

36090

**DOĞRUSAL OLMAYAN MODELLERDE TAHMİNLERE İLİŞKİN
GÜVEN BÖLGELERİNİN OLUŞTURULMASI
VE BİR KARŞILAŞTIRMA**

Yüksek Lisans Tezi

İSTATİSTİK

Atalay ÇAĞLAR

EKİM 1995

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

Bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Danışman

Yrd.Doç.Dr.Celal AYDIN

C. Aydin

Sınav Jürisi:

Başkan : Prof Dr. Alptekin ESİN

Üye : Prof .Dr. Özkan ÜNVER

Üye : Yrd. Doç Dr. Celal AYDIN

Alptekin Esin
Özkan Ünver
C. Aydin

Bu Tez Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Tez Yazım Esaslarına
Uygundur. *Yrd. Doç Dr. Celal Aydin*

**DOĞRUSAL OLMAYAN MODELLERDE TAHMİNLERE İLİŞKİN
GÜVEN BÖLGELERİNİN OLUŞTURULMASI VE
BİR KARŞILAŞTIRMA
(Yüksek Lisans)**

**Atalay ÇAĞLAR
GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
EKİM 1995**

ÖZ

Bu Yüksek lisans Tezi'nde doğrusal olmayan modellerde parametre tahmini ve bu parametrelere ilişkin güven aralıkları ve güven bölgelerinin oluşturulması incelendi. Ayrıca parametre tahmin tekniklerinden üç tanesi karşılaştırmalı olarak incelendi.

Öncelikle doğrusal modellerde parametre tahminini bulmak için kullanılan Doğrusal En Küçük Kareler Metodu verildi. Daha sonra doğrusal olmayan modellerde Doğrusallaştırma Metodu ile Gauss Metodu, parametre tahminini ve bu parametrelere ilişkin güven aralıklarının, güven bölgelerinin oluşturulması amacıyla kullanıldı. Likelihood Metodu ise yalnızca güven aralıkları ve güven bölgelerini belirlemek için kullanıldı.

Yapılan çalışma sonunda en çok ve en kolay kullanılan metodun Doğrusallaştırma Metodu olduğu görüldü. Yine uygulamada çok kullanılan bir diğer tahmin metodu Gauss Metodu'nun oldukça kullanışlı olduğu görüldü. Özellikle Gauss Metodu'nun yapısında yer alan N matrisinin daima pozitif tanımlı olmasının faydasından bahsedildi. Parametreler için oluşturulan güven aralıklarının ve güven bölgelerinin her iki metod için de aynı özellikleri taşıdığı anlaşıldı. İncelenen son metod olan Likelihood Metodu'yla oluşturulan güven aralıkları ve güven bölgeleri en zor oluşturulan; fakat, en güvenilir aralıklar ve bölgeler olduğu anlaşıldı. İncelenen metotlarla bulunan parametre değerlerinin, güven aralıklarının ve güven bölgelerinin küçük farklılıklara rağmen birbirlerine denk olduğu görüldü.

**FORMING CONFIDENCE REGIONS FOR PARAMETER
ESTIMATION IN NONLINEAR MODELS AND A COMPARISON
(M.Sc Thesis)**

**Atalay ÇAĞLAR
GAZI UNIVERSITY
INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY
OCTOBER 1995**

ABSTRACT

In this master thesis, parameter estimation of confidence intervals and confidence regions related to these parameters have been analyzed. In addition, three of the parameter estimation techniques have been analyzed comparatively.

First of all, the Linear Least Square Method, which is used for obtaining parameter estimation in linear models, has been given. Then, Linearization Method and Gauss Method in nonlinear models have been used with the aim of formation of parameter estimation and, confidence intervals and confidence regions connected with this parameter estimation. Likelihood Method has been used for determining only confidence intervals and confidence regions.

At the end of the study, it has been observed that the Linearization Method is the one that has been used most widely and easily. It has also been observed that the Gauss Method, another estimation method, which has been used frequently in applications, is quite practical. Especially, it has been emphasized that the presence of the positive definition of an N matrix in the structure of Gauss Method is useful. It has been realized that the confidence intervals and confidence region, formed for parameters, have the same characteristics in both methods. And it has been seen that the confidence intervals and confidence regions formed with Likelihood Method, which is the last method analyzed, are the most difficult to be formed but the most confident intervals and regions. It has been seen that the parameter values confidence intervals and confidence regions obtained with the methods analyzed match each other, but there are a few differences.

TEŞEKKÜR

İnsanlar bulundukları coğrafya nedeniyle pekçok imkan ve bir o kadar da zorluklarla yaşamak durumundadır. Bizim bulunduğumuz coğrafya da ise en zor yapılan işin bilimsel araştırmada bulunmak olduğu düşüncesindeyim. Zira bu çalışma esnasında elde edemediğim ya da yetersiz kaynaklar, veri bulmaktaki zorluklar gibi güçlükler karşıma çıktı. Fakat tüm güçlüklerle rağmen her zaman çalışma zevkimi taze tutan ve her an güvenini belirterek özgüvenimi artıran sayın hocam Yrd.Doç.Dr.Celal AYDIN'a olan minnertarlığımı belirtmek isterim. Sayın hocamın her an ayırdığı vakti, engin düşüncesi ve sonsuz ufkuyla verdiği bilgileri unutmam mümkün değil.

Bu çalışma sırasında en büyük özveriyi, en büyük hoşgörüyü, sınır tanımadan tüm imkanlarını benim için seferber eden Ailemden gördüm. Sevgili Aileme teşekkür ve minnet duygularımı belirtmek için satırlar yetersiz kalıyor. Ama şunu söylemek isterim ki, hiçbir zaman sizin emeğinizi boşa çıkarmayacağıma ve daima size layık bir insan olacağıma söz veriyorum.

Beni tanıyanlar arkadaşlarımla olan iletişimimi çok iyi bilirler. Desteklerini benden esirgemeyen sevgili arkadaşlarıma teşekkürlerimi ayrıca sunuyorum.

Son olarak da bugüne kadar hayatımda çok önemli yeri alan "Güzel Kız"a teşekkürlerimi sunuyor; göstereceği anlayış ve hoşgörünün, gösterdiği anlayış ve hoşgörüyü aratmamasını temenni ediyorum.

TABLOLARIN LİSTESİ

<u>Tablo</u>	<u>Sayfa</u>
5.1. Girdiler ve Gözlemlenen Değerler.....	54
5.2. Doğrusallaştırma Metodu Çözümü.....	58
5.3. Doğrusallaştırma Metodu Güven Aralıkları.....	60
5.4. (5.8) Eşitliğinden Bulunan Değerler.....	61
5.5. (5.9) Eşitliğinden Bulunan Değerler.....	62
5.6. (5.10) Eşitliğinden Bulunan Değerler.....	63
5.7. (5.11) Eşitliğinden Bulunan Değerler.....	63
5.8. (5.12) Eşitliğinden Bulunan Değerler.....	64
5.9. (5.13) Eşitliğinden Bulunan Değerler.....	65
5.10. Likelihood Metodu Güven Aralıkları.....	71
5.11. Gauss Metodu Çözümü.....	72
5.12. Gauss Metodu Güven Aralıkları.....	74
5.13. (5.28) Eşitliğinden Bulunan Değerler.....	75
5.14. (5.29) Eşitliğinden Bulunan Değerler.....	76
5.15. (5.30) Eşitliğinden Bulunan Değerler.....	76
5.16. (5.31) Eşitliğinden Bulunan Değerler.....	77
5.17. (5.32) Eşitliğinden Bulunan Değerler.....	78
5.18. (5.33) Eşitliğinden Bulunan Değerler.....	78

İÇİNDEKİLER

ÖZ.....	II
ABSTRACT.....	III
TEŞEKKÜR.....	IV
TABLoların LİSTESİ.....	V

BÖLÜM 1

GİRİŞ.....	1
------------	---

BÖLÜM 2

DOĞRUSAL MODELLERDE EN KÜÇÜK KARELER TAHMİNİ....	5
2.1. Doğrusal En Küçük Kareler	5
2.1.1. Doğrusal En Küçük Kareler Tahmin Edicisinin	
İstatistiksel Özellikleri	8
2.1.2 Doğrusal En Küçük Karelerin Geometrisi.....	10
2.1.3. Doğrusal En Küçük Kareler Tahmin Edicisinin Güven Bölgesi	
ve Güven Aralığı	13

BÖLÜM 3

DOĞRUSAL OLMAYAN EN KÜÇÜK KARELER.....	15
3.1. Doğrusal Olmayan Modellerin Yapısı.....	15
3.2. Doğrusal Olmayan En Küçük Kareler.....	17
3.2.1. Doğrusal Olmayan En küçük Karelerin Geometrisi	20
3.3. Doğrusal Olmayan Modellerin Özellikleri	21

BÖLÜM 4

DOĞRUSAL OLMAYAN MODELLERDE PARAMETRE	
TAHMİNİ	22

4.1. Doğrusallaştırma (Linearization) Metodu	22
4.1.1. Doğrusallaştırma Metodunda Güven Bölgesi ve Güven Aralığının Oluşturulması	27
4.1.2. Varyans-Kovaryans Matrisinin Tahmini	29
4.2. Likelihood Metodu	30
4.2.1. Likelihood Metodunda Güven Bölgesi ve Güven Aralığının Oluşturulması	30
4.3. Gauss Metodu.....	32
4.3.1. Newton Metodu.....	33
4.3.2. Gauss Tahmin Edicisinin Elde Edilmesi	35
4.3.3. Gauss Metodunun İstatistiksel Özellikleri	37
4.3.4. Gauss Metodunda Güven Bölgesi ve Güven Aralığının Oluşturulması.....	41
4.3.5. Varyans-Kovaryans Matrisinin Tahmini	45
4.3.6. Varyans-Kovaryans Matrisinin İrdelenmesi	47

BÖLÜM 5

UYGULAMA.....	54
5.1. Veri	54
5.2. Varsayımlar	56
5.3. Başlangıç Değeri	56
5.4. Doğrusallaştırma Metodu Çözüm ve Sonuçları	58
5.4.1. Doğrusallaştırma Metodu Güven Aralıkları ve Güven Bölgeleri	60
5.5. Likelihood Metodu Çözüm ve Sonuçları.....	65
5.5.1. Likelihood Metodu Güven Aralıkları ve Güven Bölgeleri.....	65
5.6. Gauss Metodu Çözüm ve Sonuçları	71
5.6.1. Gauss Metodu Güven Aralıkları ve Güven Bölgeleri	73
5.7. Tahminlere İlişkin Sonuçların İncelenmesi	79

5.7.1. Tahminlere İlişkin Güven Aralıkları ve

Güven Bölgelerinin İncelenmesi..... 84

BÖLÜM 6

SONUÇ..... 84

KAYNAKLAR..... 87

ÖZGEÇMİŞ 89

EKLER 90



BÖLÜM 1

GİRİŞ

İstatistiksel analizin konularından birisi de "Regresyon" dur. Regresyonda amaç, bağımlı değişken ile bağımsız değişken arasındaki ilişkinin ortaya çıkartılmasıdır. Bu nedenle öncelikle model en genel haliyle aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$\underline{Y} = f(\underline{\xi}, \underline{\theta}) + \underline{\varepsilon} \quad (1.1)$$

Bu model denkleminde;

- $\underline{Y}$: Bağımlı değişken vektörü
- $\underline{\xi}$: k- boyutlu ve bağımsız değişkenlerden oluşan matris
- $f(\underline{\xi}, \underline{\theta})$:Yanıt fonksiyonu
- $\underline{\theta}$: p- boyutlu bilinmeyen parametre vektörü
- $\underline{\varepsilon}$: Deney ya da gözlemlerden kaynaklanan hata vektörü

olarak yazılabilir. Eğer model denklemi doğrusal bir yapı gösteriyorsa;

$$Y = \theta_1 X_1 + \theta_2 X_2 + \dots + \theta_p X_p + \varepsilon$$

olacaktır. Ayrıca yapılan çalışmada incelenen gözlemlerin sayısı n olduğunda, her bir gözlem için model eşitliği açık olarak yazılabilir. Öyleyse,

$$\begin{aligned}
Y_1 &= X_{11}\theta_1 + X_{12}\theta_2 + \dots + X_{1p}\theta_p + \varepsilon_1 \\
Y_2 &= X_{21}\theta_1 + X_{22}\theta_2 + \dots + X_{2p}\theta_p + \varepsilon_2 \\
&\vdots \\
&\vdots \\
Y_n &= X_{n1}\theta_1 + X_{n2}\theta_2 + \dots + X_{np}\theta_p + \varepsilon_n
\end{aligned}$$

yazılabilir. Her bir model eşitliğini daha genel halde,

$$Y_u = X_{u1}\theta_1 + X_{u2}\theta_2 + \dots + X_{up}\theta_p + \varepsilon_u \quad (u = 1, 2, \dots, n)$$

olacaktır. Burada ε_u hata terimleri, ortalaması 0 ve varyansı σ^2 olan normal dağılımına sahiptir. Öyleyse $\underline{\varepsilon} \sim N(\underline{0}, \sigma^2 I)$ olmak üzere hata terimlerinin birbirinden bağımsız olduğu düşünülecektir.

Regresyonda amacın bağımlı değişken ile bağımsız değişkenlerin arasındaki ilişkilerin ortaya çıkartılması olduğu belirtildi. Bu konudaki ilk adım bilinmeyen $\underline{\theta}^T = [\theta_1, \theta_2 \dots \theta_p]$ parametre vektörünün tahmin edilmesi olacaktır. Burada bulunacak parametre vektörü, Hata Kareler Toplamını minimum yapacaktır. Öyleyse,

$$\text{Hata Kareler Toplamı} = \sum_{u=1}^n \left[Y_u - \sum_{i=1}^p \theta_i X_{iu} \right]^2$$

olduğundan, bu ifadeyi minimum seviyede tutacak $\underline{\theta}^*$ parametre vektörü Doğrusal En Küçük Kareler Yöntemiyle,

$$\underline{\theta}^* = (X^T X)^{-1} X^T \underline{Y}$$

olarak elde edilir. Bu konudaki yani, Doğrusal En Küçük Kareler Metodu hakkındaki tüm ayrıntılar Bölüm 2'de verildi. Ayrıca model doğrusal olduğunda

tahmin uzayı düzlemdir. Geometrik anlamda $\underline{\theta}^*$ vektörünün, bağımlı değişken vektörünün tahmin uzayına dik izdüşümü alınarak bulunduğu aynı bölümde açıklandı. Yine 2. Bölümde Doğrusal En Küçük Kareler tahmininin güven aralığı ve güven bölgesinin oluşturulması verildi.

Eğer (1.1) eşitliğindeki $f(\xi, \underline{\theta}^*)$ doğrusal değilse bu durumda modele, "Doğrusal Olmayan Model"dir denilir. Model doğrusal olmadığına, tahmin uzayının yapısından dolayı parametre tahmini kolayca yapılamaz. Çünkü tahmin uzayı eğrilerden, çukurlardan, tepeciklerden, ilmiklerden oluşan bir yüzeydir. Doğrusal En Küçük Kareler Metodunda tahmin uzayı bir düzlemdi. Oysa aynı varsayım doğrusal olmayan modellerin oluşturduğu yüzey için geçerli olmamaktadır. Bu nedenle modelin doğrusal olmadığı durumlarda, Doğrusal En Küçük Kareler Metodu'ndaki gibi bir formülize çözüm noktası elde edilemez. Dolayısıyla model doğrusal olmadığına, parametre tahmini için "İteratif Teknikler" kullanılmaktadır. Doğrusal olmayan modellerin yapısının ve çözümlerin iteratif tekniklerle yapılabileceğinin ayrıntılı anlatımı, konunun geometrik yorumuyla birlikte 3. Bölümde verildi.

4. Bölümde ise doğrusal olmayan modellerde parametre tahmini yapmak için kullanılan Doğrusallaştırma, Gauss ve Likelihood Metotları ayrıntılı olarak anlatıldı. Sözkonusu metodlardan Likelihood Metodu yalnızca parametreye ilişkin güven aralığının ve güven bölgesinin oluşturulması için kullanılır. Diğer iki metot ise parametre için nokta tahminin yapılması ve tahmine ilişkin güven aralıkları ile güven bölgelerinin oluşturulması amacıyla kullanılır.

Bu bölümde Doğrusallaştırma Metodu için parametre tahmini, varyans-kovaryans matrisinin bulunması ve güven aralıkları ile güven bölgelerinin oluşturulması verilirken; Likelihood Metodu, yöntemin özelliğinden dolayı güven aralıkları ve güven bölgesinin oluşturulması anlatıldı. Uygulamalarda en

sık kullanılan yöntemlerden biri olan Gauss Metodu'nda parametre tahmini, tahmine ilişkin güven aralığı ve güven bölgesinin oluşturulması ile varyans-kovaryans matrisinin bulunması ayrıntılı olarak anlatıldı. Ayrıca log-likelihood fonksiyonundan hareketle varyans-kovaryans matrisinin mümkün durumlarından üçü irdelenerek, bu durumlara ilişkin güven bölgeleri oluşturuldu.

Çalışmanın 5. ve son bölümünde ise uygulama problemi ve elde edilen çözümler tüm ayrıntılarıyla birlikte verildi. Ayrıca sonuçlar itibarıyla metotların yorumlanması ve birbirleriyle karşılaştırılması yapıldı. Bu amaçla parametre çiftleri için oluşturulan güven bölgeleri her metot için çizilerek EKLER kısmında verildi.

BÖLÜM 2

DOĞRUSAL MODELLERDE EN KÜÇÜK KARELER TAHMİNİ

Bu çalışmada incelenecek metodlar güven bölgesi ve güven aralıklarının oluşturulması ile irtibatlandırılacaktır. Doğrusal olmayan modellerin parametrelerinin tahmin edilmesi için incelenecek olan, Doğrusallaştırma (Linearization), Likelihood ve Gauss iteratif yöntemi açıklanacaktır. Diğer yandan, doğrusal olmayan modellerde En Küçük Kareler yönteminin daha iyi anlaşılabilmesi için öncelikle Doğrusal En Küçük Kareler yöntemi verilecektir. Bu bölümdeki yöntemlerin daha ayrıntılı incelenmesi için Draper and Smith (1966), Gallant (1975), Duncan (1978), Bard (1974), Watts and Bates (1988) kaynaklarına bakılabilir.

2.1. Doğrusal En Küçük Kareler

Doğrusal modelin genel yapısı aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$\underline{Y} = f(\underline{\xi}, \underline{\theta}) + \underline{\varepsilon} \quad (2.1)$$

Burada $f(\underline{\xi}, \underline{\theta})$; p parametrelili ve doğrusal bir fonksiyon olduğunda, yukarıdaki model;

$$Y = \theta_1 X_1 + \theta_2 X_2 + \dots + \theta_p X_p + \varepsilon \quad (2.2)$$

olur. Burada X , ξ 'nin bir fonksiyonudur. ε_u hatalarını içeren Y_u gözlemlendiğinde, $u=1,2,3,\dots,n$ için $X_{1u}, X_{2u}, \dots, X_{pu}$ değerlerini X_i olarak tanımladıktan sonra model denklemi vektörel formda yazılabilir:

$$\underline{Y} = \underline{X}\underline{\theta} + \underline{\varepsilon} \quad (2.3)$$

Bu modelde;

$\underline{Y}$: n gözlemden oluşan bağımlı değişken vektörü,

$\underline{X}$: nxp boyutlu bağımsız değişkenler matrisi,

$\underline{\theta}$: p boyutlu parametre vektörü,

$\underline{\varepsilon}$: n boyutlu hata vektörü

olarak açıklanır (1,3,4,5).

Bu değişkenleri ayrıntılı olarak inceleyelim:

$$\underline{Y} = \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{bmatrix}_{nx1}$$

$$\underline{X} = \begin{bmatrix} X_{11} & X_{21} & \dots & X_{p1} \\ X_{12} & X_{22} & \dots & X_{p2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ X_{1n} & X_{2n} & \dots & X_{pn} \end{bmatrix}_{nxp}$$

$$\underline{\theta} = \begin{bmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \\ \vdots \\ \theta_p \end{bmatrix}_{px1}$$

$$\underline{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}_{nx1}$$

En Küçük Kareler Metodunda amaç, Hata Kareler Toplamını en küçük yapacak parametre tahmini elde etmektir. Hata Kareler Toplamı;

$$S(\underline{\theta}) = \sum_{u=1}^n \left[Y_u - \sum_{i=1}^p \theta_i X_{iu} \right]^2 \quad (2.4)$$

şeklindedir. Bu ise uygun vektörel yazılımı ile,

$$S(\underline{\theta}) = (\underline{Y} - \underline{X}\underline{\theta})^T . (\underline{Y} - \underline{X}\underline{\theta}) \quad (2.5)$$

şeklinde yazılabilir (4, 5, 6, 7). Yalnızca $\underline{\theta}$ 'nın fonksiyonu olan Hata Kareler toplamının minimumunu bulmak için;

$$i) \frac{\partial S(\underline{\theta})}{\partial \underline{\theta}} = 0$$

$$ii) \frac{\partial^2 S(\underline{\theta})}{\partial^2 \underline{\theta}} > 0$$

koşulları sağlanmalıdır. Gerek ve yeter şartları, (2.5) eşitliği aşağıdaki formda yazdıktan sonra uygulansın:

$$S(\underline{\theta}) = \underline{Y}^T \underline{Y} - 2\underline{\theta}^T \underline{X}^T \underline{Y} + \underline{\theta}^T \underline{X}^T \underline{X} \underline{\theta} \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial S(\underline{\theta})}{\partial \underline{\theta}} = -2\underline{X}^T \underline{Y} + 2\underline{X}^T \underline{X} \underline{\theta} = 0$$

olacağından,

$$\underline{X}^T \underline{X} \underline{\theta} = \underline{X}^T \underline{Y} \quad (2.7)$$

eşitliği elde edilir.

X matrisi tam ranklı ve $X^T X$ nonsingular varsayımları altında (2.7) eşitliği çözüldüğünde,

$$\underline{\theta}^* = (X^T X)^{-1} X^T \underline{Y} \quad (2.8)$$

elde edilir (3, 4, 5, 6, 11).

Bulunan $\underline{\theta}^*$ vektörünün hata kareler toplamını minimum yapıp yapmayacağı (ii) koşulu ile kontrol edilir:

$$\text{ii) } \frac{\partial^2 S(\underline{\theta})}{\partial \underline{\theta}} = 2X^T X > 0$$

Her durumda $X^T X > 0$ olacağından (2.8) eşitliğinde verilen $\underline{\theta}^*$ vektörü hata kareler toplamını minimum yapacaktır.

2.1.1. Doğrusal En Küçük Kareler Tahmin Edicisinin İstatistiksel Özellikleri

Elde edilen $\underline{\theta}^*$ değeri yardımıyla varyans analizi uygulayarak, sonuçlar irdelenebilir. Öyleyse

$$\text{Toplam Kare Toplamı} = \underline{Y}^T \underline{Y} \quad (2.9)$$

$$\text{Regresyon Kare Toplamı} = \underline{\theta}^T X^T \underline{Y} \quad (2.10)$$

$$\text{Hata Kare Toplamı} = \underline{Y}^T \underline{Y} - \underline{\theta}^T X^T \underline{Y} \quad (2.11)$$

şeklinde yazılabilir. Buradan (2.3) eşitliğinden "Hata Kare Toplamı"nın $S(\underline{\theta}^*)$ değerine eşit olduğu bilinmektedir. Ayrıca $S(\underline{\theta}^*)$, $S(\underline{\theta})$ 'nin en küçük değeridir.

$S(\underline{\theta}^*)$ değerini (2.6) eşitliğinde $\underline{\theta}$ yerine, (2.8) eşitliğindeki $\underline{\theta}^*$ değerini koyarak,

$$\begin{aligned} S(\underline{\theta}^*) &= \underline{Y}^T \underline{Y} - 2\underline{\theta}^{*T} \underline{X}^T \underline{Y} + \underline{\theta}^{*T} \underline{X}^T \underline{X} \underline{\theta}^* \\ S(\underline{\theta}^*) &= \underline{Y}^T \underline{Y} - \underline{\theta}^{*T} \underline{X}^T \underline{Y} - \underline{\theta}^{*T} (\underline{X}^T \underline{Y} - \underline{X}^T \underline{X} \underline{\theta}^*) \\ S(\underline{\theta}^*) &= \underline{Y}^T \underline{Y} - \underline{\theta}^{*T} \underline{X}^T \underline{Y} - \underline{\theta}^{*T} (\underline{X}^T \underline{Y} - \underline{X}^T \underline{X} (\underline{X}^T \underline{X})^{-1} \underline{X}^T \underline{Y}) \end{aligned}$$

$(\underline{X}^T \underline{X})(\underline{X}^T \underline{X})^{-1} = I$ olduğundan;

$$\begin{aligned} S(\underline{\theta}^*) &= \underline{Y}^T \underline{Y} - \underline{\theta}^{*T} \underline{X}^T \underline{Y} - \underline{\theta}^{*T} (\underline{X}^T \underline{Y} - \underline{X}^T \underline{Y}) \\ S(\underline{\theta}^*) &= \underline{Y}^T \underline{Y} - \underline{\theta}^{*T} \underline{X}^T \underline{Y} \end{aligned}$$

elde edilir (4, 5). Böylece (2.11) eşitliğindeki $S(\underline{\theta}^*)$ değeri elde edilir. Daha sonraki bölümde güven bölgesinin yarıçapının bulunmasında değerlendirilecek $S(\underline{\theta}) - S(\underline{\theta}^*)$ farkı,

$$\begin{aligned} S(\underline{\theta}) - S(\underline{\theta}^*) &= \underline{\theta}^T \underline{X}^T \underline{X} \underline{\theta} - 2\underline{\theta}^T \underline{X}^T \underline{Y} + \underline{\theta}^{*T} \underline{X}^T \underline{X} \underline{\theta}^* \\ &= (\underline{\theta} - \underline{\theta}^*)^T \underline{X}^T \underline{X} (\underline{\theta} - \underline{\theta}^*) \end{aligned} \quad (2.12)$$

olarak oluşturulabilir (3, 4).

ϵ_u hata terimleri birbirinden bağımsız ve herbiri 0 ortalamayla ve σ^2 varyansı ile normal dağıldığı durumda kısaca $\underline{\epsilon} \sim N(\underline{0}, \sigma^2 I)$ iken aşağıdaki özellikler

- i) $\underline{\theta}^* \sim N(\underline{\theta}, (\underline{X}^T \underline{X})^{-1} \sigma^2)$
- ii) $S(\underline{\theta}^*) \sim \sigma^2 \chi_{n-p}^2$
- iii) $S(\underline{\theta}) - S(\underline{\theta}^*) \sim \sigma^2 \chi_p^2$
- iv) $S(\underline{\theta}) - S(\underline{\theta}^*)$ ve $S(\underline{\theta}^*)$ birbirinden bağımsız olduğunda;

$$\frac{[S(\underline{\theta}) - S(\underline{\theta}^*)]/p}{S(\underline{\theta}^*)/n-p} \sim F(p, n-p)$$

şeklinde sıralanabilirler (4, 5).

2.1.2. Doğrusal En Küçük Karelerin Geometrisi:

Bundan önceki söylenenler bir örnek uzayında geometrik olarak gösterilebilir. İşlemler n boyutlu örnek uzayında yapılmaktadır.

$$\underline{Y} = \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{bmatrix}$$

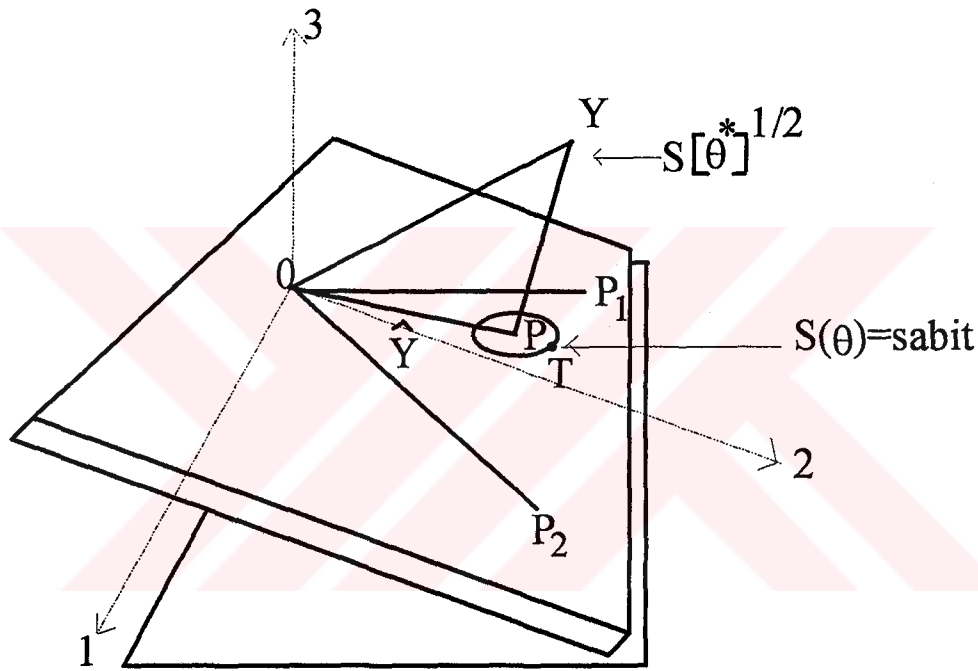
incelenen vektörü ($Y_1, Y_2, \dots, Y_n$) koordinatları ile O orijininden Y noktasına bir $\vec{OY}$ vektörü olarak tanımlanır. X matrisi herbiri n elemanlı, p tane vektörden oluşur. Yani herbiri n elemanlı $\vec{OX}_1, \vec{OX}_2, \dots, \vec{OX}_p$ vektörlerinden oluşmaktadır. Bu vektörler orijin noktasından X_i noktasına uzanmaktadır. $\underline{\theta}^T = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_p)$ vektörüyle oluşturulan $X\underline{\theta}$, lineer formu, X 'in tüm doğrusal kombinasyonlarını oluşturur.

$\vec{X\underline{\theta}}$ lineer formunun bir noktası T olarak belirlensin. Bu durumda $\vec{OY}$ vektörünün üzerindeki Y noktasının, T noktasına olan uzaklığı YT^2 vektörel biçimde şu şekilde belirlenir:

$$YT^2 = (\underline{Y} - X\underline{\theta})^T (\underline{Y} - X\underline{\theta}) \quad (2.13)$$

Son olarak elde edilen (2.13) eşitliğine dikkat edilirse $YT^2 = S(\underline{\theta})$ olduğu görülür. $S(\underline{\theta})$ 'nın minimum değeri $\underline{\theta}^*$ ile bulunacak ve $\hat{\underline{Y}} = X\underline{\theta}^*$ olarak

tanımlanacaktır. Tahmin uzayının bir P noktası alınsın ki, bu P noktası Y noktasına yakın olsun. O halde geometrik olarak X matrisinin tüm sütunlarına ortogonal olan ve vektörünün bir ucu P noktasında bulunan $\vec{YP}$ vektörü tanımlanır. Tahmin uzayına Y 'den çizilen bir dik ile elde edilen $\vec{YP}$ vektörü P noktasının, Y noktasına en yakın uzaklığını göstermektedir. Ayrıca burada incelenen P noktası, gerçekte θ^* değerinden başka birşey değildir.



Şekil 1. $n=3$ ve $p=2$ İçin Örnek Uzayı (4).

n boyutlu örnek uzayından başka p boyutlu parametre uzayı ve $n-p$ boyutlu hata uzayları tanımlanabilir. Bu üç uzay şu şekilde belirtilir.

$$\begin{aligned} \underline{Y} &= \underline{\hat{Y}} + (\underline{Y} - \underline{\hat{Y}}) \\ &= \underline{\hat{Y}} + \underline{e} \end{aligned} \quad (2.14)$$

Görüldüğü gibi $\underline{Y}$ vektörü iki ortogonal bileşene ayrılmaktadır. Burada $\hat{\underline{Y}}$, tahmin uzayında, $\underline{e} = \underline{Y} - \hat{\underline{Y}}$ artıklar vektörü hata uzayında yatar. Daha önce belirtildiği gibi p boyutlu tahmin uzayı tanımlandıktan sonra, n boyutlu örnek uzayından arta kalan $(n-p)$ boyutlu uzay hata uzayıdır. Tahmin (parametre) uzayı ile hata uzayının ortogonal oldukları kolayca söylenebilir. Kısaca,

$$\begin{aligned}\hat{\underline{Y}}^T \cdot \underline{e} &= (\underline{X}\underline{\theta}^*)^T (\underline{Y} - \underline{X}\underline{\theta}^*) \\ &= \underline{\theta}^{*T} \underline{X}^T (\underline{Y} - \underline{X}\underline{\theta}^*) \\ &= \underline{\theta}^{*T} (\underline{X}^T \underline{Y} - \underline{X}^T \underline{X} \underline{\theta}^*) \\ &= \underline{\theta}^{*T} (\underline{X}^T \underline{Y} - \underline{X}^T \underline{X} (\underline{X}^T \underline{X})^{-1} \underline{X}^T \underline{Y})\end{aligned}$$

$(\underline{X}^T \underline{X}) \cdot (\underline{X}^T \underline{X})^{-1} = \underline{I}$ olduğundan;

$$\begin{aligned}\hat{\underline{Y}} \cdot \underline{e} &= \underline{\theta}^{*T} (\underline{X}^T \underline{Y} - \underline{X}^T \underline{Y}) \\ &= \underline{\theta}^{*T} \cdot 0 \\ &= 0\end{aligned}$$

sonucu parametre uzayı ile hata uzayının birbirine dik (ortogonal) olmasını gerektirir.

Daha önce tanımlanan tahmin uzayının genel bir noktası $\underline{T}$ ile tahmin uzayının $\underline{Y}$ vektörüne en yakın noktası olan $\underline{P}$ noktası dikkate alınarak aşağıdaki eşitlik yazılır:

$$\underline{Y}\underline{T}^2 = \underline{Y}\underline{P}^2 + \underline{P}\underline{T}^2 \quad (2.15)$$

Son olarak elde edilen (2.15) eşitliği yeniden düzenlenirse;

$$\underline{S}(\underline{\theta}) = \underline{S}(\underline{\theta}^*) + \underline{P}\underline{T}^2$$

olur. Öyleyse;

$$PT^2 = S(\underline{\theta}) - S(\underline{\theta}^*) \quad (2.16)$$

elde edilir (2.16) eşitliği p boyutlu parametre uzayında merkezi P noktası (yani $\underline{\theta}^*$) olmak üzere, güven bölgesinin kenar çizgilerini (sınırlarını) oluşturur (4). Doğrusal En Küçük Kareler Yöntemi için güven bölgesinin parametre uzayındaki görüntüsünün küre olacağı açıktır. Bu durumda kürenin ya da bir başka deyişle güven bölgesinin yarıçapı $[S(\underline{\theta}) - S(\underline{\theta}^*)]^{1/2}$ olarak elde edilir (3, 4, 5).

2.1.3. Doğrusal En Küçük Kareler Tahmin Edicisi İçin Güven Bölgesi ve Güven Aralığı

Daha önce 2.1.2. Konusunda verilen sonuçlardan (iv) aşağıdaki gibiydi.

$$\frac{[S(\underline{\theta}) - S(\underline{\theta}^*)]/p}{S(\underline{\theta}^*)/n-p} = F_{(p, n-p, 1-\alpha)} \quad (2.17)$$

Ayrıca (2.17) eşitliğinde gerekli işlemler yapıldığında;

$$S(\underline{\theta}) = S(\underline{\theta}^*) \left[1 + \frac{p}{n-p} F_{(p, n-p, 1-\alpha)} \right] \quad (2.18)$$

elde edilir.

(2.18) eşitliğine dikkat edilirse $S(\underline{\theta})$, en küçük değeri olan $S(\underline{\theta}^*)$ 'dan biraz daha büyüktür. Ayrıca buradan (2.16) eşitliği ile belirtilen güven bölgesinin yarıçapı;

$$[S(\underline{\theta}) - S(\underline{\theta}^*)]^{1/2} = \left[S(\underline{\theta}^*) \cdot \frac{p}{n-p} \cdot F_{(p, n-p, 1-\alpha)} \right]^{1/2} \quad (2.19)$$

olarak tanımlanabilir.

(2.17) eşitliği incelendiğinde;

$$S(\underline{\theta}) - S(\underline{\theta}^*) \leq s^2 \cdot p \cdot F_{(p, n-p, 1-\alpha)} \quad (2.20)$$

sonucu bulunur (2.20) eşitliğinde,

$$s^2 = \frac{S(\underline{\theta}^*)}{n - p} \quad (2.21)$$

olarak belirlenir. (2.20) eşitliğinde elde edilen sonuçlar (2.12) eşitliğinde yerine konulduğunda;

$$(\underline{\theta} - \underline{\theta}^*)^T X^T X (\underline{\theta} - \underline{\theta}^*) \leq s^2 \cdot p \cdot F_{(p, n-p, 1-\alpha)} \quad (2.22)$$

elde edilir (3, 4, 5, 6, 7). (2.22) ifadesi düzenlendiğinde tek tek parametrelerin güven aralığı aşağıdaki gibi tanımlanabilir.

$$|\underline{\theta} - \underline{\theta}^*| \leq s \cdot \left[(X^T X)^{-1} \right]^{1/2} t_{n-p, 1-\alpha/2} \quad (2.23)$$

(2.23) ifadesinden, herhangi bir θ_j değeri için güven sınırlarını oluşturulduğunda;

$$|\theta_j - \theta_j^*| \leq s \cdot \left[(X^T X)^{-1}_{jj} \right]^{1/2} t_{n-p, 1-\alpha/2} \quad (2.24)$$

olarak bulunur. Burada $(X^T X)^{-1}_{jj}$, $(X^T X)$ matrisinin j'inci köşegen elemanıdır (3, 4, 6).

BÖLÜM 3

DOĞRUSAL OLMAYAN MODELLER VE EN KÜÇÜK KARELER

3.1. Doğrusal Olmayan Modellerin Yapısı:

Eğer model $\underline{Y} = \mathbf{X}^T \underline{\theta}$ genel formunda yazılabiliyorsa, model doğrusal, aksi halde; yani model $\underline{Y} = \mathbf{X}^T \underline{\theta}$ genel formunda yazılamıyorsa model doğrusal olmayan yapıdadır (3).

Doğrusal olmayan modellere ilişkin bir başka tanım ise şöyledir: "Eğer modelin parametreye göre alınan birinci türevleri sonunda, birinci türevler θ parametre değerlerine bağımlı değilse model doğrusaldır. Aksi takdirde model, doğrusal olmayandır" (9, 10).

Model doğrusal olduğunda konunun geometrisi 2. Bölümde verilmişti. Modele ait karteziyen çizimleri daima doğrulardan oluşmaktadır. Fakat model doğrusal olmadığında karteziyen çizimi eğrilerden oluşur. Ayrıca burada "Modelin asli eğriliği" ve "Parametre eğrilik etkisi" ile karşılaşılmaktadır. Modelin asli eğrilik ölçüsünün çok küçük olduğu durumlarda, $\underline{\theta}$ 'nın en iyi tahmin değeri $\underline{\theta}^*$ 'ın yakın komşuluğunda teğet düzlemin tahmin yüzeyini iyi temsil ettiği varsayılabilir. Bu durumlarda, doğrusallık varsayımları geçerli olabilmektedir. Parametre etkisi eğrilik ölçüsü ise "yeniden parametreleme" yapmak sureti ile yalıtılabilmektedir (8). Doğrusal olmayan modeller için konunun geometrisi ayrıntılı olarak 3.1.3. konusunda incelenmiştir.

İncelenen modelin aşağıdaki gibi olduğu farzedilsin.

$$\underline{Y} = f(\xi_1, \dots, \xi_k; \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_p) + \varepsilon \quad (3.1)$$

Burada,

$$\underline{\xi} = \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_k \end{pmatrix}$$

$$\underline{\theta} = \begin{pmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \\ \vdots \\ \theta_p \end{pmatrix}$$

$$\underline{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}$$

olmak üzere (3.1) eşitliğinde yazılan model denklemi aşağıdaki gibi olur:

$$\underline{Y} = f(\underline{\xi}, \underline{\theta}) + \underline{\varepsilon} \quad (3.2)$$

$u=1, 2, 3, \dots, n$ olmak üzere u . deneme sonunda elde edilen sonuçlar yazıldığında,

$$Y_u = f(\xi_{1u}, \dots, \xi_{ku}; \theta_1, \dots, \theta_p) + \varepsilon_u \Rightarrow Y_u = f(\underline{\xi}_u, \underline{\theta}) + \varepsilon_u \quad (3.3)$$

elde edilir ve,

Y_u : u . denemede bağımlı değişkenin değeri,

ξ_{ku} : u . denemede k . bağımsız değişkenin değeri,

ε_u : u . denemedeki hatadır.

Daha önce (2.1.2) konusunda belirtildiği gibi $\varepsilon_u \sim N(0, \sigma^2)$ ve birbirinden bağımsız olduğundan kısaca $\underline{\varepsilon} \sim N(\underline{0}, \sigma^2 I)$ olarak ifade edilebilir.

3.2. Doğrusal Olmayan En Küçük Kareler

En Küçük Kareler metodunda amaç "Hata Kare Toplamı" nı minimum yapacak parametre tahminlerini elde etmektir. Bu nedenle önce Hata Kareler Toplamı belirtilsin:

$$S(\underline{\theta}) = \sum_{u=1}^n \left[Y_u - f(\underline{x}_u, \underline{\theta}) \right]^2 \quad (3.4)$$

Bu eşitlikte dikkat edilirse verilen data setinde Y_u ve $\underline{x}_u$ değerleri bellidir ve sabittir. Bu nedenle $S(\underline{\theta})$, $\underline{\theta}$ 'nın bir fonksiyonudur. $\underline{\theta}$ 'nın En Küçük Kareler tahmini olan $\underline{\theta}^*$, $S(\underline{\theta})$ 'yı minimum yapacak değerdir. Ayrıca Doğrusal En Küçük Kareler için gösterilebileceği gibi, Doğrusal Olmayan En Küçük Karelerin tahmini $\underline{\theta}^*$, aynı zamanda Maximum Likelihood tahminidir (3). Bu şu şekilde açıklanabilir:

$L(\underline{\theta}, \sigma^2)$, Likelihood fonksiyonu olmak üzere ve $\underline{\varepsilon} \sim N(\underline{0}, \sigma^2 I)$ varsayımı altında;

$$L(\underline{\theta}, \sigma^2) = (2\pi\sigma)^{-\frac{n}{2}} \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} (\underline{Y} - f(\underline{\xi}, \underline{\theta}))^T (\underline{Y} - f(\underline{\xi}, \underline{\theta})) \right\} \quad (3.5)$$

yazılabilir. Ayrıca (3.4) eşitliğindeki $S(\underline{\theta})$,

$$S(\underline{\theta}) = (\underline{Y} - f(\underline{\xi}, \underline{\theta}))^T (\underline{Y} - f(\underline{\xi}, \underline{\theta})) \quad (3.6)$$

değerine denktir. (3.6) eşitliğindeki $S(\underline{\theta})$ değeri (3.5) eşitliğinde yerine koyulduğunda,

$$L(\underline{\theta}, \sigma^2) = (2\pi\sigma)^{-\frac{n}{2}} \cdot \exp\left\{-\frac{S(\underline{\theta})}{2\sigma^2}\right\} \quad (3.7)$$

σ^2 'nin bilindiği varsayımı altında $L(\underline{\theta}, \sigma^2)$ fonksiyonunu maximum yapacak $\underline{\theta}^*$ araştırılır. Logaritma işleminin fonksiyonun özelliklerinde farklılaşma yapmamasından yararlanarak ve $L(\underline{\theta}, \sigma^2)$ 'nin maximum ile $\ln L(\underline{\theta}, \sigma^2)$ 'nin maximumu aynı olduğundan, (3.7) eşitliğinin logaritması alınabilir.

$$\ln L(\underline{\theta}, \sigma^2) = -\frac{n}{2} \ln(2\pi\sigma) - \frac{S(\underline{\theta})}{2\sigma^2} \quad (3.8)$$

(3.8) eşitliğindeki fonksiyonunun maximum değerinin bulunabilmesi için,

$$\frac{\partial \ln L(\underline{\theta}, \sigma^2)}{\partial \underline{\theta}} = 0$$

$$\frac{\partial \ln L(\underline{\theta}, \sigma^2)}{\partial \sigma^2} < 0$$

şartları sağlanmalıdır. Buna göre:

$$\begin{aligned} \text{i) } \frac{\partial \ln L(\underline{\theta}, \sigma^2)}{\partial \underline{\theta}} &= 0 - \frac{\partial S(\underline{\theta}) / 2\sigma^2}{\partial \underline{\theta}} \\ &\Rightarrow -\frac{\partial S(\underline{\theta})}{\partial \underline{\theta}} = 0 \end{aligned}$$

$$\text{ii) } \frac{\partial^2 \ln L(\underline{\theta}, \sigma^2)}{\partial \underline{\theta}^2} < 0 \quad \text{olduğu açıkça görülmektedir. Ayrıca bilinir}$$

ki, $S(\underline{\theta})$ 'yı minimum yapan parametre ile $-S(\underline{\theta})$ 'yı maksimum yapan parametre

aynıdır. Dikkat edilirse (i)'de elde edilen ifade En küçük Kareler tahmin edicisini vermektedir. Öyleyse hata terimleri normal dağılıma sahip olduğunda, Maximum Likelihood tahmin edicisiyle, En Küçük Kareler tahmin edicisi birbirine eşittir.

(3.4) eşitliği gözönünde tutulsun. Bu durumda $\underline{\theta}^*$ elde edilebilir,

$$\frac{\partial S(\underline{\theta})}{\partial \underline{\theta}} = \sum_{u=1}^n (Y_u - f(\underline{\xi}_u, \underline{\theta})) \sum_{i=1}^p \left[\frac{\partial f(\underline{\xi}_u, \underline{\theta})}{\partial \theta_i} \right]_{\underline{\theta}=\underline{\theta}^*} = 0$$

Burada;

$$f(\underline{\xi}, \underline{\theta}) = \mathbf{X}^T \underline{\theta}$$

olarak model doğrusal olsaydı;

$$\frac{\partial f(\underline{\xi}, \underline{\theta})}{\partial \underline{\theta}} = \mathbf{X}^T$$

elde edilecek ve $\underline{\theta}^*$ 'ın değeri bulunabilecekti. Bir başka deyişle hesaplanması kolay olacaktı. Fakat, model doğrusal olmadığından, $\underline{\theta}^*$ kolayca bulunamıyor. Zira $\frac{\partial f(\underline{\xi}, \underline{\theta})}{\partial \underline{\theta}}$ ifadesi $\underline{\theta}$ 'nın değerlerindeki de içeriyor. Yani $\frac{\partial f(\underline{\xi}, \underline{\theta})}{\partial \underline{\theta}}$ ifadesi $\underline{\theta}$ 'ya bağlı kalıyor. Bu yüzden doğrusal olmayan model için parametre tahmini sadece "iteratif" özelliklerle elde edilebilir (4,6,9,10,11). Yani İteratif Teknikler ya da İteratif Yaklaşımlar yardımıyla En Küçük Kareler Tahmini bulunabilir.

3.2.1. Doğrusal Olmayan En Küçük Karelerin Geometrisi

Doğrusal olmayan modellerin geometrisi incelendiğinde $S(\underline{\theta})$, tahmin uzayında yer alan nokta ile, $(Y_1, Y_2, \dots, Y_n)$ noktası arasındaki uzaklıkların karesini temsil ediyor. $S(\underline{\theta})$ 'nın minimumu, Y 'ye en yakın tahmin uzayının noktası P 'ye olan en küçük uzaklıktır.

Model doğrusal olmadığından tahmin uzayı çok karmaşık olabilir. Tahmin uzayı eğrilerden ya da karmaşık çizgilerden oluştuğundan parametre tahmini yaparken kullanılan Taylor Serisi açılımında kullanılan θ noktası çevresinin "doğrusal ya da düzlemsel" olduğu kabul edilir. Ancak bu şekilde karmaşık yüzeyin "doğrusal yada düzlemsel" olarak düşünülen bölümüne "Doğrusal En Küçük Kareler" uygulanabilir. Tüm bunlar yapılırken doğrusal olmayan kartezyen sistemi ve doğrusal olmayıştan dolayı noktalar arası uzaklıklar "eşit büyüklükte" değildirler. Bu durumun yaratabileceği sıkıntılara dikkat edilmelidir. Bu durumda genellikle şu yol izlenir: Tahmin uzayına bir θ_0 noktasında teğet çizilir. Daha sonra Y noktasından teğet düzleme çizilen dik yardımıyla bir θ_1 noktası elde edilir. Teğet düzlem, "doğrusal" olduğundan tahmin yüzeyindeki uzaklıklar eşit uzunlukta olacaktır. Daha sonra θ_1 noktasında teğet düzlemi oluşturulur ve Y noktasından çizilen dik yardımıyla bir θ_2 noktası elde edilir. Bu işlemlere ardışık olarak devam edilir. Tüm bunları geometrik olarak görebilme şansına her zaman sahip olunamaz. Zira parametre ve gözlem sayısı arttığında hem tahmin uzayı ve hem de örnek uzayı genişlediğinden durum oldukça karmaşıklaşır. Ayrıca çizim ya çok zor olur ya da çizim yapılamaz.

Modelin doğrusal olması durumunda $S(\underline{\theta})$ sabitinin konturları parametre uzayında elipsler oluştururlar. Burada model doğrusal olmadığından konturlar,

düzgün elipsler oluşturmayıp bazen muz biçimler, sık sıkta birçok ilmikler oluştururlar (4).

3.3. Doğrusal Olmayan Modellerin Özellikleri

Doğrusal olmayan modeller Fizik, Mühendislik çalışmaları, Biyoloji, Kimya, Sosyal Bilimler, Eczacılık ve daha birçok konuda karşımıza çıkmaktadır. Doğrusal olmayan modellerin uygulanmasında çeşitli zorluklarla karşılaşılır.

Doğrusal olmayan modeller, oluşturulması sırasındaki esnekliği nedeniyle kolaylıklar taşımaktadır. Zira doğrusal olmayan modeller, doğrusal modellerden daha az parametre ile oluşturulabilir. Fakat doğrusal olmayan modeller için deney düzenlemek, doğrusal modeller için deney düzenlemekten çok daha karmaşıktır (6, 9).

Doğrusal olmayan modellerde karşılaşılan en önemli zorluklardan biri ise iteratif tekniklerin kullanılmasıdır. Zira önce başlangıç noktasının seçimi oldukça zor bir seçimdir. Daha sonra atılacak adımın büyüklüğü ve yönü gibi sorunlara mevcut uygulanan yöntemler ile cevap bulmaya çalışılmaktadır. Ayrıca hesaplamalar sonunda elde edilen parametre tahmini değerlerinin "tam çözüm" olması oldukça zordur. Özellikle doğrusal olmayan model için parametre tahminleri yapılırken gözönünde alınan varsayımların sağlanmaması durumunda, tahminlerin sapmasız olması beklenemez (8).

BÖLÜM 4

DOĞRUSAL OLMAYAN MODELLERDE PARAMETRE TAHMİNİ

Doğrusal olmayan modellerin parametre tahmini için Doğrusallaştırma, Likelihood ve Gauss Yöntemleri incelenecektir. Her metodun anlatımı içinde önce parametre için nokta tahmini teorisi verilecektir. Daha sonra her bir metod için ayrı ayrı "Güven Bölgesi" ve "Güven Aralığı" oluşturulması ele alınacaktır. Bu konular hakkında ayrıntılı bilgi için Goldfeld (1972), Bard (1974), Duncan (1978), Nash ve Walker-Smith (1987) kaynakları incelenebilir.

4.1. Doğrusallaştırma (Linearization) Metodu

Doğrusallaştırma Metodu için model denklemi (3.3) eşitliğindeki gibi yazılabilir.

$$Y_u = f(\underline{\xi}_u, \underline{\theta}) + \varepsilon_u \quad (4.1)$$

Ayrıca $\theta_{10}, \theta_{20}, \dots, \theta_{p0}$ değerleri $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_p$ parametrelerinin ilk değerleri olarak alınır. Belirtilen değerler iterasyonların başlangıç değerleri olacağından oldukça önemlidir ve mümkün olduğunca iyi seçilmelidir. Zira "iyi seçilen" başlangıç değerleri daha az sayıda iterasyon ve minimum değere ulaşmayı kolaylaştıracak potansiyele sahip olacaktır (4, 6, 9).

Doğrusallaştırma Metodunda $f(\underline{\xi}_u, \underline{\theta})$ fonksiyonunun;

$$\underline{\theta}_0 = \begin{bmatrix} \theta_{10} \\ \theta_{20} \\ \vdots \\ \theta_{p0} \end{bmatrix}$$

noktası etrafında Taylor Serisi açılımı kullanılır. Taylor Serisi açılımı "birinci türev" lerde kesilir. Söylenenler uygulandığında,

$$f(\underline{\xi}_u, \underline{\theta}) \cong f(\underline{\xi}_u, \underline{\theta}_0) + \sum_{i=1}^p \left[\frac{\partial f(\underline{\xi}_u, \underline{\theta})}{\partial \theta_i} \right]_{\underline{\theta}=\underline{\theta}_0} \cdot (\theta_i - \theta_{i0}) \quad (4.2)$$

yazılabilir. Burada;

$$\begin{aligned} f_u^0 &= f(\underline{\xi}_u, \underline{\theta}_0) \\ \beta_i^0 &= \theta_i - \theta_{i0} \\ B_{iu}^0 &= \left[\frac{\partial f(\underline{\xi}_u, \underline{\theta})}{\partial \theta_i} \right]_{\underline{\theta}=\underline{\theta}_0} \end{aligned}$$

olarak alınıp, (4.1) modeli yaklaşık olarak;

$$Y_u = f_u^0 + \sum_{i=1}^p \beta_i^0 B_{iu}^0 + \varepsilon_u \quad \text{yazılır. O halde;}$$

$$Y_u - f_u^0 = \sum_{i=1}^p \beta_i^0 B_{iu}^0 + \varepsilon_u \quad (4.3)$$

olur. (4.3) eşitliği yalnızca "birinci derece" türevleri içerdiğinden $\underline{\theta}_0$ noktası etrafında "doğrusal" olduğu kabul edilerek "Doğrusal En Küçük Kareler" yöntemi uygulanabilir. Buna göre $\underline{\beta}_0$ 'ın EKK tahmini $\underline{b}_0$ olarak alınırsa;

$$\underline{b}_0 = (B_0^T B_0)^{-1} B_0^T (Y - \underline{f}^0) \quad (4.4)$$

elde edilir. Burada:

$$\underline{\beta}_0 = \begin{bmatrix} \beta_1^0 \\ \beta_2^0 \\ \vdots \\ \beta_p^0 \end{bmatrix}$$

$$\hat{\underline{\beta}}_0 = \underline{b}_0 = \begin{bmatrix} b_1^0 \\ b_2^0 \\ \vdots \\ b_p^0 \end{bmatrix}$$

$$\underline{Y}_0 = \begin{bmatrix} Y_1 - f_1^0 \\ Y_2 - f_2^0 \\ \vdots \\ Y_n - f_n^0 \end{bmatrix} = \underline{Y} - \underline{f}^0$$

$$B_0 = \begin{bmatrix} B_{11}^0 & B_{21}^0 & \dots & B_{p1}^0 \\ B_{12}^0 & B_{22}^0 & \dots & B_{p2}^0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ B_{1n} & B_{2n} & \dots & B_{pn} \end{bmatrix} = [B_{iu}^0]_{n \times p}$$

dir. (4.4.) eşitliğinde elde edilen $\underline{b}_0$ vektörü Hata Kareler Toplamını en küçükleyecek değerdir. Yani $\underline{b}_0$ vektörü;

$$S(\underline{\theta}) = \sum_{u=1}^n \left[Y_u - f(\underline{\xi}_u, \underline{\theta}_0) - \sum_{i=1}^p \beta_i^0 B_{iu}^0 \right]^2 \quad (4.5)$$

değerini minimum yapan değerdir.

(4.2) eşitliğinden (4.3) eşitliğine geçerken $i=1, 2, \dots, p$ değerleri için;

$\beta_i^0 = \theta_i - \theta_{i0}$ tanımlanmıştı. Elde edilen $\underline{b}_0$ vektörünü düşünerek bu eşitliği,

$$b_i^0 = \theta_{i1} - \theta_{i0}$$

şeklinde elde edilmiştir. Öyleyse bilinen b_i^0 ve başlangıç değeri olarak alınan θ_{i0} değerlerinden yeni θ değeri elde edilebilir. Yani:

$$\theta_{i1} = b_i^0 + \theta_{i0}$$

bulunur.

Buraya kadar iterasyonun ilk adımı anlatıldı. İterasyonun bundan sonraki adımlarında aynı düşünceyle yürütülür. İkinci adımda θ_{i1} , üçüncü adımda $\theta_{i2}, \dots$, ve j. adımda $\theta_{i(j-1)}$ değerleri yakın komşuluğunda (ya da etrafında) Taylor Serisine açarak aynı işlemler tekrarlanır. Söylenenler vektörel formda genelleştirerek tanımlanırsa;

$$\underline{\beta}_j = \begin{bmatrix} \beta_1^j \\ \beta_2^j \\ \vdots \\ \beta_p^j \end{bmatrix}$$

$$\hat{\underline{\beta}}_j = \underline{b}_j = \begin{bmatrix} b_1^j \\ b_2^j \\ \vdots \\ b_p^j \end{bmatrix}$$

$$\underline{Y}_j = \begin{bmatrix} Y_1 - f_1^j \\ Y_2 - f_2^j \\ \vdots \\ Y_n - f_n^j \end{bmatrix} = \underline{Y} - \underline{f}^j$$

$$B_j = \begin{bmatrix} B_{11}^j & B_{21}^j & \dots & B_{p1}^j \\ B_{12}^j & B_{22}^j & \dots & B_{p2}^j \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ B_{1n}^j & B_{2n}^j & \dots & B_{pn}^j \end{bmatrix} = [B_{iu}^j]_{n \times p}$$

ve

$$\underline{\theta}_j = \begin{bmatrix} \theta_j \\ \theta_{2j} \\ \vdots \\ \theta_{pj} \end{bmatrix}$$

olmak üzere;

$$\underline{\theta}_{j+1} = \underline{\theta}_j + \underline{b}_j \quad (4.6)$$

yazılabilir Dolayısıyla;

$$\underline{\theta}_{j+1} = \underline{\theta}_j + (B_j^T B_j)^{-1} B_j^T (\underline{Y} - \underline{f}^j) \quad (4.7)$$

olacağı açıktır.

Doğrusallaştırma yöntemiyle elde edilen iteratif noktalardan $\underline{\theta}_{j+1}$ değeri, $\underline{\theta}_j$ değerinden daima daha iyi bir nokta olmalıdır. Bu "daha iyi" olma ölçüsü ise (4.5) eşitliğiyle verilen $S(\underline{\theta})$ değeriyle belirlenmektedir. Zira her zaman için $S(\underline{\theta})$ 'nın daha küçük olması istenir. Öyleyse bulunan $\underline{\theta}$ değerleri için $S(\underline{\theta}_{j+1}) < S(\underline{\theta}_j)$ olmalıdır. Eğer bu şart sağlanıyorsa $\underline{\theta}_{j+1}, \underline{\theta}_j$ 'den daha iyi bir noktadır ve iterasyonlara devam edilir. Aksi takdirde yani, $S(\underline{\theta}_{j+1}) > S(\underline{\theta}_j)$ oluyorsa iterasyonlara son verilir ve $\underline{\theta}_j$ en iyi değer kabul edilir (2, 4, 5, 10).

Uygulamalarda daha başka durdurma kriterleride kullanılmaktadır. δ durdurma kriteri olarak tanımlanarak daha önceden "yeterince küçük" belirlenebilir. Her iterasyon sonunda aşağıdaki eşitlik kontrol edilerek karar verilir. Eğer;

$$\left| \frac{\underline{\theta}_{i(j+1)}^* - \underline{\theta}_{ij}^*}{\underline{\theta}_{ij}^*} \right| < \delta$$

oluyorsa iterasyona son verilebilir. Aynı düşünceyle aşağıdaki eşitsizlikte durdurma kriteri olarak alınabilir. Buna göre;

$$\left| \frac{S(\underline{\theta}_{j+1}^*) - S(\underline{\theta}_j^*)}{S(\underline{\theta}_j^*)} \right| < \delta$$

olduğundan iterasyonlara son verilebilir (8). Burada $\underline{\theta}^*$, $\underline{\theta}$ 'nin tahmin edilen değeridir. Aynı şekilde $S(\underline{\theta}^*)$, $S(\underline{\theta})$ 'nin tahmin değeridir ve (4.5) eşitliğinde $\underline{\theta}$ yerine $\underline{\theta}^*$ değerleri kullanılarak elde edilir.

4.1.1. Doğrusallaştırma Metodunda Güven Bölgesi ve Güven Aralığının Oluşturulması

Doğrusal olmayan model için;

$$s^2 = \frac{S(\underline{\theta}^*)}{n - p} \quad (4.8)$$

ifadesi, hala σ^2 'nin yansız tahmin edicisidir. Fakat doğrusal olmayan modeller için $(X^T X)^{-1} \sigma^2$ matrisi, artık varyans-kovaryans matrisi değildir. Bununla beraber güven bölgeleri hala aşağıdaki gibidir.

$$S(\underline{\theta}) = S(\underline{\theta}^*) \left[1 + \frac{p}{n-p} F(p, n-p, 1-\alpha) \right] \quad (4.9)$$

(4.9) eşitliğini doğrusallaştırma altında yazılabilir. Doğrusal durum için, (4.9) eşitliği $(1-\alpha)$ 'lık güven bölgesini gösteriyor. Fakat doğrusal olmayan durumda güven düzeyi $(1-\alpha)$ güven düzeyindedir denilebilir (3,4).

Doğrusallaştırma Metodu için tahmin yüzeyi düzlemsel ve tekdüze olarak güven aralığı ve güven bölgelerini her tarafta doğrusal bölgelerle örtüyor farzedilmiştir. Kaldı ki çözüm noktaları etrafında Taylor Serisine açılması bunu gösteriyor. Bundan sonra güven aralığı ve güven bölgesi Doğrusal En Küçük Kareler Metodundaki gibi oluşturulur. Buna göre (2.22) eşitliğinin bir adım önceki hali yazılırsa;

$$(\underline{\theta} - \underline{\theta}^*)^T \hat{V}^{-1} (\underline{\theta} - \underline{\theta}^*) \leq p.F(p, n-p, 1-\alpha) \quad (4.10)$$

elde edilir. Burada $\hat{V}$, varyans-kovaryans matrisini temsil etmektedir. Eğer bu eşitlikte $\hat{V}$ yerine $(X^T X)^{-1} \cdot s^2$ kullanılırsa (2.22) eşitliğine ulaşılır. Yani,

$$(\underline{\theta} - \underline{\theta}^*)^T X^T X (\underline{\theta} - \underline{\theta}^*) \leq s^2 \cdot p.F(p, n-p, 1-\alpha)$$

bulunur. Fakat $(X^T X)^{-1} s^2$ 'nin doğrusal olmayan modeller için genellikle varyans-kovaryans matrisi olmadığı belirtilmişti. Bu nedenle öncelikle, doğrusal olmayan modellerde kullanılan varyans-kovaryans matrisi bulunmalıdır. Ayrıca aynı varyans-kovaryans matrisini θ_j 'nin güven sınırı için oluşturulan;

$$|\theta_j - \theta_j^*| \leq \hat{V}_{jj}^{1/2} \cdot t_{n-p, 1-\alpha/2} \quad (4.11)$$

eşitsizlikte de kullanılacaktır (3). Burada:

$\hat{V}_{jj}$: $\hat{V}$ 'nin (j, j) . elemanıdır ($j = 1, 2, \dots, p$ olmak üzere).

4.1.2. Varyans Kovaryans Matrisinin Tahmini

Literatürde üç farklı varyans-kovaryans matrisi sık sık kullanılır. Bunlar:

$$\hat{V} = s^2 [B(\underline{\theta}^*)^T B(\underline{\theta}^*)]^{-1} \quad (4.12)$$

$$\hat{V} = s^2 [H(\underline{\theta}^*)]^{-1} \quad (4.13)$$

$$\hat{V} = s^2 [H(\underline{\theta}^*)]^{-1} [B(\underline{\theta}^*)^T \cdot B(\underline{\theta}^*)] [H(\underline{\theta}^*)]^{-1} \quad (4.14)$$

dir (3). Burada:

$B(\underline{\theta}^*): \underline{\theta}^*$ 'da $f(\xi, \underline{\theta})$ 'nın birinci türevlerinin oluşturduğu matris.

$H(\underline{\theta}^*): \underline{\theta}^*$ 'da $f(\xi, \underline{\theta})$ 'nın ikinci türevlerinden oluşan matris.

Ayrıca $s^2 = \frac{S(\underline{\theta}^*)}{n - p}$ olduğu (4.8) eşitliğinde belirtilmiştir.

Doğrullaştırma Metodunda (4.12) eşitliği ile verilen varyans-kovaryans matrisi kullanılır. Eğer dikkat edilirse (4.2) eşitliğiyle verilen Taylor Açılımı'nda yalnızca birinci türevler kullanılmıştır. Doğrusallaştırma Metodunda (4.12) eşitliğindeki varyans-kovaryans matrisinin kullanılmasındaki düşünce buradan kaynaklanmaktadır. Bu matris (4.10) eşitliğinde yerine konularak $\underline{\theta}$ parametresi için güven bölgesi ve (4.11) eşitliğinde yerine

konularak $\underline{\theta}$ parametresi için güven aralığı oluşturmaktadır. Ayrıca güven bölgesinin (4.9) eşitliği ile de oluşturulabilmesi mümkündür.

Bu arada (4.14) eşitliğindeki varyans-kovaryans matrisi duyarlılık analizi (sensitivity analysis) yardımıyla elde edilir (3).

Doğrusallaştırma Metodu'nda güven bölgeleri ve güven aralıkları kolay ve çabuk kurulur. Bu yöntemin avantajları olarak kabul edilebilecek bu unsurların yanında, oldukça fazla sayıda iterasyona rağmen çok yavaş yakınsaması ya da aniden çok büyük bir sıçrama yaparak çözüm noktasından uzaklaşması gibi dezavantajlara da sahiptir (3, 4).

4.2. Likelihood Metodu

Likelihood tahmin edicisi ile En Küçük Kareler tahmin edicisinin birbirine denk olduğu 3.2. Konusunda belirtilmişti. Fakat doğrusal olmayan modellerde Likelihood Metodu yalnızca parametreler için güven aralıkları ve güven bölgeleri oluşturmak amacıyla kullanılır.

4.2.1 Likelihood Metodunda Güven Bölgesi ve Güven Aralığının Oluşturulması

Doğrusal olmayan modeller için yapılan tahminlerde ilgili noktanın yakın komşuluğunu, bir başka deyişle etrafının düzlemsel olduğu kabul edilmiştir (4,8). Bu nedenle $\underline{\theta}$ parametresi için oluşturulacak güven bölgesinin Doğrusal En Küçük Karelerdeki gibi olması beklenebilir. Buna göre: Likelihood güven bölgesi:

$$S(\underline{\theta}) - S(\underline{\theta}^*) = s^2 \cdot p \cdot F_{(p, n-p, 1-\alpha)} \quad (4.15)$$

olarak bulunur. Dikkat edilirse Doğrusal En Küçük Karelerdeki (2.20) eşitliğine benzerdir. Ayrıca (4.15) eşitliğinden θ_j parametreleri için aralık sınırlarını oluşturan noktalar,

$$S(\underline{\theta}) - S(\underline{\theta}^*) = s^2 \cdot F_{(1, n-p, 1-\alpha)} \quad (4.16)$$

olacaktır. Dikkatle incelendiğinde (4.16) eşitliği oluşturulan güven bölgesi, Doğrusallaştırma Metodu ile elde edilen güven bölgesinin tahmin uzayındaki görüntüsüdür (3).

Likelihood güven bölgeleri ve güven aralıkları, Doğrusallaştırma Metodu güven bölgeleri ve güven aralıklarından daha fazla çekicidir. Çünkü Likelihood Metodu güven bölgesi, (4.15) eşitliğinde $S(\underline{\theta}) - S(\underline{\theta}^*)$ değeri yerine yazılıp, parametrelerden birinin sabit tutulması sonunda, diğer parametrenin alabileceği değerler bulunarak ve kontur sınırları olarak işaretlenerek oluşturulur. Bu şekilde oluşturulan güven bölgesinin, Doğrusallaştırma Metodunda olduğu gibi tam bir elips olamayıp, bazen elipsten farklılaşma olabileceğini ortaya çıkartacaktır. Zira elips bazen içe ilmik ya da çukur yapabileceği gibi, tam tersi bir harekette izleyebilir. Bulunan güven bölgesi ise parametrelerin karşılıklı olarak alabilecekleri mümkün değerler olacağından, doğrusal olmayan modellerdeki parametreler için en gerçekçi güven bölgesi olarak düşünülebilir.

Likelihood Metodu aynı zamanda bazı zorluklara da sahiptir. Özellikle hesaplamada zorluklarla karşılaşmaktadır. Her nokta için ayrı ayrı hesaplama yapılması ve bu noktalarla, karşılık gelen değerlerin koordinat düzleminde tek tek işaretlenmesi oldukça zor ve zaman alıcı bir işlemdir. Ayrıca Likelihood Metodu yeterli sayıda veri istemektedir. Dolayısıyla veri toplamının zorluğu yaşanabilir. Verilerin içinde kullanışlı olmayan veriler de bulunabilir. Bu

nedenle hatalı güven bölgesi ve güven aralığının hesaplanmasına engel olabilmek için kullanışlı olmayan veriler çıkarılarak güven bölgesi ve güven aralığı yeniden kurulmalıdır (3). Tüm bunlara ilave olarak parametre sayısının artması, kontur çizimini zorlaştıracaktır. Modelin asli eğriliği ve parametre etkisi eğrilik ölçüsü de güven bölgesinin doğru oluşturulmasında güçlük çıkartabilir. Bu nedenle bu etkilerin giderme yoluna gidilmesi gereklidir.

4.3. Gauss Metodu

Gauss Metodu doğrusal olmayan modellerde parametre tahmini için kullanılan bir başka yöntemdir. Gauss yöntemi herşeyden önce bir iteratif tekniktir. Bu nedenle önce iteratif tekniklerin nasıl bir yöntem izledikleri incelenmelidir.

$\Phi(\underline{\theta})$ gibi bir fonksiyonu minimum (ya da maksimum) yapacak $\underline{\theta}$ noktasını ararken önce $\underline{\theta}_0$ gibi bir başlangıç noktası ile iterasyonlara başlanır. Her iterasyon sonunda elde edilen noktanın $\Phi(\underline{\theta})$ fonksiyonunu bir önceki değerinden daha iyi bir değere taşıması istenir. Yani:

$$\text{Minimum problemi} \quad : \quad \Phi(\underline{\theta}_i) > \Phi(\underline{\theta}_{i+1}) \quad (4.17)$$

$$\text{Maksimum problemi için} \quad : \quad \Phi(\underline{\theta}_i) < \Phi(\underline{\theta}_{i+1}) \quad (4.18)$$

olmalıdır. Böylece yapılacak iterasyonlar sonunda bir $\underline{\theta}^*$ noktasının $\underline{\theta}$ parametre değerine yakınsaması beklenir. Burada

$\Phi(\underline{\theta}_i)$: $\underline{\theta}_i$ noktasında $\Phi(\underline{\theta})$ fonksiyonun değeri

$\underline{\theta}^*$: $\Phi(\underline{\theta})$ fonksiyonunu "en iyi" yapan parametre değeri.

4.3.1. Newton Metodu

Gauss Metodunu iyi anlayabilmek için öncelikle Newton Metodu incelenmelidir.

$Q(\underline{\theta})$; $\Phi(\underline{\theta})$ fonksiyonun $\underline{\theta}_i$ noktası etrafında Taylor Serisine açılmış haline denk olsun. Öyle ise:

$$Q(\underline{\theta}) = \Phi(\underline{\theta}_i) + q(\underline{\theta}_i)^T (\underline{\theta} - \underline{\theta}_i) + \frac{1}{2} (\underline{\theta} - \underline{\theta}_i)^T H(\underline{\theta}_i) (\underline{\theta} - \underline{\theta}_i) \quad (4.19)$$

bulunur. Burada: $q(\underline{\theta}_i)$, $\underline{\theta}_i$ 'de birinci türevler vektörü (gradient vektörü) ve $H(\underline{\theta}_i)$, $\underline{\theta}_i$ 'de ikinci türevler matrisi (Hessein Matrisi)'dir.

Yani:

$$q(\underline{\theta}_i) = \left. \frac{\partial \Phi(\underline{\theta})}{\partial \underline{\theta}} \right|_{\underline{\theta}=\underline{\theta}_i} \quad (4.20)$$

$$H(\underline{\theta}_i) = \left. \frac{\partial^2 \Phi(\underline{\theta})}{\partial \underline{\theta}^2} \right|_{\underline{\theta}=\underline{\theta}_i} \quad (4.21)$$

Taylor Serisi Açılımının teorisinden dolayı $Q(\underline{\theta}) \cong \Phi(\underline{\theta})$ olduğu bilinmektedir. Bu nedenle $Q(\underline{\theta})$ üzerinde yapılacak tüm işlemlerin $\Phi(\underline{\theta})$ içinde kabul edilebileceği açıktır. O halde bulunmak istenen noktayı yani, $Q(\underline{\theta})$ ifadesini minimum yapacak değeri bulunmalıdır. Bunun için (4.19) eşitliğinde minimum aranmalıdır. Bulunan noktanın minimum olabilmesi için:

$$i) \quad \frac{\partial Q(\underline{\theta})}{\partial \underline{\theta}} = 0$$

$$\text{ii) } \frac{\partial^2 Q(\underline{\theta})}{\partial \underline{\theta}^2} > 0$$

şartlarının her ikisinin sağlanması gerekir. Buna göre:

$$\frac{\partial Q(\underline{\theta})}{\partial \underline{\theta}} = \underline{q}_i + H_i(\underline{\theta} - \underline{\theta}_i) \quad (4.22)$$

Burada:

$\underline{q}_i$: $\underline{\theta}_i$ noktasında $q(\underline{\theta})$ 'nın değerini gösteren vektör,

H_i : $\underline{\theta}_i$ noktasında $H(\underline{\theta})$ matrisinin değerlerini veren matristir.

(i) şartının sağlanabilmesi için (4.22) eşitliği 0'a eşitlensin ve H_i matrisinin nonsingular olduğu varsayımı altında eşitlik çözüldüğünde;

$$\begin{aligned} \underline{q}_i + H_i(\underline{\theta} - \underline{\theta}_i) &= \underline{0} \\ \Rightarrow \underline{\theta}_{i+1} &= \underline{\theta}_i - H_i^{-1} \cdot \underline{q}_i \end{aligned} \quad (4.23)$$

elde edilir. $\underline{\theta}_{i+1}$ 'in $Q(\underline{\theta})$ 'yı minimum yapması için gereken (ii) şartı aranmalıdır.

Öyleyse:

$$\frac{\partial^2 Q(\underline{\theta})}{\partial \underline{\theta}^2} = H$$

olur. H matrisi pozitif tanımlı olduğunda (ii) şartı her zaman sağlanacaktır. Öyleyse $\underline{\theta}_{i+1}$ 'in $Q(\underline{\theta})$ 'yı minimum yapacaktır. Fakat $Q(\underline{\theta})$, $\Phi(\underline{\theta})$ fonksiyonunu iyi temsil etmiyorsa bir iterasyon sonunda minimuma ulaşamaz. Özellikle $\Phi(\underline{\theta})$ fonksiyonu karesel bir iterasyonda minimuma ulaşacaktır. Bu minimumu veren noktada $\underline{\theta}_{i+1}$ olacaktır. Ayrıca H matrisi negatif tanımlı ya da tanımsız iken metot uygulanamayacaktır (2).

$\Phi(\underline{\theta})$ fonksiyonu doğrusal olmadığından şekli, tepecikler ve çukurlardan, özetle karmaşık bir yapıdan oluşacaktır. Eğer iterasyon uygun adım büyüklüğü ile yürütülmez ise minimumdan aşırı uzaklaşabilecektir. Çünkü $-H^{-1} \cdot \underline{q}$ adımı minimum etrafında iken bir anda yanlış bir noktaya götürebilir. Bunu önleyebilmek amacıyla ρ , adım büyüklüğünün uygun büyüklükte olabilmesi için kullanılır ve $0 \leq \rho \leq 1$ olarak tanımlanır. ρ değerinin belirlenebilmesi amacıyla Extrapolasyon-Interpolasyon işlemleri tanımlanmıştır (2, 8).

Buraya kadar anlatılan Newton Yöntemi'nin, H matrisinin pozitif tanımlı olmadığına işlemeyeceği açıktır. Ayrıca ikinci türevlerin oluşturduğu H matrisi hesaplanırken, amaç fonksiyonu çok karmaşık olduğunda hesaplamalar çok yavaş ve zor olur. Bu nedenlerle H matrisinin yerini alan N matrisinin daima pozitif tanımlı olduğu ve hesaplamaları nispeten daha kolay olan Gauss Metodu kullanılmalıdır.

4.3.2. Gauss Tahmin Edicisinin Elde Edilmesi

$f(\xi, \underline{\theta})$, doğrusal olmayan bir fonksiyondur. Bu fonksiyonun Doğrusal Olmayan En Küçük Kareler denkliği yazıldığında:

$$\Phi(\underline{\theta}) = \sum_{u=1}^n (y_u - f(\xi_u, \underline{\theta}))^2 \quad (4.24)$$

Burada; $\Phi(\underline{\theta})$, Doğrusal Olmayan En Küçük Kareler; y_u , bağımlı değişkenin u. değeri ve $f(\xi_u, \underline{\theta})$ ise u. bağımsız değişkenlerin $f(\xi_u, \underline{\theta})$ fonksiyonunda aldığı değerleri göstermektedir. (4.24) eşitliğine dikkat edildiğinde $y_u - f(\xi_u, \underline{\theta})$ değerinin e_u değerine eşitliği görülür. Zira e_u ifadesi hata terimi değeridir. Öyleyse (4.24) eşitliği,

$$\Phi(\underline{\theta}) = \sum_{u=1}^n e_u^2 \quad (4.25)$$

halini alacaktır. (4.25) eşitliğinden gradyant vektörü ve Hessein Matrisi aşağıdaki gibi elde edilir.

$$q_\alpha = \frac{\partial \Phi(\underline{\theta})}{\partial \theta_\alpha} = 2 \sum_{u=1}^n e_u = -2 \sum_{u=1}^n e_u \cdot \frac{\partial f(\underline{\xi}_u, \underline{\theta})}{\partial \theta_\alpha} \quad (4.26)$$

q_α , $\Phi(\underline{\theta})$ fonksiyonunun α . parametreye göre birinci türevdir.

$$H_{\alpha\beta} = \frac{\partial^2 \Phi(\underline{\theta})}{\partial \theta_\alpha \partial \theta_\beta} = -2 \sum_{u=1}^n e_u \cdot \frac{\partial^2 f(\underline{\xi}_u, \underline{\theta})}{\partial \theta_\alpha \partial \theta_\beta} + 2 \sum_{u=1}^n \left(\frac{\partial f(\underline{\xi}_u, \underline{\theta})}{\partial \theta_\alpha} \right) \left(\frac{\partial f(\underline{\xi}_u, \underline{\theta})}{\partial \theta_\beta} \right) \quad (4.27)$$

$H_{\alpha\beta} \cdot \Phi(\underline{\theta})$ fonksiyonunun α . parametreye göre alınan türevden sonra elde edilen q_α gradyant vektörünün β . parametreye göre türevinin alınmasıyla bulunan Hessian Matrisi değeridir. Burada $\alpha=1, 2, \dots, p$ ve $\beta=1, 2, \dots, p$ 'dir.

Gauss Metodunda, (4.27) eşitliğiyle gösterilen Hessian Matrisinde yer alan $-2 \sum_{u=1}^n e_u \cdot \frac{\partial^2 f(\underline{\xi}_u, \underline{\theta})}{\partial \theta_\alpha \partial \theta_\beta}$ ifadesi ihmal edilerek ortaya çıkan yeni matris N

olarak tanımlanır. Daha sonra ise H matrisinin yerine N matrisi kullanılarak Newton Metodundaki gibi işlemler yürütülebilir. Burada N matrisi tanımlanırsa;

$$N = 2 \sum_{u=1}^n \left(\frac{\partial f(\underline{\xi}_u, \underline{\theta})}{\partial \theta_\alpha} \right) \left(\frac{\partial f(\underline{\xi}_u, \underline{\theta})}{\partial \theta_\beta} \right) \quad (4.28)$$

bulunur (2). N matrisi yaklaşık olarak H matrisine eşittir. Zira ihmal edilen ifade oldukça küçüktür. Bu nedenle pek fazla sakınca yaratmayacağı gibi çok

önemli faydalar sağlamaktadır. Çünkü N matrisi daima pozitif tanımlıdır. Ayrıca hesaplama gücünü önemli ölçüde azaltılmıştır.

Elde edilen N matrisinin (4.19) eşitliğinde yerine koyulmasıyla

$$Q(\underline{\theta}) = \Phi(\underline{\theta}_i) + \mathbf{q}_i^T (\underline{\theta} - \underline{\theta}_i) + (\underline{\theta} - \underline{\theta}_i)^T \mathbf{N}_i (\underline{\theta} - \underline{\theta}_i) \quad (4.29)$$

eşitliği bulunur. Bulunan $Q(\underline{\theta}_i)$, $\Phi(\underline{\theta}_i)$ fonksiyonunun $\underline{\theta}_i$ komşuluğunda ve N matrisi etrafında ikinci derece açılımıdır. Bu nedenle $\Phi(\underline{\theta})$ fonksiyonunun minimumu ile $Q(\underline{\theta})$ 'nın minimumu birbirine yakındır. $Q(\underline{\theta})$ 'nın En Küçük Kareler çözümü, Newton Metodunda bulunduğu gibi elde edilirse;

$$\underline{\theta}_{i+1} = \underline{\theta}_i - \mathbf{N}_i^{-1} \mathbf{q}_i \quad (4.30)$$

olur. Daha önce belirtilen adım büyüklüğü hesaba alındığında (4.30) eşitliği

$$\underline{\theta}_{i+1} = \underline{\theta}_i - \rho \cdot \mathbf{N}_i^{-1} \mathbf{q}_i \quad (4.31)$$

halini alır (2, 8).

4.3.3. Gauss Metodunun İstatistiksel Özellikleri

Bu bölümde, Gauss Metodunun Doğrusal Olmayan En Küçük Kareler tahmin edicisini bulmak için niçin kullanıldığının üzerinde durulacaktır. Bunun için işlemler moment fonksiyonunu içeren genel bir Ψ fonksiyonu ile yürütülecektir. İşlemlerde yer alan moment fonksiyonu Hata Kareler Toplamıdır. Yani:

$$M(\underline{\theta}) = \sum_{u=1}^n \mathbf{e}_u \cdot \mathbf{e}_u \quad (4.32)$$

dur. Bu şekilde, moment fonksiyonu içeren En Küçük Kareler ve Maximum Likelihood gibi tahmin ediciler bulunmuştu. bundan sonrası için işlmelerin yürütüleceği fonksiyon,

$$\Phi(\underline{\theta}) = \Psi(M(\underline{\theta})) \quad (4.33)$$

olarak tanımlansın. Genel çözüm adımlarını uygulayabilmek için gradyant vektörünün ve Hessein matrisinin, dolayısıyla N matrisinin elde edilmesi gereklidir.

$$q_{\alpha} = \frac{\partial \Phi(\underline{\theta})}{\partial \theta_{\alpha}} = \sum_{a,b} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial M_{ab}} \right) \left(\frac{\partial M_{ab}}{\partial \theta_{\alpha}} \right) \quad (4.34)$$

Burada:

$$\frac{\partial M_{ab}}{\partial \theta_{\alpha}} = \sum_{u=1}^n \left(\mathbf{e}_{ua} \cdot \frac{\partial \mathbf{e}_{ub}}{\partial \theta_{\alpha}} + \mathbf{e}_{ub} \cdot \frac{\partial \mathbf{e}_{ua}}{\partial \theta_{\alpha}} \right) \quad (4.35)$$

(4.35) ifadesi simetrik olduğundan (4.34) eşitliğindeki gradyant vektörünün yeniden düzenlenmesiyle

$$q_{\alpha} = \sum_{u,a,b} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial M_{ab}} \right) \left(\mathbf{e}_{ua} \frac{\partial \mathbf{e}_{ub}}{\partial \theta_{\alpha}} + \mathbf{e}_{ub} \cdot \frac{\partial \mathbf{e}_{ua}}{\partial \theta_{\alpha}} \right)$$

$$q_{\alpha} = 2 \cdot \sum \left(\frac{\partial \Psi}{\partial M_{ab}} \right) \mathbf{e}_{ua} \left(\frac{\partial \mathbf{e}_{ub}}{\partial \theta_{\alpha}} \right) \quad (4.36)$$

elde edilir. Buna ilave olarak Hessien matrisi ise

$$\begin{aligned}
H_{\alpha,\beta} = & 2 \sum_{u,a,b} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial M_{ab}} \right) \left(\frac{\partial e_{ua}}{\partial \theta_\alpha} \right) \left(\frac{\partial e_{ub}}{\partial \theta_\beta} \right) \\
& + 2 \sum_{u,a,b} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial M_{ab}} \right) e_{ua} \left(\frac{\partial^2 e_{ub}}{\partial \theta_\alpha \partial \theta_\beta} \right) \\
& + 4 \sum_{u,a,b} \sum_{\eta,c,d} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial M_{ab} \partial M_{cd}} \right) e_{ua} \left(\frac{\partial e_{ub}}{\partial \theta_\alpha} \right) e_{\eta c} \left(\frac{\partial e_{\eta d}}{\partial \theta_\beta} \right) \quad (4.37)
\end{aligned}$$

olarak bulunur.

Görüldüğü gibi e_u artık değerleri ikinci türevlerde çoğalıyor. Ayrıca $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial M_{ab} \partial M_{cd}}$ ifadesi çok küçüktür. Çok küçük olduğu düşünülen ifadeler (4.37) eşitliğinden çıkartıldıktan sonra N matrisi şöyle elde edilir.

$$N_{\alpha\beta} = 2 \sum_{u,a,b} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial M_{ab}} \right) \left(\frac{\partial e_{ua}}{\partial \theta_\alpha} \right) \left(\frac{\partial e_{ub}}{\partial \theta_\beta} \right) \quad (4.38)$$

Bu şekilde Gauss Metodunun özelliği olan Hessien matrisi yerine kullanılan N matrisi ve gradyant vektörü yeniden oluşturulsun:

$$q = -2 \sum_{u=1}^n B_u^T \cdot \Gamma \cdot e_u \quad (4.39)$$

$$N = 2 \sum_{u=1}^n B_u^T \cdot \Gamma \cdot B_u \quad (4.40)$$

Burada;

$$B_{u,a,\alpha} = -\frac{\partial e_{ua}}{\partial \theta_\alpha} = \frac{\partial f_\alpha(\xi_u, \theta)}{\partial \theta_\alpha} \quad (4.41)$$

$$\Gamma_{a,b} = \frac{\partial \psi}{\partial M_{ab}} \quad (4.42)$$

olarak tanımlanmıştır (2).

Gauss Metodunda parametrenin i. iterasyon değeri (4.30) eşitliğinde şu şekilde bulunmuştur:

$$\underline{\theta}_{i+1} = \underline{\theta}_i - N_i^{-1} \cdot \underline{q}_i \quad (4.43)$$

Bu ifadeden,

$$N_i \cdot \underline{v}_i = \underline{q}_i$$

olduğu ortaya çıkar. Son bulunan eşitlikte (4.40) ve (4.39) eşitliğindeki N ve $\underline{q}$ değerleri yazıldığında

$$\sum_{u=1}^n B_u^T \Gamma B_u \cdot \underline{v} = \sum_{u=1}^n B_u^T \Gamma e_u$$

olarak ifade edilebilecek bir regresyon probleminin normal denklemi durumundadır.

Varyans-kovaryans matrisinin aşağıdaki gibi olduğu farzedilsin.

$$E(e_u - B_u \underline{v})(e_u - B_u \underline{v}) = \delta \cdot \Gamma^{-1}$$

Buradan minimumu aranılan ve moment fonksiyonunu içeren denklik;

$$\Phi_i(\underline{v}) \equiv \sum_{u=1}^n (e_u - B_u \underline{v}) \Gamma(e_u - B_u \underline{v}) \quad (4.45)$$

şeklinde ifade edilebilir. Bulunan (4.45) eşitliğine dikkat edilirse bir doğrusal regresyon problemine benzemektedir. Öyleyse Gauss çözümleri ile bir doğrusal regresyon probleminin çözümlerine ulaşabilmektedir. Zira Gauss Metodunun her bir iterasyon çözümü bunu göstermektedir (2).

4.3.4. Gauss Metodunda Güven Bölgesi ve Güven Aralığının Oluşturulması

İterasyonlar sonunda ulaşılan en iyi $\underline{\theta}$ noktasının $\underline{\theta}^*$ olduğu farzedilsin. $\underline{\theta}$ için $\underline{\theta}^*$ 'dan yararlanarak güven bölgesi ve güven aralığını oluşturmanın aşamalarına ε - farksızlık bölgesi yaklaşımı ile başlansın.

$\Phi(\underline{\theta}^*)$, $\underline{\theta}^*$ noktasında $\Phi(\underline{\theta})$ fonksiyonunun değeri olmak üzere ve ε keyfi olarak alındığında:

$$|\Phi(\underline{\theta}) - \Phi(\underline{\theta}^*)| \leq \varepsilon \quad (4.46)$$

olması $\underline{\theta}^*$ 'ın tercih edilme nedenidir.

$\Phi(\underline{\theta})$ sürekli ve $\underline{\theta}^*$, $\Phi(\underline{\theta})$ 'nın tek serbest minimumu olduğunda, ε 'nun yeterince küçük bir pozitif değeri için ε -farksızlık bölgesi, p boyutlu parametre uzayında $\underline{\theta}^*$ 'ı çevreleyen bir alandır.

$\underline{\theta}^*$ noktasının yakın komşuluğunda $\Phi(\underline{\theta})$ 'nın Taylor Serisi açılarak.

$$\Phi(\underline{\theta}) \approx \Phi(\underline{\theta}^*) + \underline{q}^{*T} (\underline{\theta} - \underline{\theta}^*) + \frac{1}{2} (\underline{\theta} - \underline{\theta}^*) H^* (\underline{\theta} - \underline{\theta}^*) \quad (4.47)$$

şeklinde yazılabilir.

Bu son eşitlikte $\underline{q}^*$, $\underline{\theta}^*$ noktasında gradyant vektörü ve H^* , $\underline{\theta}^*$ noktasında Hessein Matrisi değeridir.

$\underline{\theta} = \underline{\theta}^*$ olduğunda $\underline{q}^* = 0$ olacaktır. Bu nedenle (4.47) eşitliğinde gerekli irdeleme yapıldığında,

$$\Phi(\underline{\theta}) \approx \Phi(\underline{\theta}^*) + \frac{1}{2}(\underline{\theta} - \underline{\theta}^*)^T H^* (\underline{\theta} - \underline{\theta}^*) \quad (4.48)$$

elde edilir. (4.48) eşitliğinin sağ tarafındaki $\Phi(\underline{\theta}^*)$ diğer tarafa alınır ve (4.46) eşitliği dikkate alınırsa:

$$\left| (\underline{\theta} - \underline{\theta}^*)^T H^* (\underline{\theta} - \underline{\theta}^*) \right| \leq 2\varepsilon \quad (4.49)$$

yazılabilir (2,8). Dikkat edilirse (4.49) eşitliğindeki denklik p serbestlik derecesi ile χ^2 (ki-kare) dağılır. Öyleyse,

$$(\underline{\theta} - \underline{\theta}^*)^T H^* (\underline{\theta} - \underline{\theta}^*) \leq 2\varepsilon \quad (4.50)$$

eşitliği p boyutlu elipstir.

$j=1,2,3,...,p$ olmak üzere (4.50) eşitliğinde θ_j değeri için güven aralığı:

$$\theta_j^* - (2\varepsilon / H_{jj}^*)^{1/2} \leq \theta_j \leq \theta_j^* + (2\varepsilon / H_{jj}^*)^{1/2} \quad (4.51)$$

olarak yazılabilir.

ε -farksızlık bölgesi yaklaşımında yapılan işlemlerde $\underline{\theta}^*$ parametresinin H^{*-1} varyans-kovaryans matrisiyle normal dağıldığı varsayımı olduğu unutulmamalıdır. Ancak bu şekilde daha önce belirtilen ε -farksızlık bölgesi p serbestlik derecesi χ^2 (ki-kare) dağılacaktır.

$\underline{\theta}^*$ parametresi için oluşturulan güven bölgesi ve güven aralıkları H matrisinin pozitif tanımlı olması ile oluşturulabilmektedir. Eğer Gauss Metodunda olduğu gibi H matrisi yerine N matrisi kullanılırsa pozitif tanımlı olma şartı sağlanacaktır. Öyleyse H^* matrisi yerine N^* matrisi kullanılarak $\underline{\theta}^*$ parametresi için güven bölgesi ve güven aralığı (4.50) ve (4.51) eşitliklerinden oluşturulur. Bu durumda $\underline{\theta}^*$ için güven bölgesi

$$(\underline{\theta} - \underline{\theta}^*) N^* (\underline{\theta} - \underline{\theta}^*) \leq 2 \cdot \varepsilon \quad (4.52)$$

ve güven aralığı;

$$\theta_j^* - (2\varepsilon / N_{jj}^*)^{1/2} \leq \theta_j \leq \theta_j^* + (2\varepsilon / N_{jj}^*)^{1/2}$$

olarak elde edilir. Burada $j=1, 2, \dots, p$ ve N_{jj}^* , N^* matrisinin (j, j) elemanıdır. N^* ise $\underline{\theta}^*$ noktasında N matrisinin değeridir.

Buraya kadar ε -farksızlık yaklaşımı kullanıldı. Şimdi ise daha farklı bir yaklaşım kullanarak güven bölgesinin oluşturulması incelensin.

$V_{\underline{\theta}}$, varyans-kovaryans matrisi olmak ve 4.3.5 konusunda ayrıntılı olarak incelemek üzere θ_j için Gauss Güven Aralığı,

$$|\theta_j - \theta_j^*| \leq [V_{\underline{\theta}}]^{1/2} \cdot t_{n-p, \alpha} \quad (4.53)$$

ve ayrıca

$$(\theta - \theta^*)^T V_{\theta}^{-1} (\theta - \theta^*) \leq \chi_{(p, \alpha)}^2 \quad (4.54)$$

olacağı açıktır. Bu tanımlamadan sonra "doğrusallaştırma" yaklaşımı ile θ için güven bölgesi tanımlanabilmektedir.

Model denklemi $f(\xi, \theta)$ olmak üzere u . denemeye ilişkin bir deneyin modeli $f(\xi_u, \theta)$ değerini bulunan θ^* yakın komşuluğunda Taylor Serisine açılımı aşağıdaki gibi yazılır:

$$f(\xi_u, \theta) \approx f(\xi_u, \theta^*) + \frac{\partial f(\xi_u, \theta)}{\partial \theta} (\theta - \theta^*)$$

Bu açılımda dikkat edilirse $\frac{\partial f(\xi_u, \theta)}{\partial \theta} = B_u$ olduğu görülür. Zira bu tanımlama

(4.41) eşitliğinde yapılmıştı. Bu eşitlikte oluşacak B matrisinin $(n \times p)$ boyutlu olduğu açıktır. Burada 4.1 konusunda verilen (Linearization) Doğrusallaştırma Metodundaki yaklaşım gibi eşitliğin sağ tarafındaki $f(\xi_u, \theta)$, eşitliğin diğer tarafında atılarak işlemler yapılır. Sonunda $(\theta - \theta^*)$ değerinin sahip olduğu varyans-kovaryans matrisinin değerine göre güven bölgesi oluşturulacaktır. Bu nedenle "bu özel güven bölgeleri" daha sonraki özel varyans-kovaryans matrisi formları tanımlandıktan sonra verilecektir. Fakat burada genel bir form oluşturulmalıdır.

θ değerinin varyans-kovaryans matrisi V_{θ} olduğu farzedilsin. Öyle ise aşağıda tanımlanan τ , p serbestlik derecesi ile χ^2 (ki-kare) dağılacaktır. Bu eşitlik (4.54) eşitliğiyle aynıdır.

$$\tau \equiv (\theta - \theta^*)^T V_{\theta}^{-1} (\theta - \theta^*) \quad (4.55)$$

Çoklu Doğrusal Regresyonun tanımından aşağıdaki φ eşitliğinin $n-p$ serbestlik derecesi ve τ 'den bağımsız olarak χ^2 dağılır.

$$\varphi = [\underline{Y} - f(\underline{\xi}, \underline{\theta}^*)] V^{-1} [\underline{Y} - f(\underline{\xi}, \underline{\theta}^*)] \quad (4.56)$$

Bu tanımlardan sonra aşağıdaki eşitlik yazılabilir:

$$\frac{(n-p)\tau}{p\varphi} \equiv \frac{(n-p)(\underline{\theta} - \underline{\theta}^*) V_{\underline{\theta}}^{-1} (\underline{\theta} - \underline{\theta}^*)}{p [\underline{Y} - f(\underline{\xi}, \underline{\theta}^*)]^T V^{-1} [\underline{Y} - f(\underline{\xi}, \underline{\theta}^*)]} \approx F_{(p, n-p, 1-\alpha)} \quad (4.57)$$

(2) Bundan sonra $V_{\underline{\theta}}$ 'nın değişik durumlardaki formuna göre güven bölgesi (4.57) eşitliğinden hesaplanabilir. Fakat öncelikle $V_{\underline{\theta}}$ varyans-kovaryans matrisinin elde edilmesi gerekir.

4.3.5. Varyans Kovaryans Matrisinin Tahmini

$\Phi(\underline{\theta})$ fonksiyonunun $\underline{\theta}^*$ noktasında minimum olduğu biliniyor $\Phi(\underline{\theta}^*)$, $\Phi(\underline{\theta})$ fonksiyonunun "en iyi" değeridir. Ayrıca $\Phi(\underline{\theta}) = \Phi(\underline{\theta}, W)$ yazılabilir. Bu ise $\Phi(\underline{\theta}^*) = \Phi(\underline{\theta}^*, W)$ olmasını gerektirir. Buradaki W değerleri gözlenen değerlerine aynı deneyin farklı denemelerinde bağımsız değişken(ler)in aynı değerlerine karşılık bağımlı değişken farklı değerler alabilmektedir. Bunun sonucu olarak gözlem değerleri gerçek değerlerinden δw kadar farklılık gösterecektir. Dolayısıyla bu farklılık parametre değerlerinde de yansıtacaktır. Bu durumda aşağıdaki sonuçlar yazılabilir:

$$\delta \underline{\theta}^* = \underline{\theta} - \underline{\theta}^* \Rightarrow \underline{\theta} = \underline{\theta}^* + \delta \underline{\theta}^*$$

ve

$$W = W + \delta w$$

Bu değerleri kullanarak $\Phi(\underline{\theta}, W)$ fonksiyonunu, $\underline{\theta}^*$ 'in yakın komşuluğunda irdelendiğinde, yeni minimum biraz ötelenmiş olarak $\underline{\theta}^* + \delta \underline{\theta}^*$ olacaktır. O halde:

$$\frac{\partial \Phi(\underline{\theta}, W)}{\partial \underline{\theta}} = \frac{\partial \Phi(\underline{\theta}^* + \delta \underline{\theta}^*, W + \delta W)}{\partial \underline{\theta}} = \underline{0} \quad (4.58)$$

dır. Çünkü ulaşılan "en iyi" $\underline{\theta}^*$ noktasında gradyant vektörü 0 (sıfır) olur. Bu ifade dikkate alınarak Taylor Serisinden faydalanarak aşağıdaki eşitlik tanımlanabilir:

$$\frac{\partial^2 \Phi(\underline{\theta}, W)}{\partial \underline{\theta}^2} \cdot \delta \underline{\theta}^* + \frac{\partial^2 \Phi(\underline{\theta}, W)}{\partial \underline{\theta} \partial W} \delta W \approx 0 \quad (4.59)$$

(4.59) eşitliğinde $\left. \frac{\partial^2 \Phi(\underline{\theta}, W)}{\partial \underline{\theta}^2} \right|_{\underline{\theta}=\underline{\theta}^*} = H^*$ olduğu açıktır. Çünkü H matrisinin ikinci derece türevlerin oluşturduğu bir matris olduğu bilinmektedir. Öyleyse (4.59) eşitliğinden,

$$\delta \underline{\theta}^* = -H^{*-1} \left(\frac{\partial^2 \Phi(\underline{\theta}, W)}{\partial \underline{\theta} \partial W} \right) \cdot \delta W \quad (4.60)$$

bulunur (2, 8). Buradan θ 'ya ait varyans-kovaryans matrisi;

$$V_{\underline{\theta}} = E[\delta \underline{\theta}^* \cdot \delta \underline{\theta}^{*T}] \quad (4.61)$$

olarak tanımlanır. (4.60) eşitliğindeki değerler (4.61) eşitliğinde yerine koyulduğunda;

$$V_{\underline{\theta}} = E \left[H^{*-1} \frac{\partial^2 \Phi(\underline{\theta}, W)}{\partial \underline{\theta} \partial W} \cdot \delta W \delta W^T \frac{\partial^2 \Phi(\underline{\theta}, W)^T}{\partial \underline{\theta} \partial W} \cdot H^{*-1} \right] \quad (4.62)$$

olacaktır. Burada H^* ve $\frac{\partial^2 \Phi(\underline{\theta}, W)}{\partial \underline{\theta} \partial W}$ değerleri $\underline{\theta} = \underline{\theta}^*$ 'da hesaplandığından sabittirler. Bu durumda:

$$V_{\underline{\theta}} = H^{*-1} \frac{\partial^2 \Phi(\underline{\theta}, W)}{\partial \underline{\theta} \partial W} E[\delta W \cdot \delta W^T] \frac{\partial^2 \Phi(\underline{\theta}, W)}{\partial \underline{\theta} \partial W} \cdot H^{*-1} \quad (4.63)$$

yazılabilir (2, 3, 8). Ayrıca $E[\delta W \cdot \delta W^T] = V_w$ olduğundan:

$$V_{\underline{\theta}} = H^{*-1} \cdot \frac{\partial^2 \Phi(\underline{\theta}, W)}{\partial \underline{\theta} \partial W} \cdot V_w \cdot \frac{\partial^2 \Phi(\underline{\theta}, W)}{\partial \underline{\theta} \partial W} \cdot H^{*-1} \quad (4.64)$$

bulunur. Burada V_w , W veri setinin varyans-kovaryans matrisidir. Her denemede veriye ilişkin varyans-kovaryans matrisinin değişiklik göstermemesi halinde ve yapılan her denemenin diğerlerinden bağımsız olması halinde (4.64) eşitliği aşağıdaki gibi tanımlanacaktır (2).

$$V_{\underline{\theta}} = H^{*-1} \left[\sum_{u=1}^n \frac{\partial^2 \Phi(\underline{\theta}, W)}{\partial \underline{\theta} \partial W} \cdot V_u \cdot \frac{\partial^2 \Phi(\underline{\theta}, W)}{\partial \underline{\theta} \partial W} \right] \cdot H^{*-1} \quad (4.65)$$

4.3.6. Varyans-Kovaryans Matrisinin İrdelenmesi

$\Phi(\underline{\theta})$ amaç fonksiyonu artıkların moment matrisi M 'e bağlı olduğunda özel sonuçlar bulunabilir. Gauss yaklaşımına ait (4.23), (4.40), (4.41), (4.42) eşitlikleri dikkate alınarak sırasıyla H , B_u ve Γ değerlerinin oluşturacağı $V_{\underline{\theta}}$ matrisini (4.65) eşitliğinden yeniden aşağıdaki gibi düzenlenir.

$$V_{\underline{\theta}} \approx \left(\sum_{u=1}^n B_u^T \cdot \Gamma \cdot B_u \right)^{-1} \left(\sum_{u=1}^n B_u^T \cdot \Gamma \cdot V_u \cdot \Gamma \cdot B_u \right) \left(\sum_{u=1}^n B_u^T \cdot \Gamma \cdot B_u \right)^{-1} \quad (4.66)$$

(2). Buradan, aşağıda tanımlanan özel bir durum için $V_{\underline{\theta}}$ varyans-kovaryans matrisi hesaplanır.

$$B_u^T = b_u = \frac{\partial f(\underline{\xi}_u, \underline{\theta})}{\partial \underline{\theta}},$$

$$V_u = \sigma^2,$$

$$\Psi(M(\underline{\theta})) = M(\underline{\theta}) \Rightarrow \Gamma = \frac{\partial \Psi}{\partial M(\underline{\theta})} = 1 \quad \text{bulunur.}$$

Tanımlanan eşitlikler (4.66) eşitliğinde yerine koyulduğunda;

$$V_{\underline{\theta}} = \sigma^2 \left(\sum_{u=1}^n b_u b_u^T \right)^{-1} = \sigma^2 \left[\sum_{u=1}^n \left(\frac{\partial f(\underline{\xi}_u, \underline{\theta})}{\partial \underline{\theta}} \right) \left(\frac{\partial f(\underline{\xi}_u, \underline{\theta})}{\partial \underline{\theta}} \right)^T \right]^{-1} \quad \text{elde edilir.}$$

Burada (4.28) eşitliğinde tanımlanan N matrisi yerine koyulduğunda ise;

$$V_{\underline{\theta}} \approx 2\sigma^2 N^{-1} \quad (4.67)$$

bulunur (2). Burada σ^2 bilinmediğinde, $\sigma^2 = \frac{\sum_{u=1}^n e_u^2}{n-p} = \frac{\Phi(\underline{\theta}^*)}{n-p}$ kullanılır.

Üç özel durum için $V_{\underline{\theta}}$ 'nın değerleri hesaplanmış ve bu durumlara ilişkin güven bölgeleri belirlenmiştir.

Amaç fonksiyonunu (4.33) eşitliğindeki gibi Moment matrisi $M(\underline{\theta})$ 'ya bağlı olduğunda özel durumların ortaya çıktığı belirtilmiştir. Bunlardan biri olan ve oldukça sık kullanılan log-likelihood fonksiyonunun davranışı, $V_{\underline{\theta}}$

değeri ve güven bölgesi incelenebilir. Bunun için her zaman olduğu gibi ε_u hata terimleri ortalaması $\underline{\theta}$ ve varyansı σ^2 olmak üzere herbirinin normal dağıldığı varsayımı burada da geçerlidir. Ayrıca n tane x_u gözleminin herbiri için m farklı deneme yapıldığını düşünülür. Öyleyse deney düzeni aşağıdaki gibi olur.

$$y_{11} = f(x_{11}, \underline{\theta}) + \varepsilon_{11}$$

$$y_{21} = f(x_{21}, \underline{\theta}) + \varepsilon_{21}$$

$$\vdots$$

$$y_{n1} = f(x_{n1}, \underline{\theta}) + \varepsilon_{n1}$$

$$y_{12} = f(x_{12}, \underline{\theta}) + \varepsilon_{12}$$

$$y_{22} = f(x_{22}, \underline{\theta}) + \varepsilon_{22}$$

$$\vdots$$

$$y_{n2} = f(x_{n2}, \underline{\theta}) + \varepsilon_{n2}$$

$$\vdots$$

$$y_{1m} = f(x_{1m}, \underline{\theta}) + \varepsilon_{1m}$$

$$y_{2m} = f(x_{2m}, \underline{\theta}) + \varepsilon_{2m}$$

$$\vdots$$

$$y_{nm} = f(x_{nm}, \underline{\theta}) + \varepsilon_{nm}$$

Yukarıdaki verilenler ışığında $\varepsilon \sim N(\underline{0}, V)$ olduğu farzedilsin. Bu durumda (likelihood) olabilirlik fonksiyonu aşağıdaki gibi bulunur.

$$L(\underline{\varepsilon}, V) = \prod_{u=1}^n \frac{1}{(2\pi)^{m/2} |V|^{1/2}} \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{2} \underline{\varepsilon}^T V^{-1} \underline{\varepsilon} \right\}$$

$$\Rightarrow L(\underline{\varepsilon}, V) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{nm}{2}} |V|^{n/2}} \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{u=1}^n \underline{\varepsilon}_u^T V^{-1} \underline{\varepsilon}_u \right\}$$

$$\Rightarrow L(\underline{X}, \underline{Y}, V) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{nm}{2}} |V|^{n/2}} \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{u=1}^n [y_u - f(\underline{x}_u, \underline{\theta})]^T V^{-1} [y_u - f(\underline{x}_u, \underline{\theta})] \right\}$$

$$\Rightarrow L(\underline{X}, \underline{Y}, V) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{nm}{2}} |V|^{n/2}} \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{2} \text{tr} V^{-1} M(\underline{\theta}) \right\}$$

$$\Rightarrow \ell n L(\underline{X}, \underline{Y}, V) = -\frac{nm}{2} \ell n(2\pi) - \frac{n}{2} \ell n |V| - \frac{1}{2} \text{tr} V^{-1} M(\underline{\theta}) \quad (4.68)$$

1. Durum: (4.68) eşitliğinde V matrisi biliniyorsa:

$$\frac{\partial \ell n L}{\partial M(\underline{\theta})} = -\frac{1}{2} V^{-1}$$

$$\Rightarrow \Gamma = \frac{1}{2} V^{-1}$$

bulunur. Bu değer (4.66) eşitliğinde yerine koyulduğunda

$$V_{\underline{\theta}} \approx \frac{1}{2} \left(\sum_{u=1}^n B_u^T \cdot B_u \right)^{-1} = N^{*-1} \approx H^{*-1} \quad (4.69)$$

elde edilir. Buradan $\underline{\theta}$ için güven bölgesi:

$$\frac{(\underline{\theta} - \underline{\theta}^*)^T N^* (\underline{\theta} - \underline{\theta}^*)}{2p \cdot \sigma^2} = F_{(p, n-p, 1-\alpha)} \quad (4.70)$$

bir başka deyişle,

$$\frac{(\underline{\theta} - \underline{\theta}^*)^T B^T B (\underline{\theta} - \underline{\theta}^*)}{p \cdot \sigma^2} = F_{(p, n-p, 1-\alpha)}$$

olacaktır (2).

2. Durum: (4.68) eşitliğinde $V=k.Q$ ise ve burada Q bir matris ve biliniyor, k herhangi bir skaler olmak üzere ($k \in \mathbb{R}$) fakat bilinmiyorsa:

$$\ell n L(X, \underline{Y}, V) = -\frac{nm}{2} \ell n(2\pi) - \frac{n}{2} \ell n|k.Q| - \frac{1}{2} \text{tr}(k.Q)^{-1} M(\underline{\theta})$$

$$\ell n L(X, \underline{Y}, kQ) = -\frac{nm}{2} \ell n(2\pi) - \frac{nm}{2} \ell n k - \frac{n}{2} \ell n|Q| - \frac{1}{2k} \text{tr} Q^{-1} M(\underline{\theta})$$

k sabiti bilinmediğinden öncelikle $\ell n L$ fonksiyonunu minimum yapacak $\hat{k}$ değeri elde edilmelidir. Bu nedenle;

$$\frac{\partial \ell n L(X, \underline{Y}, kQ)}{\partial k} = 0$$

koşulu sağlanmalıdır.. Öyleyse;

$$\frac{\partial \ell n(X, \underline{Y}, kQ)}{\partial k} = -\frac{n.m}{2.k} + \frac{1}{2.k^2} \text{tr} Q^{-1} . M(\underline{\theta})$$

$$\Rightarrow \quad \hat{k} = \frac{\text{tr} Q^{-1} M(\underline{\theta})}{n.m}$$

olacaktır. Bu değeri $\ell n L(X, \underline{Y}, kQ)$ fonksiyonunda yerine koyarak Γ değeri elde edilir;

$$\ell n L(X, \underline{Y}, kQ) = -\frac{nm}{2} \ell n(2\pi) - \frac{nm}{2} \ell n \left[\frac{\text{tr} Q^{-1} M(\underline{\theta})}{nm} \right] - \frac{n}{2} \ell n(Q) - \frac{1}{2} \frac{\text{tr} [Q^{-1} M(\underline{\theta})]}{\text{tr} [Q^{-1} M(\underline{\theta})]} \frac{1}{nm}$$

$$\begin{aligned}
\ell n L(\underline{X}, \underline{Y}, kQ) &= -\frac{nm}{2} \ell n(2\pi) - \frac{nm}{2} \ell n \left[\frac{\text{tr} Q^{-1} M(\underline{\theta})}{nm} \right] - \frac{n}{2} \ell n |Q| - \frac{nm}{2} \\
\Rightarrow \frac{\ell n L(\underline{X}, \underline{Y}, kQ)}{\partial M(\underline{\theta})} &= \frac{nm}{2} \frac{Q^{-1} / nm}{\text{tr} Q^{-1} M(\underline{\theta}) / nm} \\
\Rightarrow \Gamma &= \frac{nm}{2} \cdot \frac{Q^{-1}}{\text{tr} Q^{-1} M(\underline{\theta})}
\end{aligned}$$

bulunur. Görüldüğü gibi Γ 'nın değeri k skalerinden bağımsızdır.

Bulunan Γ değeri (4.66) eşitliğinde yerine koyulduğunda;

$$V_{\underline{\theta}} \approx \sum_{u=1}^n B_u^T V_u B_u^{-1} \quad (4.71)$$

elde edilir. Buradan $\underline{\theta}$ için güven bölgesi:

$$\frac{(n-p)(\underline{\theta} - \underline{\theta}^*)^T B^T Q^{-1} B (\underline{\theta} - \underline{\theta}^*)}{p \left[\underline{Y} - f(\underline{X}, \underline{\theta}^*) \right]^T Q^{-1} \left[\underline{Y} - f(\underline{X}, \underline{\theta}^*) \right]} = F_{(p, n-p, 1-\alpha)} \quad (4.72)$$

olarak bulunur (2).

3. Durum: (4.68) eşitliğinde V matrisi bilinmiyorsa, öncelikle V matrisi tahmin edilmelidir. Bunun için (4.68) eşitliğinde V matrisine göre türev alınarak 0'a eşitlenir. Öyleyse:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \ell n L(\underline{X}, \underline{Y}, V)}{\partial V} &= -\frac{n}{2} V^{-1} + \frac{1}{2} V^{-1} M(\underline{\theta})^{-1} = 0 \\
\Rightarrow \hat{V} &= \frac{M(\underline{\theta})}{n}
\end{aligned}$$

elde edilir. Bulunan $\hat{V}$ değeri (4.68) eşitliğinde V matrisinin yerine konulduğunda;

$$\begin{aligned}\ell n L(X, \underline{Y}, V) &= -\frac{nm}{2} \ell n(2\pi) - \frac{n}{2} \ell n \left| \frac{1}{n} M(\underline{\theta}) \right| - \frac{1}{2} \text{tr } n M(\underline{\theta})^{-1} M(\underline{\theta}) \\ &= -\frac{nm}{2} \ell n(2\pi) - \frac{n}{2} \ell n \left| \frac{1}{n} M(\underline{\theta}) \right| - \frac{n}{2}\end{aligned}$$

Artık bulunan eşitlikten Γ değeri tahmin edilebilir.

$$\begin{aligned}\frac{\partial \ell n L(X, \underline{Y}, V)}{\partial M(\underline{\theta})} &= \frac{n}{2} \frac{1/n}{\frac{1}{n} M(\underline{\theta})} \\ \Rightarrow \Gamma &= \frac{n}{2} M(\underline{\theta})^{-1}\end{aligned}$$

bulunur. Elde edilen Γ' değeri (4.66) eşitliğinde yerine koyulduğunda;

$$V_{\underline{\theta}} \approx \sum_{u=1}^n B_u^{-1} V_u B_u^{-1} \quad (4.73)$$

elde edilir. Buradan $\underline{\theta}$ için güven bölgesi:

$$\frac{(n-p)(\underline{\theta} - \underline{\theta}^*)^T B^T B (\underline{\theta} - \underline{\theta}^*)}{p \cdot [\underline{Y} - f(X, \underline{\theta}^*)]^T [\underline{Y} - f(X, \underline{\theta}^*)]} = F_{(p, n-p, 1-\alpha)} \quad (4.74).$$

olacaktır (2).

BÖLÜM 5

UYGULAMA

5.1. Veri

Bu çalışmada kullanılan veri seti A.R.GALLANT tarafından çalışılmış ve "Nonlinear Regression" ismiyle "The American Statistician"'da 1975'te yayınlanmıştır.

Yanıta exponential etkili deneysel materyal yaşı (x_3) için veriler iki denemeli bir yönlü düzene uygundur. x_1 ve x_2 düzen yapısıyla belirlenen sabit noktalar setini oluşturur. x_3 ise deneysel materyalin yaşıdır ve $[0, 10]$ aralığında Uniform (Düzgün) dağıldığı varsayılararak simule edilmiştir. Belirtilen veriler Tablo 5.1'de verilmiştir.

Tablo 5.1 Girdiler ve Gözlemlenen Değerler

u	y_u	X_{u1}	X_{u2}	X_{u3}
1	.98610	1	1	6.28
2	.95482	1	1	9.11
3	1.02324	1	1	8.11
4	.96263	1	1	6.58
5	.98861	1	1	6.52
6	.98982	1	1	9.86
7	.66768	1	1	.47
8	.96822	1	1	4.07
9	.59759	1	1	.17
10	1.01962	1	1	4.39
11	1.04255	1	1	4.73
12	.97526	1	1	8.90
13	.80219	1	1	.77
14	.95196	1	1	4.51
15	.50811	1	1	.08

u	y _u	X _{u1}	X _{u2}	X _{u3}
16	1.03848	0	1	9.86
17	1.04184	0	1	8.43
18	.90475	0	1	1.82
19	1.05026	0	1	5.02
20	1.03437	0	1	3.75
21	1.01214	0	1	7.31
22	.55107	0	1	.07
23	.98823	0	1	4.61.
24	.99418	0	1	6.99
25	.69163	0	1	.39
26	1.04343	0	1	9.42
27	1.04969	0	1	3.02
28	1.01046	0	1	3.31
29	.97658	0	1	2.65
30	.91840	0	1	6.11

Bu verilerin kullanılacağı ve hesaplamaların gösterileceği yanıt fonksiyonu (model):

$$f(X, \underline{\theta}) = \theta_1 X_1 + \theta_2 X_2 + \theta_4 \cdot e^{\theta_3 X_3} \quad (5.1)$$

şeklindedir. Bu model her bir deneme için yazıldığında,

$$y_u = \theta_1 X_{u1} + \theta_2 X_{u2} + \theta_4 \cdot e^{\theta_3 X_3}$$

elde edilir. Bu eşitlikten sistem eşitlikleri aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$.98610 = \theta_1 + \theta_2 + \theta_4 e^{\theta_3(6.22)}$$

$$.95482 = \theta_1 + \theta_2 + \theta_4 e^{\theta_3(9.11)}$$

$$1.02324 = \theta_1 + \theta_2 + \theta_4 e^{\theta_3(8.11)}$$

⋮

⋮

$$.97658 = \theta_2 + \theta_4 e^{\theta_3(2.65)}$$

$$.91840 = \theta_2 + \theta_4 e^{\theta_3(6.11)}$$

(5.1) eşitliğiyle verilen modelde θ_3 parametresinin doğrusal olmadığı görülmektedir. Bu nedenle (5.1) eşitliğiyle verilen modelin "doğrusal olmayan" bir yapıda olduğu açıktır.

5.2. Varsayımlar

(5.1) eşitliğinde verilen model kısaca,

$$y_u = f(X_u, \underline{\theta}) + e_u$$

şeklinde yazılabilir. Burada $u = 1, 2, \dots, n$ olmak üzere, $f(X_u, \underline{\theta})$ yanıt fonksiyonu ve $\underline{\theta}$ ise p -boyutlu parametre vektörüdür. e_u ise deneyden ya da gözlemlenmeden kaynaklanan hata terimini göstermektedir. Bu durumda e_u hata terimlerinin birbirinden bağımsız ve aynı dağılıma sahip oldukları varsayılmıştır. Yani daha açık ifade edildiğinde e_u hata terimlerinin sıfır ortalama ve σ^2 varyanslı normal dağılıma sahip olduğu düşünülmüştür. Ayrıca $\underline{\theta}^*$ parametre vektörü, $S(\underline{\theta}^*)$ Hata Kareler Toplamını minimum yapan değer olarak bulunur. Dolayısıyla σ^2 'nin tahmini olan s^2 'de bu sayede minimum olacaktır. Zira s^2 , 4.Bölümde (4.8) eşitliğiyle $s^2 = \frac{S(\underline{\theta}^*)}{n-p}$ olarak verilmiştir. Öyleyse $\underline{\theta}^*$, (5.1) eşitliğinde verilen modelin parametrelerin "en iyi" tahmin değerini temsil etmektedir.

5.3. Başlangıç Değeri

Doğrusal olmayan modeller için yapılan parametre tahminlerinin "İteratif Teknikler" yardımıyla yapılabileceği 3.3. konusunda belirtilmiştir. Yine aynı şekilde çözümün "tam çözüm" olmasının zorluğuna değinildi. Bu zorlukları aşabilmek amacıyla model ile belirlenen yüzey üzerinde farklı

bölgelerden farklı noktalar alınarak parametre tahmini yapmak uygun olacaktır. Ancak bu şekilde yüzey üzerinde Hata Kareler Toplamını minimum yapacak parametre vektörü yüzlerce farklı kombinasyon arasından bulunabilir. Çünkü yüzey üzerinde olabilecek tepelikler, çukurlar, ilmikler gerçek çözüm noktasının bulunmasını engelleyecektir. Dolayısıyla farklı bölgelerden alınan başlangıç değerlerinin aynı Hata Kareler Toplamı değerine ulaşması çok zordur. Bu nedenle en iyi çözüme ulaştıran başlangıç değerinin seçilmesi aynı şekilde zor ve önemlidir. Modelin oluşturduğu yüzeyin farklı bölgelerinden hareketle Hata Kareler Toplamını minimum yapan ya da Hata Kareler Toplamına yakınsayan çözüm değerlerine ulaştıran başlangıç değeri belirlenmelidir.

Bu çalışmada belirtilen sakıncalardan korunmak amacıyla değişik başlangıç değeri kombinasyonları denendi. Bunlar arasında öncelikle GALLANT tarafından yapılan çalışma esnasında kullanılan,

$$\underline{\theta} = \begin{bmatrix} -.04866 \\ 1.038 \\ -1.176 \\ -.5292 \end{bmatrix}$$

parametre vektörü dikkate alındı. Ayrıca onlarca farklı başlangıç değerlerlerinde incelenmesiyle elde edilen sonuçlar sonunda, GALLANT tarafından seçilen başlangıç noktasının "en iyi" ya da "en iyi" başlangıç noktalarından birisi olduğu belirlendi. Fakat bu çalışmada incelenen, Doğrusallaştırma Metodu ve Gauss Metodu için hazırlanan bilgisayar programlarının işletilmesi sonunda,

$$\underline{\theta} = \begin{bmatrix} -1.0000 \\ -1.0000 \\ -1.0000 \\ -1.0000 \end{bmatrix}$$

başlangıç noktasının seçilmesiyle Hata Kareler Toplamı için "daha iyi" bir değere ulaşıldı. Her iki başlangıç değerleri sonunda elde edilen Hata Kareler Toplamları arasındaki farklılığın ise "on milyonda bir" den daha az olduğu görüldü. Bu çalışmada dolayısıyla $\underline{\theta}_0^T = [-1, -1, -1, -1]$ noktası başlangıç değeri olarak seçildi.

5.4. Doğrusallaştırma Metodu Çözüm ve Sonuçları

Doğrusallaştırma Metodu için hazırlanan bilgisayar programı işletilerek Tablo 5.2'deki sonuçlar elde edildi.

Tablo 5.2. Doğrusallaştırma Metodu Çözümü

İterasyon No (i)	b_{1j}	b_{2j}	b_{3j}	b_{4j}	θ_{1j}	θ_{2j}	θ_{3j}	θ_{4j}	$S(\theta_j)$
0	-	-	-	-	-1.0000	-1.0000	-1.0000	-1.0000	209.149006
1	.97414	2.01520	-.05648	.49562	-.02568	1.01519	-1.05648	-.50438	.03088937
2	-.00014	.00034	-.05942	-.00049	-.02583	1.01553	-1.11590	-.50487	.0304958862
3	-.0006	.00014	-.00021	-.00002	-.02588	1.01567	-1.11568	-.50490	.0304955373
4	-.00000	-.00000	-.00000	-.00000	-.02588	1.01567	-1.11569	-.50490	.304955370

Tablo 5.2'de görüldüğü gibi Doğrusallaştırma Metodu için yapılan çözüm sonunda tahmin vektörü,

$$\underline{\theta} = \begin{bmatrix} -.02588 \\ 1.01567 \\ -1.11569 \\ -.50490 \end{bmatrix} \quad (5.2)$$

olarak elde edildi.

İterasyonları durdurma kriteri olarak bilgisayar programında $S(\underline{\theta}_5) > S(\underline{\theta}_4)$ olması dikkate alındı. Ayrıca,

$$\left| \frac{S(\underline{\theta}_4) - S(\underline{\theta}_5)}{S(\underline{\theta}_4)} \right| \leq (2.6) \times 10^{-8}$$

bulunmuştur.

Tablo 5.2'den $S(\underline{\theta}^*) = .030495537$ olduğu görülmektedir. Buradan,

$$s^2 = \frac{S(\underline{\theta}^*)}{n - p} = \frac{.030495537}{30 - 4} = .0011729052 \quad (5.3)$$

olarak bulundu. Varyans-kovaryans matrisinin bulunmasında kullanılan $B^T B$ matrisi,

$$B^T B = \begin{bmatrix} 15 & 15 & -.4869 & 2.7895 \\ 15 & 30 & -.9895 & 4.6309 \\ -.4869 & .9895 & .0967 & -.3815 \\ 2.7895 & 4.6309 & -.3815 & 3.3471 \end{bmatrix} \quad (5.4)$$

şeklinde elde edilirken,

$$(B^T B)^{-1} = \begin{bmatrix} .1359 & -.0671 & -.1510 & -.0376 \\ -.0671 & .0842 & .5175 & -.0016 \\ -.1510 & .5175 & 22.8032 & 2.0089 \\ -.0376 & -.0016 & 2.0089 & 3.3471 \end{bmatrix} \quad (5.5)$$

bulunmuştur. (4.12) eşitliği yardımıyla varyans-kovaryans matrisi,

$$V = s^2 (B^T B)^{-1} = \begin{bmatrix} .1594 & -.0787 & -.1771 & -.0441 \\ -.0787 & .0987 & .6069 & -.0018 \\ -.1771 & .6069 & 26.7459 & 2.3562 \\ -.0441 & -.0018 & 2.3562 & .6582 \end{bmatrix} \cdot 10^{-3} \quad (5.6)$$

olarak elde edildi.

5.4.1. Doğrusallaştırma Metodu Güven Aralıkları ve Güven Bölgeleri

(4.11) eşitliği ile verilen Doğrusallaştırma Metodu güven aralıkları Tablo 5.3'deki gibi bulundu.

Tablo 5.3. Doğrusallaştırma Metodu Güven Aralıkları

j	θ_j^*	V_{jj}	$t_{n-p;\alpha/2} \cdot V_{jj}^{1/2}$	Alt Sınır	Üst Sınır
1	-.02588	.1594x10 ⁻³	.02595	-.05183	.07127x10 ⁻³
2	1.01567	.0987x10 ⁻³	.02042	.99524	1.03609
3	-1.11569	26.7459x10 ⁻³	.33616	-1.45185	-.77952
4	-5.0490	.6582x10 ⁻³	.05273	-.55763	-.45216

Tablo 5.3'te yapılan hesaplamalarda $\alpha=.05$ alınmıştır. Dolayısıyla $t_{26,025} = 2.0555$ tablo değeri kullanıldı.

Doğrusallaştırma Metodu güven aralıkları oluşturulduktan sonra, (4.10) formülü yardımıyla parametrelere ilişkin güven bölgeleri oluşturuldu. Güven bölgeleri çizimleri iki boyutlu yapıldığından parametre çiftleri için $\binom{6}{2} = \frac{6!}{4!2!} = 6$ farklı güven bölgesi oluşturuldu. Bu amaçla (4.10) eşitliği ve (4.12) eşitliğinden yararlanarak,

$$(\underline{\theta} - \underline{\theta}^*)^T B(\underline{\theta} - \underline{\theta}^*) \leq \frac{p}{n-p} \cdot S(\underline{\theta}^*) \cdot F_{(p, n-p, 1-\alpha)} \quad (5.7)$$

eşitliği elde edildi ve güven bölgeleri oluşturulurken kullanıldı.

Çalışmamızda parametre sayısı, $p=4$; deney sayısı, $n=30$ 'dur. Dolayısıyla $p=4$, $n-p=26$ ve $1-\alpha=.95$ için F- tablo değeri 2.74 olarak alındı. Ayrıca $S(\underline{\theta}^*)=.030495537$ olduğu açıktır. Tüm bunların ışığı altında eşitliğin sağ tarafı,

$$\frac{p}{n-p} S(\underline{\theta}^*) \cdot F_{(p, n-p, 1-\alpha)} = \frac{4}{30-4} (.030495537)(2.74) = .012855041$$

olarak elde edildi ve kullanıldı.

θ_1 ve θ_2 İçin Güven Bölgesi:

$$[\theta_1 + .02588 \quad \theta_2 - 1.01567] \begin{bmatrix} 15 & 15 \\ 15 & 30 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \theta_1 + .02588 \\ \theta_2 - 1.01567 \end{bmatrix} \leq .012855041 \quad (5.8)$$

θ_1 ve θ_2 parametre çifti için güven bölgesi (5.8) eşitliğindeki karesel formu oluşturan matrisin özdeğerleri ve özvektörleri yardımıyla oluşturuldu. Bu amaçla hesaplanan değerler Tablo 5.4.'te verildi.

Tablo 5.4. (5.8) Eşitliğinden Bulunan Değerler

i	Özdeğerler (λ_i)	Özvektörler(e_i^T)	i. Eksen Yarı Uzunluğu
1	5.7294	[.8506508 - .527311]	.04736732
2	39.2705	[.527311 -.8506508]	.01809271

Tablo 5.4'te verilen sonuçlar ışığında θ_1 ve θ_2 parametre çifti için oluşturulan Doğrusallaştırma Metodu güven bölgesi Ek 1'de verilmiştir.

θ_1 ve θ_3 İçin Güven Bölgesi:

$$[\theta_1 + .02588 \quad \theta_3 + 1.11569] \begin{bmatrix} 15 & -.4869 \\ -.4869 & .0967 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \theta_1 + .02588 \\ \theta_3 - 1.11569 \end{bmatrix} \leq .012855041 \quad (5.9)$$

θ_1 ve θ_3 parametre çifti için güven bölgesi (5.9) eşitliğindeki karesel formu oluşturan matrisin özdeğerleri ve özvektörleri yardımıyla oluşturuldu. Bu amaçla hesaplanan değerler Tablo 5.5'te verildi.

Tablo 5.5. (5.9) Eşitliğinden Bulunan Değerler

i	Özdeğerler (λ_i)	Özvektörler ($\underline{e}_i^T$)	i. Eksen Yarı Uzunluğu
1	.0808096	[.03261845 .9994679]	.398846
2	15.01589	[.9994679 -.0326845]	.02925912

Tablo 5.5.'te verilen sonuçlar yardımıyla θ_1 ve θ_3 parametre çifti için oluşturulan Doğrusallaştırma Metodu güven bölgesi Ek2'de verildi.

θ_1 ve θ_4 için Güven Bölgesi:

$$[\theta_1 + .02588 \quad \theta_4 + .50490] \begin{bmatrix} 15 & 2.7895 \\ 2.7895 & 15 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \theta_1 + .02588 \\ \theta_4 + .50490 \end{bmatrix} \leq .012855041 \quad (5.10)$$

θ_1 ve θ_4 parametreleri için Doğrusallaştırma Metodu güven bölgesini oluşturmak amacıyla kullanılan (5.10) eşitliğindeki matrisin özdeğerleri ve özvektörleri Tablo 5.6.'da verilmiştir.

Tablo 5.6. (5.10) Eşitliğinden Bulunan Değerler

Tablo 5.6. (5.10) eşitliğinden Bulunan Değerler

i	Özdeğerler (λ_i)	Özvektörler($\underline{e}_i^T$)	i. Eksen Yarı Uzunluğu
1	2.713765	[.2214078 -.9751813]	.06882571
2	15.63334	[.9751813 .2214076]	.0286755

Tablo 5.6.'da verilen sonuçlar yardımıyla oluşturulan θ_1 ve θ_4 parametreleri Doğrusallaştırma Metodu güven bölgesi Ek3'te verilmiştir.

θ_2 ve θ_3 için Güven Bölgesi:

$$[\theta_2 - 1.01567 \quad \theta_3 + 1.11569] \begin{bmatrix} 30 & -.9895 \\ -.9895 & .0967 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \theta_2 - 1.01567 \\ \theta_3 + 1.11569 \end{bmatrix} \leq .01285504 \quad (5.11)$$

θ_2 ve θ_3 parametre çifti için Doğrusallaştırma Metodu güven bölgesi, (5.11) eşitliğindeki karesel formu oluşturan matrisin özdeğerleri ve özvektörleri yardımıyla oluşturuldu. Bu amaçla hesaplanan değerler Tablo 5.7.'dedir.

Tablo 5.7. (5.11) Eşitliğinden Bulunan Değerler

i	Özdeğerler (λ_i)	Özvektörler($\underline{e}_i^T$)	i. Eksen Yarı Uzunluğu
1	.06399346	[.0330358 .9994541]	.4481971
2	30.03271	[.9994541 -.0330358]	.020689

Tablo 5.7.'de verilen sonuçlar ışığında θ_2 ve θ_3 parametreleri için oluşturulan Doğrusallaştırma Metodu güven bölgesi Ek4'te verilmiştir.

θ_2 ve θ_4 için Güven Bölgesi:

$$[\theta_2 - 1.01567 \quad \theta_4 + .50490] \begin{bmatrix} 30 & 4.6309 \\ 4.6309 & 3.3471 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \theta_2 - 1.01567 \\ \theta_4 + .50490 \end{bmatrix} \leq .012855041 \quad (5.12)$$

θ_2 ve θ_4 parametreleri için Doğrusallaştırma Metodu güven bölgesini oluşturmak amacıyla kullanılan (5.12) eşitliğindeki matrisin özdeğer ve özvektörleri Tablo 5.8'de verilmiştir.

Tablo 5.8. (5.12) Eşitliğinden Bulunan Değerler

i	Özdeğerler (λ_i)	Özvektörler (e_i^T)	i. Eksen Yarı Uzunluğu
1	2.565415	[.1664433 -.986051]	.07078773
2	30.78169	[.986051 .1664433]	.02043575

Tablo 5.8'de verilen değerler ışığında oluşturulan θ_2 ve θ_4 parametreleri için Doğrusallaştırma Metodu güven bölgesi Ek5'te verilmiştir.

θ_3 ve θ_4 için Güven Bölgesi:

$$[\theta_3 + 1.11569 \quad \theta_4 + .50490] \begin{bmatrix} .0967 & -.3815 \\ -.3815 & 3.3471 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \theta_3 + 1.11569 \\ \theta_4 + .50490 \end{bmatrix} \leq .012855041 \quad (5.13)$$

θ_3 ve θ_4 parametreleri için Doğrusallaştırma Metodu güven bölgesi, (5.13) eşitliğindeki karesel formu oluşturan matrisinin özdeğerleri ve özvektörleri yardımıyla oluşturuldu. Bu amaçla hesaplanan değerler Tablo 5.9'da verildi.

Tablo 5.9. (5.13) Eşitliğinden Bulunan Değerler

i	Özdeğerler (λ_i)	Özvektörler($\underline{e}_i^T$)	i. Eksen Yarı Uzunluğu
1	.05252362	[.9933622 .1150279]	.49472
2	3.391276	[.1150279 -.9933622]	.06156802

Tablo 5.9'da verilen sonuçlar yardımıyla oluşturulan θ_3 ve θ_4 parametreleri için Doğrusallaştırma Metodu güven bölgesi Ek 6'da verilmiştir.

5.5. Likelihood Metodu Çözüm ve Sonuçları

Likelihood Metodu yalnızca parametrelere ilişkin güven bölgelerini ve güven aralıklarını oluşturmak amacıyla kullanılır. Bu nedenle Doğrusallaştırma Metodu sonuçları yardımıyla Likelihood Metodu güven aralıkları ve güven bölgeleri oluşturuldu. Buna göre Doğrusallaştırma Metodu'nda elde edilerek (5.2) eşitliğiyle verilen ve Likelihood Metodu'nda kullanılan tahmin vektörü,

$$\underline{\theta}^* = \begin{bmatrix} -.02588 \\ 1.01567 \\ -1.11569 \\ -.50490 \end{bmatrix}$$

olarak hesaplanmıştır.

5.5.1. Likelihood Metodu Güven Aralıkları ve Güven Bölgeleri

Likelihood Metodu güven bölgesi ve güven aralıklarını oluşturmak için (4.15) eşitliği aşağıdaki gibi yazıldı:

$$S(\underline{\theta}) - S(\underline{\theta}^*) \leq ps^2 F_{(p, n-p, 1-\alpha)} \\ \sum_{u=1}^{30} (y_u - \theta_1 x_{1u} - \theta_2 x_{2u} - \theta_4 R^{\theta_3 x_{3u}})^2 - .030495537 \leq \frac{4}{30-4} (.30495537)(2.74) \quad (5.14)$$

(5.14) eşitliği yardımıyla oluşturulan güven bölgelerine ait çözümler iki boyutlu yapılabildiğinden $\binom{6}{2} = \frac{6!}{4!2!} = 6$ farklı parametre çifti için güven aralıkları ve güven bölgeleri oluşturuldu.

İncelenen problemde parametre sayısı, $p=4$; deney sayısı, $n=30$ 'dur. Dolayısıyla $p=4$, $n-p=26$ ve $1-\alpha=.95$ için F-tablo değeri 2.74 olarak alındı. Ayrıca Doğrusallaştırma Metodunda $S(\underline{\theta}^*) = .030495537$ olarak bulunmuştur. (5.14) eşitliğinin sağ tarafı da .012855041 olarak hesaplanmıştır.

Likelihood güven bölgelerini oluşturmak amacıyla, incelenen parametre çifti için (5.14) eşitliği yazıldı. Bu eşitlikte, incelenen parametreler dışında kalan parametrelere optimum çözüm değerleri verildi. Elde edilen eşitlikte parametrelerin birisine belirlenen bir aralıkta sabit değerler verildi. Bu şekilde, ilk parametrenin değerlerine karşılık gelen ikinci parametre değerleri kullanılarak güven bölgeleri çizildi. Bu işlemleri yapmak için hazırlanan bilgisayar programında incelenen aralıkta ilk parametre değerleri .001 artırılarak ikinci parametreye ait değerlerin bulunması yoluna gidilmiştir. Ayrıca bu işlemler θ_1 ve θ_2 , θ_1 ve θ_4 , θ_2 ve θ_4 parametre çiftleri için parametrelerin işlemdeki işlevleri değiştirilerek yinelenmiştir. Yani, ikinci parametreye sabit değerler verilmiş ve bu şekilde işlemler tekrarlanmıştır. Bundan amaç, işlemlerin sağlanmasını yapmaktır. Her iki durum için oluşturulan güven bölgeleri aynı sonucu vermiştir. Yalnızca θ_1 ve θ_3 , θ_2 ve θ_3 , θ_3 ve θ_4 güven bölgeleri oluşturulurken işlem zorlukları nedeniyle tekrarlanamamıştır.

Likelihood güven aralıklarını oluşturmak için de yine, incelenen parametre çifti için (5.14) eşitliği yazıldı. Elde edilen eşitlikte ilk olarak parametrelerden biri sabit tutularak diğer parametre incelendi. Daha sonra diğer parametre sabitlenerek, ilk parametrenin davranışı incelendi. Burada parametrelere verilen sabit değer, θ^* vektöründe kendisine karşılık gelen değer alınmıştır. Bu şekilde θ_1, θ_2 ve θ_4 parametreleri için güven aralıkları bulunmuştur. Fakat θ_3 parametresine ait güven aralığı oluşturulurken ayrı bir bilgisayar programı yardımıyla iteratif olarak (5.14) eşitliğini 0 (sıfır) yapan değerler θ_1^*, θ_2^* ve θ_4^* noktasında aranmıştır.

θ_1 ve θ_2 için Güven Aralığı ve Güven Bölgesi:

$$15\theta_1^2 - 24.059\theta_1 + 300\theta_2 + 300\theta_2^2 - 60.16407\theta_2 + 27.18634 \leq 0 \quad (5.15)$$

θ_1 ve θ_2 parametrelerine ilişkin Likelihood Metodu güven aralıkları; (5.15) eşitliğinde $\theta_2 = \theta_2^*$ alınarak θ_1 için güven aralığı,

$$-.055154533 \leq \theta_1 \leq .00339398$$

olarak ve $\theta_1 = \theta_1^*$ alınarak θ_2 için güven aralığı,

$$.99497612 \leq \theta_2 \leq 1.03637311$$

olarak elde edildi.

θ_1 ve θ_2 parametreleri için oluşturulan Likelihood Metodu güven bölgesi Ek1'de verilmiştir.

θ_1 ve θ_3 için Güven Aralığı ve Güven Bölgesi:

$$\Rightarrow 15\theta_1^2 + \theta_1(3.5933 - 1.0098 \sum_{u=1}^{30} e^{\theta_3 x_{3u}}) + .25492 \sum_{u=1}^{30} e^{\theta_3 x_{3u}} + 1.0098 \sum_{u=1}^{30} y_u e^{\theta_3 x_{3u}} \\ \sum_{u=1}^{30} x_{2u} e^{\theta_3 x_{3u}} + .92333617 \leq 0$$

(5.16)

θ_1 ve θ_3 parametrelerine ilişkin Likelihood Metodu güven aralıkları; (5.16) eşitliğinde $\theta_3 = \theta_3^*$ alınarak θ_1 için güven aralığı,

$$-.055154533 \leq \theta_1 \leq .00339398$$

olarak ve $\theta_1 = \theta_1^*$ alınarak θ_3 için güven aralığı,

$$-1.55309939 \leq \theta_3 \leq -.81739956$$

olarak elde edildi.

θ_1 ve θ_3 parametreleri için oluşturulan Likelihood Metodu güven bölgesi Ek2'de verilmiştir.

θ_1 ve θ_4 için Güven Aralığı ve Güven Bölgesi:

$$\Rightarrow 15\theta_1^2 + 3.5933\theta_1 + 5.5791049\theta_1\theta_4 - 3.3471050\theta_4^2 + 3.5242\theta_4 + 26.8105 \leq 0 \quad (5.17)$$

θ_1 ve θ_4 parametrelerine ilişkin Likelihood Metodu güven aralıkları; (5.17) eşitliğinde $\theta_4 = \theta_4^*$ alınarak θ_1 için güven aralığı,

$$-.055154533 \leq \theta_1 \leq .00339398$$

olarak ve $\theta_1 = \theta_1^*$ alınarak θ_4 güven aralığı,

$$-.56687746 \leq \theta_4 \leq -.44291601$$

olarak elde edildi.

θ_1 ve θ_4 parametreleri için oluşturulan Likelihood Metodu güven bölgesi Ek3'te verilmiştir.

θ_2 ve θ_3 için Güven Aralığı ve Güven Bölgesi:

$$30\theta_2^2 - \theta_2(56.26422 + 1.0098 \sum_{u=1}^{30} x_{2u} e^{\theta_3 x_{3u}}) + .25492401 \sum_{u=1}^{30} e^{\theta_3 x_{3u}} + 1.0098 \sum_{u=1}^{30} y_u e^{\theta_3 x_{3u}} + .02613362 \sum_{u=1}^{30} x_{1u} e^{\theta_3 x_{3u}} + .27.03870485 \leq 0 \quad (5.18)$$

θ_2 ve θ_3 parametrelerine ilişkin Likelihood Metodu güven aralıkları; (5.18) eşitliğinde $\theta_3 = \theta_3^*$ alınarak θ_2 için güven aralığı,

$$.99497612 \leq \theta_2 \leq 1.03637311$$

olarak ve $\theta_2 = \theta_2^*$ alınarak θ_3 için güven aralığı,

$$-1.55309939 \leq \theta_3 \leq -.81739956$$

olarak elde edildi.

θ_2 ve θ_3 parametreleri için oluşturulan Likelihood Metodu güven bölgesi Ek4'te verilmiştir.

θ_2 ve θ_4 için Güven Aralığı ve Güven Bölgesi:

$$30\theta_2^2 - 56.26422 \theta_2 + 9.26174857 \theta_2 \theta_4 + 3.34710503 \theta_4^2 - 6.02699529 \theta_4$$

$$+27.03870461 \leq 0 \quad (5.19)$$

θ_2 ve θ_4 parametrelerine ilişkin Likelihood Metodu güven aralıkları; (5.19) eşitliğinde $\theta_4 = \theta_4^*$ alınarak θ_2 için güven aralığı,

$$.99497612 \leq \theta_2 \leq 1.03637311$$

olarak ve $\theta_2 = \theta_2^*$ alınarak θ_4 için güven aralığı,

$$-.56687746 \leq \theta_4 \leq -.44291601$$

olarak elde edildi.

θ_2 ve θ_4 parametrelerine için oluşturulan Likelihood Metodu güven bölgesi Ek5'te verilmiştir.

θ_3 ve θ_4 için Güven Aralığı ve Güven Bölgesi:

$$\theta_4^2 \sum_{u=1}^{30} e^{2\theta_3 x_{3u}} - 2\theta_4 \sum_{u=1}^{30} y_u e^{\theta_3 x_{3u}} - .05176\theta_4 \sum_{u=1}^{30} x_{1u} e^{\theta_3 x_{3u}} + 2.03134\theta_4 \sum_{u=1}^{30} x_{2u} e^{2\theta_3 x_{3u}} + .840388212 \leq 0 \quad (5.20)$$

θ_3 ve θ_4 parametrelerine ilişkin Likelihood Metodu güven aralıkları; (5.20) eşitliğinde $\theta_4 = \theta_4^*$ alınarak θ_3 için güven aralığı,

$$-1.55309939 \leq \theta_3 \leq -.81739956$$

olarak ve $\theta_3 = \theta_3^*$ alınarak θ_4 için güven aralığı,

$$-.56687746 \leq \theta_4 \leq -.44291601$$

olarak elde edildi.

θ_3 ve θ_4 parametreleri için oluşturulan Likelihood Metodu güven bölgesi Ek6'da verilmiştir.

Bütün parametreler için elde edilen güven aralıkları 6 farklı durumda da kendilerine ait aralıklara denk olmuştur. Bulunan bu güven aralıkları Tablo 5.10'da özetlendi.

Tablo 5.10. Likelihood Metodu Güven Aralıkları

j	θ_j^*	Alt Sınır	Üst Sınır
1	-.02588	-.05515	.00339
2	1.01567	.99497	1.03637
3	-1.11569	-1.55309	-.81739
4	-.50490	-.56687	-.44291

5.6. Gaus Metodu Çözüm ve Sonuçları

Gauss Metodu için hazırlanan bilgisayar programı işletilerek Tablo 5.11'deki sonuçlar elde edildi. Yrd.Doç.Dr.Celal AYDIN tarafından hazırlanan bu programda, N matrisinin zayıf koşullu olması durumunda Marquart adımı atarak ilerlemesi ve normal denklem sisteminin çözümünde yuvarlama hatalarıyla karşılaşılması için Gram-Schmit ortogonalleştirilmesinin kullanılması sağlanmıştır.

Tablo 5.11 Gauss Metodu Çözümü

İterasyon No (i)	θ_i	θ_{2i}	θ_{3i}	θ_{4i}	$S(\underline{\theta}_i)$
0	-1.0000	-1.00000	-1.0000	-1.0000	209.14900
1	-.02568	1.01519	-1.05648	-.50438	.03088937
2	-.02583	1.01553	-1.11590	-.50487	.03049589
3	-.02588	1.01568	-1.11569	-.50490	.03049554
4	-.02588	1.01568	-1.11569	-.50490	.03049553

Tablo 5.11'den de görüldüğü gibi Gauss Metodu için yapılan çözüm sonucunda ulaşılan tahmin vektörü,

$$\underline{\theta}^* = \begin{bmatrix} -.02588 \\ 1.01568 \\ -1.11569 \\ -.50490 \end{bmatrix} \quad (5.21)$$

olarak elde edildi. İterasyonları durdurmak amacıyla,

$$\left| \frac{S(\underline{\theta}_3) - S(\underline{\theta}_4)}{S(\underline{\theta}_3)} \right| \leq .00001$$

eşitsizliği kabul edildi ve kullanıldı.

Tablo 5.11'den $S(\underline{\theta}^*) = .03049553$ olarak bulundu. Buradan,

$$s^2 = \frac{S(\underline{\theta}^*)}{n - p} = \frac{.03049553}{30 - 4} = .001172905 \quad (5.22)$$

elde edildi.

Bu çalışmada (4.33) eşitsizliğiyle verilen,

$$\Phi(\underline{\theta}) = \Psi(M(\underline{\theta})) = M(\underline{\theta}) \quad (5.23)$$

olduğu açıktır. Dolayısıyla incelenen problemde (4.42) eşitsizliği,

$$\Gamma = \frac{\partial \Psi(M(\underline{\theta}))}{\partial M(\underline{\theta})} = 1 \quad (5.24)$$

olarak yazıldı. (5.24) eşitliğinden yararlanarak ve (4.40) eşitliğinden,

$$N = \begin{bmatrix} 30 & 30 & -.9738 & 5.5790 \\ 30 & 60 & -1.9790 & 9.2618 \\ -.9738 & -1.9790 & .1934 & -.7630 \\ 5.5790 & 9.2618 & -.7630 & 6.6942 \end{bmatrix}$$

yazılabilir. Burada yer alan B^TB matrisinin (5.4) eşitliğindeki matrisle aynı olduğu görüldü. Tahmine ilişkin varyans-kovaryans matrisi (4.67) eşitliğinden yazılabilir. Burada

$$V_{\underline{\theta}} = 2\sigma^2 N^{-1} = \sigma^2 (B^TB)^{-1} = \begin{bmatrix} .1593 & -.0787 & -.1771 & -.0441 \\ -.0787 & .0987 & -.6069 & -.0018 \\ -.9738 & .6069 & 26.7459 & 2.3562 \\ 5.5790 & -.0018 & 2.3562 & .6582 \end{bmatrix} \cdot 10^{-3} \quad (5.26)$$

olarak elde edildi. İşlemde kullanılan σ^2 değeri yerine (5.22) eşitliğindeki değer kullanıldı.

5.6.1. Gauss Metodu Güven Aralıkları ve Güven Bölgeleri

Gauss Metodu parametre tahminleri için kurulan güven aralıkları (4.53) eşitliğinden yararlanılarak oluşturulmuştur. Oluşturulan bu güven aralıkları Tablo 5.12'de verilmiştir.

Tablo 5.12. Gauss Metodu Güven Aralıkları

j	θ_j^*	$[V_\theta]_{jj}$	$t_{n-p;\alpha/2} \cdot [V_\theta]_{jj}^{1/2}$	Alt Sınır	Üst Sınır
1	-.02588	.1593x10 ⁻³	.02594	-.05182	.0633x10 ⁻³
2	1.01568	.0987x10 ⁻³	.02042	.99525	1.03610
3	-1.11569	26.7459x10 ⁻³	.33616	-1.45185	-.77952
4	-.50490	.6582x10 ⁻³	.05273	-.55763	-.45216

Tablo 5.12'de yapılan hesaplamalarda $\alpha=.05$ alınmıştır. Dolayısıyla $t_{26;.025} = 2.0555$ tablo değeri kullanıldı.

Parametrelere ilişkin Gauss Metodu güven bölgelerini oluşturmak amacıyla (4.74) eşitliği aşağıdaki gibi yeniden düzenlendi ve $\binom{6}{2} = \frac{6!}{4!2!} = 6$ farklı parametre çifti için güven bölgeleri ayrı ayrı oluşturuldu.

$$(\underline{\theta} - \underline{\theta}^*)^T B^T B (\underline{\theta} - \underline{\theta}^*) \leq \frac{p}{n-p} \cdot S(\underline{\theta}^*) \cdot F_{(p;n-p;1-\alpha)} \quad (5.27)$$

Bu çalışmada parametre sayısı, $p = 4$; deney sayısı, $n=30$ 'dur. Dolayısıyla $p = 4$, $n-p=26$ ve $1-\alpha=.95$ için F-tablo değeri 2.74 olarak alındı. Ayrıca $S(\underline{\theta}^*) = .03049553$ olduğu açıktır. Verilen bu değerleri (5.27) eşitliğinin sağ tarafında yerine koyulduğunda,

$$\frac{p}{n-p} S(\underline{\theta}^*) \cdot F_{(p, n-p; 1-\alpha)} = \frac{4}{30-4} (.03049553)(2.74) = .012855038$$

olarak elde edildi ve kullanıldı.

θ_1 ve θ_2 için Güven Bölgesi:

$$[\theta_1 + .02588 \quad \theta_2 - 1.01568] \begin{bmatrix} 15 & 15 \\ 15 & 30 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \theta_1 + .02588 \\ \theta_2 - 1.01568 \end{bmatrix} \leq .012855038 \quad (5.28)$$

θ_1 ve θ_2 parametreleri için Gauss Metodu güven bölgesi (5.28) eşitliğinde yer alan matrisin özdeğerleri ve özvektörleri yardımıyla oluşturuldu. Bu amaçla hesaplanan değerler Tablo 5.13'te verildi.

Tablo 5.13. (5.28) Eşitliğinden Bulunan Değerler

i	Özdeğerler (λ_i)	Özvektörler(e_i^T)	i. Eksen Yarı Uzunluğu
1	5.729491	[.8506509 -.5257311]	.04736732
2	39.27051	[.5257311 .8506509]	.01809271

Tablo 5.13'te verilen sonuçlar yardımıyla θ_1 ve θ_2 parametreleri için oluşturulan Gauss Metodu güven bölgesi Ek1'de verilmiştir.

θ_1 ve θ_3 için Güven Bölgesi:

$$[\theta_1 + .02588 \quad \theta_3 + 1.11569] \begin{bmatrix} 15 & -.4869 \\ -.4869 & .0967 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \theta_1 + .02588 \\ \theta_3 + 1.11569 \end{bmatrix} \leq .012855038 \quad (5.29)$$

θ_1 ve θ_3 parametreleri için Gauss Metodu güven bölgesi (5.29) eşitliğindeki karesel formda bulunan matrisin özdeğerleri ve özvektörleri

yardımla oluşturuldu. Bu amaçla hesaplanan değerler Tablo 5.14'de verilmiştir.

Tablo 5.14. (5.29) Eşitliğinden Bulunan Değerler

i	Özdeğerler (λ_i)	Özvektörler($\underline{e}_i^T$)	i. Eksen Yarı Uzunluğu
1	.080896	[.03261845 .9994679]	.3988461
2	15.01589	[.9994679 -.03261845]	.02925912

Tablo 5.14'de verilen sonuçlar ışığında θ_1 ve θ_2 parametreleri için oluşturulan Gauss Metodu güven bölgesi Ek2'de verildi.

θ_1 ve θ_4 için Güven Bölgesi:

$$[\theta_1 + .02588 \quad \theta_4 + .50490] \begin{bmatrix} 15 & 2.7895 \\ 2.7895 & 3.3471 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \theta_1 + .02588 \\ \theta_4 + .50490 \end{bmatrix} \leq .012855038 \quad (5.30)$$

θ_1 ve θ_4 parametrelerine ilişkin Gauss Metodu güven bölgesini oluşturmak için (5.30) eşitliğinde yer alan matrisin özdeğer ve özvektörleri hesaplanarak Tablo 5.15'de verilmiştir.

Tablo 5.15. (5.30) Eşitliğinden Bulunan Değerler

i	Özdeğerler (λ_i)	Özvektörler($\underline{e}_i^T$)	i. Eksen Yarı Uzunluğu
1	2.778866	[.1996052 -.9798763]	.06801473
2	15.56823	[.9798261 .2225289]	.02873539

Tablo 5.15'de verilen sonuçlar yardımıyla θ_1 ve θ_4 parametreleri için oluşturulan Gauss Metodu güven bölgesi Ek3'te verilmiştir.

θ_2 ve θ_3 için Güven Bölgesi:

$$[\theta_2 - 1.01568 \theta_3 + 1.11569] \begin{bmatrix} 30 & -.9895 \\ -.9895 & .0967 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \theta_2 & -1.01568 \\ \theta_3 & +1.11569 \end{bmatrix} \leq .012855038 \quad (5.31)$$

θ_2 ve θ_3 parametreleri için Gauss Metodu güven bölgesini (5.31) eşitliğinde yer alan matrisin özdeğerleri ve özvektörleri yardımıyla oluşturuldu. Bu amaçla hesaplanan değerler Tablo 5.16'da verilmiştir.

Tablo 5.16. (5.31) Eşitliğinden Bulunan Değerler

i	Özdeğerler (λ_i)	Özvektörler(e_i^T)	i. Eksen Yarı Uzunluğu
1	.06399346	[.0330358 .9994542]	.4481971
2	30.03271	[.9994542 -.0330358]	.020689

Tablo 5.16'da yer alan değerler yardımıyla θ_2 ve θ_3 parametreleri için oluşturulan Gauss Metodu güven bölgesi Ek4'te verildi.

θ_2 ve θ_4 için Güven Bölgesi:

$$[\theta_2 - 1.01568 \theta_4 + .50490] \begin{bmatrix} 30 & 4.6309 \\ 4.6309 & 3.3471 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \theta_2 & -1.01568 \\ \theta_4 & +.50490 \end{bmatrix} \leq .012855038 \quad (5.32)$$

θ_2 ve θ_4 parametreleri için Gauss Metodu güven bölgesi (5.32) eşitliğindeki karesel formda yer alan matrisin özdeğerleri ve özvektörleri yardımıyla oluşturuldu. Bu nedenle hesaplanan değerler Tablo 5.17'de verilmiştir.

Tablo 5.17. (5.32) Eşitliğinden Bulunan Değerler

i	Özdeğerler (λ_i)	Özvektörler($\underline{e}_i^T$)	i. Eksen Yarı Uzunluğu
1	2.565415	[.1664433 -.986051]	.07078773
2	30.78169	[.986051 .1664433]	.02043575

Tablo 5.17'deki sonuçlar yardımıyla θ_2 ve θ_4 parametreleri Gauss Metodu güven bölgesi Ek5'te verilmiştir.

θ_3 ve θ_4 için Güven Bölgesi:

$$[\theta_3 + 1.11569 \theta_4 + .50490] \begin{bmatrix} .0967 & -.3815 \\ -.3815 & 3.3471 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \theta_3 + 1.11569 \\ \theta_4 + .50490 \end{bmatrix} \leq .012855038 \quad (5.33)$$

θ_3 ve θ_4 parametreleri için Gauss Metodu güven bölgesi (5.33) eşitliğinde yer alan matrisin özdeğerleri ve özvektörleri yardımıyla oluşturuldu. Bu amaçla hesaplanan değerler Tablo 5.18'de verilmiştir.

Tablo 5.18. (5.33) Eşitliğinden Bulunan Değerler

i	Özdeğerler (λ_i)	Özvektörler($\underline{e}_i^T$)	i. Eksen Yarı Uzunluğu
1	.05252362	[.9933622 .1150277]	.49472
2	3.391276	[.1150277 -.9933622]	.06156802

Tablo 5.18'de yer alan sonuçlar yardımıyla θ_3 ve θ_4 parametreleri için oluşturulan Gauss Metodu güven bölgesi Ek6'da verilmiştir.

5.7. Tahminlere İlişkin Sonuçların İncelenmesi

Bu çalışma kapsamı içinde incelenen Likelihood Metodu dışındaki diğer iki metot yani, Doğrusallaştırma ve Gauss Metotları ile parametre vektörü tahmin edildi. Bulunan (5.2) ve (5.21) eşitlikleri, aynı başlangıç değerinden

iterasyonlara başlayan her iki metot için aynı tahmin değerlerine ulaşıldığını gösterdi. Bu çalışmada tahmin vektörü,

$$\underline{\theta}^* = \begin{bmatrix} -.02588 \\ 1.01567 \\ -1.11569 \\ -.50490 \end{bmatrix}$$

olarak elde edildi. Her iki metot sonuçları incelendiğinde, yalnızca θ_2 parametresinin tahmininde .00001 kadar bir farklılık göze çarptı. Bunun dışında en önemli kriter olan $S(\underline{\theta}^*)$ değerleri her iki metot açısından incelendiğinde 7×10^{-9} gibi bir fark oluştu. Fakat sözkonusu bu farkın küçüklüğüyle, Doğrusallaştırma Metodu tahminlerinin Gauss Metodu tahminlerine denk olduğu söylenebilir. Her iki metodun denkliğinin en önemli işareti olan Hata Kareler Toplamının,

$$S(\underline{\theta}^*) = .03049553$$

olduğu kabul edilebilir

5.7.1. Tahminlere İlişkin Güven Aralıkları ve Güven Bölgelerinin İncelenmesi

Tahminlere ilişkin güven aralıklarını inceleyebilmek için Tablo 5.3 ile Tablo 5.12'ye bakıldığında tüm parametreler için Gauss Metodu ve Doğrusallaştırma Metoduyla oluşturulan güven aralıklarının aynı olduğu görüldü. Yalnız θ_1 ve θ_2 'ye ilişkin güven aralıklarında sözkonusu iki metot için .00001'lik bir farklılık vardır. Fakat farkın önemli olmadığı söylenebilir. Tablo 5.10 incelendiğinde Likelihood Metodu güven aralıklarının hem Gauss Metodu

ve hem de Doğrusallaştırma Metodu güven aralıklarından biraz farklı olduğu görüldü. θ_1 , θ_2 ve θ_4 parametreleri için Doğrusallaştırma Metodu ve Gauss Metodu güven aralıkları sınırlarından .01'den daha az farklıdır. Bunun yanında θ_3 parametresi için üç metot için oluşturulan güven sınırları arasındaki farklılık .05 civarında bulunmuştur. Bütün metotlar dikkate alındığında $\alpha = .05$ için θ_1 , θ_2 , θ_3 , θ_4 parametreleri için güven sınırlarının, sırasıyla $\theta_1^* \mp .026$, $\theta_2^* \mp .020$, $\theta_3^* \mp .35$ ve $\theta_4^* \mp .055$ biçiminde olduğu düşünülebilir. Ayrıca $\alpha = .05$ için oluşturulan Likelihood Metodu güven sınırlarına, Gauss Metodu veya Doğrusallaştırma Metodu güven sınırları olarak ulaşmak istendiğinde α 'nın yaklaşık olarak .04 alınması gereklidir.

İncelenen metotlarla, parametrelere ilişkin oluşturulan güven bölgeleri 6 farklı parametre çifti için ayrı ayrı yorumlandı. Ayrıca, EKLER bölümünde verilen şekillerden daha ayrıntılı inceleyebilmek amacıyla Ek1, Ek3 ve Ek 5'in diğerlerine oranla 10 kat büyük ölçekle çizildiğine dikkat edilmelidir.

θ_1 ve θ_2 için Oluşturulan Güven Bölgesi

θ_1 ve θ_2 parametreleri güven bölgesini oluşturmak için hazırlanan Tablo 5.4. ve Tablo 5.13 incelendiğinde, θ_1 ve θ_2 parametreleri için Doğrusallaştırma Metodu ve Gauss Metodu güven bölgelerinin birbirlerine denk olduğu görüldü. Ayrıca Ek1'de verilen her iki metot güven bölgeleride bu düşüncüyü destekledi. Aynı Ek'te verilen Likelihood Metodu güven bölgesinin de diğer iki metot için oluşturulan güven bölgelerine denk olduğu görüldü.

θ_1 ve θ_2 için oluşturulan güven elipsinin uzun ekseninin boyu kısa ekseninin boyunun yaklaşık 2.26 katıdır. Ayrıca Tablo 5.4 ve Tablo 5.13'te yer alan ve birbirlerine eşit olan özvektörlerin koordinat eksenleriyle, yaklaşık 35

derecelik bir açı yaptığı saptandı. θ_1 ve θ_2 parametreleri arasında negatif yönde bir etkileşim varlığı ve bu etkileşimin kuvvetli olduğu görüldü.

θ_1 ve θ_3 için Oluşturulan Güven Bölgesi

θ_1 ve θ_3 parametreleri güven bölgesi oluşturmak için hazırlanan Tablo 5.5. ve Tablo 5.14 incelendiğinde θ_1 ve θ_3 parametreleri için Doğrusallaştırma Metodu güven bölgesi ve Gauss Metodu güven bölgesinin birbirlerine denk olduğu ortaya çıktı. Bu sözkonusu tablolardaki sonuçlar yardımıyla oluşturulan ve Ek2'de verilen güven bölgelerinde de iki metodun güven bölgeleriyle Likelihood Metodu güven bölgesi benzer özellikleri gösterdi.

θ_1 ve θ_3 parametreleri için oluşturulan güven ekseninin uzun ekseninin boyu, kısa ekseninin boyunun yaklaşık 13.63 katıdır. Güven elipsinin oluşturulmasında kullanılan özvektörlerin, koordinat eksenleriyle yaklaşık 2 derecelik bir açı yaptığı görüldü. Buradan θ_1 ve θ_3 parametreleri arasında negatif yönlü, küçük bir etkileşimin olduğu ve hatta bu etkileşimin ihmal edilebilecek kadar küçük olduğu saptandı.

θ_1 ve θ_4 için Oluşturulan Güven Bölgesi

θ_1 ve θ_4 parametreleri için Doğrusallaştırma metodu ve Gauss Metodu güven bölgelerinin oluşturulmasında kullanılan Tablo 5.6 ile Tablo 5.15'in aynı olduğu görüldü. Ayrıca çizilen güven bölgelerinin Ek3'teki görüntüsünden, sözkonusu iki metot güven bölgelerinin denkliği desteklendi. Yine Ek3'te verilen Likelihood Metodu güven bölgesi Doğrusallaştırma Metodu ve Gauss Metodu güven bölgelerinden çok az bir farklılık gösterdi. Çizim yapılırken alınan ölçek büyüklüğünde dikkate alınarak, oluşan farklılığın büyük olmadığı düşünüldü.

Oluşturulan güven bölgeleri ayrıntılı incelendiğinde, güven elipsinin uzun eksen uzunluğunun kısa eksen uzunluğuna olan oranının 2.36 olduğu ortaya çıktı. Ayrıca özvektörlerin, koordinat eksenleriyle yaklaşık 13 derecelik bir açı yaptığı görüldü. İncelemeler sonunda θ_1 ve θ_4 parametreleri arasında zayıfta olsa negatif yönlü bir etkileşimin varlığı saptandı.

θ_2 ve θ_3 için Oluşturulan Güven Bölgesi

Doğrusallaştırma Metodu ve Gauss Metodu güven bölgeleri için hazırlanan Tablo 5.7 ve Tablo 5.16 ile birlikte Ek4' incelendiğinde, θ_2 ve θ_3 parametreleri için oluşturulan sözkonusu metodlara ilişkin güven bölgelerinin denk olduğu görüldü. Likelihood Metodu güven bölgesi diğer iki metod yardımıyla oluşturulan güven bölgelerine benzerdir. θ_3 parametresinin doğrusal olmayışından kaynaklanan farklılığa rağmen üç metot güven bölgelerinin aynı olduğu söylenebilir.

θ_2 ve θ_3 parametresi güven bölgesini oluşturan elips incelendiğinde ise uzun eksen uzunluğunun, kısa eksen uzunluğunda 21.66 kat daha büyük olduğu saptandı. elipsi oluşturulan özvektörlerin ise koordinat eksenleriyle yaklaşık 2 derecelik açı yaptığı görüldü. Sözkonusu parametreler arasında pozitif yönde ve ihmal edilebilecek kadar küçük bir etkileşimin olduğu ortaya çıktı.

θ_2 ve θ_4 için Oluşturulan Güven Bölgesi

θ_2 ve θ_4 parametreleri için Doğrusallaştırma Metodu ve Gauss Metodu güven bölgelerini oluşturmak amacıyla düzenlenen Tablo 5.8 ile Tablo 5.17 ve Ek 5'te verilen güven bölgesi çizimlerinden incelenen üç metot güven bölgelerinin aynı olduğu görüldü. Fakat Ek5'te verilen çizimlerde Likelihood Metodu güven bölgesinin, diğer iki metot güven bölgelerinden bir miktar farklı olduğu saptandı. Sözkonusu bu farklılığın incelenen metot güven bölgelerinin aynı olmadığı sonucunu doğuracak kadar önemli olmadığı düşünüldü.

θ_2 ve θ_4 parametreleri güven elipsinin uzun ekseninin boyu, kısa eksen boyunun yaklaşık 3.46 katıdır. Güven elipsini oluşturan özvektörlerin koordinat eksenleriyle arasında oluşan açının 11 derece civarında olduğu görüldü. Ayrıca θ_2 ve θ_4 parametreleri arasında negatif yönde fakat, oldukça zayıf bir etkileşim saptandı.

θ_3 ve θ_4 için Oluşturulan Güven Bölgesi

Tablo 5.9 ile Tablo 5.18 ve Ek 6, θ_3 ve θ_4 parametrelerine ilişkin oluşturulan Doğrusallaştırma Metodu, Likelihood Metodu ve Gauss Metodu güven bölgelerinin benzer olduğunu ortaya çıkardı. Ek 6'da çizilen üç metoda ait güven bölgeleri incelendiğinde Likelihood Metodu güven bölgesinin diğerlerinden biraz farklı olmasına rağmen, oluşturulan güven bölgelerinin hepsinin aynı özellikleri gösterdiği anlaşıldı.

θ_3 ve θ_4 parametreleri için oluşturulan güven elipsinin uzun ekseninin boyu, kısa ekseninin boyunun yaklaşık 8 katıdır. Ayrıca bu iki parametreye ilişkin güven bölgesinin oluşturulmasında kullanılan özvektörler ile koordinat eksenleri arasında yaklaşık 7 derecelik bir açı gözlemlendi. θ_3 ve θ_4 parametreleri arasında pozitif yönde ve kuvvetli bir etkileşimin varlığı saptandı.

BÖLÜM 6

SONUÇ

Bu çalışmada doğrusal olmayan modele sahip bir problemde parametre tahminin yapılması, bulunan tahminlere ilişkin güven aralıklarının ve güven bölgelerinin oluşturulması ayrıntılı olarak incelendi. Bu amaçla Doğrusallaştırma Metodu, Likelihood Metodu ve Gauss Metodu kullanıldı. Önce Doğrusallaştırma Metodu ve Gauss Metodu ile parametre tahmini yapıldı. Her iki metodun uygulanması sonunda parametre vektörü olarak aynı değerlere ulaşıldı. Aynı başlangıç noktasından hareket eden metotların her ikisinde 4. iterasyon sonunda optimum çözüme ulaştı. Bu çalışmada incelenen problem için iki metodun aynı yakınsama hızına sahip olduğu söylenebilir. Burada doğrusal olmayan modeller için yapılan parametre tahmininde iteratif tekniklerin kullanılmasının zorluğuna, öncelikle başlangıç noktasının seçimine dikkat edilmelidir. Zira doğrusal olmayan modele karşılık gelen yüzey tepeciklere, çukurlara ve iç içe geçmiş ilmekler gibi karmaşık şekillere sahip olabilir. Bu durum ise değişik noktalardan iterasyona başlandığında farklı sonuçların ortaya çıkmasına neden olabilir. Ayrıca her iterasyonda atılan adımın yönü ve büyüklüğünün, optimum noktanın kaçırılmaması açısından uygun olması önemlidir. Çünkü yanlış yönde ya da fazla atılacak bir adım büyüklüğü ile çözüm noktası atlanabilir. Özellikle başlangıç noktasını belirlerken yaşanacak sıkıntıları aşabilmek için yüzeyin değişik noktalarından farklı başlangıç değerleri belirleyerek işlemleri tekrarlamak ve bu şekilde çözüm noktasına ulaşmak en iyi yoldur. Bu çalışmada incelenen problemde de farklı başlangıç noktalarından hareket edilmiş ve bu şekilde en iyi çözüme ulaştıran başlangıç noktası tespit edilmiştir. Bu yapılan işlemler sonunda problemimiz için Doğrusallaştırma Metodu ve Gauss Metodu aynı sonucu vermişlerdir.

Tahminlere ilişkin güven aralıkları ve güven bölgeleri oluşturulurken, Doğrusallaştırma Metodu ve Gauss Metodunun yanında bir de Likelihood Metodu kullanıldı. Yapılan işlemler sonunda Doğrusallaştırma Metodu ve Gauss Metodu güven aralıkları ve güven bölgeleri birbirine denk sonuçlar vermiştir. Likelihood Metodu sonuçları bu iki metot sonuçlarından küçük farklılıklar göstermesine rağmen, aynı çözümlere ulaşıldığı söylenebilir. Aynı sonuçlara ulaşılan üç metot içinde en zor çizimi yapılan güven bölgesinin Likelihood Metodu güven bölgesi olduğu saptandı. Zira diğer iki metot güven bölgeleri, güven bölgesini oluşturan eşitliklerin içinde yer alan matrisin özdeğer ve özvektörleri yardımıyla oluşturulurken; Likelihood Metodu güven bölgesi, parametrelerden birine sabit değerler vererek bulunan diğer parametre değerlerinin tek tek koordinat sisteminde noktalanarak dış konturun oluşturulmasıyla elde edilmektedir. Fakat Likelihood Metodu güven bölgelerinin diğerlerine oranla daha güvenli olduğu düşünülebilir. Çünkü Gauss Metodu ve Doğrusallaştırma Metodu güven bölgeleri oluşturulurken, güven bölgesinin tam bir elips olduğu varsayılp, güven bölgesi bu varsayıma göre oluşturulurken; Likelihood Metodu güven bölgeleri, konturların elipsten olabilecek farklı davranışlarını daha net göstermektedir.

Genel itibariyle incelenen üç metot içinde en kolay uygulanan metodun Doğrusallaştırma Metodu olduğu belirlendi. Gerek tahmin vektörü bulunurken ve gerekse güven aralıkları ile güven bölgeleri oluşturulurken bu kolaylık görüldü. İncelenen diğer metotlardan biri olan Gauss Metodu uygulamalarda en çok tercih edilen tahmin yöntemlerindendir. Her iterasyonda atılan adım büyüklüğünün kontrol edilebilmesi ve metod uygulanırken kullanılan N matrisinin negatif tanımlı (ya da zayıf koşullu) olmaması bu metodu çekici kılmaktadır. Çünkü bu şekilde tahminlerde kullanılan N matrisinin tersinin alınması daima mümkün olmaktadır.

Bu çalışmada kullanılan metotların herbir iterasyonu sırasında işlem yapılan nokta (ya da çözüm noktası) etrafında yüzeyin düzlemsel olduğu varsayılmaktadır. Metotlar ancak bu varsayım doğru olduğunda sapmasız sonuçlar verecektir. Aksi takdirde yani, doğrusal olmayan modelde iterasyon noktası (ya da çözüm noktası) etrafında yüzey düzlemsel değilse tahmin edilen değerler çok büyük bir ihtimalle sapmalı olacaktır.

Doğrusal olmayan modelin eğrilik etkisi ve eğrilik ölçüsü bu çalışmanın içeriğine dahil edilmemiş ve incelenmemiştir. Modelin eğrilik etkisi ve parametre etkisi eğrilik parametre tahmininde, güven aralıkları ve güven bölgelerinin oluşturulmasında ortaya çıkaracağı farklılıklar gözardı edilmiş ve incelenmek üzere bırakılmıştır. Zira, eğrilik ölçüsünün hesaplanması ve etkisinin belirlenmesi kuşkusuz, problemin yorumlarında ve hesaplamalarında problem hakkında daha net fikirler edinilmesini sağlayacaktır.

KAYNAKLAR

1. Gallant, A.R. "Nonlinear Regression" The American Statistician, 29, 73-81 (1975).
2. Bard, Y. Nonlinear Parameter Estimation, Academic Press, New York, 1974.
3. Donaldson, J.R, Schnabel, R.B. "Computational Experience with Confidence Regions and Confidence Intervals for Nonlinear Least Squares" Technometrics, Vol. 29, No. 1, 67-82 (1987).
4. Draper, N.R., Smith, H. Applied Regression Analysis, Jhon Wiley and sons. Inc., New York, 1966.
5. Goldfeld, S.M. and Quandt, R. E. Nonlinear Methods in Econometrics, North-Holland. Publishing Company Amsterdam, 1972.
6. Rawlings, J.O. Applied Regression Analysis: A Research Tool, Pacific Grove, Wadsworth and Brods, 1988.
7. Duncan, G.T. "An Empricial Study of Jacknife-Consturcted Confidence Regions in Nonlinear Regression" Technometrics, Vol. 20, No. 2, 123-129 (1978).
8. Aydın, C. Kovaryans Matrisi için Bilgi Verici Olmayan Önsel Dağılım ve Doğrusal Olmayan Modellerde Parametre Kestirimi, Doktora, Fen Bilimleri Enstitüsü, Şubat 1992, Gazi Üniversitesi, Ankara.

9. Bates, D.M. and Hunter, W.G. "Nonlinear Models" Encyclopedia of Statistical Sciences, John Wiley and Sons, New York, Vol. 6, 293-301, 1985.
10. Watts, P.G. and Bates, D.M. "Nonlinear Regression" Encyclopedia of Statistical Sciences, John Wiley and Sons, New York, Vol. 6, 306-312, 1985.
11. Orman, M.N. Constrained Nonlinear Least Squares Estimation: A Milk Production Study, Master, Institute of Science and Technology, September, 1991, METU, Ankara.



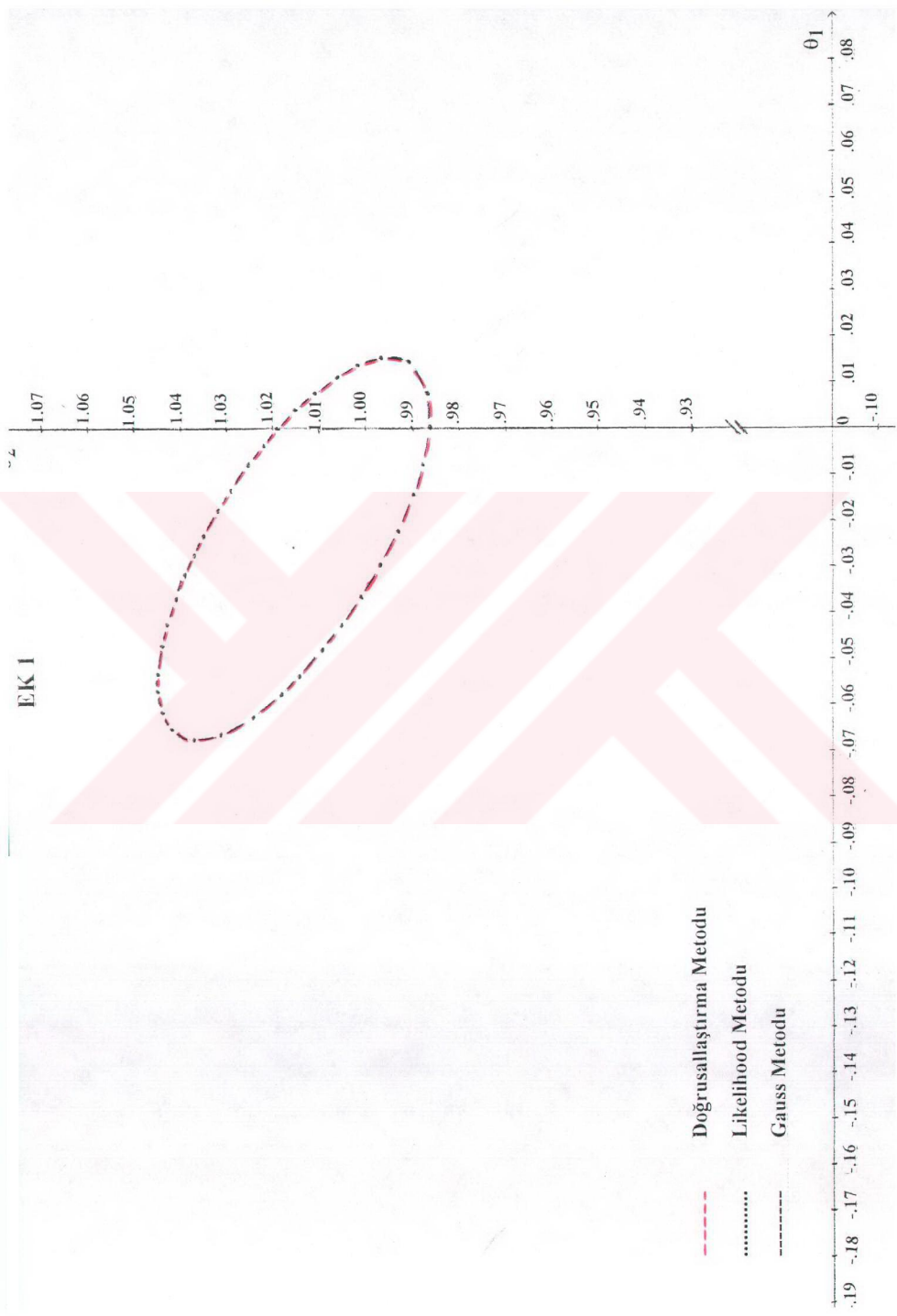
ÖZGEÇMİŞ

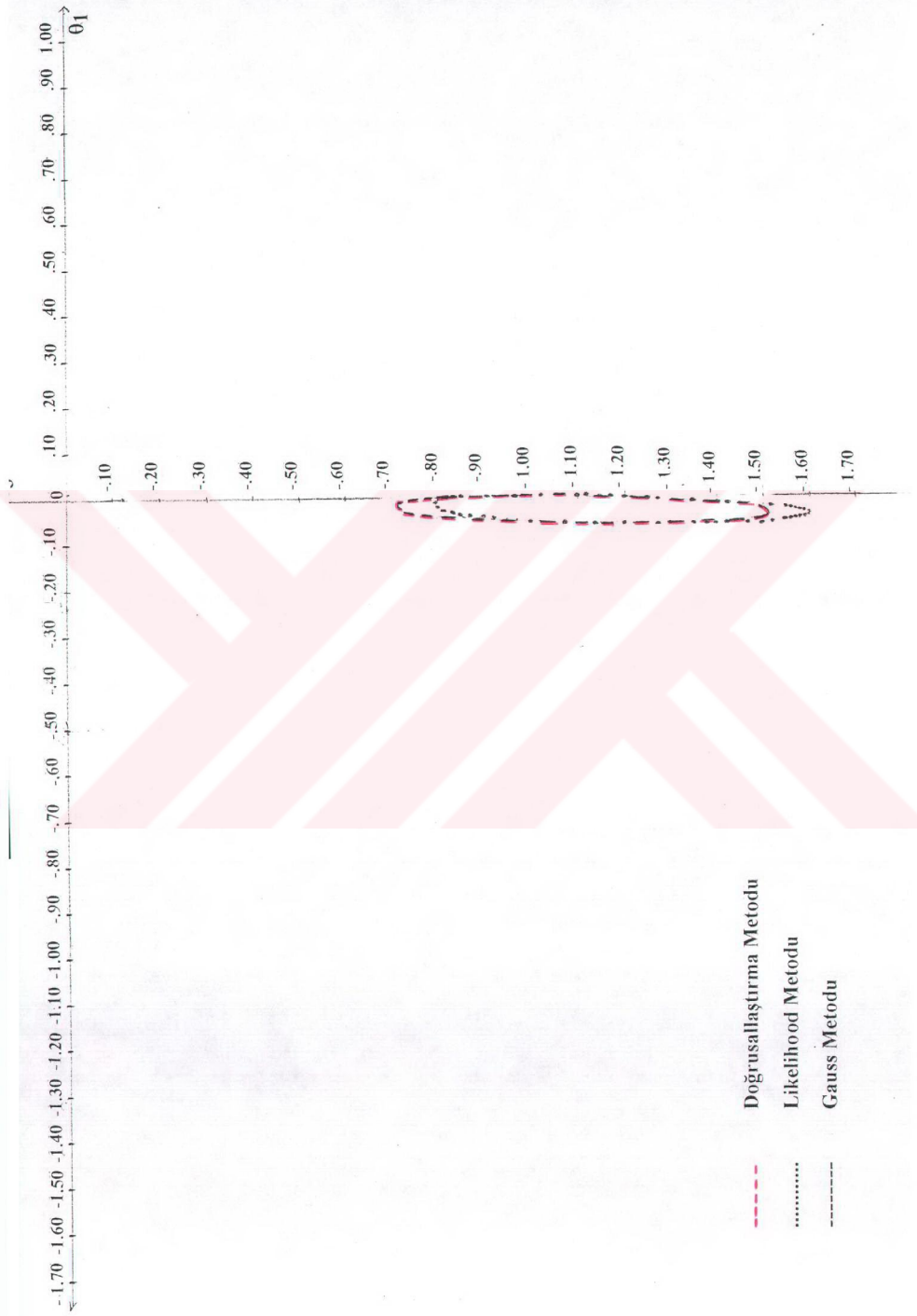
1971 yılında Giresun'da doğdu. İlk, orta ve lise öğrenimini Giresun'da tamamladı. 1988 yılında Gazi Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi İstatistik Bölümü'nde başladığı öğrenimini 1993 tarihinde bitirdi. Aynı yıl Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü'nde "Yüksek Lisans" öğrenimine başladı. Ayrıca 1994 yılında Devlet İstatistik Enstitüsü Uygulamalı İstatistik İhtisas Eğitim Programı'na (İngilizce) başladı. 1995 yılında Yurtdışında Lisansüstü Öğrenim Bursunu Kafkas Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi İstatistik Bölümü kontenjanından kazandı ve aynı üniversitede "Araştırma Görevlisi" olarak göreve başladı.

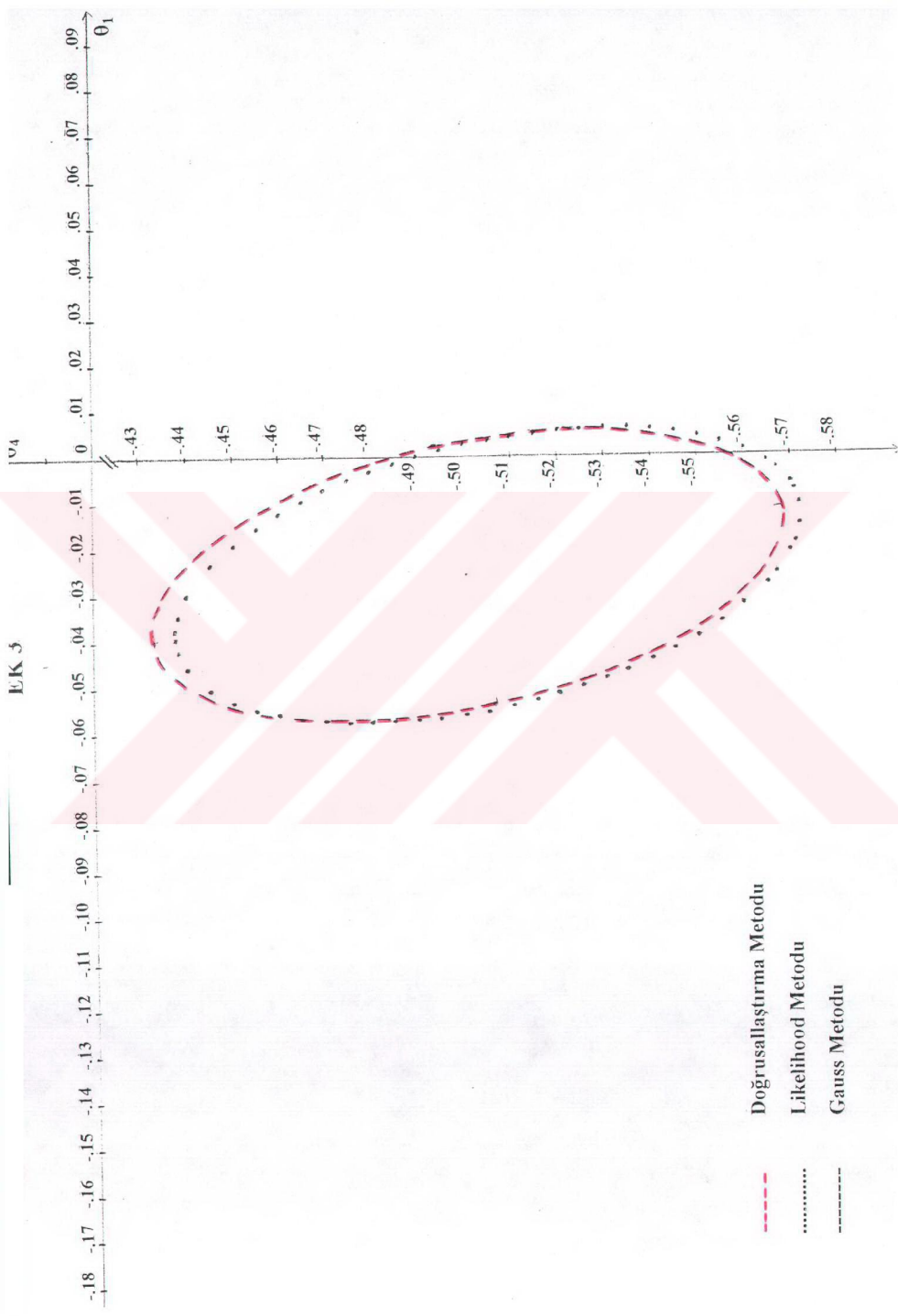


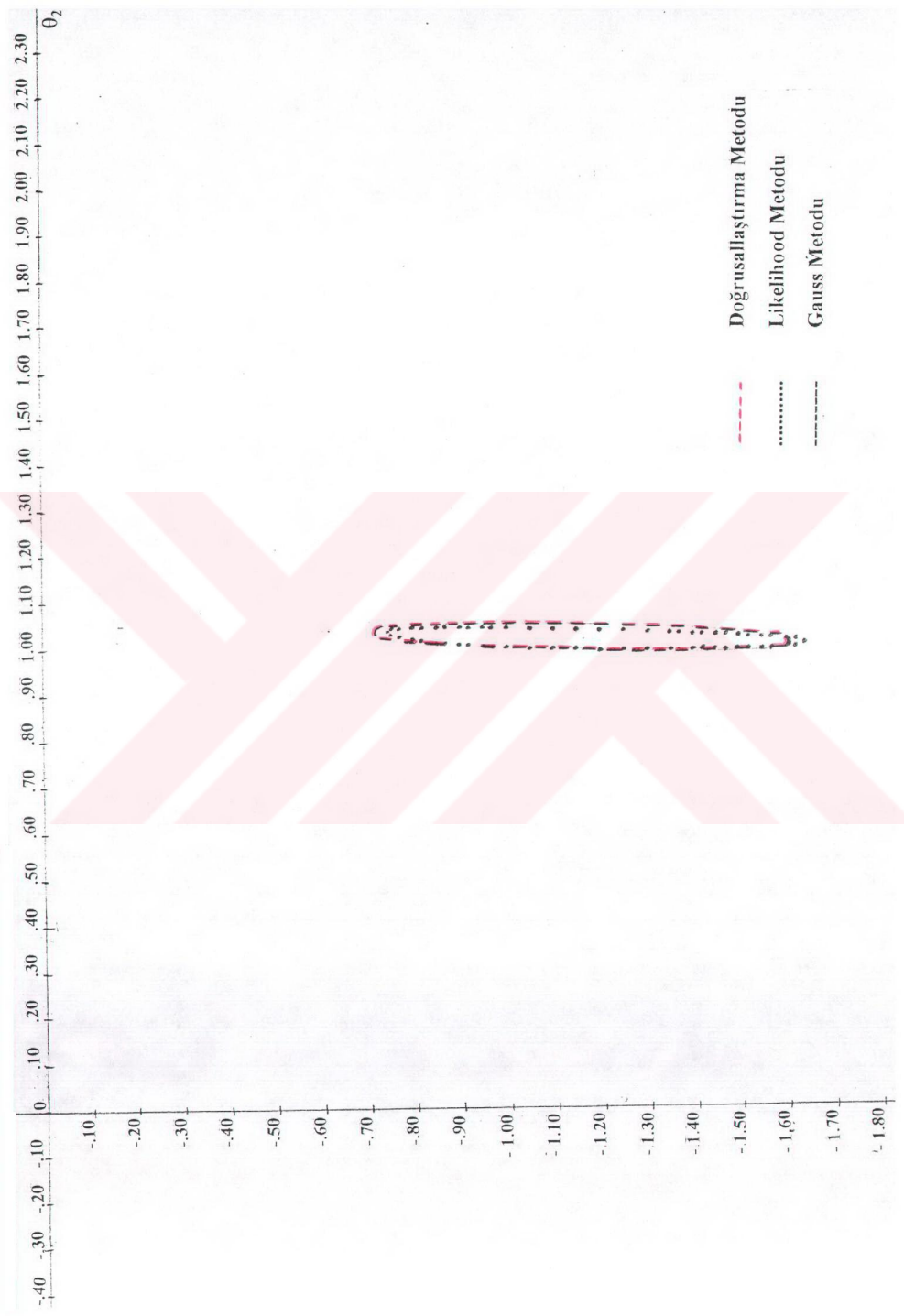


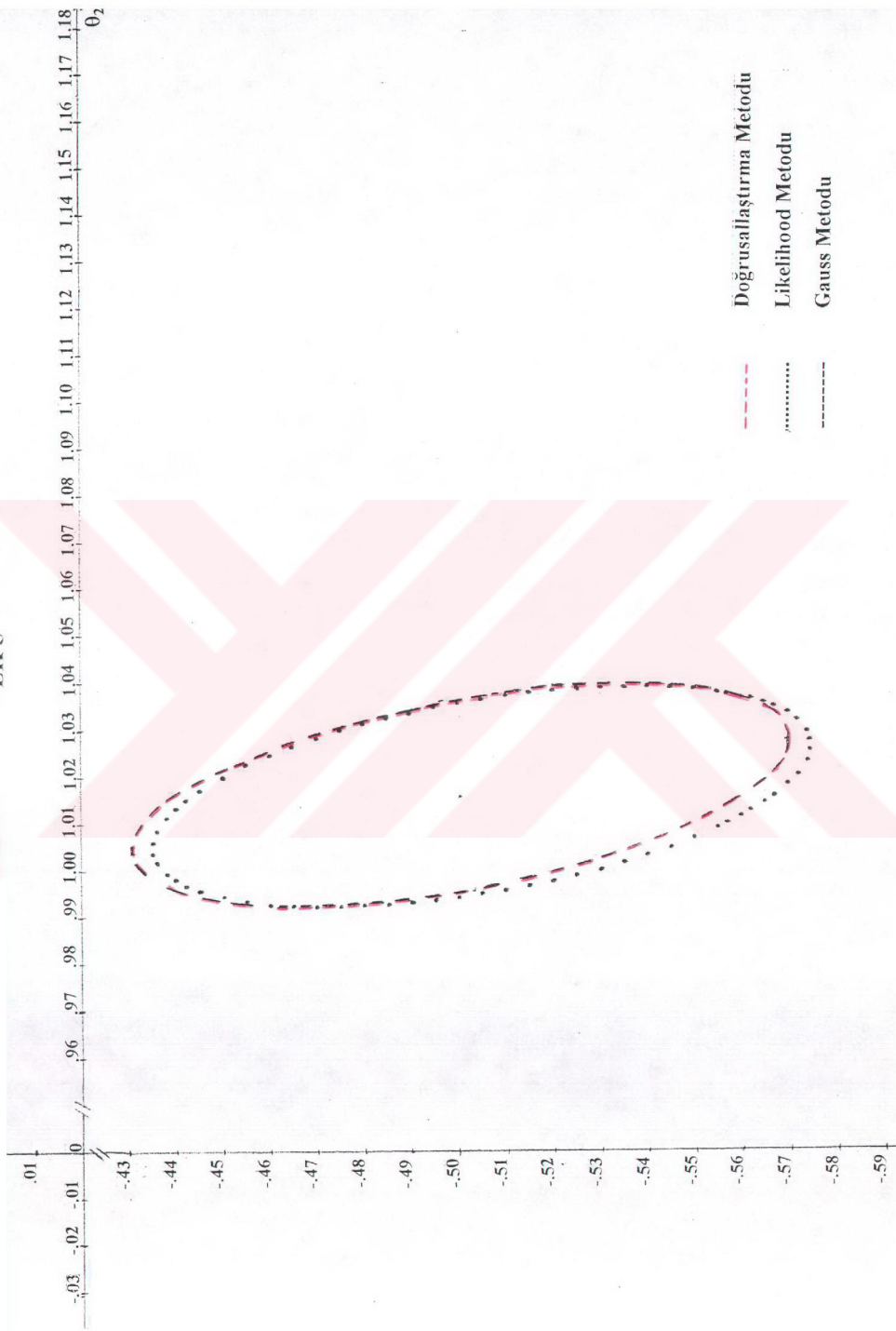
EKLER











EK 6

