize edilmesine olanak tanır. Çoklu görevli öğrenme (multi-task learning), birden fazla görevin eş zamanlı olarak öğrenilmesini ve bu görevler arasında bilgi paylaşımı yapılmasını sağlar. Bununla birlikte, topluluk öğrenmesi (ensemble learning) teknikleri ile birden fazla zayıf modelin bir araya getirilmesi sonucu daha güçlü, kararlı ve genellenebilir sistemler oluşturulabilmektedir.

Bu temel sınıflamalara ek olarak, Yapay Sinir Ağları (Artificial Neural Network – ANN) da ML’nin önemli bir alt alanını oluşturur. Özellikle karmaşık örüntülerin tanınmasında ve

yüksek boyutlu verilerin işlenmesinde etkin bir rol oynayan bu ağlar, çok katmanlı yapıları sayesinde derin öğrenme yaklaşımlarının temelini oluşturur.

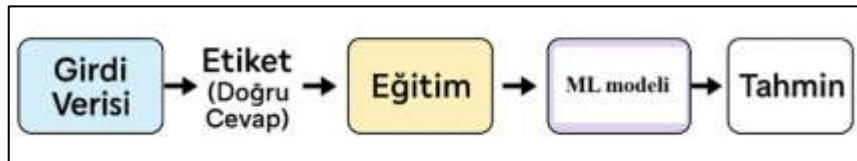
Bunların yanında, Örnek Tabanlı Öğrenme (Instance-Based Learning) yaklaşımı da sıkça başvurulan yöntemlerdendir. Bu yaklaşımda model, yeni örnekleri geçmiş verilerle doğrudan karşılaştırarak sınıflandırma veya tahmin işlemini gerçekleştirir. En bilinen örneklerinden biri olan k-En Yakın Komşu (k-Nearest Neighbors, k-NN) algoritması, özellikle düşük boyutlu verilerde yüksek doğruluk sağlamasıyla öne çıkar.

Denetimli Öğrenme (Supervised Learning): Giriş ve çıkış verileri bilinen örneklerle model eğitilir. Girdi veri kümesi genellikle ikiye ayrılır: eğitim (train) veri kümesi ve test veri kümesi. Eğitim kümesinde yer alan veriler, öğrenilmesi veya sınıflandırılması gereken doğru çıktı değişkenlerini (etiketleri) içerir. Bu veri kümesi kullanılarak makine öğrenmesi algoritması, giriş ve çıkışlar arasındaki ilişkiyi öğrenir. Bu süreçte model, belirli parametreleri optimize ederek en doğru tahmini yapmaya çalışır. Öğrenilen örüntüler (patterns), test veri kümesine uygulanarak modelin genelleme yeteneği değerlendirilir. Bu yaklaşım, sınıflandırma ve regresyon gibi problemlerde yaygın olarak kullanılmaktadır [69].

Sınıflandırma: Sınıflandırma, verilerin önceden tanımlanmış gruplara ayrılmasını sağlayan denetimli öğrenme yöntemlerinden biridir. Bu algoritmalar, etiketlenmiş verilerden öğrenerek yeni verilerin hangi sınıfa ait olduğunu tahmin eder. E-posta filtreleme (spam/ham), yüz tanıma veya belge sınıflandırma gibi birçok alanda kullanılır. Problem yapısına göre ikili, çok sınıflı veya çok etiketli sınıflandırma türleri mevcuttur.

Regresyon: Regresyon, sürekli değerleri tahmin etmeye yönelik başka bir denetimli öğrenme yöntemidir. Girdi ve çıktılar arasındaki ilişkiyi öğrenerek geleceğe yönelik tahminlerde bulunur. Örneğin, bir evin fiyatını ya da hisse senedi eğilimini öngörmek gibi uygulamalarda kullanılır.

Örnek algoritmalar: Karar Ağacı, Naive Bayes, Destek Vektör Makineleri (SVM).



Şekil 3.2: Denetimli Öğrenme.

Denetimsiz Öğrenme (Unsupervised Learning): Denetimli öğrenmenin aksine, burada etiketli veriler bulunmaz ve öğretici bir rehber de bulunmaz. Algoritmalar, verilerdeki ilginç yapıları veya örüntüleri kendi başlarına keşfetmek ve sunmak üzere bırakılır [70].

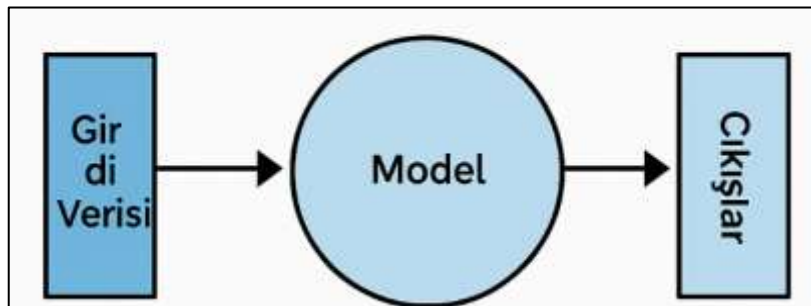
Denetimsiz öğrenme algoritmaları, verilerden bazı temel özellikleri öğrenir. Ardından, sisteme yeni veri tanıtıldığında, bu verinin hangi gruba ait olduğunu, önceden öğrendiği özelliklere dayanarak tanımaya çalışır.

Kümeleme: Kümeleme, denetimsiz öğrenme algoritmalarından biridir ve etiketlenmemiş veriler arasında benzerliklere göre gruplar oluşturmayı amaçlar. Aynı kümedeki verilerin birbirine oldukça benzer, farklı kümelerdeki verilerin ise belirgin şekilde farklı olması beklenir. Bu işlem genellikle uzaklık ölçümleri temel alınarak yapılır. En bilinen yöntemler arasında K-means ve Hiyerarşik Kümeleme yer alır.

Birliktelik Kuralları: Birliktelik kuralları, verilerde birlikte ortaya çıkan öğeleri analiz ederek aralarındaki ilişkileri ortaya çıkaran denetimsiz bir öğrenme yöntemidir. Özellikle market sepeti analizlerinde, hangi ürünlerin birlikte satın alındığını keşfetmek amacıyla sıkça kullanılır.

Boyut Azaltma: Boyut azaltma, özellikle Ana Bileşenler Analizi (PCA) gibi yöntemlerle, yüksek boyutlu veri kümelerindeki değişken sayısını azaltarak, verideki en fazla bilgiyi daha az özellik ile temsil etmeyi hedefler. Bu yöntem, hem görselleştirme hem de modelleme sürecini kolaylaştırır.

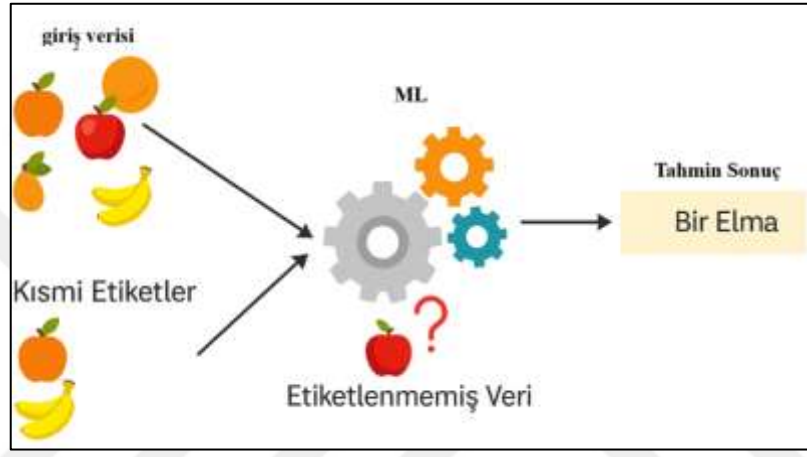
Etiketli veriler olmadan, veri içindeki örüntüler keşfedilir. *Örnek algoritmalar:* Temel Bileşenler Analizi (PCA), K-Ortalamlar (K-Means)



Şekil 3.3: Denetimsiz Öğrenme.

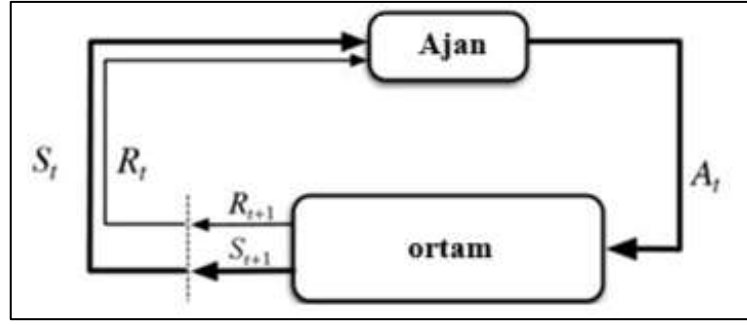
Yarı-Denetimli Öğrenme (Semi-Supervised Learning): Denetimli ve denetimsiz ML yöntemlerinin bir kombinasyonudur. Özellikle etiketli veriye ulaşmanın zor ve zahmetli olduğu durumlarda, etiketsiz verinin çokça bulunduğu koşullarda faydalı olabilmektedir. Bir diğer deyişle, az sayıda etiketli ve çok sayıda etiketsiz veriyle model eğitimi yapılır. Model, hem etiketli örneklerden öğrenir hem de etiketsiz veriyi kullanarak kendini geliştirmeye çalışır.

Örnek yaklaşımlar: Üretici Modeller, Kendi Kendine Öğrenme, Transduktif SVM



Şekil 3.4: Yarı-Denetimli Öğrenme.

Pekiştirmeli Öğrenme (Reinforcement Learning): Sistemde iki ana bileşen bulunur: Ajan ve Ortam. Denetimli ve denetimsiz öğrenme ile birlikte üç temel ML algoritmasından biri olarak kabul edilir. Ajanlar, ödül (reward) R_t mekanizması ile çevresini keşfeder. Deneme yanılma ile çevreden aldıkları ödüllere göre öğrenir. Özellikle oyunlar, robotik sistemler ve kontrol problemleri gibi alanlarda yaygın olarak kullanılmaktadır. Ajan, zamanın t anında bulunduğu durum (S_t) bilgisine göre bir A_t seçer. Bu A_t , ortama gönderilir. Ortam, bu A_t 'ye karşılık olarak yeni bir S_{t+1} , ve bir R_{t+1} üretir. Ajan, bu geri bildirimi analiz ederek, gelecekteki eylemlerini bu bilgiye göre optimize etmeye çalışır.



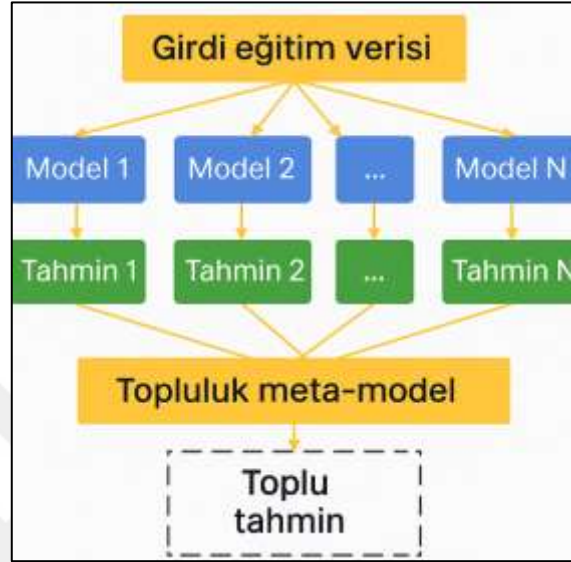
Şekil 3.5: Pekiştirmeli Öğrenme.

Çoklu Görevli Öğrenme (Multi-Task Learning): Bu öğrenme yaklaşımında, tek bir model birden fazla görevi eşzamanlı olarak öğrenir ve bu sayede görevler arasında bilgi paylaşımı gerçekleşir. Bu paylaşım, modelin Shared Layers (Paylaşılan Katmanlar) olarak adlandırılan ortak sinir ağı katmanları üzerinden gerçekleştirilir. Bu katmanlar, farklı görevler için ortak temsiller öğrenilmesini sağlar ve modelin tüm görevlerde daha tutarlı ve etkili sonuçlar üretmesine katkı sunar. Farklı görevler arasındaki yapısal benzerliklerden yararlanılarak öğrenme sürecinin daha verimli hâle gelmesi sağlanırken, aynı zamanda modelin genellenebilirliği de artar. Task 1, Task 2, ..., Task N (Görevler) şeklinde tanımlanan her bir görev, bu paylaşılan katmanlardan elde edilen özellikleri kullanarak kendine özgü bir hedefi yerine getirir. Böylece her görev için ayrı bir çıktı katmanı kullanılırken, temel bilgi altyapısı ortaktır. Çoklu görevli öğrenme, klasik derin öğrenme yöntemlerinden farklı olarak yalnızca tek bir göreve odaklanmak yerine, birbiriyle ilişkili ancak tam olarak aynı olmayan görevleri aynı anda işleyebilir. Bu görevlerden elde edilen ortak bilgi, modelin tekil görevlerde daha başarılı sonuçlar üretmesini destekler.



Şekil 3.6: Çoklu Görevli Öğrenme.

Topluluk Öğrenmesi (Ensemble Learning): Birden fazla modelin (örneğin sınıflandırıcıların) bir araya getirilerek daha doğru ve genellenebilir sonuçlar üretmesini amaçlayan bir ML yaklaşımıdır. Bu yöntem, tek bir modelin hatalarını telafi etmek ve performansı artırmak için kullanılır.



Şekil 3.7: Topluluk Öğrenmesi.

Yukarıdaki şekilde görüldüğü gibi, eğitim verisi birden çok modele gönderilir ve her model kendi tahminini üretir. Bu tahminler, ensemble meta-model tarafından birleştirilerek nihai sonuç (ensemble prediction) elde edilir.

Yöntemler: Boosting, Bagging

Yapay Sinir Ağları (Neural Networks): YZ'nin bu evrimsel gelişiminde önemli dönüm noktalarından biri yapay sinir ağları (Artificial Neural Networks – ANN)'dır. Bu ağlar derin öğrenmenin (Deep Learning-DL) temelini oluşturan yapılardır. Sinir ağları genel olarak üç farklı şekilde uygulanabilir:

Denetimli Sinir Ağı, etiketli verilerle eğitilir ve genellikle sınıflandırma ya da regresyon problemlerinde kullanılır.

Denetimsiz Sinir Ağı, etiketsiz veri ile örüntü çıkarımı ve kümeleme gibi görevlerde kullanılır.

Pekiştirmeli Sinir Ağı, ajan-temelli sistemlerde ödül-ceza mekanizmasıyla öğrenir.

Yapay sinir ağıları biyolojik sinir hücreleri ve işleyişinden esinlenerek geliştirilmiştir. Özellikle bu ağılar insan beyninin öğrenme ve bilgi işleme süreçlerini modellemeye yönelik çalışmalardan ilham almıştır. İlk olarak 1943 yılında McCulloch ve Pitts tarafından önerilen yapay nöron modeliyle temelleri atılan sinir ağıları, 1958 yılında Rosenblatt'ın geliştirdiği perceptron yapısı ile daha geniş çapta ilgi görmüştür. Sınırlı donanım kapasitesi ve algoritmik yetersizlikler nedeniyle bu alandaki ilerlemeler 1970'li ve 1980'li yıllarda duraklama dönemine girmiştir. 1986 yılında Rumelhart, Hinton ve Williams'ın öne sürdüğü geri yayılım algoritması (backpropagation), çok katmanlı yapay sinir ağlarının eğitilmesini mümkün kılarak bu teknolojinin yeniden yükselmesine öncülük etmiştir. Böylece, sınıflandırma, regresyon ve örüntü tanıma gibi problemler için çok katmanlı ağların kullanılabilirliği artmıştır.

Yapay sinir ağıları, zamanla daha karmaşık mimariler ve aktivasyon fonksiyonları ile donatılarak yalnızca doğrusal olmayan ilişkileri öğrenmekle kalmamış, aynı zamanda çok katmanlı yapıların sağladığı soyutlama düzeyleri sayesinde yüksek düzeyde temsil öğrenme yeteneğine de kavuşmuştur. Bu gelişmeler, özellikle 2010'lu yıllarda derin öğrenme adı altında sinir ağlarının yeniden yükselişe geçmesine neden olmuş, günümüzde görüntü tanıma, doğal dil işleme, biyomedikal analiz, malzeme karakterizasyonu ve robotik gibi birçok alanda üstün başarı elde edilmesini sağlamıştır.

Yapay sinir ağlarının bu başarısı, sadece teorik ilerlemelerle değil; aynı zamanda arttırılmış veri erişimi, grafik işlemciler (GPU) gibi güçlü donanımlar, bulut bilişim altyapıları ve açık kaynak yazılım kütüphanelerinin yaygınlaşmasıyla da desteklenmiştir. Bu durum, yapay sinir ağlarını hem akademik hem de endüstriyel uygulamalar için erişilebilir ve ölçeklenebilir bir çözüm haline getirmiştir.

Günümüzde oldukça yaygın ve iyi bilinen araçlardan biri haline gelmiş olan yapay sinir ağıları, yalnızca yeni teknik yeteneklerle değil; aynı zamanda insanın bilişsel ve düşünsel süreçlerini taklit edebilme yönünde sürekli olarak güncellenmeye devam etmektedir. biçimde kullanılmaktadır. Bu bölümde yapay sinir ağlarının işleyişi ve öğrenmesinden bahsedilecektir.

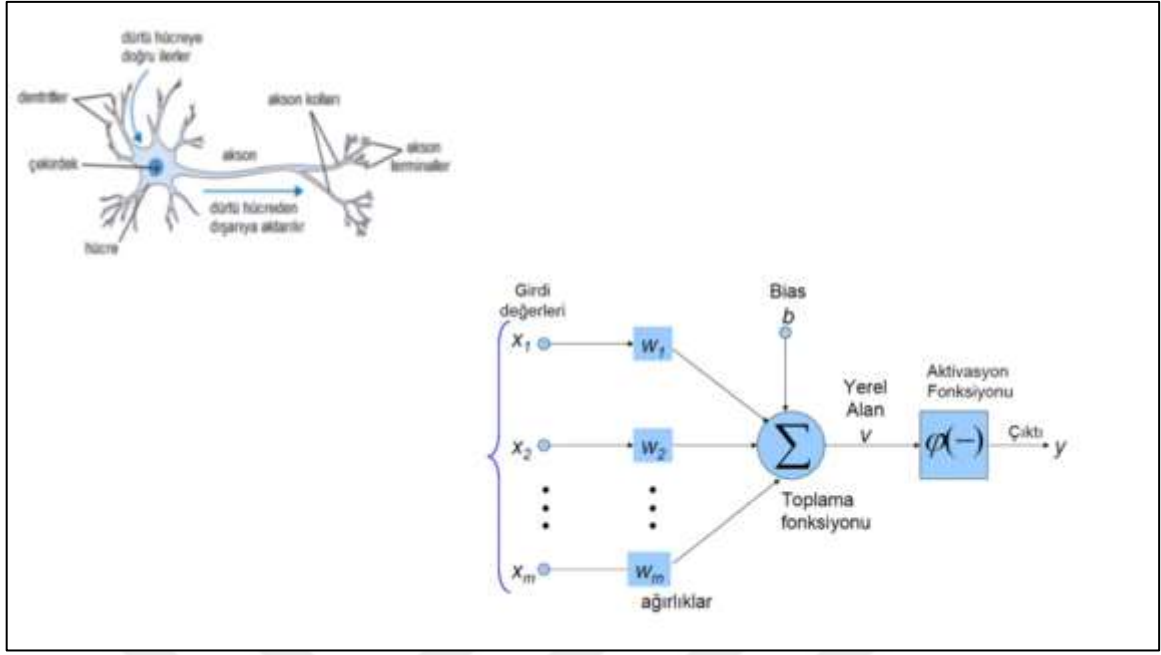
Bir yapay sinir hücresi beş bölümden oluşmaktadır: girdiler, ağırlıklar, toplama fonksiyonu, aktivasyon fonksiyonu ve çıktı. Bu bileşenler Tablo 2.2'de detaylı olarak verilmiştir.

Bahsedildiği üzere yapay sinir hücresi, biyolojik sinir hücresinden esinlenerek geliştirilmiş bir modeldir. Tıpkı bir biyolojik nöronun dendritleriyle gelen sinyalleri alıp, çekirdekte işleyip, akson yoluyla diğer nöronlara iletmesi gibi; yapay nöron da giriş verilerini alır, bu verilere ait ağırlıkları kullanarak bir hesaplama yapar, ardından aktivasyon fonksiyonu ile çıktısını üretir ve bu çıktıyı sonraki nöronlara aktarır. Bir başka ifade ile biyolojik nöron → sinyali alır, işler, iletir, yapay nöron → veriyi alır, ağırlıklarla işler, çıktı üretir. Bu benzerlik sayesinde yapay sinir ağları, insan beyninin öğrenme mekanizmalarına yakın bir şekilde çalışarak karmaşık problemleri çözebilir (Bkz. Şekil 3.8).

ANN’lerde öğrenme işlemi, örnek veriler üzerinden gerçekleştirilir. Bu süreçte giriş ve çıkış bilgileri kullanılarak, sistemin öğrenme kapasitesini artıracak şekilde çeşitli parametreler ayarlanır. Esasen ağın amacı, kendisine verilen örneklere dayanarak en iyi tahmini veya sınıflandırmayı yapabilecek ağırlık (w) ve sapma (b) değerlerini öğrenmektir. Yani yapay sinir ağlarında yapılan temel işlem, bir sinir hücresinin (nöronun) matematiksel modeli üzerinden, en iyi sonuçları verecek parametre kombinasyonunu bulmaktır.

Tablo 3.3: Yapay Sinir Hücresi Bileşenleri.

Bileşen	Açıklama
Girdiler (x)	Nörona gelen dış veriler veya önceki katmandan gelen sinyaller
Ağırlıklar (w)	Her girdinin önemini belirleyen, öğrenme sürecinde güncellenen katsayılar
Toplama Fonksiyonu	Girdi-ağırlık çarpımlarını toplar; genellikle $v = \sum w_i x_i + b$ şeklindedir
Aktivasyon Fonksiyonu	Toplam sonucu doğrusal olmayan bir biçime dönüştürerek çıktı üretir
Çıktı (y)	Aktivasyon fonksiyonu sonucu; ya nihai çıktı olur ya da bir sonraki katmana aktarılır



Şekil 3.8: Yapay Sinir Ağları.

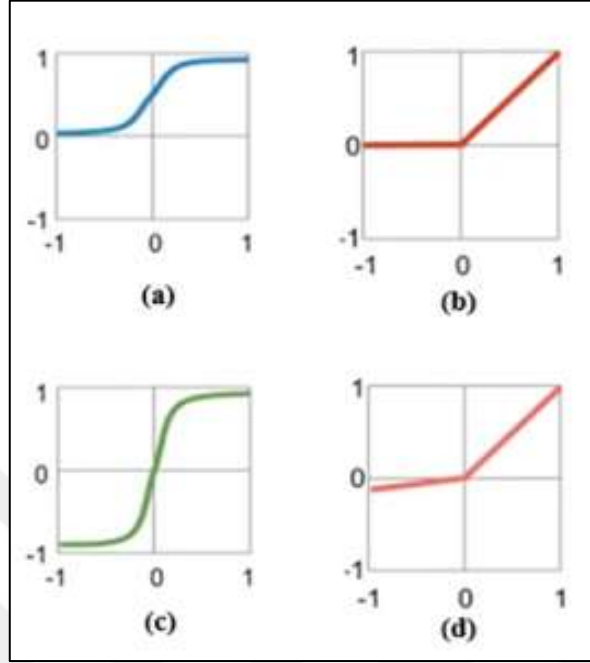
Şekil 3.8’da, bir yapay sinir ağındaki temel yapay nöronun (nöral birim) nasıl çalıştığı şematik olarak gösterilmektedir. Bu yapı, biyolojik nöronlardan ilham alınarak tasarlanmış olup, çok katmanlı yapay sinir ağlarının temel yapı taşını oluşturur. Nöron, kendisine gelen girdi değerlerini ($x_1, x_2, \dots, x_m$) her biriyle ilişkili ağırlık katsayıları ($w_1, w_2, \dots, w_m$) ile çarpar ve bu çarpımların toplamına bias (b) adı verilen bir sabit değer eklenerek bir toplam (net giriş veya yerel alan – v) elde edilir. Bu işlem şu şekilde matematiksel olarak ifade edilir:

$$v = \sum_{i=1}^m w_i x_i + b \quad (3.1)$$

Burada ağırlık değerleri, her bir girdinin çıktıya olan katkısını belirleyen öğrenilebilir parametrelerdir. Eğitim sürecinde bu ağırlıklar, hata geri yayılımı (backpropagation) ve optimizasyon algoritmaları (örneğin gradyan inişi) ile güncellenir. Bu sayede ağ, zamanla daha doğru tahminler yapacak şekilde kendini optimize eder.

Toplama işlemi sonucu elde edilen net giriş değeri (v), doğrusal olmayan bir aktivasyon fonksiyonu aracılığıyla işlenir. Bu fonksiyon, yapay sinir ağlarının yalnızca doğrusal ilişkileri değil, aynı zamanda karmaşık ve çok boyutlu örüntüleri de öğrenebilmesini mümkün kılar. Farklı problemler ve ağ mimarileri için çeşitli aktivasyon fonksiyonları tercih

edilmektedir. Şekil 3.9’da bu fonksiyonlardan bazıları grafiksel ve matematiksel ifadeleriyle birlikte gösterilmektedir:



Şekil 3.9: Aktivasyon Fonksiyonları: (a) Sigmoid, (b) ReLU, (c) Tanh, (d) Leaky ReLU.

Sigmoid, çıktıyı 0 ile 1 arasında sıkıştırarak özellikle sınıflandırma problemlerinde tercih edilir. Ancak gradyan kaybı (vanishing gradient) gibi problemler yaratabilir.

$$a = \frac{1}{1 + e^{-z}} \quad (3.2)$$

Tanjant Hiperbolik (Tanh) Fonksiyonu: Tanh fonksiyonu, çıktıyı -1 ile 1 arasında ölçeklendirir. Sigmoid’e kıyasla daha güçlü gradyanlar sağlar, bu da öğrenme sürecini hızlandırabilir.

$$a = \frac{e^z - e^{-z}}{e^z + e^{-z}} \quad (3.3)$$

ReLU (Rectified Linear Unit): ReLU, pozitif girişleri olduğu gibi geçirirken negatif girişleri sıfıra eşitler. Basit yapısı ve hesaplama avantajı nedeniyle günümüzde en yaygın kullanılan aktivasyon fonksiyonudur.

$$a = \max(0, z) \quad (3.4)$$

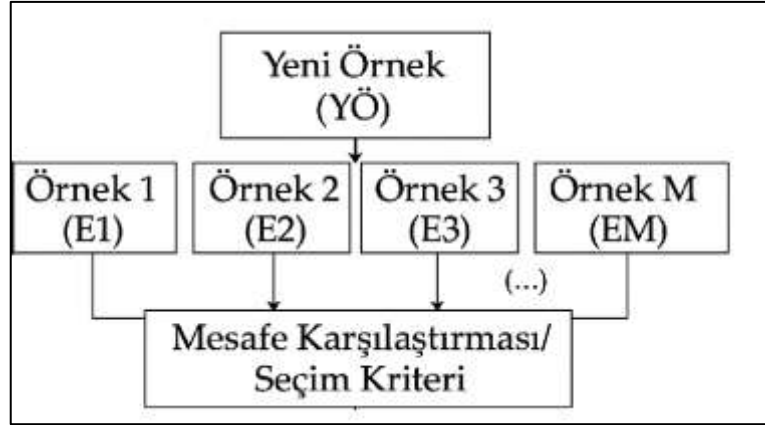
Leaky ReLU: Leaky ReLU, ReLU'nun geliştirilmiş bir versiyonudur. Negatif girişler için sıfır yerine küçük bir eğim kullanır ve bu sayede "ölü nöron" (dead neuron) probleminin önüne geçilmesi amaçlanır.

$$a = \max(0.01, z) \quad (3.5)$$

Tüm bu yapıların amacı, girdilerden anlamlı çıktılar üretebilecek şekilde öğrenen ve genelledebilen bir sistem inşa etmektir. Aktivasyon fonksiyonu sonucunda elde edilen çıktı değeri (y), ya doğrudan ağın nihai çıktısı olur ya da bir sonraki katmandaki nöronlara giriş olarak aktarılır. Bu yapı sayesinde yapay sinir ağları, çok sayıda nöron ve katmandan oluşan mimarilerle organize edilerek karmaşık veri örüntülerini öğrenebilir; veriye dayalı tahmin, sınıflandırma veya regresyon gibi görevleri yüksek doğrulukla gerçekleştirebilir. Ağırlık parametrelerinin doğru öğrenilmesi, ağın genel başarımını doğrudan etkileyen en önemli unsurlardan biridir.

Alt türler: Denetimli, Denetimsiz ve Pekiştirmeli Sinir Ağları

Örnek Tabanlı Öğrenme (Instance-Based Learning): Bu öğrenme yaklaşımında, model doğrudan veri üzerinden öğrenir ve kararlarını geçmiş örneklerle olan benzerliğe dayalı olarak verir. Yeni veriler, daha önceki örneklerle doğrudan karşılaştırılarak değerlendirilir. Sınıflandırma ve regresyon işlemlerinde kullanılan bu yöntem, her yeni veri için eğitim kümesindeki en benzer örnek(ler) üzerinden tahmin yapar.



Şekil 3.10: Örnek Tabanlı Öğrenme.

Şekil 3.10, örnek tabanlı öğrenme yaklaşımını göstermektedir. Bu yöntemde sistem, yeni gelen bir örneği (NE – New Example) daha önce sakladığı örneklerle (E1, E2, E3, ..., EM) karşılaştırır. Model, eğitim sürecinde genel bir kural oluşturmaz; bunun yerine, tüm eğitim verilerini belleğinde tutar. Yeni bir veri geldiğinde, bu veri ile eğitim örnekleri arasındaki mesafeler hesaplanır. Bu işlem, "Mesafe Karşılaştırması / Seçim Kriteri" adı verilen adımda yapılır. Genellikle en yakın komşular belirlenerek, bu komşulara göre yeni verinin hangi sınıfa ait olduğu ya da hangi değeri alacağı tahmin edilir.

Örnek algoritma: k-En Yakın Komşu (k-NN)

3.1.1 Derin Öğrenme (Deep Learning-DL)

Derin öğrenme (Deep Learning – DL), YZ alanında geliştirilen ve ML'nin bir alt dalı olarak kabul edilen güçlü bir öğrenme yaklaşımıdır. Temelinde çok katmanlı yapay sinir ağları bulunan bu yöntem, özellikle karmaşık veri yapıları içerisindeki anlamlı örüntüleri otomatik olarak keşfedebilme yeteneği sayesinde son yıllarda büyük ilgi görmüştür. "Derin öğrenme" terimi, yapay sinir ağlarının çok katmanlı (derin) versiyonlarını ifade etmek üzere ilk kez 2000 yılında Igor Aizenberg ve çalışma arkadaşları tarafından kullanılmıştır [71], [72], [73], [74], [75]. Bu yaklaşımda, bilgi işleme birimleri olan yapay nöronlar birden fazla katman hâlinde yapılandırılır ve bu katmanlar arasında veriler adım adım işlenerek daha soyut ve yüksek seviyeli temsillere dönüştürülür.

Derin öğrenme sistemleri, özellikle büyük ve etiketli veri kümeleri ile eğitildiklerinde, manuel özellik mühendisliği ihtiyacını azaltarak veriden doğrudan anlamlı temsiller çıkarmayı başarırlar. Görüntü işleme, doğal dil işleme, ses tanıma ve biyomedikal analiz gibi

birçok uygulama alanında insan seviyesinde veya daha yüksek doğrulukta sonuçlar elde edebilen bu yöntem, günümüzde YZ araştırmalarının merkezinde yer almaktadır.

Tablo 3.4: Derin Öğrenme (DL) Paradigmaları.

DL Paradigma	Açıklama	Örnek Uygulamalar / Modeller
Denetimli Öğrenme	Etiketli verilerle çalışır; sınıflandırma, regresyon gibi görevlerde kullanılır.	CNN, LSTM, LightGBM
Denetimsiz Öğrenme	Etiketsiz veri ile örüntü çıkarımı ve boyut indirgeme yapılır.	Autoencoder, k-means, PCA
Yarı-Denetimli Öğrenme	Az etiketli ve çok etiketsiz veri ile model eğitilir.	Self-training, Transductive SVM
Pekiştirmeli Öğrenme	Ajan, çevreden aldığı ödüle göre öğrenir.	Q-learning, DQN, PPO, A3C
Kendinden Denetimli Öğrenme	Veri içinden kendi etiketini türeterek öğrenme sağlar.	SimCLR, BYOL, BERT, GPT
Transfer Öğrenme	Eğitilmiş modellerin başka görevlerde yeniden kullanımı.	ResNet + Fine-tuning, CLIP, BERT + Task
Few-shot / Zero-shot Learning	Çok az (veya hiç) örnekle öğrenme sağlar.	GPT-4, Meta OPT, T5
Multi-Task Learning	Aynı model birden fazla görevi aynı anda öğrenir.	Shared Transformer, Multi-head modeller
Ensemble Learning	Birden fazla modelin çıktısı birleştirilir.	Bagging, Boosting, Stacking, Voting
Graph Neural Networks (GNN)	Grafik yapıdaki verilerle çalışır.	GCN, GAT, GraphSAGE
Attention Tabanlı Modeller	Girdiler arasındaki ilişkileri modellemek için dikkat (attention) kullanılır.	Transformer, BERT, GPT, ViT
Diffusion Models	Veri örneklerini adım adım gürültüden kurtararak üretir.	Stable Diffusion, DALL-E 2, Imagen
Generative Modeller (Üretici Modeller)	Yeni veri örnekleri oluşturur.	GANs, VAEs, Diffusion models

Bu tez kapsamında, görüntü analizi ve veri sınıflandırma süreçlerinde yaygın olarak kullanılan üç temel makine öğrenmesi ve derin öğrenme yöntemi detaylı olarak ele alınacaktır: Convolutional Neural Networks (CNN), Long Short-Term Memory (LSTM) ve Light Gradient Boosting Machine (LightGBM).

Evrişimli Sinir Ağları (Convolutional Neural Networks- CNN): CNN bilgisayarla görme (computer vision-CV) ve görüntü işleme alanlarının temelini oluşturur. Bu bölümde ilk olarak CNN'lerin temel yapısından bahsedip, sonrasında yaygın olarak kullanılan farklı katman türlerinin ayrıntılı inceleyeceğiz.

Evrişimli Sinir Ağlarının (CNN) temelleri, 1959 yılında Hubel ve Wiesel'in kedilerin görsel korteksinde yaptığı deneylere dayanmaktadır. Bu çalışmada, nöronların katmanlı bir yapıda

yer aldığı ve önce yerel görsel özellikleri algılayıp, ardından bunları daha üst düzey temsillere dönüştürdüğü ortaya konmuştur [76].

Bu fikirden ilham alan Kunihiko Fukushima, 1980 yılında Neocognitron adlı, çok katmanlı ve hiyerarşik görsel tanıma yapısına sahip ilk teorik CNN modelini önermiştir [77]. Ardından LeCun ve arkadaşları, 1989 yılında LeNet-5 mimarisini geliştirerek CNN'leri modern anlamda uygulamaya geçirmiştir. LeNet-5, MNIST el yazısı rakam veri kümesinde başarıyla test edilmiş ve geri yayılım algoritması ile eğitilmiştir.

Ancak bu dönemde, sınırlı veri, algoritma eksiklikleri ve yetersiz donanım nedeniyle CNN'lerin yaygınlaşması sınırlı kalmıştır. 2012 yılı ise bir dönüm noktası olmuş; Krizhevsky et al., büyük veri ve GPU destekli AlexNet modelini geliştirerek ImageNet yarışmasında önemli bir başarıya imza atmıştır [78], [79], [80]. Bu gelişme, CNN mimarilerinin hem CV hem de doğal dil işleme alanlarında yaygınlaşmasının önünü açmıştır.

Günümüzde CNN, görüntü sınıflandırma, nesne tespiti, yüz tanıma, ses tanıma, araç tanıma, yüz ifadesi tanıma, metin tanıma gibi birçok bilgisayarla görme (computer vision) temelli uygulamada başarılı sonuçlar elde etmek için yaygın olarak kullanılan bir yöntem haline gelmiştir.

İlk olarak CNN katmanlarını ve öğrenme sürecini detaylı olarak inceleyeceğiz. CNN, görüntülerden anlamlı öznitelikler çıkarmak ve bu bilgileri kullanarak sınıflandırma yapmak için birden fazla katmandan oluşur. Bu katmanlar Tablo 3.5'de yer almaktadır.

Tablo 3.5: CNN Katmanları.

Katman	Görevi	Açıklama / Kullanım Alanı
Girdi Katmanı (Input Layer)	Girdi verisini alır (görüntü-pixel)	Ham görüntünün sinir ağına iletimi.
Evrişim katmanı (Convolutional Layer)	Özellik çıkarımı	Özellik çıkarımı (feature extraction)
Aktivasyon Fonksiyonları	Doğrusal olmayanlık ekler	Özellik haritası filtrelenmiş ve doğrusal olmayan hale gelir.

Tablo 3.5: CNN Katmanları (Devamı).

Batch Normalization (Toplu Normalizasyon)	Normalizasyon sağlar	Aktivasyon çıktılarının istatistiksel olarak normalize edilmesini sağlar.
Havuzlama Katmanı (Pooling Layer)	Boyut indirgeme	Özellik haritalarının boyutlarını küçültmek için kullanılır.
Bırakma Katmanı (Dropout Layer)	Aşırı öğrenmeyi engeller	Rastgele bağlantıları devre dışı bırakır; genelleme başarısını artırır. Eğitim sırasında rastgele bazı nöronların çıkışlarını sıfırlayarak aşırı öğrenmeyi önler. Modelin genelleme yeteneğini artırır.
Tam Bağlantılı Katman (Fully Connected Layer - FC)	Karar verir	Çıkış katmanına bağlanan nöronların tamamı önceki katmana bağlıdır. Flatten edilmiş veriler, bir veya daha fazla FC katmanına girer. Bu katmanlar, sınıflandırma görevini yerine getirir ve modelin karar alma sürecini yönetir.
Çıkış Katmanı (Output Layer)	Sonuç üretir	Son katmandır. Sınıflandırma problemlerinde genellikle Softmax aktivasyon fonksiyonu ile birlikte kullanılır ve her sınıfa ait olasılığı döndürür. Sınıflandırma (softmax) veya regresyon (linear) sonucunu verir.

CNN, aynı zamanda ConvNet olarak da bilinir, bir tür ANN olup, derin ileri beslemeli (feed-forward) bir mimariye sahiptir ve tam bağlantılı (Fully Connected - FC) katmanlara sahip diğer ağ türlerine kıyasla yüksek genelleme yeteneği ile öne çıkar. Tablo 3.5’de, CNN mimarisinde yer alan temel katmanlar detaylı bir biçimde sunulmuştur. Bu bölümde, söz konusu katmanların görevlerini ve öğrenme sürecinin nasıl gerçekleştiğini katman bazlı olarak inceleyeceğiz.

Girdi Katmanı (Input Layer): Bu katman, genel olarak bir görüntü verisini temsil eder ve sayısal ifade ile bir pixel matrisidir (örn: $224 \times 224 \times 3$). Katmanda modelin işleyebilmesi için gerekli olan ham veri alınır ve sinir ağına hesaplama yapılmaksızın iletilir. Görüntü verileri bu katmanda 2D veya 3D tensörler şeklinde temsil edilir. Örneğin: 2D: 28x28 gri tonlamalı bir görüntü (tek kanal)’a karşılık gelir. 3D: 224x224x3 renkli bir görüntü (RGB: kırmızı, yeşil, mavi)’a karşılık gelir. Herhangi bir ağırlık, kernel (filtre) veya öğrenme işlemi bu katmanda gerçekleşmez.

Konvolüsyon Katmanı (Convolutional Layer): Bu katmanın temel amacı, giriş verisinden yerel ve anlamlı öznitelikleri çıkarmaktır. Bu katman, CNN mimarisinin en önemli yapı

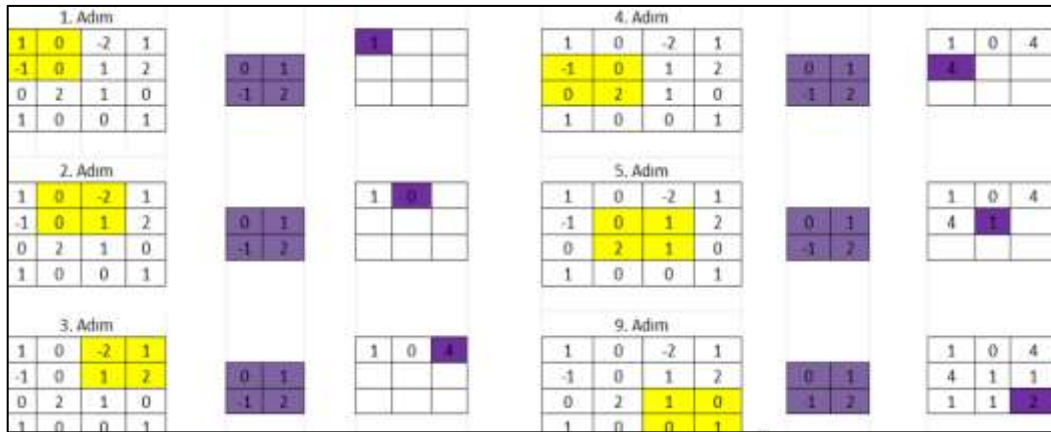
taşıdır. Konvolüsyon işlemine geçmeden önce, CNN'e verilen girdinin formatını anlamak gerekir. Klasik ANN'lerden farklı olarak, CNN'lerde giriş verisi bir vektör değil, genellikle çok kanallı bir görüntü verisidir (örn: renkli görüntü (RGB) her pixelin kırmızı (R), yeşil (G), mavi (B) rengi bulunur ve görüntüler 3 kanallıdır yükseklik x genişlik x 3, gri tonlamalı görüntü (grayscale) tek kanal (1 kanal) vardır yükseklik x genişlik x 1).

Giriş görüntüsünün üzerinde kaydırılarak gezen ve belirli öznitelikleri (kenar, doku, desen gibi) yakalamak üzere tasarlanmış küçük boyutlu matrislere çekirdek (kernel) ya da filtre denir. Bu filtreler, görüntü üzerinde konvolüsyon (evrişim) işlemi ile uygulanır ve her bir uygulama sonucunda özellik haritaları (feature maps) elde edilir. Bu işlem sırasında filtre, giriş görüntüsüyle noktasal çarpım yaparak öne çıkan özellikleri çıkarır. (Bkz. Şekil 20). Renkler sadece bu değerlerin görsel temsili olarak kullanılır.

0	1
-1	2

Şekil 3.11: Örnek 2x2'lik Bir Kernel.

Evrişim (konvolüsyon) işlemini detaylandıracak olursak; 4×4 boyutunda gri tonlamalı bir görüntü ve 2×2 boyutunda bir kernel (çekirdek) kullanıldığında, kernel giriş görüntüsü üzerinde hem yatay hem de dikey ekseninde adım adım kaydırılır. Her bir konumda, kerneldeki değerler ile görüntüde o konuma karşılık gelen pikseller çarpılır. Bu işleme noktasal çarpım (dot product) denir. Çarpım sonucu elde edilen değerlerin toplamı, çıktı haritasında (özellik haritası – feature map) bir skaler değer olarak yer alır. Bu işlem, çekirdeğin görüntü üzerinde kaydırılabileceği tüm konumlar boyunca tekrarlanır. Böylece, giriş görüntüsündeki öznitelikler (kenar, doku vb.) çıkarılarak daha küçük boyutlu ama anlamlı bir özellik haritası elde edilir. Bu işlemi gerçekleştiren kernel içindeki her bir sayı, bir ağırlık (weight) parametresidir. Bu ağırlıklar modelin eğitimi sırasında rastgele başlatılır ve daha sonra veriden öğrenilir. CNN'in öğrenme sürecinde, ağ bu ağırlıkları güncelleyerek, belirli desen ve örüntüleri daha iyi tanıyacak şekilde filtrelerini optimize eder. Dolayısıyla, ağırlıklar, görüntüde hangi özelliklerin ne kadar önemli olduğunu belirleyen temel öğrenme unsurlarıdır.

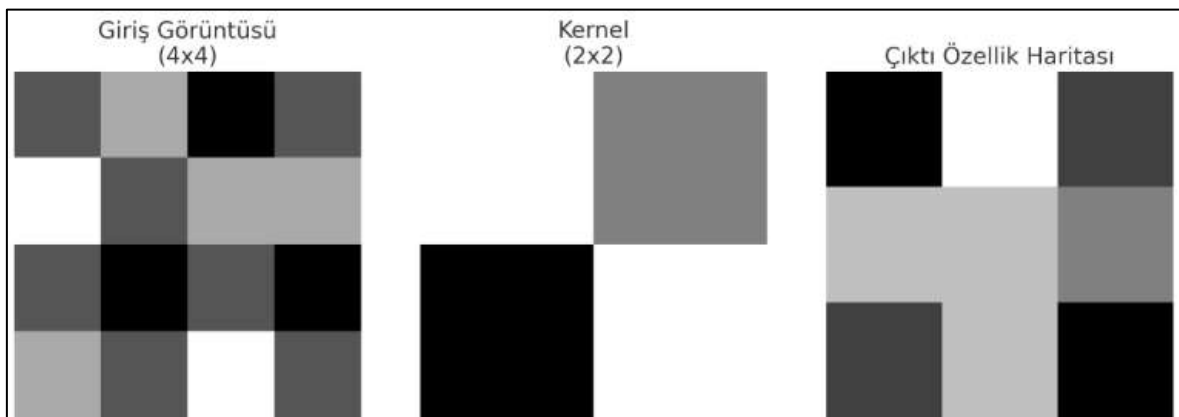


Şekil 3.12: Evrişim İşlemi İçin Örnek Adımlar.

1	0	4
4	1	1
1	1	2

Şekil 3.13: Evrişim İşlemi Sonucu.

Görüntünün renkli mi yoksa gri tonlamalı mı olduğunu bilmek, ANN’lerde zellikle girdi katmanını tasarlarken çok kritik bir bilgidir. Örnek: doğal görüntü sınıflandırma: renkli (rgb), yüz tanıma: gri tonlamalı veya renkli, medikal görüntüleme: genellikle gri tonlamalı, el yazısı / karakter tanıma: gri tonlamalı, uydu görüntü analizi: renkli (ya da çok bantlı), görüntüden kenar/desen tespiti: gri tonlamalı tercih edilir.



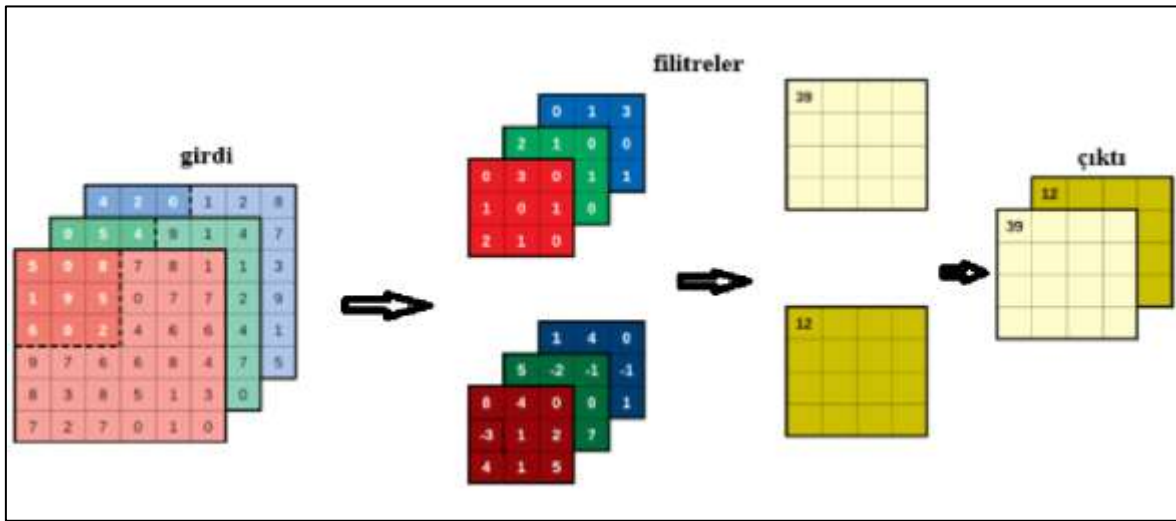
Şekil 3.14: Gri Tonlamalı Evrişim İşlemi Örneği.

Gri tonlamalı olana örnek yukarıdaki Şekil 21’de verilebilir. Şekil 21’de giriş görüntüsü gri tonlamalı bir 4x4 matrisi temsil eder. Bu matrisin her bir hücresi, bir pikselin parlaklık

seviyesini (sayısal değer olarak) ifade eder. Ancak görselde bu sayılar renk tonlarıyla ifade edilmiştir: açık renk daha yüksek sayı, koyu renk daha düşük sayı anlamına gelir.

Kernel de yine aynı şekilde sayısal değerlerden oluşur ancak burada da görsel temsilde gri tonlar kullanılmıştır. Bu gri tonlar, temelde matematiksel işlemlerin görselleştirilmiş halidir ve bu sayede sayısal bilgiyi görsel olarak sezmek kolaylaşır.

Renkli görüntü durumunda ise her bir pixel renkli görüntü (RGB) her pixelin kırmızı (R), yeşil (G), mavi (B) rengi bulunur ve görüntüler 3 kanalıdır yükseklik x genişlik x 3.



Şekil 3.15: RGB Evrişim İşlemi Örneği.

6×6×3 boyutunda renkli bir görüntü girdisi olduğunu düşünelim. Bu görüntü, kırmızı, yeşil ve mavi olmak üzere üç renk kanalından oluşur (RGB). Bu tür çok kanallı girişlerde, her konvolüsyon filtresi de üç kanallı olacak şekilde tasarlanır. Yani her filtre, 3×3×3 boyutundadır. Her bir filtre, giriş görüntüsünün tüm kanallarıyla ayrı ayrı etkileşime girer; bu işlem sonucunda bir adet özellik haritası (feature map) elde edilir. Örneğin, bu senaryoda iki farklı filtre uygulandığında, her biri için birer adet 4×4 boyutunda çıktı matrisi oluşur. Sonuç olarak, bu işlemde elde edilen çıktı boyutu 4×4×2 olur; yani her biri 4×4 olan iki adet özellik haritası üretilmiştir. Bu örnekte padding işlemi uygulanmamıştır, valid konvolüsyon (padding = 0), adım değeri (stride) değeri 1 işlemidir. Ancak, konvolüsyon işlemlerinde 1'den farklı adım değerleri de kullanılabilir. Adım, konvolüsyon işlemi sırasında kernel'in giriş verisi üzerinde ne kadar adım atarak kaydırılacağını belirleyen bir parametredir. Adım 0 ise konvolüsyon işlemi uygulanamaz, 1 ise kernel her adımda 1 piksel

kayar, giriş görüntüsü detaylı taranır, çıktı boyutu büyüktür, 2 ise kernel her adımda 2 piksel kayar, daha az işlem yapılır, çıktı boyutu küçülür. Özet olarak adım değeri arttıkça hesaplama maliyeti azalır, ancak çözünürlük ve detay kaybı artar, çıktı olarak elde edilen özellik haritasının boyutunun küçülür.

Dolgu (Padding), evrişim işlemi öncesinde giriş görüntüsünün etrafına sıfır gibi sabit değerlerle çerçeve eklenmesidir. Bu işlemin uygulanmasının temel sebepleri şunlardır:

1. Kenar Bilgisini Korumak: Filtre, görüntü üzerinde kayarken kenar bölgelerde tam olarak sığmayabilir. Bu durumda kenar bilgileri işlenmeden kaybolabilir. Dolgu, bu sorunu ortadan kaldırır.
2. Giriş Boyutunu Korumak: Dolgu sayesinde, konvolüsyon işlemi sonrasında elde edilen çıktı giriş görüntüsüyle aynı boyutta kalabilir. Özellikle "same" padding türü bu amaçla kullanılır.
3. Çıktı Boyutunu Ayarlamak: Eğer daha büyük ya da belirli boyutta bir çıktı isteniyorsa, dolgu miktarı artırılarak özellik haritası boyutu kontrol altında tutulabilir.

Evrişim işleminden sonra çıktı özellik haritasının boyutunu hesaplamak için aşağıdaki formül kullanılır:

2D evrişim için;

$$H_{\text{çıkış}} = \left\lfloor \frac{H_{\text{giriş}} + 2D - K}{A} \right\rfloor + 1 \quad (3.6)$$

$$W_{\text{çıkış}} = \left\lfloor \frac{W_{\text{giriş}} + 2D - K}{A} \right\rfloor + 1 \quad (3.7)$$

Burada $H_{\text{çıkış}}$ ve $W_{\text{çıkış}}$ çıkış yüksekliği ve genişliği, $H_{\text{giriş}}$ ve $W_{\text{giriş}}$ giriş verisinin yükseklik ve genişliği, K kernel boyutu, D dolgu miktarı, A adım sayısıdır.

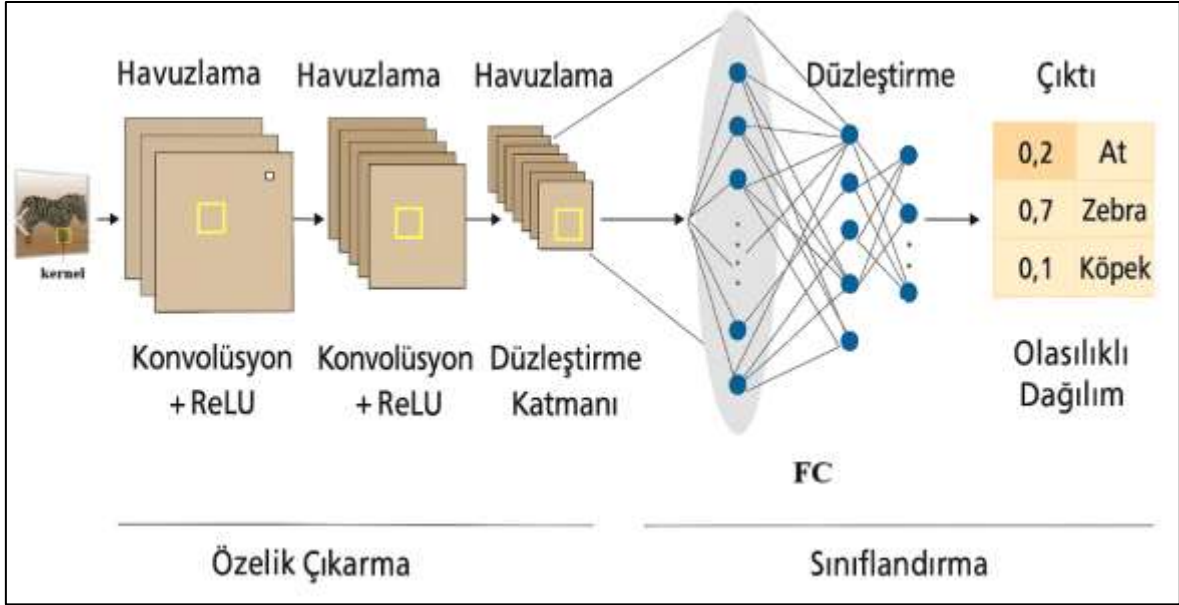
Evrişim işlemi aktivasyon fonksiyonu ile birlikte çalışarak CNN'in öğrenme yeteneğini sağlar. Aktivasyon fonksiyonlarının temel görevi girdiyi çıktıya dönüştürmektir. Evrişim işleminden hemen sonra devreye girer. Yani çıktı özellik haritasına aktivasyon fonksiyonu uygulanır. Örn: ReLU negatif değerleri sıfıra çeker, pozitifleri olduğu gibi bırakır. Sigmoid

tüm deęerleri 0 ile 1 arasında sıkıştırır. Tanh ise deęerleri -1 ile 1 arasına dönüştürür. Aktivasyon fonksiyonu uygulanması ile özellik haritası filtrelenmiş ve doğrusal olmayan hale gelir.

Toplu Normalizasyon (Batch Normalization), her mini-batch'teki ara katman çıkışlarını (özellikle aktivasyon fonksiyonu çıktılarını) istatistiksel olarak normalize ederek ağı daha dengeli ve hızlı öğrenmesini sağlar. Genel olarak aktivasyon fonksiyonu sonrasında kullanılır, düzleştirme katmanlarıyla birlikte de kullanılabilir (özellikle derin yapay sinir ağlarında). Toplu Normalizasyon, yalnızca veriyi normalize etmekle kalmaz; aynı zamanda bu normalleştirilmiş verinin, öğrenme sürecinde daha esnek ve güçlü hale gelmesi için ek olarak iki yeni öğrenilebilir parametre (ölçekleme – γ ve kaydırma – β) de dahil eder. Bu sayede model, sadece giriş dağılımını sabitlemekle kalmaz, aynı zamanda bu dağılım üzerinde ince ayarlar yaparak daha verimli öğrenme sağlar. Güncel CNN mimarilerinde neredeyse normalizasyonların kullanımı standart hale gelmiştir. Ayrıca bu yöntem, ağırlık güncellemelerinin daha istikrarlı yapılmasını sağlar. Çünkü her katmanda giriş dağılımı daha sabit hale geldiği için, gradyanların çok büyümesi veya sifıra yaklaşması gibi sorunlar (örneğin "vanishing gradient") azaltılmış olur. Böylece ağırlıklar daha hızlı ve dengeli güncellenir, öğrenme süreci hem hızlanır hem de genelde daha yüksek başarı elde edilir.

Havuzlama Katmanı (Pooling Layer): Evrişim işlemleri sonucunda üretilen özellik haritalarının alt örneklemesini yapmak için kullanılır. Bir başla deyişle, büyük boyutlu özellik haritalarını daha küçük boyutlu hale getirir. Bu küçültme işlemi sırasında, hem hesaplama yükü azalımı hem de her havuzlama adımında en baskın özelliklerin (veya bilginin) korunması amaçlanır. Bu işlem sürecinde evrişim işleminde olduğu gibi, havuz bölgesi boyutu ve stride belirlenerek gerçekleştirilir. Max Pooling, en yaygın ve en çok kullanılan havuzlama tekniğidir ve aktivasyon fonksiyonu sonrasında uygulanır. Özellik haritası üzerinde, örneğin 2×2 gibi bir pencere seçilir. Bu pencere, stride değeriyle yatay ve dikey olarak kaydırılır. Her penceredeki en büyük deęer (maksimum) alınarak yeni bir, daha küçük boyutlu matris oluşturulur. Bu pencere seçimi veri yapısına ve modelin karmaşıklığına baęlı olarak farklı seçilebilir, 2×2 , 3×3 ,... gibi. Havuzlama işleminin boyut küçültme, hafızada tasarruf, aşırı öğrenme önüne geçme ve baskın özelliklerin korunması gibi avantajları bulunur. Ancak bazı durumlarda konum bilgisinin yok sayılması veya detayların kaybolması gibi dezavantajlara da yol açabilir. Özellikle yüz tanıma gibi konum

duyarlılığı yüksek görevlerde dikkatli kullanılmalıdır. Genel olarak büyük ve karmaşık görüntülerin işlendiği modellerde verimli bir strateji olarak tercih edilir.



Şekil 3.16: CNN Süreci.

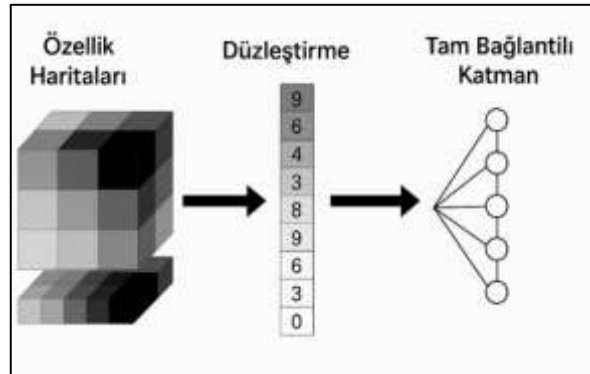
Şekil 23'te birden fazla evrişim ve havuzlama katmanı kullanılmasının nedeni ise modelin daha derin, daha doğru ve daha anlamlı öğrenme yapabilmesini sağlaması amacıdır. Özellikle büyük ve karmaşık veri setlerinde bu yapı zorunlu hale gelir. Max Pooling her katmandan sonra boyutu küçültür. Bu sayede hem hesaplama maliyeti düşer hem de önemsiz bilgiler elenir. Katmanlar arttıkça veri daha fazla soyutlanır. İlk katman nerede sorusuna odaklanırken son katman bu bilgi ne tür bir nesne olduğu bilgisine dönüşür.

Max Pooling en yaygın kullanılan havuzlama (pooling) türü olsa da, CNN mimarilerinde kullanılan başka havuzlama yöntemleri de vardır. Her biri farklı avantajlara sahiptir ve belirli problemler için tercih edilir. Örnek: Average Pooling, Min Pooling, Global Average Pooling (GAP), Global Max Pooling (GMP), Stochastic Pooling, L2-Norm Pooling, Mixed Pooling. Bu yöntemlerin tümü, modelin daha verimli, dayanıklı ve genellenebilir hale gelmesini sağlamak amacıyla özellik boyutlarını azaltırken bilgi kaybını en aza indirmeyi hedefler.

Bırakma Katmanı (Dropout Layer): Bu katman, her eğitim adımında ağıdaki bazı nöronların aktivasyonlarını rastgele ve geçici olarak sıfıra ayarlayarak devre dışı bırakır. Bu yöntem sayesinde, modelin belirli özelliklere aşırı bağımlı hale gelmesi önlenir ve bu da aşırı öğrenme (overfitting) riskini azaltır. Eğitim boyunca bu işlemin tekrar edilmesi, ağı daha

dayanıklı ve yüksek genelleme yeteneğine sahip temsiller öğrenmesine katkı sağlar. İşlem için genellikle bir oran belirlenir. Örneğin, dropout rate = 0.5 olarak ayarlandığında, her eğitim adımında nöronların yaklaşık %50'si rastgele devre dışı bırakılır. Dropout katmanı genellikle tam bağlantılı (Fully Connected) katmanlardan sonra uygulanır; ancak bazı mimarilerde evrişim (convolutional) katmanlardan sonra da tercih edilebilir. Dropout yalnızca eğitim sırasında aktiftir. Test / çıkarım (inference) aşamasında ise devre dışıdır ve tüm nöronlar tam kapasiteyle çalışır. Dropout katmanı CNN mimarilerinde her zaman kullanılmaz, ancak aşırı öğrenme riski olan durumlarda özellikle tercih edilir.

Tam Bağlantılı Katman (Fully Connected Layer - FC): Bu katman, CNN mimarisinin karar verme sürecini gerçekleştiren en kritik bileşenlerden biridir. Bir tam bağlantılı katmanda, her nöron bir önceki katmandaki tüm nöronlarla bağlantılıdır. FC katmanlarının sonuncusu genellikle ağın çıkış katmanı olarak görev yapar ve sınıflandırma ya da regresyon gibi görevlerin nihai çıktısını üretir. Bu katmanlar, ileri beslemeli ANN türüdür. Geleneksel çok katmanlı algılayıcı yapısını temel alır. FC katmanları, son evrişim ya da havuzlama katmanından gelen özellik haritaları verilerini düzleştirilerek tek boyutlu bir vektör haline getirilir. Bu vektör daha sonra tam bağlantılı katmana beslenir ve CNN'in nihai çıktısını üretmek için kullanılır. Özellik haritaları verileri bir sınıflandırma problemini çözmek için kullanmak istediğimizde (etiket veya sınıf tahmini) yapmak istediğimizde bu çok boyutlu verileri (örneğin, $4 \times 4 \times 64$ gibi) düzleştirilerek tek boyutlu bir vektöre (örneğin, $4 \times 4 \times 64 = 1024$) çevirmek gerekir. Bunun nedeni FC katmanının klasik ANN gibi çalışması ve girdiyi bir vektör (tek boyutlu dizi) olarak beklemesidir (bakınız Şekil 3.17).



Şekil 3.17: Tam Bağlantılı Katman (FC).

Çıkış Katmanı (Output Layer): CNN mimarisinin son katmanıdır ve burada nihai sınıflandırma işlemi gerçekleşir. Bu çıkış katmanında, CNN modelinin eğitim örnekleri üzerindeki tahmin hatası, bir kayıp fonksiyonu (loss function) aracılığıyla hesaplanır. Kayıp fonksiyonu, modelin tahmini ile gerçek çıktı arasındaki farkı (hata) belirler. Bu hata, CNN'in öğrenme sürecinde optimize edilir. Yani, model bu hatayı azaltacak şekilde kendini günceller. Farklı problem türlerine göre farklı kayıp fonksiyonları kullanılır: Çapraz Entropi (Cross-Entropy) / Softmax Kayıp Fonksiyonu, Öklidyen Kayıp Fonksiyonu (Euclidean / Mean Squared Error - MSE), Hinge Kayıp Fonksiyonu (Hinge Loss), bakınız Tablo 3.6. Bir kayıp fonksiyonu, iki parametre kullanır: modelin tahmini çıktısı (p) ve gerçek çıktı (etiket $- y$).

Tablo 3.6: Yaygın Kayıp Fonksiyonları.

Kayıp Fonksiyonu	Kullanım Alanı	Özellikler	Matematiksel İfadesi
Çapraz Entropi (Cross-Entropy Loss)	Sınıflandırma (özellikle çok sınıflı)	Softmax aktivasyonu ile kullanılır, modelin tahmin ettiği dağılım ile gerçek dağılım arasındaki farkı ölçer.	$H(p,y) = -\sum y_i \log(p_i)$
Öklidyen Kayıp (Euclidean Loss / Mean Squared Error)	Regresyon problemleri	Tahmin edilen değer ile gerçek değer arasındaki kare farkının ortalamasını alır.	$H(p,y) = (1/2N) \sum (p_i - y_i)^2$
Hinge Loss	İkili sınıflandırma (SVM için yaygın)	Maksimum margin ilkesine dayanır, doğru sınıf ile karar sınırı arasındaki mesafeyi maksimize etmeye çalışır.	$H(p,y) = \sum \max(0, 1 - y_i * p_i)$

Uzun Kısa Süreli Bellek (Long Short-Term Memory - LSTM): 1997 yılında Hochreiter ve Schmidhuber tarafından geliştirilen [LSTM (Long Short-Term Memory)], tekrarlayan sinir ağlarının (Recurrent Neural Network - RNN) özel ve geliştirilmiş bir mimarisidir. RNN'ler; zaman serisi, metin, konuşma veya sensör çıktıları gibi ardışık verilerin işlenmesine yönelik olarak tasarlanmış yapay sinir ağı (ANN) türleridir. Bu ağlar, önceki zaman adımlarındaki bilgileri hafızasında tutarak mevcut çıktıyı geçmiş bilgilerle birlikte üretme yetisine sahiptir. Ancak klasik RNN'ler, özellikle uzun dizilerle çalışırken kaybolan (vanishing) ve patlayan

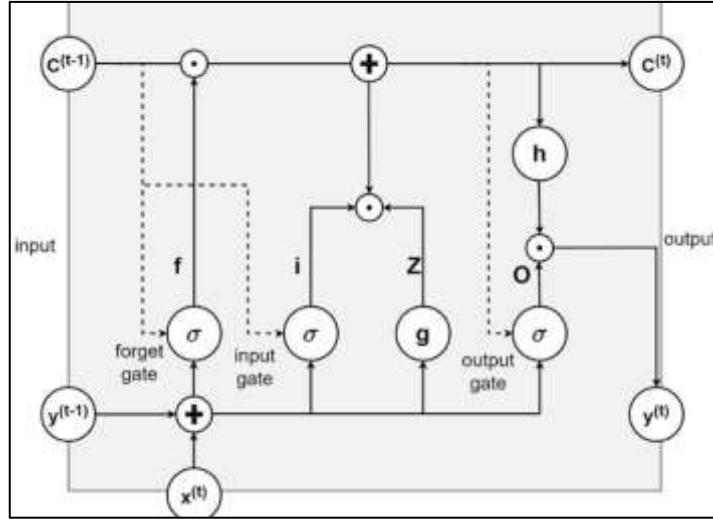
(exploding) gradyan problemleri nedeniyle öğrenme sürecinde zorluk yaşar. Bu durum, geri yayılım algoritması sırasında gradyanların çok küçük ya da çok büyük değerlere ulaşması sonucu oluşur ve modelin verimli öğrenmesini engelleyebilir [81].

LSTM'nin temel çözüm mekanizması, her hücre içinde hata bilgisinin zaman içinde korunmasını sağlayan Sabit Hata Döngüsü (Constant Error Carousel- CEC) yapısıdır. Bu mekanizma, bilgiyi uzun zaman adımları boyunca kaybetmeden tutabilen bir bellek görevi görür. LSTM hücreleri, hangi bilgilerin içeri alınacağına, hangi bilgilerin saklanacağına veya dışarı aktarılacağına karar veren giriş kapısı (input gate) ve çıkış kapısı (output gate) gibi denetim bileşenleriyle yapılandırılmıştır.

Bu açıklama, literatürde “vanilla LSTM” olarak bilinen klasik LSTM mimarisini temel alır. Vanilla LSTM, bir hücre durumu ile birlikte giriş, çıkış ve unutma kapılarından oluşur ve LSTM mimarileri arasında en yaygın kullanılan versiyondur. Özellikle sıralı veri ile çalışan sistemlerde, bilgi kaybını en aza indirerek uzun vadeli bağımlılıkların öğrenilmesini mümkün kılar [82].

Tablo 2.2’de, LSTM mimarisini oluşturan temel katmanlar ve bu katmanların işlevleri detaylandırılmıştır. Bu yapı, LSTM modelinin zaman serisi verileri üzerinde uzun vadeli bağımlılıkları nasıl öğrendiğini anlamak açısından önemlidir. Her bir katman, bilgi akışını kontrol eden özel bileşenlerle donatılmış olup, öğrenme sürecinde hem geçmiş hem de mevcut bilgilere dayalı kararlar alınmasını mümkün kılar.

Şekil 3.18’ de LSTM nin yapısı görülebilmektedir.



Şekil 3.18: Vanilla LSTM Yapısı.

Bu yapı, zaman adımı t 'de bir LSTM hücresinin nasıl çalıştığını temsil etmektedir. Şimdi ayrıntılı olarak LSTM mimarisine bakacağız.

Tablo 3.7: LSTM Katmanları.

Katman	Görevi	Açıklama / Kullanım Alanı
Giriş Kapısı (Input Gate)	Veri Alımı	Ne tür yeni bilgilerin saklanacağını belirler
Hücre Durumu (Cell State)	Uzun vadeli bellek	Zaman boyunca taşınan ve güncellenen bellektir. Bilgi akışını sağlayan temel yapıdır.
Unutma Kapısı (Forget Gate)	Gereksiz bilgiyi silme	Önceki hücre durumundan hangi bilgilerin silineceğine karar verir. Sigmoid aktivasyon fonksiyonu ile çalışır.
Blok Çıkışı (Block Output)	Çıktı üretimi	Güncel hücre durumu ve giriş bilgilerine göre bir sonraki adıma hangi bilginin aktarılacağını belirler. Genellikle sigmoid ve tanh aktivasyon fonksiyonları ile çalışır.

Giriş Kapısı: LSTM hücresinin belleğine hangi bilgilerin ekleneceğine karar veren adımdır. LSTM modellerine verilen girişler genellikle birden fazla ve farklı türde özelliği içerir. Örneğin; bir kelimenin vektör temsili, bir sensör verisi, bir finansal gösterge ya da birden

fazla sensörden gelen değerler aynı anda giriş olarak verilebilir. LSTM bu özellikleri birleştirerek işler ve her bir özelliğin bilgi akışına katkısını öğrenir.

Bu işlem matematiksel olarak şu şekilde ifade edilir:

$$i^{(t)} = \sigma(W_i x^{(t)} + R_i + p_i \odot c^{(t-1)} + b_i) \quad (3.8)$$

Burada $i^{(t)}$ giriş kapısının aktivasyon vektörüdür. $i^{(t)}$ 'nin her bir elemanı 0 ile 1 arasında bir sayıdır. 1'e yakınsa: O bilgi hücre durumuna tam olarak dahil edilir. 0'a yakınsa: O bilgi görmezden gelinir, hücre durumuna eklenmez. $x^{(t)}$: giriş sinyalıdır. Eğer giriş birden fazla özellik içeriyorsa, bu vektörün boyutu n olur (özellik sayısı). W_i Giriş sinyaliyle (vektörüyle) ilişkili ağırlık matrisidir. Burada h, LSTM'nin gizli katman boyutu olmak üzere W_i 'nin boyutu $h \times n$ 'dir. R_i Bir önceki çıktı olan $y^{(t-1)}$ ile çarpılan ağırlık matrisidir. p_i önceki hücre durumu $c^{(t-1)}$ ile noktasal çarpım yapılan ağırlık vektörüdür. b_i bias (sapma) vektörüdür. σ Sigmoid aktivasyon fonksiyonu ve $\odot$ noktasal (element bazlı) çarpımı ifade eder.

Giriş kapısı farklı özellikleri dikkate alarak hücre durumuna hangi yeni bilgilerin ekleneceğini belirler. LSTM zaman içinde bilgiyi taşıyabilen özel bir yapıya sahiptir. Bu yapının detaylı anlaşılabilmesi için hücre durumu ($c^{(t)}$) kavramını bilmek gereklidir. Bu, LSTM'nin o ana kadar öğrendiği/hatırladığı bilgilerin özeti gibi düşünülebilir. Her bir zaman adımında, bu bellek güncellenir. Güncelleme sırasında bazı bilgiler silinir, bazıları eklenir. Bu işlemler “kapılar” aracılığıyla yapılır (giriş kapısı, unutma kapısı vs.). $c^{(t-1)}$ ise önceki hücre durumudur. LSTM, geçmişteki adımları hatırlayarak çalışır. Bu nedenle her bir zaman adımında, bir önceki hücre durumuna (geçmişten gelen hafıza) bakar. Bu şu anki hücreye neyin aktarılıp neyin aktarılmayacağına karar vermede kullanılır (kontrol mekanizması $p_i \odot c^{(t-1)}$). LSTM, hem mevcut girişe $x^{(t)}$ hem de bu hafızaya bakarak yeni kararlar verir. Bu sayede zaman içindeki bağlamı koruyabilir, öğrenilmiş bilgileri uzun süre taşıyabilir.

Unutma Kapısı (Forget Gate): Bu kapıda, LSTM birimi $c^{(t-1)}$ içinden hangi bilgilerin unutulması gerektiğine karar verir.

$$f^{(t)} = \sigma(W_f x^{(t)} + R_f y^{(t-1)} + p_f \odot c^{(t-1)} + b_f) \quad (3.9)$$

$f^{(t)}$ unutmakapısının aktivasyon vektörüdür. Her elemanı 0 ile 1 arasında bir değerdir. 1'e yakınsa: Bilgi korunur. 0'a yakınsa: Bilgi unutulur. W_f, R_f, p_f sırasıyla giriş sinyali, önceki çıktı ve hücre durumu için kullanılan ağırlık matrisleri/vektörleridir.

Bu aşamada hücre durumu $c^{(t)}$ güncellenir. Yeni hücre değeri, mevcut zaman adımındaki blok girişi $z^{(t)}$ ile giriş kapısı çıktısı $i^{(t)}$ 'nin noktasal çarpımı ve bir önceki hücre durumu $c^{(t-1)}$ ile unutmakapısı çıktısı $f^{(t)}$ 'nin çarpımının toplamı şeklinde hesaplanır:

$$c^{(t)} = z^{(t)} \odot i^{(t)} + c^{(t-1)} \odot f^{(t)} \quad (3.10)$$

Denklem 2.1, LSTM'nin hem güncel bilgiyi belleğe ne ölçüde alacağını (giriş kapısının etkisiyle) hem de geçmişteki bilgiyi hangi oranda koruyacağını (unutmakapısının etkisiyle) aynı anda belirlemesini sağlar. Unutmakapısı, öğrenme sürecinde aktif bir oyuncudur.

Blok Çıkışı (Block Output): Blok çıkışı, LSTM hücresinin zaman adımı t 'de ürettiği nihai çıktıdır ve bu çıktı, güncel hücre durumu ile çıkış kapısının kararı temel alınarak hesaplanır.

Bu işlem aşağıdaki formülle tanımlanır:

$$y^{(t)} = g(c^{(t)}) \odot o^{(t)} \quad (3.11)$$

Burada: $c^{(t)}$ güncel hücre durumu, $o^{(t)}$ çıkış kapısının aktivasyon değeri ve g o(t) genellikle hiperbolik tanjant (tanh) olan bir aktivasyon fonksiyonudur. Bu fonksiyon, hücre durumunu -1 ile 1 arasında sınırlandırarak çıktıların dengeli bir şekilde yayılmasını sağlar ve pozitif-negatif bilgiyi aynı anda taşıyabilme özelliği sunar. Ancak teorik olarak, g fonksiyonu farklı aktivasyon türleriyle de değiştirilebilir. Örneğin ReLU, Leaky ReLU, GELU, Swish veya ELU gibi alternatifler literatürde incelenmiştir. ReLU gibi fonksiyonlar pozitif bilgiye odaklanırken, negatif bilgiyi tamamen sıfıra indirgediği için bazı bilgi kayıplarına yol açabilir. Leaky ReLU ise negatif bilginin bir kısmını tutarak bu sorunu kısmen çözmeyi hedefler. Bu alternatif fonksiyonlar, bazı uygulamalarda performans artışı sağlayabilse de, klasik LSTM mimarisiyle tam uyumlu ve kararlı sonuçlar vermeleri her zaman garanti değildir. Bu yapı, modelin yalnızca belleğinde sakladığı bilgileri dış dünyaya aktarmasını değil, aynı zamanda bu aktarımın kontrollü ve seçici biçimde gerçekleşmesini sağlar. Böylece model, yalnızca göreve katkı sağlayacak nitelikteki bilgiyi çıktı olarak iletir. Bu

yapı, çok katmanlı ve uzun dizili verilerle çalışırken bilgi kaybını önlemede kilit rol oynamaktadır.

Modelin Eğitimi: Bir LSTM modeli eğitilirken temel amaç, verilen giriş verileri ile doğru hedef değerler arasında güçlü bir ilişki kurarak bu örüntüyü öğrenmektir. Bu süreç, denetimli öğrenme yaklaşımı çerçevesinde gerçekleşir ve birkaç temel aşamadan oluşur. LSTM ağlarının eğitimi, geçmiş zaman adımlarıyla olan ilişkileri öğrenebilmesi için özel bir gradyan hesaplama süreci içerir. Bu süreç, zaman bağımlı verilerle çalışan modellerde oldukça etkili olan Zamana Göre Geri Yayılım (Backpropagation Through Time – BPTT) yöntemi ile gerçekleştirilir. Özellikle $c^{(t)}$, hem $y^{(t)}$ hem de $c^{(t-1)}$ 'den gelen gradyanları birleştirir. Bu birleştirme, kapılarla (giriş, çıkış, unutma kapısı) bağlantılı delta değerlerinin de hesaplanmasıyla tamamlanır. Her kapının parametreleri, bu delta değerleri üzerinden güncellenerek modelin bilgiyi daha verimli şekilde tutması veya unutmasını sağlar.

Bu hesaplamalar sırasında kullanılan değişkenleri δ_y^t o zamandaki toplam hata, δ_o , δ_i , δ_f ve δ_z sırasıyla çıkış, giriş, unutma kapısı ve blok girişine ait hata sinyalleridir. Ayrıca ağın girişlerine ilişkin gradyanlar, yalnızca modelin alt katmanlarında eğitilmesi gereken bir yapı varsa hesaplanır. Bu, modelin gereksiz hesaplamalardan kaçınmasına ve daha verimli çalışmasına olanak tanır. $\hat{o}^t$, $\hat{i}^t$, $\hat{z}^t$ ve $\hat{f}^t$ sırasıyla çıkış kapısı, giriş kapısı, blok girişi ve unutma kapısı ile ilişkili olan, aktivasyon fonksiyonları uygulanmadan önceki ham değerleri ifade eder.

Ağırlıkların güncellenmesi sırasında $\odot$ yöntemi kullanılarak her zaman adımındaki gradyanlar toplanır. Bu sayede ağın her bir bileşeni için doğru yönde bir optimizasyon yapılabilir. Özellikle LSTM'deki peephole bağlantılarına ait ağırlıklar da bu sürece dahildir.

Alternatif olarak, modelin eğitimi için Evolino gibi evrimsel yöntemler de kullanılabilir. Bu tür yaklaşımlar, özellikle klasik gradyan tabanlı yöntemlerin yeterli olmadığı durumlarda, gizli katman ağırlıklarını evrimsel algoritmalarla optimize ederken, çıktı katmanını için lineer bir çözüm üretir. Bu, özellikle çok karmaşık veya sınırlı veri ile çalışan sistemlerde fayda sağlayabilmektedir.

LSTM ağları, hem bağımsız olarak hem de farklı derin öğrenme mimarileriyle entegre edilerek pek çok farklı problem türünde başarıyla uygulanmaktadır. Literatürde de belirtildiği üzere, LSTM yapısı, özellikle zamana bağlı sıralı verilerin işlenmesinde öne

ıkan en gl yntemlerden biri olarak kabul edilmektedir. Bu nedenle, her ne kadar farklı mimari yapılarla hibrit modeller oluřturmak mmkn olsa da, vanilla LSTM hl yaygın olarak tercih edilen modeller arasında yerini korumaktadır.

Zaman serilerinin ngrlmesinde olduka etkili sonular veren bu yapı, yalnızca bu alanda deėil; aynı zamanda gemiř bilginin kısa ya da uzun sreli olarak bellekte tutulmasının gerekli olduėu pek ok farklı problemde de kullanılabilmektedir.

Bu uygulama alanlarını su řekilde syleyebiliriz: Doėal Dil İřleme (NLP): Metin tamamlama, duygu analizi, makine evirisi gibi dilin zaman iindeki yapısını anlayan uygulamalarda kullanılır. Finansal Zaman Serileri: Hisse senedi fiyatı, dviz kuru, piyasa trendi tahmini gibi ekonomik gstergelerin ngrlmesinde etkilidir. Ses ve Konuřma Tanıma: Konuřma sinyallerinin ardışık doėası nedeniyle, sesli komut algılama ve otomatik konuřma tanıma sistemlerinde yaygın olarak kullanılır. Biyomedikal Sinyal İřleme: EEG, EKG gibi biyolojik sinyallerin analizi ve saėlık durumu ngrlerinde zaman baėımlı desenleri yakalamak iin tercih edilir. Tahmin ve Kontrol Sistemleri: Robotik, otonom aralar veya retim sistemlerinde, gemiř hareketleri analiz ederek gelecek adımların tahmininde kullanılır.

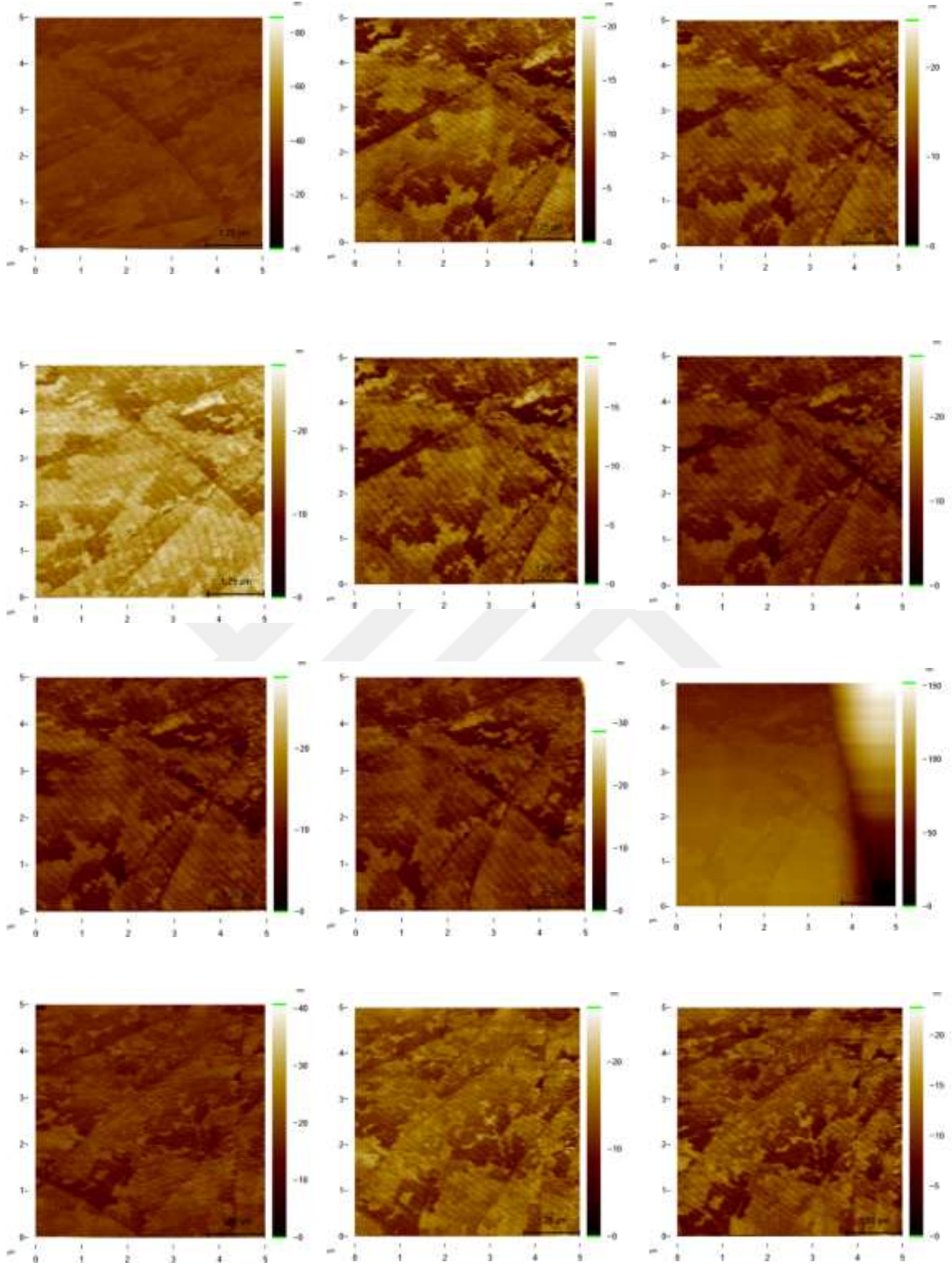
4. DENEY VE SONUÇLARIN ANALİZİ

Bu tez kapsamında, epitaksiyel büyüme yöntemiyle üretilmiş grafen yüzeyinin yapısal özelliklerinin belirlenmesinde AKM'nin etkinliği ML tabanlı analiz yöntemleri ile detaylı analiz edilecektir. Yüzeylerin hazırlanması ve AKM görüntülemelerinin gerçekleştirilmesi sürecinde, Yaşar Üniversitesi'nden teknik destek alınmış olup, görüntüleme işlemleri üniversite bünyesinde bulunan NanoMagnetics Instruments marka AKM cihazı kullanılarak gerçekleştirilmiştir.

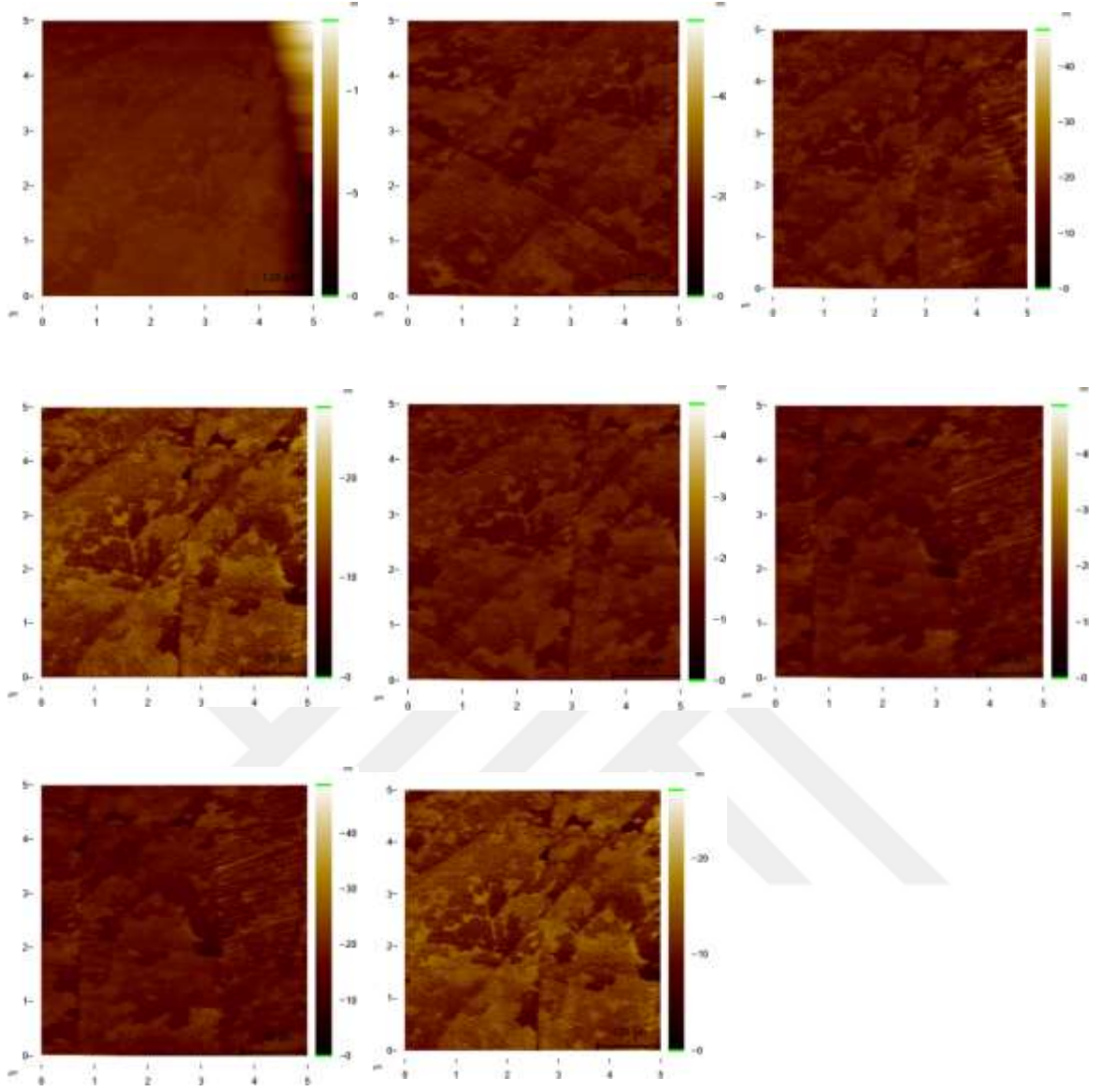
Bu çalışmada, epitaksiyel yöntemle C-yüzeyli SiC substratı üzerinde büyütülmüş grafen yüzeyinin detaylı karakterizasyonu, AKM ile gerçekleştirilmiştir (Tablo 4.1). Ölçüm sürecinde kullanılan cihaz parametreleri aşağıda sunulmuştur ve analizlerin güvenilirliğini sağlamak adına setler boyunca sabit tutulmuştur. Malzeme olarak, yüksek kristal kaliteye sahip epitaksiyel grafen kullanılmıştır. Tarama işlemi, temas modu ile gerçekleştirilmiş olup bu mod, yüzeyin yüksek çözünürlükte analiz edilmesine olanak tanımaktadır. Tarama işlemlerinde kullanılan Bruker CONTV-A modeli yay, temas duyarlı ölçümler için uygun özellikler taşımaktadır. AKM görüntü alımı, $5\ \mu\text{m} \times 5\ \mu\text{m}$ 'lik bir alan üzerinde, $4\ \mu\text{m/s}$ tarama hızı ile yapılmıştır. Bu hız, yüzey özelliklerinin bozulmadan algılanmasına olanak sağlayacak seviyede seçilmiştir. 256×256 piksel çözünürlük, yüzey topografyasının yeterli ayrıntıyla analiz edilmesini mümkün kılmıştır. Normal kuvvet değeri olarak $-1\ \text{V}$ uygulanmış, bu da kantilever ile yüzey arasındaki temas kuvvetini kontrol altında tutmak için kullanılmıştır. Ölçüm ortamı sıcaklığı $21.7\ ^\circ\text{C}$ olup, analizlerin standart laboratuvar koşullarında gerçekleştirildiğini göstermektedir.

Tablo 4.1: Deney Ölçüm Parametreleri.

Malzeme:	C-yüzeyli SiC üzerinde büyütülmüş epitaksiyel grafen
Karakterizasyon Yöntemi:	NanoMagnetics Instruments AFM Ambient
Yay:	Bruker CONTV-A model kantilever
Tarama modu:	Temas modu
Tarama alanı:	$5\ \mu\text{m} \times 5\ \mu\text{m}$
Tarama hızı:	$4\ \mu\text{m/s}$
Çözünürlük:	256×256
Normal Kuvvet:	$-1\ \text{V}$
Sıcaklık:	$21.7\ ^\circ\text{C}$



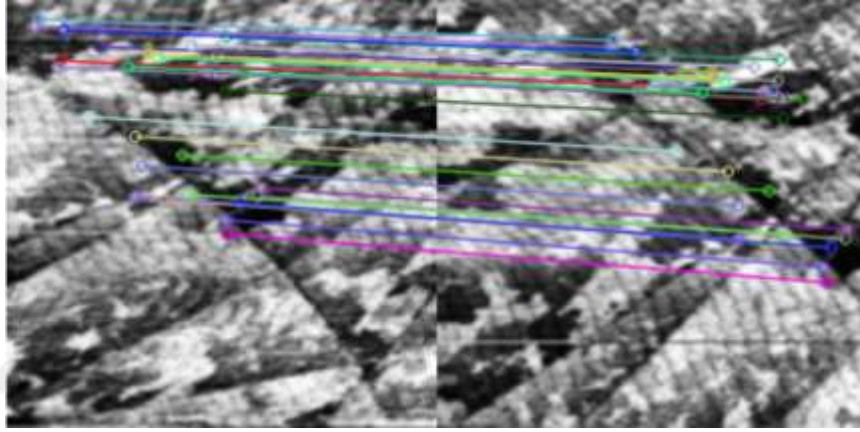
Şekil 4.1: AKM Ardışık Alınmış 20 Topografik Görüntü (Devamı).



Şekil 4.1: AKM Ardışık Alınmış 20 Topografik Görüntü.

Elde edilen topografik görüntüler, NanoMagnetics Instrument Image Analyzer yazılımı ile işlenmiş ve görsel kalite artırılarak analize hazır hale getirilmiştir. Bu yazılım, görüntü üzerindeki gürültülerin azaltılması, düzleme oturtma (flattening), eğim düzeltme ve 3B yüzey oluşturma gibi işlemleri desteklemekte olup, analiz sürecinin doğruluğunu artırmıştır.

Set içerisinde ardışık iki AKM topografik görüntüsü arasında konum eşleşmeleri yapan ve bu eşleşmeler üzerinden rölatif kayma (hizalama hataları) analizi gerçekleştiren resim sunulmaktadır. Bu çalışma kapsamında, iki farklı AKM topografik görüntüsü içeren Excel dosyaları okunarak, bu veriler üzerinden yüzeyde meydana gelen kaymalar analiz edilmektedir. İşlem süreci aşağıdaki adımlarla gerçekleştirilmektedir:



Şekil 4.2: CV ile Eşleştirme.

İki farklı Excel dosyasından AFM topografik verileri, pandas kütüphanesi ile okunarak, sırasıyla df1 ve df2 adlı veri çerçeveleri elde edilir. Bu veri çerçeveleri, to_numpy() metodu ile NumPy dizilerine dönüştürülür ve Vz_data1 ile Vz_data2 olarak saklanır. Her bir veri dizisi, min-max normalizasyon yöntemi kullanılarak 0-255 aralığına sıkıştırılır. Normalizasyon sonrası elde edilen değerler 8-bit (uint8) formatına dönüştürülür. Histogram eşitleme uygulanarak, görüntünün aydınlık-karanlık dağılımı iyileştirilir. Böylece detaylar daha belirgin hale gelir. Gaussian Blur (Gauss Bulanıklaştırma) ile gürültü azaltılarak, kenar tespiti ve özellik çıkarımı işlemlerinin daha sağlıklı yapılması sağlanır. SIFT (Scale-Invariant Feature Transform) algoritması kullanılarak her iki görüntü üzerinde de önemli noktalar (keypoints) ve bunlara ait tanımlayıcılar (descriptors) çıkarılır. Çıkan tanımlayıcılar daha sonra, iki görüntü arasındaki eşleşmeleri bulmak için BFMatcher (Brute Force Matcher) kullanılarak eşleştirilir. K-En Yakın Komşu (k=2) yöntemiyle yapılan

eşleştirmede, Lowe's ratio testi uygulanarak güvenilir eşleşmeler filtrelenir. Elde edilen iyi eşleşmelerden, RANSAC algoritması kullanılarak dönüşüm matrisi hesaplanır. Bu işlem, yanlış eşleşmeleri elerken, doğru eşleşmeleri doğrulamayı amaçlar. RANSAC sonucu elde edilen doğrulama maskesine göre, iyi eşleşmeler arasından mesafe temelli sıralama yapılarak en iyi maksimum 40 eşleşme seçilir.

Seçilen eşleşmeler için, her iki görüntüdeki eşleşme noktalarının koordinatları alınır. Bu koordinatlar kullanılarak, her eşleşme için x ve y düzlemlerinde kayma hesaplanır. Hesaplanan piksel farkları, önceden belirlenen bir dönüşüm oranı (örneğin, tarama alanı 5 µm, çözünürlük 256 piksel şeklinde) aracılığıyla mikrometre cinsine çevrilir. Ayrıca, x ve y kayma değerlerine dayanarak, kaymanın yönü (“sağ”, “sol”, “yukarı”, “d”) belirlenir. Elde edilen eşleşme ve kayma bilgileri; eşleşen noktaların piksel ve mikrometre cinsinden koordinatları, x ve y kayma değerleri ve kayma yönleri gibi detaylar bir sözlük yapısında toplanır. Bu bilgiler, pandas DataFrame'e dönüştürülür ve sonuçlar bir Excel dosyasına kaydedilir. Böylece, analiz sonucunda elde edilen veriler daha sonra detaylı olarak incelenip raporlanabilir. Son adımda, cv2.drawMatches() fonksiyonu kullanılarak, iki görüntü arasındaki seçilmiş eşleşme noktaları grafiksel olarak işaretlenir. Bu eşleşmeler, matplotlib kütüphanesi ile görselleştirilir; böylece eşleşmelerin ve kayma analizinin görsel çıktısı elde edilir.

Tablo 4.2: AKM Görselleri Nokta Eşleşmesi.

Eşleşme İndeksi	Görsel 1 Noktası (piksel)	Görsel 1 Noktası (mikron)	Görsel 2 Noktası (piksel)	Görsel 2 Noktası (mikron)	X Kayması (mikron)	Y Kayması (mikron)	Kayma Yönü
1	(124, 34)	(2.44, 0.67)	(202, 48)	(3.95, 0.95)	1.51	0.28	sağ, aşağı
2	(120, 39)	(2.35, 0.78)	(198, 55)	(3.89, 1.08)	1.53	0.30	sağ, aşağı
3	(80, 99)	(1.57, 1.94)	(178, 123)	(3.48, 2.40)	1.91	0.46	sağ, aşağı
4	(124, 44)	(2.43, 0.87)	(204, 59)	(4.00, 1.17)	1.57	0.30	sağ, aşağı
5	(115, 39)	(2.25, 0.78)	(193, 55)	(3.78, 1.07)	1.53	0.30	sağ, aşağı
6	(130, 131)	(2.54, 2.57)	(228, 159)	(4.47, 3.12)	1.93	0.55	sağ, aşağı
7	(31, 36)	(0.62, 0.72)	(119, 51)	(2.34, 1.00)	1.72	0.28	sağ, aşağı
8	(104, 92)	(2.04, 1.82)	(196, 114)	(3.85, 2.23)	1.81	0.41	sağ, aşağı
9	(124, 44)	(2.43, 0.87)	(204, 59)	(4.00, 1.17)	1.57	0.30	sağ, aşağı
10	(113, 43)	(2.21, 0.85)	(192, 59)	(3.77, 1.16)	1.55	0.31	sağ, aşağı

Tablo 4.2: AKM Görselleri Nokta Eşleşmesi (Devamı).

11	(93, 119)	(1.83, 2.33)	(194, 144)	(3.80, 2.83)	1.97	0.49	sağ, aşağı
12	(83, 29)	(1.63, 0.58)	(162, 43)	(3.18, 0.85)	1.55	0.27	sağ, aşağı
13	(55, 28)	(1.08, 0.56)	(137, 42)	(2.69, 0.82)	1.61	0.27	sağ, aşağı
14	(149, 117)	(2.91, 2.29)	(242, 142)	(4.73, 2.79)	1.82	0.50	sağ, aşağı
15	(16, 16)	(0.33, 0.32)	(103, 28)	(2.02, 0.56)	1.69	0.24	sağ, aşağı
16	(18, 12)	(0.37, 0.24)	(103, 24)	(2.03, 0.48)	1.66	0.24	sağ, aşağı
17	(130, 139)	(2.56, 2.73)	(231, 168)	(4.52, 3.30)	1.96	0.56	sağ, aşağı
18	(109, 27)	(2.14, 0.54)	(188, 40)	(3.67, 0.79)	1.53	0.25	sağ, aşağı
19	(76, 117)	(1.49, 2.30)	(178, 143)	(3.49, 2.80)	2.00	0.50	sağ, aşağı
20	(141, 44)	(2.76, 0.87)	(217, 60)	(4.25, 1.17)	1.49	0.30	sağ, aşağı
21	(89, 34)	(1.75, 0.68)	(170, 49)	(3.33, 0.96)	1.58	0.28	sağ, aşağı
22	(76, 81)	(1.49, 1.60)	(172, 102)	(3.37, 2.01)	1.88	0.41	sağ, aşağı
23	(30, 40)	(0.59, 0.80)	(118, 55)	(2.31, 1.08)	1.73	0.28	sağ, aşağı
24	(48, 70)	(0.95, 1.37)	(142, 90)	(2.78, 1.77)	1.83	0.40	sağ, aşağı
25	(108, 116)	(2.11, 2.27)	(206, 139)	(4.04, 2.73)	1.93	0.46	sağ, aşağı
26	(109, 27)	(2.14, 0.54)	(188, 40)	(3.67, 0.79)	1.53	0.25	sağ, aşağı
27	(151, 112)	(2.96, 2.20)	(243, 137)	(4.75, 2.68)	1.79	0.48	sağ, aşağı
28	(130, 22)	(2.55, 0.44)	(203, 36)	(3.98, 0.71)	1.42	0.27	sağ, aşağı
29	(130, 54)	(2.54, 1.07)	(205, 70)	(4.01, 1.39)	1.47	0.32	sağ, aşağı
30	(84, 32)	(1.65, 0.64)	(164, 47)	(3.20, 0.93)	1.56	0.28	sağ, aşağı
31	(72, 40)	(1.41, 0.79)	(157, 56)	(3.07, 1.10)	1.66	0.31	sağ, aşağı
32	(33, 18)	(0.66, 0.36)	(117, 31)	(2.29, 0.62)	1.64	0.25	sağ, aşağı
33	(138, 121)	(2.71, 2.38)	(233, 147)	(4.57, 2.89)	1.86	0.51	sağ, aşağı

Tablo 4.2, AKM görüntüleri üzerinde yapılan eşleştirme (matching) işlemleri sonrası, RANSAC algoritması ile doğrulanan 33 adet eşleşmeye ilişkin bilgileri içermektedir. Eşleştirme, iki farklı AKM görüntüsündeki benzer yapıları ya da noktaları tespit ederek, aralarındaki yer değiştirme miktarını ve yönünü belirlemeye yönelik gerçekleştirilmiştir.

Tablonun Sütun Açıklamaları:

Eşleşme İndeksi: Her bir eşleşmeye ait sıra numarasıdır.

Görsel 1 Noktası (piksel): İlk görüntüde tespit edilen noktanın piksel koordinatlarıdır.

Görsel 1 Noktası (mikron): Aynı noktanın mikron cinsinden koordinatlarıdır.

Görsel 2 Noktası (piksel): İkinci görüntüdeki eşleşen noktanın piksel koordinatlarıdır.

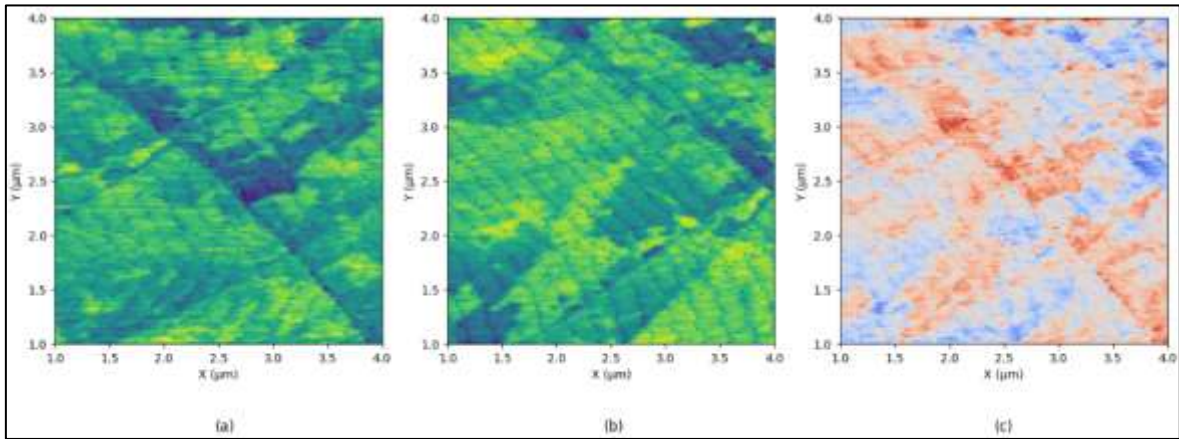
Görsel 2 Noktası (mikron): Bu noktanın mikron cinsinden koordinatlarıdır.

X Kayması (mikron): İki görüntü arasındaki eşleşen noktanın yatay eksenindeki (x yönü) yer değişim miktarıdır.

Y Kayması (mikron): İki görüntü arasındaki eşleşen noktanın dikey eksenindeki (y yönü) yer değişim miktarıdır.

Kayma Yönü: Noktanın hangi yöne doğru kaydığı bilgisini içerir. Tablodaki tüm eşleşmelerde kayma yönü “sağ, aşağı” olarak gözlemlenmiştir, bu da ikinci görüntüdeki yapıların birinciye göre sağa ve aşağıya kaymış olduğunu göstermektedir.

Toplamda 33 eşleşme, RANSAC algoritması ile tutarlı bulunmuş ve doğrulanmıştır. Mikron cinsinden hesaplanan x ve y kayma değerleri, görüntüler arasında yaklaşık 1.4 – 2.0 μm civarında yatay ve 0.24 – 0.56 μm civarında dikey kaymalar olduğunu göstermektedir. Bu veriler, örnekler arasındaki fiziksel veya sistem kaynaklı kaymaları değerlendirmede, görüntü hizalama (alignment) işlemlerinde ya da örnek dinamiğini analiz etmede kullanılabilir. Bu işlem ardışık 20 görüntü arasında uygulanmış ve genişletilmiş bir veri seti oluşturulmuştur.



Şekil 4.3: AKM Ardışık Alınmış Topografik Görüntü Karşılaştırması.

Şekil 4.3 yüzey topografisi verilerinin karşılaştırmalı analizini içeren üçlü bir panelden oluşmaktadır. Her panel farklı bir analitik amacı temsil etmektedir ve bir araya gelerek

yüzeyin hem yapısal özelliklerini hem de zaman veya işlem sonrası değişimlerini değerlendirmemizi sağlar.

İlk panel (a), örneğin belirli ilk taramadan alınan AKM görüntüsüdür. Bu görüntüde yeşil, sarı ve mavi tonlamalar kullanılarak yüzeydeki yükseklik farklılıkları görselleştirilmiştir. Sarı bölgeler yüzeyde daha yüksek noktaları, mavi tonlar ise daha düşük bölgeleri temsil etmektedir. Yüzey üzerinde düzenli, tekrarlayan yapılar görülmektedir, bu da örneğin oldukça homojen veya düzenli bir yüzey yapısına sahip olduğunu düşündürmektedir. Bu yapı bir kristal yüzey, nanoyapı düzeni veya teknik olarak işlenmiş bir yüzey olabilir.

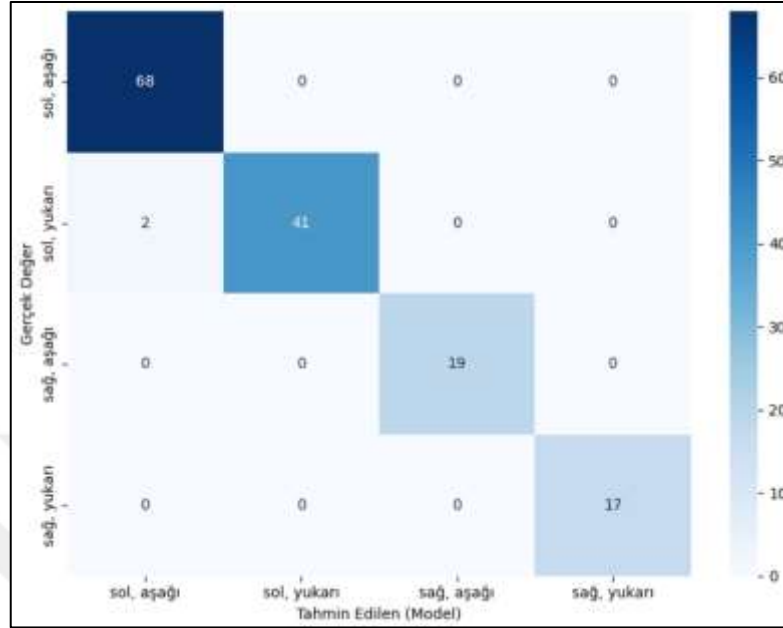
İkinci panel (b), ardışık görüntüsünün tekrar taranmasıyla elde edilen görüntüdür. Görsel olarak birinci panel ile yüksek benzerlik göstermektedir. Bu durum, yüzeyin genel yapısında büyük bir değişiklik olmadığını, ancak çok küçük pozisyonel kaymalar olabileceğini düşündürür. Bu tarz minimal kaymalar genellikle cihaz kaynaklı piezo drift, termal genleşme ya da örnek kayması gibi nedenlerle ortaya çıkabilir.

Üçüncü panel (c), ilk iki panelin piksel piksel karşılaştırılmasıyla oluşturulmuş fark haritasıdır. Bu harita, her piksel için ikinci görüntüden birincisi çıkarılarak elde edilmiştir. Kırmızı tonlar ikinci görüntüde yükseklik artışını, mavi tonlar ise azalışı temsil ederken, beyaz ya da açık renkli bölgeler iki görüntü arasında çok az fark olduğunu göstermektedir. Bu panel, özellikle yüzeyde meydana gelen lokal değişimleri, deformasyonları ya da sistematik kaymaları analiz etmek için oldukça yararlıdır. Görselde eğik yönde belirgin çizgisel izlerin bulunması, ölçüm sırasında sistematik bir kayma veya tarama yönüne bağlı olarak oluşmuş izleri işaret edebilir.

Sonuç olarak, bu üçlü görsel, AKM verilerinin hem birebir karşılaştırılmasını hem de aralarındaki farkların detaylı şekilde analiz edilmesini sağlamaktadır. İki ölçüm arasında yapısal tutarlılık korunmuş olsa da, fark haritası lokal düzeyde belirli farklılıkları ortaya koymakta ve bu da yüzey stabilitesi, ölçüm güvenilirliği ya da olası işlem etkileri hakkında bize bilgi vermektedir.

Rastgele Orman (Random Forest): İlk olarak AKM verilerinde gözlemlenen kayma yönlerinin tahmin edilmesi amacıyla klasik ML yöntemlerinden biri olan Random Forest sınıflandırıcısı kullanılmıştır. Modelin giriş değişkenleri olarak, her görüntü çifti arasında

hesaplanan x ve y eksenlerindeki mikrometre cinsinden kayma miktarları seçilmiş; hedef değişken olarak ise bu kaymanın yönsel ifadesi etiketlenmiştir.

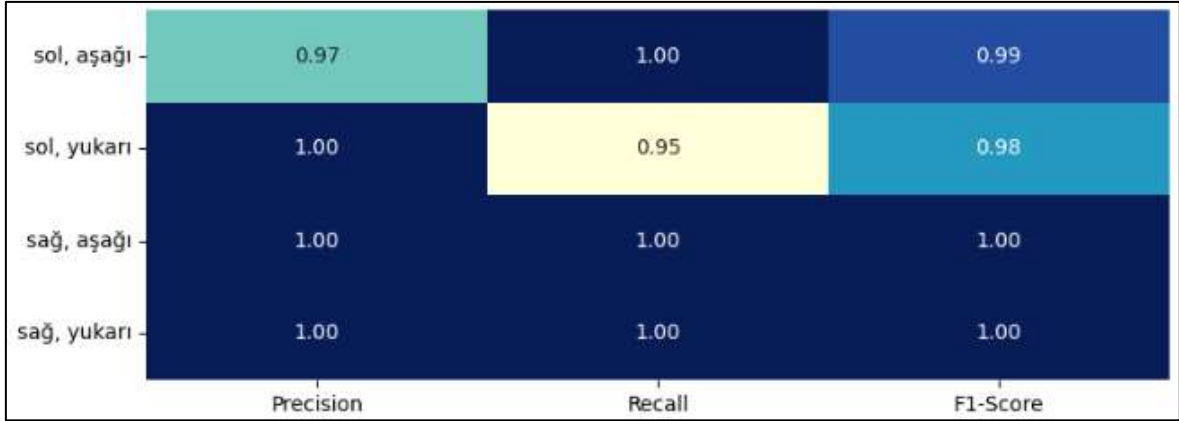


Şekil 4.4: Karşılaştırma Matrisi.

Şekil 4.4'te gösterilen karışıklık matrisi, Rastgele Orman sınıflandırıcısı ile eğitilmiş modelin kayma yönlerini tahmin etme performansını ortaya koymaktadır. Model, dört farklı yön kategorisinde (sol, aşağı; sol, yukarı; sağ, aşağı; sağ, yukarı) sınıflandırma yapmıştır.

En yoğun örnek “sol, aşağı” sınıfına ait olup, bu sınıftaki 68 örneğin tamamı doğru tahmin edilmiştir. Benzer şekilde, “sağ, aşağı” ve “sağ, yukarı” sınıflarında da %100 doğruluk elde edilmiştir. Sadece “sol, yukarı” sınıfında 2 örnek “sol, aşağı” olarak hatalı sınıflandırılmış, geri kalan 41 örnek doğru şekilde tahmin edilmiştir. Bu küçük sapma, özellikle X eksenindeki kaymanın düşük olduğu durumlarda, sınıflar arasında ayrımın zorlaşmasından kaynaklanıyor olabilir.

Genel olarak, bu sonuçlar modelin yüksek doğrulukta sınıflandırma yaptığını ve sınıflar arası karışıklığın oldukça sınırlı kaldığını göstermektedir. Rastgele Orman gibi klasik ML algoritmalarının, özellikle düşük boyutlu ve sayısal veriler üzerinde yönsel sınıflandırma gibi görevlerde etkili olduğu bu sonuçlarla bir kez daha ortaya konmuştur.



Şekil 4.5: Random Forest : Sınıf Bazında Precision - Recall - F1 Skorları.

Şekil 4.5’te sunulan ısı haritası, modelin dört farklı kayma yönü sınıfı için hesaplanan precision, recall ve F1-score değerlerini özetlemektedir.

Model, “sağ, aşağı” ve “sağ, yukarı” sınıflarında hem precision hem recall açısından 1.00 değeri ile kusursuz sınıflandırma yapmıştır. “Sol, aşağı” sınıfı için precision 0.97, recall 1.00 ve F1-score 0.99 gibi oldukça yüksek başarı değerleri elde edilmiştir. Sadece “sol, yukarı” sınıfında recall değeri 0.95 olarak biraz daha düşük kalmış; bu da birkaç örneğin yanlış sınıflandırıldığını (bkz. Şekil 4.4) göstermektedir.

Modelin tüm sınıflarda dengeli ve yüksek doğrulukta performans gösterdiği, özellikle kayma yönlerini ayırt etmede hataya neredeyse hiç yer vermediği anlaşılmaktadır. Bu durum, Random Forest gibi klasik makine öğrenmesi algoritmalarının, sayısal verilerle çalışılan uygulamalarda güvenle tercih edilebileceğini desteklemektedir.

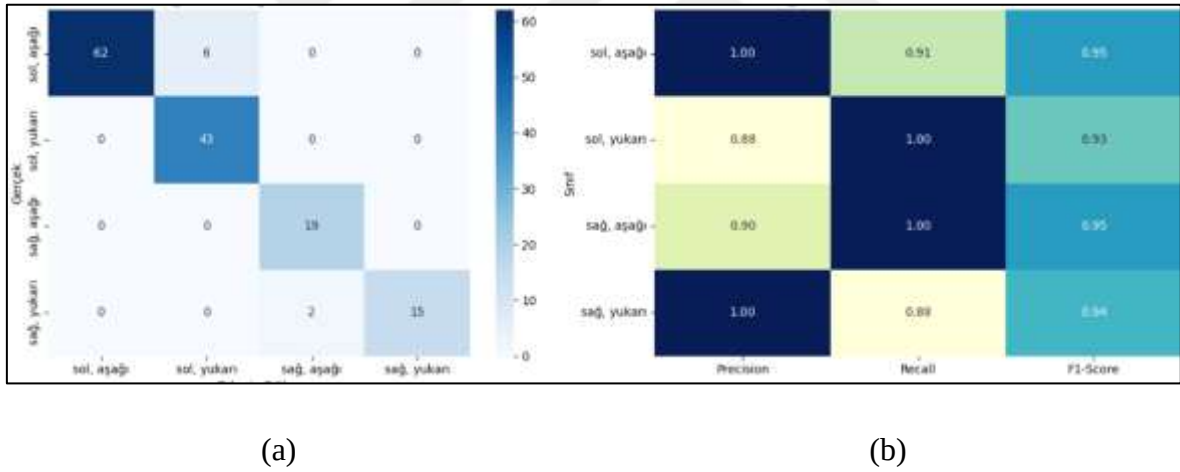
Modelin eğitim ve test setlerinde gösterdiği doğruluk oldukça yüksek olup, sırasıyla %99.8 ve %98.6 olarak elde edilmiştir. Ancak, 5 katlı çapraz doğrulama ile yapılan ek değerlendirmede ortalama doğruluk %96.0 olarak bulunmuştur. Bu farklılık, modelin veri setini oldukça iyi öğrendiğini, ancak daha önce görmediği yeni verilere genelleme yaparken hafif düzeyde aşırı öğrenme (overfitting) eğiliminde olabileceğini göstermektedir.

Bu amaçla, modelin eğitim verisine çok yüksek uyum sağladığı ancak genel performansın daha temkinli değerlendirilmesi gerektiği anlaşılmaktadır. İlerleyen çalışmalarda, modelin karmaşıklığının azaltılması, farklı algoritmalarla karşılaştırmalı analizlerin yapılması ve

daha çeşitli veri setleriyle eğitilerek genelleme yeteneğinin güçlendirilebileceğini düşündürmüştür.

Bu çalışmada Random Forest sınıflandırıcısı temel model olarak seçilmiştir. Bununla birlikte, karşılaştırmalı analiz için SVM (Support Vector Machine), KNN ve Lojistik Regresyon gibi farklı klasik ML algoritmaları da değerlendirmeye alınmıştır. Bu alternatif modeller, sınıflar arası ayırt ediciliği ve genelleme kapasitesi açısından karşılaştırmalı olarak incelenmiştir.

Destek Vektör Makinesi (Support Vector Machine – SVM): Şekil 4.6’da, klasik ML algoritmalarından biri olan Destek Vektör Makinesi (Support Vector Machine - SVM) yöntemi uygulanmıştır. Modelin giriş değişkenleri olarak, her görüntü çifti arasındaki x ve y eksenlerindeki mikrometre cinsinden kayma miktarları kullanılmıştır. Hedef değişken ise, bu kaymaların yönsel karşılıkları (sol-aşağı, sol-yukarı, sağ-aşağı, sağ-yukarı) olarak etiketlenmiştir. İkinci yöntem olarak bu algoritma tercih edilmiştir.



Şekil 4.6: SVM: Sınıf Bazında Precision - Recall - F1 Skorları.

Model, eğitim ve test verisi olarak %80–%20 oranında ayrılmış; test setinde %94.6 doğruluk oranı ile yüksek bir sınıflandırma başarısı göstermiştir. Sınıf bazında incelendiğinde, model özellikle “sağ, aşağı” ve “sol, yukarı” sınıflarında %100 doğrulukla tahmin yapmış; ancak “sağ, yukarı” sınıfında yer alan örneklerin bir kısmı “sağ, aşağı” sınıfına yanlış atanmıştır. “Sol, aşağı” sınıfında da az sayıda örnek “sol, yukarı” olarak karıştırılmıştır. Bu sınıflar arasındaki karışıklık, büyük olasılıkla eksenel düzlemdeki kayma değerlerinin birbirine yakın olması ve sınıf sınırlarının belirgin olmamasından kaynaklanmaktadır.

Modelin genel başarımını değerlendirmek amacıyla uygulanan 5 katlı çapraz doğrulama sonucunda elde edilen ortalama doğruluk oranı ise %88.8 olarak ölçülmüştür. Test setindeki başarı ile kıyaslandığında bu değer, modelin eğitim verisine fazla derecede uyum gösterdiğini ve yeni/veri dışı örneklerde performansının bir miktar düşebildiğini göstermektedir. Bu durum, makine öğrenmesi literatüründe aşırı öğrenme (overfitting) olarak adlandırılmakta ve genellikle modelin eğitim örneklerindeki detayları fazla öğrenmesi nedeniyle genelleme gücünün azalmasıyla sonuçlanmaktadır.

SVM, sınıflar arası en iyi ayırma düzlemini bulmayı amaçlayan güçlü bir yöntem olsada, kernel tipi ve parametre seçimlerine (örneğin C, gamma) oldukça duyarlıdır. Bu çalışmada kullanılan rbf kernel, sınıf ayrımlarını başarılı bir şekilde yapabilmiş olsa da, sınıf sınırlarının birbirine yakın olduğu durumlarda karışıklık yaşanabildiği görülmüştür. Ayrıca modelin genelleme kapasitesinin, aynı veri seti üzerinde eğitilen Random Forest modeline kıyasla daha düşük olduğu gözlemlenmiştir.

Sonuç olarak, SVM modeli düşük boyutlu ve sayısal tabanlı veriler üzerinde yüksek doğruluk sağlamış, ancak veri genellemesi söz konusu olduğunda performansında az da olsa düşüş gözlemlenmiştir. Bu nedenle, ilerleyen çalışmalarda modelin hiperparametrelerinin iyileştirilmesi, kernel fonksiyonlarının optimizasyonu ya da daha geniş kapsamlı ve dengeli veri setleriyle yeniden eğitilebilir. Ayrıca, farklı algoritmalarla karşılaştırmalı analizler yapılması da modelin genelleme yeteneğinin daha sağlıklı bir şekilde değerlendirilebilmesine olanak tanıyacaktır.

Tablo 4.3: Klasik ML Yöntemi Karşılaştırması.

Metrik	Random Forest	SVM (Support Vector Machine)
Test Doğruluğu	98.6%	94.6%
Çapraz Doğrulama (5 Katlı)	96.0%	88.8%
Sol, Aşağı (F1-score)	0.99	0.95
Sol, Yukarı (F1-score)	0.98	0.93
Sağ, Aşağı (F1-score)	1.00	0.95
Sağ, Yukarı (F1-score)	1.00	0.94
Modelin Aşırı Öğrenme Riski	Düşük	Orta
Genelleme Yeteneği	Güçlü	Sınırlı
Hesaplama Süresi (Görece)	Kısa	Orta

Tablo 4.2’de, Random Forest ve Destek Vektör Makinesi (SVM) algoritmalarının performans karşılaştırması sunulmuştur. Test doğruluğu açısından değerlendirildiğinde, Random Forest yöntemi %98.6 doğruluk oranı ile SVM’ye (%94.6) kıyasla daha yüksek bir başarı sergilemiştir. Benzer şekilde, 5 katlı çapraz doğrulama sonuçlarında da Random Forest modeli %96.0 doğrulukla öne çıkarken, SVM algoritması %88.8 doğruluk elde etmiştir.

Sınıf bazında incelendiğinde, F1-score değerleri Random Forest modeli için tüm yönsel etiketlerde oldukça yüksektir (0.98 ve üzeri), bu da modelin sınıflar arasındaki dengeyi koruyarak güçlü bir sınıflandırma performansı gösterdiğini ortaya koymaktadır. SVM yöntemi ise her ne kadar başarılı sonuçlar verse de, özellikle "Sol, Yukarı" ve "Sağ, Yukarı" sınıflarında F1-score değerleri görece daha düşüktür.

Ayrıca, aşırı öğrenme riski değerlendirildiğinde, Rastgele Orman modelinin düşük risk taşıdığı, buna karşın SVM’nin orta düzeyde bir aşırı öğrenme eğilimi gösterdiği gözlemlenmiştir. Genelleme yeteneği açısından da Rastgele Orman algoritması daha güçlü bulunmuş, SVM’nin ise bu konuda sınırlı kaldığı ifade edilmiştir. Son olarak, hesaplama süresi bakımından Rastgele Orman algoritması daha kısa sürede sonuç üretirken, SVM yöntemi görece daha uzun bir süre gerektirmiştir.

Bu değerlendirmeler doğrultusunda, uygulanan problem özelinde Rastgele Orman algoritması, hem doğruluk hem de genelleme açısından daha uygun bir yöntem olarak öne çıkmaktadır.

Bir sonraki aşamada, geleneksel makine öğrenmesi yöntemlerinin ötesine geçilerek, sıralı verilerle etkili şekilde çalışabilen bir derin öğrenme modeli olan Uzun Kısa Süreli Bellek (Long Short-Term Memory – LSTM) ağı kullanılacaktır. Bu yöntemin uygulanabilmesi için mevcut veri seti genişletilecektir.

Veri genişletme sürecinde, CV teknikleri aracılığıyla eşleştirilen noktalar üzerinden, ardışık görüntü çiftleri arasındaki kayma hızları ortalama olarak hesaplanacaktır. Bu hesaplamalarda, her bir görüntü çifti arasında geçen tarama süresi de dikkate alınarak, zamanla ilişkili ardışık kayma bilgileri elde edilecektir. Böylece, LSTM modelinin öğrenebileceği şekilde zaman bağımlı örüntüler içeren bir veri seti oluşturulacaktır.

Bu yaklaşım sayesinde, hareket örüntülerinin dinamik yapısı daha doğru şekilde modellenebilecek ve sistemin yön tahmini performansında iyileştirme hedeflenmektedir.

Uzun Kısa Süreli Bellek (LSTM – Long Short-Term Memory): Bu çalışmada, ardışık görüntüler arasındaki kayma hızını tahmin etmek amacıyla bir LSTM tabanlı derin öğrenme modeli geliştirilmiştir. Modelin eğitimi için, mikroskobik görüntü çiftlerinden elde edilen koordinat verileri, tarama süreleri ve yönsel kayma etiketleri içeren bir veri seti kullanılmıştır. Özellikler, ölçeklendirme işlemlerinin ardından LSTM modeline uygun şekilde yeniden şekillendirilmiş; model, sıralı verilerin zaman bağımlılıklarını öğrenebilecek biçimde yapılandırılmıştır.

Modelin performansı farklı eğitim veri kombinasyonlarıyla değerlendirilmiş, her deneyde test verisi üzerinde tahminler yapılarak MSE, R^2 , RMSE ve MAE gibi metrikler hesaplanmıştır. Ayrıca, öğrenme sürecinin takibi ve modelin doğrulama başarısı, görselleştirme yoluyla detaylı şekilde analiz edilmiştir. Bu yaklaşım, veri setindeki zaman serisi yapısının modellenmesine ve kayma hızlarının daha doğru tahmin edilmesine olanak sağlamaktadır.

Set içerisinde veri kümesi toplamda 800 örnek içermektedir. Genişletilen veri seti 17 farklı özelliği kapsamaktadır. Bu özellikler arasında, her iki görüntüye (image1 ve image2) ait piksel koordinatları, kayma yönleri (sağ, sol, yukarı, aşağı), her görüntüye ait tarama sıraları, zaman farkı (ΔT), her görüntü için toplam tarama süresi, çözünürlük bilgisi, ortam sıcaklığı, hesaplanan kayma hızı (v_k) değeri, tarama hızı ($\mu\text{m/saniye}$) ve tarama alanı boyutu ($\mu\text{m} \times \mu\text{m}$) yer almaktadır.

Zaman adımları, verinin ardışık yapısını modellemede temel bir rol oynamaktadır; ancak bu bilgi doğrudan özellikler arasında yer almamaktadır. Bunun yerine, LSTM modeline uygun veri yapısının oluşturulması sırasında dolaylı olarak dikkate alınmıştır. Veri setindeki örnekler, her biri bir zaman adımını temsil eden görüntü çiftleri halinde gruplandırılmış ve böylece zamana bağlı ilişkilerin korunması sağlanmıştır. Ayrıca, kullanılan örnek türü ve AKM modunun veri seti boyunca sabit olması nedeniyle bu parametreler modele dahil edilmemiştir.

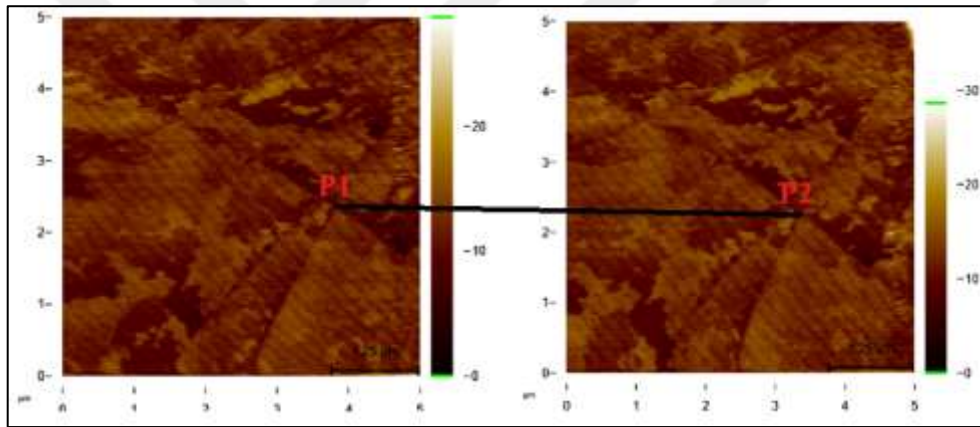
Ardışık görüntüler arasındaki pixel bazında konum kaymasını daha iyi analiz edebilmek ve sayısal olarak değerlendirebilmek amacıyla, ardışık taramalarda meydana gelen kaymayı

temsil eden şematik bir gösterim Şekil 4.7'de sunulmuştur. x ve y eksenlerinde oluşan hareketler için, ilk görüntüde tespit edilen noktanın konumu $P_1(x_1, y_1)$, ikinci (kayma gerçekleşmiş) görüntüdeki karşılık gelen konum ise $P_2(x_2, y_2)$ olarak tanımlanmıştır. Bu doğrultuda, kayma hızları aşağıdaki ifadelerle modellenmiştir:

$$\dot{x} = \frac{x_1 - x_2}{\Delta t} \quad (4.1)$$

$$\dot{y} = \frac{y_1 - y_2}{\Delta t} \quad (4.2)$$

$$\Delta t = T - \frac{T}{H}(y_2 - y_1) \quad (4.3)$$



Şekil 4.7: Kaymanın Şematik Gösterimi.

T, bir görüntünün tamamının taranması için geçen toplam süredir ve bu süre çözünürlük, tarama alanı, tarama hızı ve her bir satırın taranmasındaki çift yönlü hareketlere bağlıdır.

H, numunenin görüntü yüksekliğini (piksel cinsinden) temsil eder. Ardışık iki tarama arasında geçen geçiş süresi bu süreçte ihmal edilmiştir. Bu süre sabit ve oldukça kısa olduğundan çalışmada ihmal edilmiştir. Sonuç olarak, elde edilen x ve y yönlerindeki bileşenler kullanılarak toplam kayma hızı (v_k) aşağıdaki şekilde hesaplanır:

$$v_k = \sqrt{\dot{x}^2 + \dot{y}^2} \quad (4.4)$$

4.1 AKM'DE KARAKTERİZASYON YÖNTEMİNİN ML TABANLI ANALİZİ

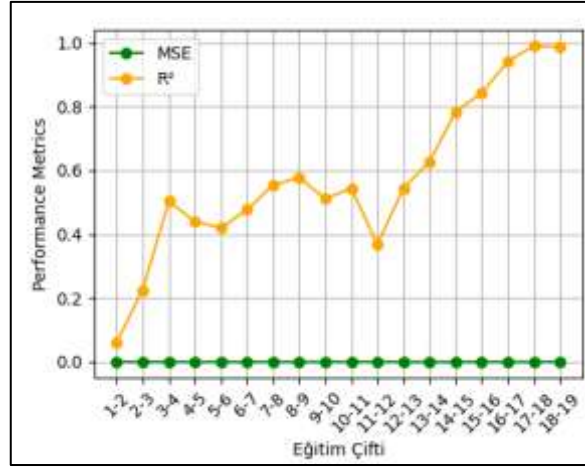
Bu bölümde, AKM verilerinden elde edilen kayma davranışının karakterizasyonu için geliştirilen ML temelli yaklaşım detaylandırılmaktadır. Özellikle zaman bağımlı kayma hareketlerinin tahmini amacıyla, sıralı veri modellemesinde güçlü performans sergileyen Uzun Kısa Süreli Bellek (LSTM) mimarisi tercih edilmiştir.

Bu çalışmanın temel amacı, ardışık AFM görüntülerinden elde edilen konum verilerini kullanarak v_k doğru şekilde tahmin edebilen bir derin öğrenme modeli geliştirmektir. Bu doğrultuda tasarlanan LSTM modeli, hem zamansal hem de konumsal ilişkileri öğrenmeye yönelik olarak yapılandırılmıştır.

Model mimarisi şu şekilde oluşturulmuştur: İlk LSTM katmanında 64 nöron yer almakta olup, aktivasyon fonksiyonu olarak tanh kullanılmıştır. Ardından gelen ikinci LSTM katmanında ise 32 nöron ve yine tanh aktivasyon fonksiyonu tercih edilmiştir. Çıkış katmanı, tahmin görevine uygun olarak tek nöronlu yoğun yapı ile oluşturulmuştur. Bu yapı, farklı mimari kombinasyonlarının rastgele denenmesiyle yapılan bir random search yöntemiyle belirlenmiş ve en iyi performansı sunan konfigürasyon seçilmiştir.

Modelin doğruluğunu ve genelleme yeteneğini değerlendirebilmek adına, eğitim ve test veri setleri açık bir şekilde ayrılmış; modelleme süreci boyunca iki görüntü çifti sürekli olarak test seti olarak kullanılmıştır. Eğitim verisinin etkisini incelemek amacıyla eğitimde kullanılan görüntü çifti sayısı artan şekilde döngüsel olarak değiştirilmiş ve her bir durumda model 50 epok boyunca eğitilmiştir.

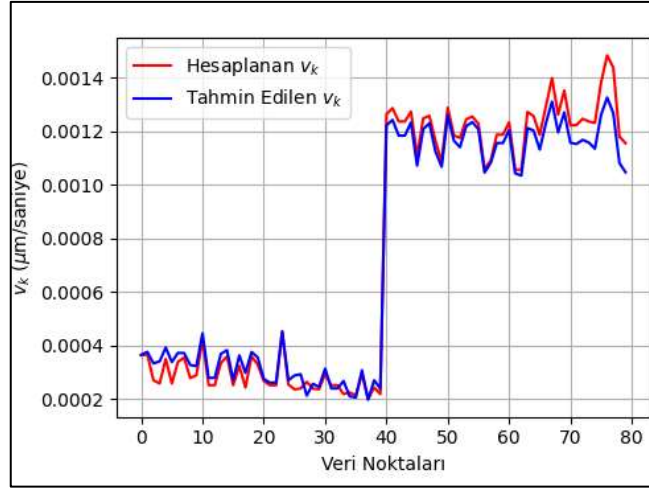
Bu sistematik yaklaşım sayesinde, modelin performansındaki değişim detaylı biçimde analiz edilmiş ve eğitim verisi miktarının model başarısı üzerindeki etkisi değerlendirilmiştir.



Şekil 4.8: Farklı Eğitim Çiftleriyle Eğitilen LSTM Modeline Ait Performans Metrikleri.

Şekil 4.8’de, farklı eğitim çiftleri kullanılarak eğitilen LSTM modelinin performans metrikleri MSE ve R^2 değerleri karşılaştırmalı olarak sunulmuştur. Grafik incelendiğinde, MSE değerlerinin tüm eğitim çiftleri boyunca oldukça düşük ve sabit kaldığı görülmektedir. Bu durum, modelin tahminlerinde düşük hata ile çalıştığını ve gerçek değerlere oldukça yakın sonuçlar üretebildiğini göstermektedir.

R^2 metriği ise eğitim verisi miktarına bağlı olarak değişim göstermektedir. Başlangıçta düşük seyreden R^2 değeri, eğitim çiftlerinin artmasıyla birlikte belirgin bir yükseliş eğilimi göstermiştir. Özellikle 14-15 çiftinden itibaren hızlı bir artış gözlemlenmiş ve 18-19 eğitim çiftlerinde R^2 değeri 1’e yaklaşarak modelin veriyi neredeyse mükemmel bir şekilde açıkladığını ortaya koymuştur. Bu sonuçlar, modelin genelleme yeteneğinin eğitim verisinin hacmiyle doğru orantılı olarak geliştiğini, yeterli sayıda örnekle eğitildiğinde yüksek doğrulukla tahmin yapabildiğini göstermektedir.

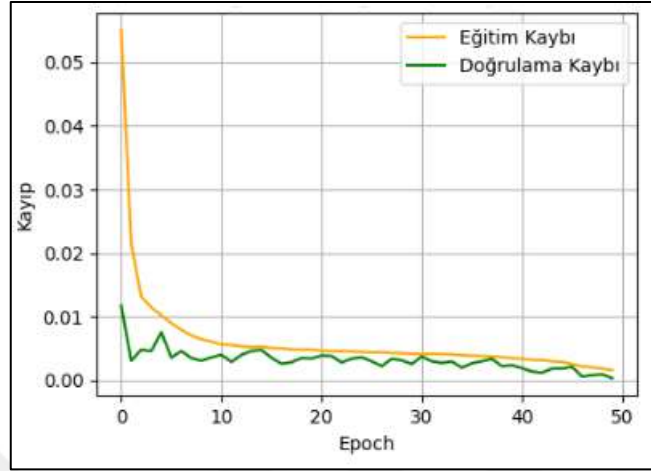


Şekil 4.9: LSTM Modelinin Tahmin Ettiği Kayma Hızları (v_k) İle Hesaplanan Değerlerin Karşılaştırılması.

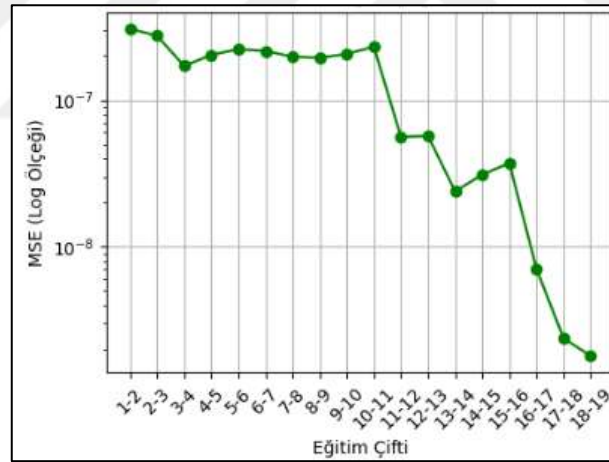
Şekil 4.9’da, LSTM modeli ile tahmin edilen v_k ile hesaplanan gerçek kayma hızının karşılaştırması verilmiştir. Grafikte yatay eksen veri noktalarını, dikey eksen ise kayma hızını ($\mu\text{m/saniye}$) cinsinden göstermektedir. Kırmızı çizgi, her bir görüntü çifti için hesaplanan v_k değerlerini, mavi çizgi ise model tarafından tahmin edilen v_k değerlerini temsil etmektedir. Grafik incelendiğinde, modelin genel olarak hesaplanan değerlerle oldukça uyumlu sonuçlar ürettiği görülmektedir. Özellikle 40. veri noktasından sonra gözlemlenen ani sıçrama hem tahmin edilen hem de hesaplanan değerlerde benzer şekilde yansımaktadır. Bu durum, modelin hem düşük hem de yüksek hız bölgelerinde kayma davranışını başarılı bir şekilde öğrenebildiğini ve farklı dinamiklere adapte olabildiğini göstermektedir. Tahminler ile gerçek değerler arasındaki fark minimal düzeyde olup, modelin doğruluğunu desteklemektedir.

Şekil 4.10’da, LSTM modelinin eğitim süreci boyunca hesaplanan eğitim kaybı ve doğrulama kaybı değerlerinin epok (eğitim döngüsü) bazında değişimi sunulmuştur. Grafikten görüldüğü üzere, her iki kayıp değeri de eğitim ilerledikçe azalmaktadır. Özellikle ilk epoklarda kayıplarda hızlı bir düşüş gözlemlenmiş, ardından daha dengeli bir seyir izlenmiştir. Eğitim kaybı (turuncu çizgi), doğrulama kaybına (yeşil çizgi) kıyasla biraz daha yüksek seyreitse de, aradaki fark oldukça küçüktür. Bu durum, modelin aşırı öğrenme eğiliminde olmadığını, genel performansının dengeli olduğunu göstermektedir.

Sonuç olarak, modelin hem eğitim hem de doğrulama verisi üzerinde istikrarlı bir şekilde öğrenme gerçekleştirdiği ve yüksek genelleme kabiliyetine sahip olduğu söylenebilir.



Şekil 4.10: LSTM Modeline Ait Eğitim ve Doğrulama Kayıplarının Epoklara Göre Değişimi.



Şekil 4.11: Farklı Eğitim Çiftlerine Göre Hesaplanan MSE Değerlerinin Logaritmik Ölçekte Gösterimi.

Şekil 4.11'de, LSTM modelinin farklı eğitim çiftleriyle eğitildiği durumlarda hesaplanan MSE değerlerinin logaritmik ölçekteki değişimi sunulmuştur. Log ölçek kullanımı, hata değerlerinin küçük boyutlardaki farklılıklarını daha belirgin şekilde gösterebilmek adına tercih edilmiştir.

Grafik ayrıntılı incelendiğinde, eğitim çiftlerinin artırılmasıyla birlikte MSE değerlerinde belirgin bir düşüş gözlemlenmektedir. Özellikle 13-14 eğitim çiftinden itibaren hata değerleri logaritmik olarak da anlamlı şekilde azalmış ve 17-18 ile 18-19 aralığında minimum seviyeye ulaşmıştır. Bu durum, modelin daha fazla veriyle eğitildiğinde tahmin doğruluğunun arttığını ve hata oranının önemli ölçüde azaldığını göstermektedir. Sonuç olarak, modelin performansı üzerinde eğitim verisi miktarının doğrudan etkili olduğu ve yeterli sayıda örnekle beslenen modelin daha düşük hata ile çalıştığı söylenebilir.

Bu tez çalışmasında, ardışık AKM görüntülerden elde edilen konum veriler kullanılarak, LSTM tabanlı bir derin öğrenme modeli ile v_k tahmini gerçekleştirilmiştir. Modelin farklı eğitim-veri kombinasyonlarıyla eğitilmesi sonucunda elde edilen performans metrikleri, modelin doğruluğunu ve genelleme kabiliyetini değerlendirmek amacıyla detaylı bir şekilde analiz edilmiştir.

Eğitim süreci boyunca elde edilen eğitim ve doğrulama kaybı grafiği, modelin öğrenme sürecinde istikrarlı bir şekilde geliştiğini ve aşırı öğrenme eğilimi göstermediğini ortaya koymuştur. MSE ve R^2 metrikleri incelendiğinde, eğitim verisi miktarının artmasıyla birlikte modelin hata oranlarının azaldığı, doğruluk değerlerinin ise anlamlı şekilde yükseldiği gözlemlenmiştir. Özellikle eğitim çiftlerinin artırılması, modelin kayma hızlarını daha doğru tahmin edebilmesini sağlamıştır. Logaritmik ölçekte sunulan MSE grafiği de bu eğilimi destekler niteliktedir.

Model tarafından tahmin edilen v_k ile hesaplanan gerçek değerler karşılaştırıldığında ise oldukça yakın sonuçlar elde edildiği görülmüştür. Bu durum, modelin hem düşük hem de yüksek hız bölgelerinde başarılı tahminlerde bulunduğunu ve farklı dinamiklere uyum sağlayabildiğini göstermektedir. Sonuç olarak, LSTM modeli ardışık verilerdeki zaman bağımlılıklarını öğrenme konusunda etkili bir yaklaşım sunmuş; özellikle yeterli miktarda eğitim verisi sağlandığında yüksek doğrulukla v_k tahmini gerçekleştirebilmiştir. Bu çalışma, zaman serisi tabanlı AKM verilerinin modellenmesinde derin öğrenme yöntemlerinin güçlü bir alternatif olduğunu ortaya koymaktadır.

5. TARTIŞMA VE SONUÇ

Bu tez çalışmasında, epitaksiyel yöntemle üretilmiş grafen yüzeylerinin Atomik Kuvvet Mikroskopu (AKM) verileri üzerinden karakterizasyonu, klasik makine öğrenmesi (ML) algoritmaları ve derin öğrenme tabanlı modeller aracılığıyla detaylı biçimde incelenmiştir. Çalışmanın temel amacı, mikroskobik görüntü çiftlerinden elde edilen konum verileriyle yönsel kaymaların ve kayma hızlarının tahmin edilmesini sağlayacak veri odaklı modeller geliştirmek; böylece geleneksel analiz yöntemlerine kıyasla daha sistematik, hızlı ve yüksek doğruluklu bir değerlendirme mekanizması sunmaktır.

Klasik ML algoritmalarından Random Forest ve SVM, kayma yönlerinin sınıflandırılması görevinde oldukça başarılı sonuçlar vermiştir. Random Forest algoritması, %98.6 test doğruluğu ve %96.0 çapraz doğrulama doğruluğu ile yüksek genelleme yeteneğine sahip olduğunu ortaya koymuştur. SVM algoritması ise %94.6 test doğruluğu elde etmiş, ancak çapraz doğrulama performansı (%88.8) görece daha düşük kalmıştır. F1-score değerleri incelendiğinde, Random Forest algoritmasının tüm yön sınıflarında dengeli ve yüksek performans sergilediği görülmektedir. Bu bulgular, klasik karar ağaçları temelli algoritmaların düşük boyutlu sayısal verilerde etkin biçimde çalıştığını göstermektedir.

Derin öğrenme sürecinde, ardışık AKM görüntülerinden elde edilen zaman serisi verileriyle eğitilen Uzun Kısa Süreli Bellek (LSTM) modeli, kayma hızlarının tahmin edilmesinde güçlü bir performans ortaya koymuştur. Modelin eğitiminde kullanılan veri çiftlerinin sayısı sistematik olarak artırılmış ve her durumda 50 epok boyunca eğitim gerçekleştirilmiştir. Grafik analizlerine göre, 13-14 görüntü çiftinden itibaren MSE değerlerinde logaritmik ölçekte anlamlı bir düşüş, 17-18 ve 18-19 çiftlerinde ise minimum seviyeye ulaşan hata oranları elde edilmiştir. Bu durum, modelin daha fazla veriye maruz kaldıkça doğruluğunun arttığını, hata oranlarının ise belirgin biçimde azaldığını göstermektedir. Eğitim verisi miktarının model başarısı üzerindeki doğrudan etkisi bu bulgularla açıkça ortaya konmuştur.

Ayrıca, modelin tahmin ettiği kayma hızları ile hesaplanan gerçek değerler arasındaki fark oldukça düşük bulunmuştur. Grafikselsel karşılaştırmalarda da bu uyum açık şekilde görülmektedir. Eğitim ve doğrulama kayıplarının birbirine yakın seyretmesi, modelin aşırı öğrenme (overfitting) göstermediğini ve genel veri yapısına başarılı şekilde genelleme

yapabildiğini göstermektedir. R^2 değerlerinin eğitim veri sayısına paralel şekilde artması da bu durumu desteklemektedir.

Sonuç olarak, bu tez çalışmasında geliştirilen ML ve DL modelleri, 2D malzemelerin karakterizasyonunda yalnızca geleneksel yöntemlerle elde edilebilecek bilgileri otomatikleştirmekle kalmamış, aynı zamanda bu süreci daha hassas, hızlı ve yeniden üretilebilir hâle getirmiştir. Özellikle LSTM modeli, zaman serisi temelli verilerle çalışırken yüksek doğrulukla tahmin yapabilmiş, AKM kaynaklı konum kaymalarının analizinde başarılı bir alternatif olarak öne çıkmıştır. Bu yönüyle çalışma, 2D malzemelerin akıllı karakterizasyonu için veri bilimi temelli yeni yaklaşımların ne derece uygulanabilir ve etkili olduğunu göstermektedir.



REFERANSLAR

- [1] Geim, A., & Novoselov, K. (2007). Graphene calling. *Nat. Mater*, 6(169), 10--1038.
- [2] Das Sarma, S., Adam, S., Hwang, E., & Rossi, E. (2011). Electronic transport in two-dimensional graphene. *Reviews of Modern Physics*, 83(2), 407--470.
- [3] Khan, K., Tareen, A. K., Aslam, M., Wang, R., Zhang, Y., Mahmood, A., Ouyang, Z., Zhang, H., & Guo, Z. (2020). Recent developments in emerging two-dimensional materials and their applications. *Journal of Materials Chemistry C*, 8(2), 387--440.
- [4] Li, M.-Y., Su, S.-K., Wong, H.-S. P., & Li, L.-J. (2019). How 2D semiconductors could extend Moore's law. *Nature*, 567(7747), 169--170.
- [5] Li, X., Cai, W., An, J., Kim, S., Nah, J., Yang, D., Piner, R., Velamakanni, A., Jung, I., & Tutuc, E. (2009). Large-area synthesis of high-quality and uniform graphene films on copper foils. *Science*, 324(5932), 1312--1314.
- [6] Akinwande, D., Huyghebaert, C., Wang, C.-H., Serna, M. I., Goossens, S., Li, L.-J., Wong, H.-S. P., & Koppens, F. H. (2019). Graphene and two-dimensional materials for silicon technology. *Nature*, 573(7775), 507--518.
- [7] Liang, C., Sha, Y., Huang, J., Zhang, C., Su, S., Li, H., Wang, G., Liu, K., Wang, F., & Wang, H. (2022). Oxidizing Hexagonal Boron Nitride into Fluorescent Structures by Photodissociated Directional Oxygen Radical. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 13(15), 3369--3376.
- [8] Liang, C., Sha, Y., Huang, J., Zhang, C., Su, S., Li, H., Wang, G., Liu, K., Wang, F., & Wang, H. (2022). Oxidizing Hexagonal Boron Nitride into Fluorescent Structures by Photodissociated Directional Oxygen Radical. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 13(15), 3369--3376.
- [9] Sun, T., Zhang, G., Xu, D., Lian, X., Li, H., Chen, W., & Su, C. (2019). Defect chemistry in 2D materials for electrocatalysis. *Materials Today Energy*, 12, 215--238.
- [10] Cao, Y., Fatemi, V., Fang, S., Watanabe, K., Taniguchi, T., Kaxiras, E., & Jarillo-Herrero, P. (2018). Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices. *Nature*, 556(7699), 43--50.

- [11] Xiong, X., Kang, J., Liu, S., Tong, A., Fu, T., Li, X., Huang, R., & Wu, Y. (2022). Nonvolatile logic and ternary content-addressable memory based on complementary black phosphorus and rhenium disulfide transistors. *Advanced Materials*, 34(48), 2106321.
- [12] Zhang, H.-Z., Wu, W.-J., Zhou, L., Wu, Z., & Zhu, J. (2022). Steering on degrees of freedom of 2D van der Waals heterostructures. *Small Science*, 2(1), 2100033.
- [13] Guo, B., Xiao, Q., Wang, S., & Zhang, H. (2019). 2D layered materials: synthesis, nonlinear optical properties, and device applications. *Laser & Photonics Reviews*, 13(12), 1800327.
- [14] Caldwell, J. D., Aharonovich, I., Cassabois, G., Edgar, J. H., Gil, B., & Basov, D. N. (2019). Photonics with hexagonal boron nitride. *Nature Reviews Materials*, 4(8), 552--567.
- [15] Caldwell, J. D., Aharonovich, I., Cassabois, G., Edgar, J. H., Gil, B., & Basov, D. N. (2019). Photonics with hexagonal boron nitride. *Nature Reviews Materials*, 4(8), 552--567.
- [16] Liu, L., Zhou, M., Jin, L., Li, L., Mo, Y., Su, G., Li, X., Zhu, H., & Tian, Y. (2019). Recent advances in friction and lubrication of graphene and other 2D materials: Mechanisms and applications. *Friction*, 7, 199--216.
- [17] Liu, L., Zhou, M., Jin, L., Li, L., Mo, Y., Su, G., Li, X., Zhu, H., & Tian, Y. (2019). Recent advances in friction and lubrication of graphene and other 2D materials: Mechanisms and applications. *Friction*, 7, 199--216.
- [18] Yang, W., Cao, Y., Han, J., Lin, X., Wang, X., Wei, G., Lv, C., Bournel, A., & Zhao, W. (2021). Spin-filter induced large magnetoresistance in 2D van der Waals magnetic tunnel junctions. *Nanoscale*, 13(2), 862--868.
- [19] Si, Z., Zhou, D., Yang, J., & Lin, X. (2023). 2D material property characterizations by machine-learning-assisted microscopies. *Applied Physics A*, 129(4), 248.
- [20] Blake, P., Hill, E., Castro Neto, A., Novoselov, K., Jiang, D., Yang, R., Booth, T., & Geim, A. K. (2007). Making graphene visible. *Applied Physics Letters*, 91(6).
- [21] Wastl, D. S., Weymouth, A. J., & Giessibl, F. J. (2014). Atomically resolved graphitic surfaces in air by atomic force microscopy. *ACS Nano*, 8(5), 5233--5239.

- [22] Jung, I., Pelton, M., Piner, R., Dikin, D. A., Stankovich, S., Watcharotone, S., Hausner, M., & Ruoff, R. S. (2007). Simple approach for high-contrast optical imaging and characterization of graphene-based sheets. *Nano Letters*, 7(12), 3569--3575.
- [23] Xu, M., Tang, B., Lu, Y., Zhu, C., Lu, Q., Zhu, C., Zheng, L., Zhang, J., Han, N., & Fang, W. (2021). Machine learning driven synthesis of few-layered WTe₂ with geometrical control. *Journal of the American Chemical Society*, 143(43), 18103--18113.
- [24] Girshick, R., Donahue, J., Darrell, T., & Malik, J. (2015). Region-based convolutional networks for accurate object detection and segmentation. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 38(1), 142--158.
- [25] Girshick, R., Donahue, J., Darrell, T., & Malik, J. (2015). Region-based convolutional networks for accurate object detection and segmentation. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 38(1), 142--158.
- [26] Chen, L.-C., Papandreou, G., Kokkinos, I., Murphy, K., & Yuille, A. L. (2017). Deeplab: Semantic image segmentation with deep convolutional nets, atrous convolution, and fully connected crfs. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 40(4), 834--848.
- [27] Butler, K. T., Davies, D. W., Cartwright, H., Isayev, O., & Walsh, A. (2018). Machine learning for molecular and materials science. *Nature*, 559(7715), 547--555.
- [28] Mjolsness, E., & DeCoste, D. (2001). Machine learning for science: state of the art and future prospects. *Science*, 293(5537), 2051--2055.
- [29] Mjolsness, E., & DeCoste, D. (2001). Machine learning for science: state of the art and future prospects. *Science*, 293(5537), 2051--2055.
- [29] Abadi, M., Barham, P., Chen, J., Chen, Z., Davis, A., Dean, J., Devin, M., Ghemawat, S., Irving, G., & Isard, M. (2016). TensorFlow: a system for Large-Scale machine learning. *12th USENIX Symposium on Operating Systems Design and Implementation (OSDI 16)*, 265--283.
- [30] Yang, J., & Yao, H. (2020). Automated identification and characterization of two-dimensional materials via machine learning-based processing of optical microscope images. *Extreme Mechanics Letters*, 39, 100771.

- [31] Mas-Balleste, R., Gomez-Navarro, C., Gomez-Herrero, J., & Zamora, F. (2011). 2D materials: to graphene and beyond. *Nanoscale*, 3(1), 20--30.
- [32] Dong, J., Zhang, L., Dai, X., & Ding, F. (2020). The epitaxy of 2D materials growth. *Nature Communications*, 11(1), 5862.
- [33] Wang, G., Hou, H., Yan, Y., Jagatramka, R., Shirsalimian, A., Wang, Y., Li, B., Daly, M., & Cao, C. (2023). Recent advances in the mechanics of 2D materials. *International Journal of Extreme Manufacturing*, 5(3), 032002.
- [34] Shanmugam, V., Mensah, R. A., Babu, K., Gawusu, S., Chanda, A., Tu, Y., Neisiany, R. E., Försth, M., Sas, G., & Das, O. (2022). A review of the synthesis, properties, and applications of 2D materials. *Particle & Particle Systems Characterization*, 39(6), 2200031.
- [35] Kim, W., & Nair, S. (2013). Membranes from nanoporous 1D and 2D materials: A review of opportunities, developments, and challenges. *Chemical Engineering Science*, 104, 908--924.
- [36] Thambiratnam, K., Yusoff, N., Aidit, S. N., Samion, M. Z., Azali, N. A., & Ahmad, H. (2023). Recent advancement in the development of optical modulators based on 1D and 2D materials. *1D Semiconducting Hybrid Nanostructures: Synthesis and Applications in Gas Sensing and Optoelectronics*, 273--309.
- [37] Geim, A. K. (2009). Graphene: status and prospects. *Science*, 324(5934), 1530--1534.
- [38] Rao, C., Biswas, K., Subrahmanyam, K., & Govindaraj, A. (2009). Graphene, the new nanocarbon. *Journal of Materials Chemistry*, 19(17), 2457--2469.
- [39] Li, D., & Kaner, R. B. (2008). Graphene-based materials. *Science*, 320(5880), 1170--1171.
- [40] Abergel, D., Apalkov, V., Berashevich, J., Ziegler, K., & Chakraborty, T. (2010). Properties of graphene: a theoretical perspective. *Advances in Physics*, 59(4), 261--482.
- [41] Liu, X., & Hersam, M. C. (2018). Interface characterization and control of 2D materials and heterostructures. *Advanced Materials*, 30(39), 1801586.
- [42] Naikoo, G. A., Arshad, F., Almas, M., Hassan, I. U., Pedram, M. Z., Aljabali, A. A., Mishra, V., Serrano-Aroca, Á., Birkett, M., & Charbe, N. B. (2022). 2D materials,

synthesis, characterization and toxicity: a critical review. *Chemico-Biological Interactions*, 365, 110081.

[43] Paul, J., Singh, A., Dong, Z., Zhuang, H., Revard, B., Rijal, B., Ashton, M., Linscheid, A., Blonsky, M., & Gluhovic, D. (2017). Computational methods for 2D materials: discovery, property characterization, and application design. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 29(47), 473001.

[44] Liechti, K. (2019). Characterizing the interfacial behavior of 2D materials: a review. *Experimental Mechanics*, 59, 395--412.

[45] Sanchez, D. A., Dai, Z., & Lu, N. (2021). 2D material bubbles: Fabrication, characterization, and applications. *Trends in Chemistry*, 3(3), 204--217.

[46] Rahman, S., Torres, J. F., Khan, A. R., & Lu, Y. (2021). Recent developments in van der Waals antiferromagnetic 2D materials: Synthesis, characterization, and device implementation. *ACS Nano*, 15(11), 17175--17213.

[47] Shanmugam, V., Mensah, R. A., Babu, K., Gawusu, S., Chanda, A., Tu, Y., Neisiany, R. E., Försth, M., Sas, G., & Das, O. (2022). A review of the synthesis, properties, and applications of 2D materials. *Particle & Particle Systems Characterization*, 39(6), 2200031.

[48] Wu, S., Gu, J., Li, R., Tang, Y., Gao, L., An, C., Deng, Q., Zhao, L., & Hu, N. (2024). Progress on mechanical and tribological characterization of 2D materials by AFM force spectroscopy. *Friction*, 12(12), 2627--2656.

[49] Binnig, G., & Rohrer, H. (1987). Scanning tunneling microscopy—from birth to adolescence. *Reviews of Modern Physics*, 59(3), 615.

[50] Miles, M. (1994). New techniques in microscopy. Characterization of Solid Polymers: New Techniques and Developments, 17--55.

[51] Giessibl, F. J. (2003). Advances in atomic force microscopy. *Reviews of Modern Physics*, 75(3), 949.

[52] Rugar, D., & Hansma, P. (1990). Atomic force microscopy. *Physics Today*, 43(10), 23--30.

- [53] Seo, Y., & Jhe, W. (2007). Atomic force microscopy and spectroscopy. *Reports on Progress in Physics*, 71(1), 016101.
- [54] Butt, H.-J., Cappella, B., & Kappl, M. (2005). Force measurements with the atomic force microscope: Technique, interpretation and applications. *Surface Science Reports*, 59(1–6), 1–152.
- [55] Gadegaard, N. (2006). Atomic force microscopy in biology: technology and techniques. *Biotechnic & Histochemistry*, 81(2–3), 87–97.
- [56] Allison, D. P., Mortensen, N. P., Sullivan, C. J., & Doktycz, M. J. (2010). Atomic force microscopy of biological samples. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Nanomedicine and Nanobiotechnology*, 2(6), 618–634.
- [57] Shao, Z., Mou, J., Czajkowsky, D. M., Yang, J., & Yuan, J.-Y. (1996). Biological atomic force microscopy: what is achieved and what is needed. *Advances in Physics*, 45(1), 1–86.
- [58] Melitz, W., Shen, J., Kummel, A. C., & Lee, S. (2011). Kelvin probe force microscopy and its application. *Surface Science Reports*, 66(1), 1–27.
- [59] Zahmatkeshsaredorahi, A., Jakob, D. S., & Xu, X. G. (2024). Pulsed Force Kelvin Probe Force Microscopy— A New Type of Kelvin Probe Force Microscopy under Ambient Conditions. *The Journal of Physical Chemistry C*, 128(24), 9813–9827.
- [60] Aldave, D. A., López-Polín, G., Calle, E., Begué, A., Ranchal, R., Martínez, R., Bran, C., Burzurí, E., Gómez-Herrero, J., & Ares, P. (2025). Magnetic field screening of 2D materials revealed by magnetic force microscopy. *Advanced Electronic Materials*, 11(2), 2400607.
- [61] Vokoun, D., Samal, S., & Stachiv, I. (2022). Magnetic force microscopy in physics and biomedical applications. *Magnetochemistry*, 8(4), 42.
- [62] Bennewitz, R. (2024). Friction force microscopy. *Fundamentals of Friction and Wear on the Nanoscale*, 1–16.
- [63] Almeida, C. M., Ptak, F., & Prioli, R. (2024). Observation of the early stages of environmental contamination in graphene by friction force. *The Journal of Chemical Physics*, 160(21).

- [64] Roeper, M., Seddon, S. D., Amber, Z. H., Rüsing, M., & Eng, L. M. (2024). Depth resolution in piezoresponse force microscopy. *Journal of Applied Physics*, 135(22).
- [65] Padilla, F., Lederman, D., Velasco Jr, J., & Asryan, A. (2024). Twisted 2D Heterostructure Moiré Superlattice Characterization with Piezoresponse Force Microscopy and Freesource SPM Software. *Bulletin of the American Physical Society*.
- [66] Valloire, H., Quéméré, P., Vaxelaire, N., Kuentz, H., Le Rhun, G., & Borowik, Ł. (2024). Enhancing ferroelectric characterization at nanoscale: A comprehensive approach for data processing in spectroscopic piezoresponse force microscopy. *Journal of Applied Physics*, 135(19).
- [67] Mahesh, B. (2020). Machine learning algorithms-a review. *International Journal of Science and Research (IJSR)*. [Internet], 9(1), 381--386.
- [68] Wang, H., Ma, C., & Zhou, L. (2009). A brief review of machine learning and its application. *2009 International Conference on Information Engineering and Computer Science*, 1--4.
- [69] Nasteski, V. (2017). An overview of the supervised machine learning methods. *Horizons. b*, 4(51--62), 56.
- [70] Hahne, F., Huber, W., Gentleman, R., Falcon, S., Gentleman, R., & Carey, V. (2008). Unsupervised machine learning. *Bioconductor Case Studies*, 137--157.
- [71] Aizenberg, I. N., Aizenberg, N. N., Vandewalle, J., Aizenberg, I. N., Aizenberg, N. N., & Vandewalle, J. (2000). Multiple-Valued threshold logic and multi-valued neurons. *Multi-Valued and Universal Binary Neurons: Theory, Learning and Applications*, 25-80.
- [72] LeCun, Y., Bengio, Y., & Hinton, G. (2015). Deep learning. *Nature*, 521(7553), 436-444.
- [73] Voulodimos, A., Doulamis, N., Doulamis, A., & Protopapadakis, E. (2018). Deep learning for computer vision: A brief review. *Computational Intelligence and Neuroscience*, 2018(1), 7068349.
- [74] Kim, K. G. (2016). *Book review: Deep learning* (Vol. 22). Korean Society of Medical Informatics.

- [75] Shah, M., & Sureja, N. (2025). A comprehensive review of bias in deep learning models: Methods, impacts, and future directions. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 32(1), 255--267.
- [76] Hubel, D. H., & Wiesel, T. N. (1968). Receptive fields and functional architecture of monkey striate cortex. *The Journal of Physiology*, 195(1), 215--243.
- [77] Fukushima, K. (1980). Neocognitron: A self-organizing neural network model for a mechanism of pattern recognition unaffected by shift in position. *Biological Cybernetics*, 36(4), 193--202.
- [78] Krizhevsky, A., Sutskever, I., & Hinton, G. E. (2012). Imagenet classification with deep convolutional neural networks. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 25.
- [79] Ghosh, A., Sufian, A., Sultana, F., Chakrabarti, A., & De, D. (2020). Fundamental concepts of convolutional neural network. *Recent Trends and Advances in Artificial Intelligence and Internet of Things*, 519--567.
- [80] Hochreiter, S., & Schmidhuber, J. (1997). Long short-term memory. *Neural Computation*, 9(8), 1735--1780.
- [81] Hochreiter, S., & Schmidhuber, J. (1996). LSTM can solve hard long time lag problems. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 9.