

**ANKARA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

**DOĞRUSAL OLMAYAN REGRESYON MODELLERİNDE
PARAMETRE TAHMİN YÖNTEMLERİ VE
UYGULAMALARI ÜZERİNE BİR ÇALIŞMA**

Umut DEMİR

İSTATİSTİK ANABİLİM DALI

**ANKARA
2022**

Her hakkı saklıdır

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

DOĞRUSAL OLMAYAN REGRESYON MODELLERİNDE PARAMETRE TAHMİN YÖNTEMLERİ VE UYGULAMALARI ÜZERİNE BİR ÇALIŞMA

Umut DEMİR

Ankara Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
İstatistik Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Esin KÖKSAL BABACAN

Bu araştırmada doğrusal olmayan regresyon modellerinin genel yapısı ele alınarak parametre tahmin yöntemlerine değinilmiştir. Doğrusal olmayan regresyon modellerinin parametrelerini tahmin etme aşamasında normal denklemlerin çözülmesi zor olacaktır. Bu nedenle denklemlerin çözümü için Gauss-Newton, Levenberg-Marquardt, En Hızlı İniş, Newton-Rapson gibi birçok iteratif yöntemlerden faydalanılabilir. Bu yöntemler kullanılırken başlangıç noktasının seçimi oldukça önemlidir, uygun olmayan başlangıç noktasının seçimi yanlış çözümler ortaya çıkarabileceği gibi çözümün zaman bakımından etkilenmesine neden olabilir. Bazı modeller uygun dönüşümler altında doğrusal gibi davrandığından bu tür modellerde doğrusal regresyon modellerinde kullanılan yöntemler uygulanabilmektedir. Ancak yapılan dönüşüm, modeldeki hata terimlerini etkileyebilir. Etkilenen hata terimlerinin sabit varyanslı olmaması durumunda model doğrusal regresyon modeli gibi davranmayacaktır.

Bu çalışmada, doğrusal olmayan regresyon modellerinde parametre tahmininde kullanılan iteratif yöntemler incelenmiş ve daha sonra bu yöntemleri uygulamak için R, SPSS, MINITAB ve MATLAB programlarından yararlanılmıştır.

Şubat 2022, 45 sayfa

Anahtar kelimeler: Parametre Tahmini, İteratif Yöntemler ve Doğrusal Olmayan Regresyon

ABSTRACT

Master Thesis

A STUDY ON PARAMETER ESTIMATION METHODS AND APPLICATIONS IN NONLINEAR REGRESSION MODELS

Umut DEMİR

Ankara University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Statistic

Supervisor: Asst. Prof. Esin KÖKSAL BABACAN

In this study, the general structure of nonlinear regression models are considered and parameter estimation methods in nonlinear regression models are investigated. It is difficult to solve normal equations, which are using for estimating the parameters of nonlinear regression models. For this reason, many iterative methods such as Gauss-Newton, Levenberg-Marquardt, Gradient Descent, Newton-Raphson can be used for the solution of equations. While using these methods, the selection of the starting point is very important. The selection of the inappropriate starting point may lead to incorrect solutions. Some models behave like linear under appropriate transformations and the methods used in linear regression models can be applied. However, the transformation may affect the error terms in the model. If the affected error terms do not have constant variance, the model is not behave like a linear regression model.

After examining the parameter estimation methods and iterative methods used in parameter estimation, R, SPSS, MINITAB and MATLAB programs are used for the solutions of parameter estimation in nonlinear regression models.

February 2022, 45 pages

Key Words: Parameter Estimation, Iterative Methods and Nonlinear Regression

ÖNSÖZ ve TEŞEKKÜR

Çalışmalarımı yönlendiren, araştırmanın her aşamasında bilgi, öneri ve yardımlarını esirgemeyen Doç. Dr. Esin KÖKSAL BABACAN'a, tez çalışmalarımnda beni destekleyen aileme en derin duygularla teşekkür ederim.

Umut DEMİR
Ankara, Şubat 2022



İÇİNDEKİLER

TEZ ONAY SAYFASI	
ETİK.....	i
ÖZET.....	ii
ABSTRACT	iii
ÖNSÖZ ve TEŞEKKÜR.....	iv
SİMGELER DİZİNİ	vi
ŞEKİLLER DİZİNİ	vii
ÇİZELGELER DİZİNİ	viii
1. GİRİŞ	1
2. DOĞRUSAL OLMAYAN REGRESYON MODELLERİNİN GENEL YAPISI.	3
2.1 Doğrusallaştırılabilen Modeller	5
3. DOĞRUSAL OLMAYAN REGRESYON MODELLERİNDE PARAMETRE TAHMİNİ.....	8
3.1 En Küçük Kareler Yöntemi	8
3.2 En Çok Olabilirlik Yöntemi	10
4. İTERATİF YÖNTEMLER	12
4.1 Gauss-Newton Yöntemi	12
4.2 En Hızlı İniş Yöntemi	13
4.3 Levenberg-Marquardt Yöntemi	15
4.4 Parametrelerin Başlangıç Değerlerinin Seçimi	18
5. UYGULAMA ÇALIŞMALARI.....	19
5.1 Uygulama Çalışması 1.	19
5.2 Uygulama Çalışması 2.	22
5.3 Uygulama Çalışması 3.	24
5.4 Simülasyon Çalışması (Michaelis-Menten Kinetiği).....	26
6. GERÇEK VERİ UYGULAMASI.....	30
7. SONUÇ.....	37
KAYNAKLAR	39
EKLER.....	41
EK 1 En Hızı İniş Yöntemi ile Parametre Tahmini Matlab Kodları	41
EK 2 Gompertz, Richaards, Weibull Modellerinin Parametre Tahmini için R Kodları.....	43
ÖZGEÇMİŞ.....	45

SİMGELER DİZİNİ

β	p tane bilinmeyen parametre vektörü
$f(x, \beta)$	beklenen değer fonksiyonu
$E(\varepsilon)$	hata terimlerinin beklenen değeri
$Cov(\varepsilon)$	hata terimlerinin kovaryansı
x	bağımsız değişken
y	bağımlı değişken
$S(\beta)$	artık kareler toplamı
$F(\beta)$	jakobyen matrisi
σ^2	varyans
L	olabilirlik fonksiyonu
∇	gradyan vektörü
$\hat{\beta}$	parametre tahmini

Kısaltmalar

EKK	En küçük kareler
EÇOB	En çok olabilirlik
SE	Standart hata
MSE	Hata kareler ortalaması
AIC	Akaike Ölçütü

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1 Farklı parametre değerleri için 2.3 modelinin grafiği.....	5
Şekil 5.1 Uygulama çalışması 1'de yer alan modelin x-y saçılım grafiği	19
Şekil 5.2 Uygulama Çalışması 1 SPSS Çıktısı	20
Şekil 5.3 Uygulama Çalışması 1 MATLAB Çıktısı	21
Şekil 5.4 Uygulama Çalışması 2 de yer alan modelin x-y saçılım grafiği.....	22
Şekil 5.5 Uygulama Çalışması 3'te yer alan modele ait x-y saçılım grafiği	25
Şekil 5.6 Michaelis–Menten kinetiği modeline ait saçılım grafiği	28
Şekil 5.7 Michaelis-Menten Kinetik modeline ait verilerin saçılım grafiği ile uydurulan eğrinin grafiği.....	29
Şekil 6.1 Gerçek veri uygulamasına ait tahmin ve gerçek değerlerinin grafiği	35

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 2.1 Doğrusal olmayan bazı modeller	4
Çizelge 2.2 Doğrusallaştırılabilen bazı modeller	6
Çizelge 5.1 Uygulama Çalışması 1 modeli için örnek veri seti	19
Çizelge 5.2 Uygulama Çalışması 2 modeline ait veri seti	22
Çizelge 5.3 Uygulama Çalışması 2 modeline ait parametre tahmini	23
Çizelge 5.4 Uygulama Çalışması 2 modeline ait 3 farklı iteratif algoritmanın karşılaştırması.....	23
Çizelge 5.5 Uygulama Çalışması 2 modeline ait 3 farklı iteratif algoritmanın farklı başlangıç değerlerinde karşılaştırması	24
Çizelge 5.6 Uygulama Çalışması 2 modeline ait 3 farklı iteratif algoritmanın farklı başlangıç değerlerinde karşılaştırması	25
Çizelge 5.7 Uygulama Çalışması 3 modeli için verilen örnek veri seti	25
Çizelge 5.8 Uygulama Çalışması 3 modeline ait 3 farklı iteratif algoritmanın karşılaştırması.....	25
Çizelge 5.9 Uygulama Çalışması 3 modeline ait 3 farklı iteratif algoritmanın farklı başlangıç değerlerinde karşılaştırması	27
Çizelge 5.10 Michaelis–Menten kinetiği modeline ilişkin simülasyonla üretilen veriler	28
Çizelge 5.11 Michaelis–Menten kinetiği modeline ait R programındaki tahmin sonuçları	29
Çizelge 6.1 Gerçek veri seti uygulaması.....	30
Çizelge 6.2 Büyüme modelleri.....	31
Çizelge 6.3 Gompertz,Richards ve Weibull modellerinin parametre başlangıç değerleri.....	34
Çizelge 6.4 Uygulama Çalışması 6'ya ait modellerin sonuçları	35

1. GİRİŞ

Bu çalışmada doğrusal olmayan regresyon modellerinde parametre tahmini konusu ele alınmıştır. Doğrusal olmayan regresyon modellerinde parametre tahminlerini bulmak için elde edilen normal denklemlerin basit ve kapalı formda çözümü mevcut değildir. Bu durumda normal denklemlerin çözülmesi için iteratif yöntemler kullanılır. Çalışmada amaç bu iteratif yöntem algoritmalarını araştırmaktır.

Doğrusal olmayan regresyon analizi, fizik, kimya, biyoloji ve mühendislik gibi birçok alanda yaygın olarak kullanıma sahiptir. Bu gibi alanlarda, uygulamalarda kullanılan modellerin çoğu doğrusal olmayan yapıdadır. Çoğu model, katsayıları bakımından doğrusal olmayan bir yapıya sahiptir. Modelin doğrusal olmaması, geometrisinden veya modeldeki parametrelerden kaynaklanır. Doğrusallık kavramı, modeldeki değişkenlerin ya da parametrelerin doğrusallığıdır. Burada bahsedilen doğrusallık, modeldeki parametrelerin doğrusal olup olmama durumudur. Modelde, parametrelere göre birinci dereceden türev alındığında elde edilen değer parametreden bağımsız yani sabit bir değer ise model doğrusal olarak anılır. Doğrusal modellerdeki tahminler minimum varyanslı, yansız en küçük kareler (*ekk*) tahminleridir. Ancak, doğrusal olmayan modellerdeki tahminler genellikle yanlıdır ve minimum varyansa sahip olmayabilirler. Büyük örneklem alındığında, parametre tahmin sonuçları doğrusal durumdaki yaklaşıma en uygun olacaktır.

Doğrusal olmayan regresyon modellerinde normal denklemlerin çözümü, doğrusal regresyon modellerinin normal denklemlerine göre daha zordur. Bu denklemlerin çözümü için Gauss-Newton, Newton Raphson, En Hızlı İniş gibi algoritmalar kullanılır. Bu algoritmalar kullanılırken uygun başlangıç değeri seçimi oldukça önemlidir. Başlangıç değeri olarak, yapılan çalışma sırasında ya da önceki çalışmalardan elde edilen değerler kullanılabilir. Yanlış seçilen başlangıç değeri ardışık işlem sayısının artmasına neden olabilir.

Literatürde, başlangıç noktasından fazla etkilenmeyen ve türev gerektirmeyen bazı sezgisel yöntemler mevcuttur. Nelder-Mead (1964), çok değişkenli fonksiyonun yerel

minimumunu bulduran Nelder-Mead simpleks yöntemini geliřtirmiřtir. Huber, 1964 ve 1973 yıllarında sađlam (robust) tahmin ediciler üzerine alıřmalar yapmıř ve M tahmin edicilerini geliřtirmiřtir.

Bates ve Watts (1988), yaptıkları alıřmada dođrusal olmayan regresyon modellerine ve uygulamalarına yer vermiřlerdir. Aydın (1992) tarafından yapılan alıřmada, dođrusal olmayan modellerin Normal dađılıma sahip hata terimlerine iliřkin varyans-kovaryans matrisi iin ileri srlen nsel dađılımın olabilirlik fonksiyonu zerindeki etkilerini incelemiřtir. Candan (1995) tarafından yapılan alıřmada dođrusal olmayan regresyon modellerinde Gauss-Newton yaklařımı yardımıyla olabilirlik fonksiyonu maksimize edilip model parametreleri tahmin edilmiřtir. Aksoy (1996) tarafından yapılan alıřmada ise dođrusal olmayan regresyon modeli kurulduktan sonra model artıkları arasında meydana gelen otokorelasyonlar da modele dahil edilip dođrusal olmayan parametre tahminleri dođrusallařtırma yöntemiyle yapılmıřtır.

Bu alıřmada, dođrusal olmayan regresyon modellerinin genel yapısı ele alınarak, dođrusal regresyon modellerle farkı incelenmiřtir. Bazı modeller uygun dnřmler altında dođrusal gibi davranmaktadır. alıřmada, uygun dnřmler altında dođrusal yapıya sahip modellerden kısaca bahsedilmiřtir. Dođrusal olmayan regresyon modellerinde parametre tahmin yöntemlerinden olan *ekk* ile *eob* yöntemlerinden bahsedilmiřtir. Bu yöntemleri uygularken normal denklemlerin kapalı formda zm yoktur. Bu nedenle Parametre tahmin yöntemleri ele alınıp, denklemlerin zmnde yardımcı olacak Gauss-Newton, Levenberg-Marquardt ve En Hızlı İniř yöntemleri anlatılmıřtır. İteratif algoritmalardan faydalanırken parametrelerin bařlangı deđerlerinin seimi olduka nemlidir. Uygun seilmeyen bařlangı deđerinin iterasyon sayısını artıracakđı gibi yakınsama gerekleřmeyebilir. Parametrelerin bařlangı deđerlerinin seimi anlatılarak rnek uygulama alıřmalarına geilmiřtir. Uygulama alıřmalarında parametre tahmin yönteminde kullanılan Gauss-Newton, Levenberg-Marquardt ve En Hızlı İniř yöntemlerinin karřılařtırmalı rneklerine yer verilmiřtir. Ayrıca R programında parametre tahmini iin simlasyon alıřması yapılmıřtır. Yapılan uygulama alıřmalarından sonra gerek veri zerinde dođrusal olmayan modellerde en iyi model seimine iliřkin uygulama alıřması yapılmıřtır.

2. DOĞRUSAL OLMAYAN REGRESYON MODELLERİNİN GENEL YAPISI

Doğrusal olmayan regresyon modeli genel olarak;

$$y = f(x, \beta) + \varepsilon \quad (2.1)$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada $f(x, \beta)$ beklenen değer fonksiyonunu, β vektörü p tane bilinmeyen parametre vektörünü, x vektörü bağımsız değişkenleri ve ε hata terimini ifade eder. Doğrusal olmayan regresyon modelinin doğrusal regresyon modelinden farkı, beklenen değer fonksiyonunun parametrelerin doğrusal olmayan bir fonksiyonu olmasıdır. Yani, doğrusal olmayan regresyon modelinde beklenen değer fonksiyonunun parametrelere göre kısmi türevlerinden en az bir tanesi en az bir parametreye bağlıdır. Doğrusal regresyon modelinde parametreye göre türevler alındığında sonuçlar parametreye bağımlı olmayacaktır. Doğrusal olmayan regresyonun doğrusal regresyondan diğer bir farkı ise modeldeki bağımsız değişkenlerin sayısı ile parametrelerin sayısının ilişkili olmamasıdır. Doğrusal regresyon modelinde $p - 1$ tane bağımsız değişken varsa p tane regresyon katsayısı olmalıdır, ancak doğrusal olmayan regresyon modeli için bu durum geçerli olmayabilir. (2.1) modeli vektör formda,

$$Y = f(\beta) + \varepsilon \quad (2.2)$$

şeklinde ifade edilebilir.

$$Y = \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{bmatrix}, f(\beta) = \begin{bmatrix} f(x_1, \beta) \\ f(x_2, \beta) \\ \vdots \\ f(x_n, \beta) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1(\beta) \\ f_2(\beta) \\ \vdots \\ f_n(\beta) \end{bmatrix}, \varepsilon = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}, \beta = \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_n \end{bmatrix}$$

ifade etmektedir.

$$Y = \beta_1^x + \varepsilon$$

modeli göz önüne alınsın. Beklenen değer fonksiyonun β_1 parametresine göre kısmi türevi alındığında;

$$\frac{\partial f(x, \beta_1)}{\partial \beta_1} = x\beta_1^{x-1}$$

dir. Kısmi türevi bilinmeyen parametre β_1 'in bir fonksiyonu olduğundan model doğrusal değildir.

Doğrusal olmayan regresyon modeli için varsayımlar;

- $f(\beta)$ biçimsel olarak biliniyor ve $f(\beta)$ fonksiyonu parametre vektörüne göre en az iki kere türevlenebilir.

- $E(\varepsilon) = 0$

- $Cov(\varepsilon) = \sigma^2 I$

- Hata terimlerinin varsayımı $\varepsilon \sim N(0, \sigma^2 I)$

şeklindedir (Bates ve Watts 1988, Genç 1997). Literatürde sıklıkla kullanılan doğrusal olmayan bazı regresyon modelleri Çizelge 2.1 ile verilmiştir.

Çizelge 2.1 Doğrusal olmayan bazı modeller

Üstel büyüme modeli	: $y_i = \beta_1 \exp(\beta_2 x_i) + \varepsilon_i$
Gompertz büyüme modeli	: $y_i = \beta_1 \exp\{-\beta_2 \exp(\beta_3 x_i)\} + \varepsilon_i$
Weibull modeli	: $y_i = \beta_1 \exp\left\{-\left(\frac{x_i}{\beta_2}\right)^{\beta_3}\right\} + \varepsilon_i$
Bölünmüş model	: $y_i = \begin{cases} \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \varepsilon_i, & x_i \leq \alpha \\ \theta_0 + \theta_1 x_i + \varepsilon_i & , x_i > \alpha \end{cases}$

Doğrusal olmayan

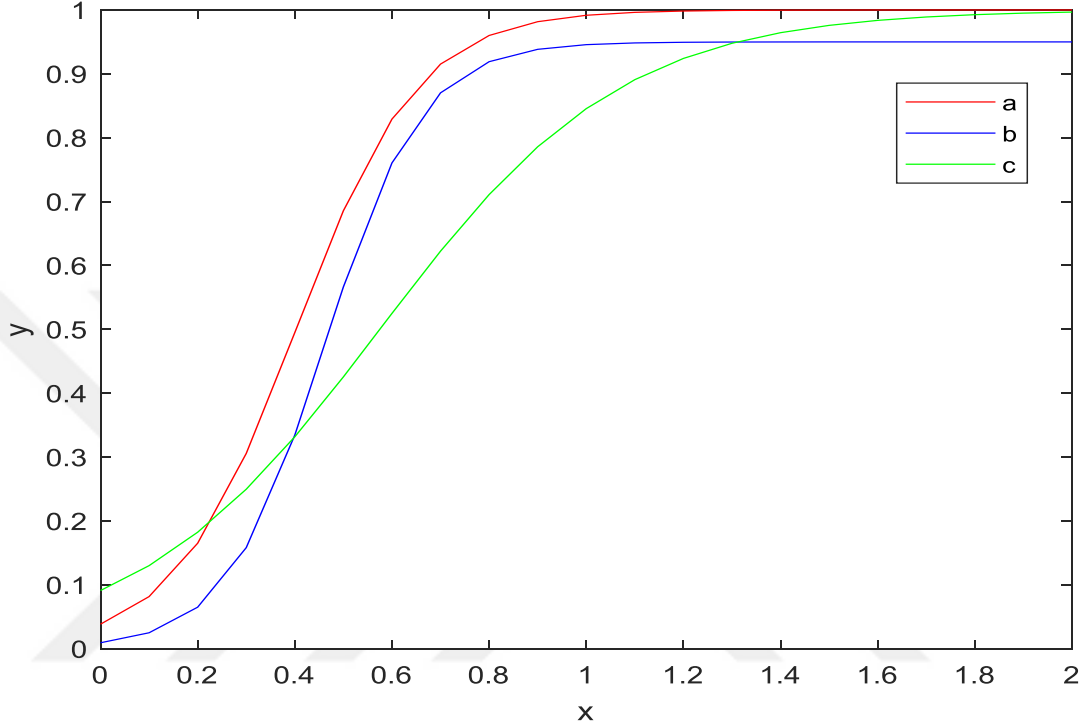
$$y = \frac{\beta_1}{1 + e^{-(\beta_2 + \beta_3 x)}} \quad (2.3)$$

(2.3) modeli göz önüne alınsın. $x \in [0, 2]$ olmak üzere verilen (2.3) modelinde parametre değerleri aşağıdaki maddelerde belirtildiği gibi olsun. Buna göre farklı parametre değerlerinde (2.3) modeline ilişkin grafikler Şekil 2.1 ile verilmiştir.

a) $\beta_1 = 3.22$, $\beta_2 = -3.32$, $\beta_3 = 8$

b) $\beta_1 = 0.95$, $\beta_2 = -4.61$, $\beta_3 = 10$

c) $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = -2.3$, $\beta_3 = 4$



Şekil 2.1 Farklı parametre değerleri için (2.3) modelinin grafiği

Şekil 2.1 de doğrusal olmayan (2.3) modelinin ait farklı parametre değerlerindeki davranışını gösteren bir grafik yer almaktadır.

2.1 Doğrusallaştırılabilen Modeller

Bazı modellere uygun dönüşümler uygulanarak doğrusal hale getirilebilmektedir. Verileri dönüştürmek ile model doğrusal davranış gösterebilir ama hata terimlerinin dönüşümü hata terimlerinin varsayımlarını etkileyecektir. Bu yüzden her zaman uygulanması doğru olmayacaktır. Bazı dönüşümler yardımıyla doğrusallaştırılan modellerin parametre tahmini orjinal modeldeki parametre tahminine denk olmayacaktır. Bununla birlikte doğrusal olmayan modeldeki hata yapısı dönüşüm

yapıldıktan sonra hata terimlerinin varsayımını sağlamaması durumunda parametre tahminine ulaşmak uygun olmayacaktır.

Doğrusallaştırılabilen bazı modeller Çizelge 2.2 ile verilmiştir.

Çizelge 2.2 Doğrusallaştırılabilen bazı modeller

Model	Doğrusallaşmış Model
$y = \beta_1 e^{\beta_2 x}$	$\ln y = \ln(\beta_1) + \beta_2 x$
$y = \beta_1^x$	$\ln y = x \ln \beta_1$
$y = \frac{1}{1 + e^{-(\beta_1 + \beta_2 x)}}$	$\ln\left(\frac{y}{1-y}\right) = \beta_1 + \beta_2 x$
$y = \frac{1}{\beta_1 - \beta_2 x}$	$\frac{1}{y} = \beta_1 - \beta_2 x$

Bir başka doğrusal olmayan,

$$y = \beta_1^* e^{-\beta_2^* x}$$

modeli göz önüne alınsın. Burada, β_1^* 'in pozitif olduğu biliniyor. Fonksiyonun doğal logaritması alındığında, dönüştürülmüş olan yeni fonksiyon

$$\ln y = \ln(\beta_1^*) - \beta_2^* x$$

olacaktır. Burada

$$\ln(\beta_1^*) = \beta_0 \text{ ve } -\beta_2^* = \beta_1$$

olarak alındığında model

$$\ln(y) = \beta_0 + \beta_1 x$$

biçiminde olup parametreleri bilinmeyen lineer modeldir. $z = \ln(y)$ ise yaklaşık lineer model,

$$z \sim \beta_0 + \beta_1 x$$

biçiminde olup lineer form olarak düşünülecek model için parametre tahminleri,

$$\widehat{\beta}_1 = \frac{\sum(z_i - \bar{z})(x_i - \bar{x})}{\sum(x_i - \bar{x})^2}$$

$$\widehat{\beta}_0 = \bar{z} - \widehat{\beta}_1 \bar{x}$$

$$\bar{z} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n z_i$$

olup

$$\widehat{\beta}_2^* = -\widehat{\beta}_1 \text{ ve } \widehat{\beta}_1^* = \exp(\bar{z} - \widehat{\beta}_1 \bar{x})$$

olarak elde edilmektedir.

Hata terimlerinin dönüşümü, varsayımları etkilemediği durumda bu örnekte doğrusal regresyon modelindeki sonuçlar ile benzer sonuçlar gösterir.

$$\begin{aligned} y &= f(x, \beta) + \varepsilon \\ &= \beta_1 e^{\beta_2 x} + \varepsilon \end{aligned}$$

modeli göz önüne alınsın. Bu regresyon modelinde beklenti fonksiyonunun doğal logaritması alındığında modeldeki dönüşüm ile hata terimleri etkileneceği için dönüşüm yapılması uygun olmayacaktır.

$$\begin{aligned} y &= f(x, \beta) \cdot \varepsilon \\ &= \beta_1 e^{\beta_2 x} \varepsilon^* \end{aligned}$$

modeli göz önüne alınsın. Doğal logaritması alındığında model;

$$\ln(y) = \ln\beta_1 + \beta_2 x + \ln\varepsilon^*$$

biçiminde olacaktır. Dönüşüm uygulanan modelin hata teriminin Normal dağılıma uyması ve sabit bir varyansa sahip olması şartlarını sağlaması durumunda, klasik doğrusal regresyon modelindeki uygulanan yöntemler kullanılabilir.

3. DOĞRUSAL OLMAYAN REGRESYON MODELLERİNDE PARAMETRE TAHMİNİ

Doğrusal olmayan regresyon modelleri, doğrusal regresyon modellerine göre oldukça karmaşık bir yapıya sahiptir. Doğrusal regresyon modelinde parametre tahmini yansız, minimum varyanslı ve veri setinin Normal dağılması gibi özelliklere sahip olurken, doğrusal olmayan regresyon modellerinde bu durumun geçerli olması pek mümkün olmayabilir. Doğrusal olmayan regresyon modellerinde tahmin edicilerin kesin bir ifadesi olmadığından tahmin problemlerinin çözümü asimtotik sonuçlara dayanmaktadır. Parametre tahmin sonuçlarını elde ederken normal denklemlerin basit kapalı formda çözülmesi kolay olmadığından iteratif algoritmalarından yararlanılacaktır.

3.1 En Küçük Kareler Yöntemi

Doğrusal regresyon modellerinde olduğu gibi, doğrusal olmayan regresyon modellerinde *ekk* tahmin edicisi hata kareler toplamını minimize eden değerdir. Doğrusal olmayan model için artık kareler toplamı,

$$S(\beta) = \sum_{i=1}^n (y_i - f(x_i, \beta))^2 \quad (3.1)$$

şeklinde ifade edilebilir. $\hat{\beta}$ *ekk* tahmin edicisini ve $S(\beta)$ hata kareler toplamını ifade eder. $S(\beta)$ minimum olacak şekilde β parametre tahmin değerini belirlemek gerekir.

(3.1) modelinin *ekk* tahmin edicisini bulmak için β parametresine göre türev alınır. Buna göre,

$$\sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i, \beta)] \left[\frac{\partial f(x_i, \beta)}{\partial \beta_j} \right]_{\beta=\hat{\beta}} = 0, \quad j = 1, 2, \dots, p$$

p tane normal denklemin çözülmesi gerekir. $f(x, \beta)$ doğrusal olmadığından ve bilinmeyen parametrelerin fonksiyonu olduğundan denklem sisteminin çözülmesi kolay değildir. (3.1) vektör formunda;

$$S(\beta) = (Y - f(\beta))' (Y - f(\beta)) \quad (3.2)$$

biçiminde yazılabilir.

$$F(\beta) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(x_1, \beta)}{\partial \beta_1} & \frac{\partial f(x_1, \beta)}{\partial \beta_2} & \cdots & \frac{\partial f(x_1, \beta)}{\partial \beta_p} \\ \frac{\partial f(x_2, \beta)}{\partial \beta_1} & \frac{\partial f(x_2, \beta)}{\partial \beta_2} & \cdots & \frac{\partial f(x_2, \beta)}{\partial \beta_p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f(x_n, \beta)}{\partial \beta_1} & \frac{\partial f(x_n, \beta)}{\partial \beta_2} & \cdots & \frac{\partial f(x_n, \beta)}{\partial \beta_p} \end{bmatrix}_{n \times p}$$

$F(\beta)$ matrisi $f(\beta)$ fonksiyonun türev matrisi olmak üzere $S(\beta)$ nın minimize edilmesi;

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \beta'} S(\beta) \Big|_{\beta=\hat{\beta}} &= 0 \\ -2F'(\hat{\beta})(Y-f(\hat{\beta})) &= 0 \\ F'(\hat{\beta})(Y-f(\hat{\beta})) &= 0 \end{aligned} \quad (3.3)$$

$F'(\hat{\beta})$ jakobiyen matrisini, $(Y - f(\hat{\beta}))$ artık vektörünü ifade etmektedir. Beklenen değer fonksiyonu ($f(x, \beta)$) doğrusal olmayacağı için normal denklemlerin çözülmesi zor olabilir. Bu nedenle $\hat{\beta}$ nın değerini belirlemek için iteratif yöntemler kullanılır.

Örneğin,

$$Y_i = \beta_1 \exp(\beta_2 t_i) + \varepsilon_i$$

üstel büyüme modeli göz önüne alınsın. Hata kareler toplamını minimum yapacak şekilde ekk tahminini elde edebilmek için, β_1 ve β_2 ' ye göre türevleri alınarak normal denklemler elde edilir. Türevler,

$$\frac{\partial f}{\partial \beta_1} = \exp(\beta_2 t_i)$$

$$\frac{\partial f}{\partial \beta_2} = \beta_1 t_i \exp(\beta_2 t_i)$$

olmak üzere normal denklemler;

$$\sum_{i=1}^n [Y_i - \hat{\beta}_1 \exp(\hat{\beta}_2 t_i)] [\exp(\hat{\beta}_2 t_i)] = 0$$

$$\sum_{i=1}^n [Y_i - \hat{\beta}_1 \exp(\hat{\beta}_2 t_i)] [\hat{\beta}_1 t_i \exp(\hat{\beta}_2 t_i)] = 0$$

olup bu örnekte $\hat{\beta}$ için basit kapalı formda çözüm yoktur. Normal denklemlerinin çözümü için iteratif algoritmalarından faydalanılacaktır.

3.2 En Çok Olabilirlik Yöntemi

Bu yöntemi uygulamak için önce hataların ortak olasılık yoğunluk fonksiyonunun bilinmesi gerekir. Hataların dağılımı bağımsız ise olabilirlik fonksiyonu hataların olasılık yoğunluk fonksiyonunun çarpımı şeklindedir. Olabilirlik fonksiyonunun maksimizasyonu iteratif algoritmalar aracılığı ile bulunabilir. Eğer hataların varyansları sabit ve Normal dağılımlı ise ve büyük hacimli örnekler mevcutsa *ekk* tahmini ile en çok olabilirlik tahmini aynı değerlerde bulunur (Gallant, 1987; Seber ve Wild, 1989). Hataların bağımsızlığı veya sabit varyans koşulları sağlanmadığında en çok olabilirlik (*eçob*) yöntemi kullanılabilir.

ε_i bağımsız ve $N(0, \sigma^2)$ dağılıma sahip olduğu varsayalım. Bu durumda,

$$Y_i \sim N(f_i(\beta), \sigma^2), \quad i = 1, 2, \dots, n$$

dağılımına sahip olup olasılık yoğunluk fonksiyonu,

$$f_y(y_i; \beta, \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{\frac{-1}{2\sigma^2}(y_i - f_i(\beta))^2}$$

olacaktır. $Y = (Y_1, Y_2, \dots, Y_n)'$ olmak üzere Y_1, Y_2, \dots, Y_n rasgele değişkenlerinin olabilirlik fonksiyonu,

$$L(Y; \beta, \sigma^2) = \prod_{i=1}^n f_y(y_i; \beta, \sigma^2)$$

$$= (2\pi)^{-\frac{n}{2}}(\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (y_i - f_i(\beta))^2}$$

olup $L(Y; \beta, \sigma^2)$ fonksiyonunu maksimum yapan β ve σ^2 parametrelerinin tahmin edilmesi gerekmektedir. Olabilirlik fonksiyonunun logaritması alınıp maksimize edilirse;

$$\ln L(Y; \beta, \sigma^2) = \frac{-n}{2} \ln(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (y_i - f_i(\beta))^2$$

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n (y_i - f_i(\beta)) \frac{\partial f_i(\beta)}{\partial \beta'} = 0 \\ -n\sigma^2 + \sum_{i=1}^n (y_i - f_i(\beta))^2 = 0 \end{cases}$$

denkleme sistemine ulaşılır. β nın *ekk* yöntemi ile elde edilen tahmini *eçob* ile elde edilen tahminine eşittir. β nın tahmin edicisi $\hat{\beta}$ olmak üzere σ^2 nin tahmin edicisi,

$$\widehat{\sigma^2} = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - f_i(\hat{\beta}))^2}{n}$$

olarak elde edilir (Gallant, 1987; Seber ve Wild, 1989).

4. İTERATİF YÖNTEMLER

$\hat{\beta}$ değerinin çözümü normal denklemlerle elde edilemeyeceği ya da elde edilmesi zor olacağından dolayı çözüm, türeve dayalı iteratif algoritmalar yardımıyla elde edilebilmektedir. İterasyon süreci yakınsama kriteri sağlanıncaya kadar devam eder. Her algoritma farklı özelliklere sahip olduğundan yakınsama süreçleri birbirinden farklılık gösterebilir. Bu algoritmalarda başlangıç değerinin seçimi oldukça önemlidir. Uygun seçilmeyen başlangıç değeri iterasyon sayısının artmasına ya da optimum çözüme yakınsamama gibi sorunlara neden olabilir. Başlangıç noktasının seçiminden etkilenmeyen türevden bağımsız Nelder-Mead Simpleks algoritması gibi sezgisel yöntemlerden de faydalanılabilir.

4.1 Gauss-Newton Yöntemi

Gauss-Newton doğrusallaştırma yöntemi olarak bilinen, doğrusal olmayan modellerin normal denklemlerinin çözümünde yaygın olarak kullanılan bir yöntemdir. Bu yöntem klasik Newton yönteminin bir modifikasyonudur. Yakınsama oranı durumdan duruma değişir. Yakınsama hızı bazen yavaş olurken, bazen de hiç yakınsamayabilir. Bu yöntemden uygun yakınsama sonuçları elde etmek için iyi bir başlangıç değerinden başlamak önemlidir. Uygun olmayan başlangıç değerinin seçimi ardışık işlem sayısını artıracaktır. $f(\beta)$ fonksiyonun β^i noktasındaki Taylor serisi açılımı,

$$f(\beta) \cong f(\beta^i) + F(\beta^i)(\beta - \beta^i) \quad (4.1)$$

ifade edilebilir. (Gallant 1977).

Ekk ve *eçob* ile elde edilen (3.3) denkleminde (4.1) denklemi yerine konulursa,

$$\begin{aligned} F'(\beta^i) (Y - f(\beta^i)) - F(\beta^i)(\beta^{i+1} - \beta^i) &= 0 \\ F'(\beta^i) (Y - f(\beta^i)) - F'(\beta^i)F(\beta^i)(\beta^{i+1} - \beta^i) &= 0 \\ F'(\beta^i)F(\beta^i)(\beta^{i+1} - \beta^i) &= F'(\beta^i) (Y - f(\beta^i)) \\ (\beta^{i+1} - \beta^i) &= (F'(\beta^i)F(\beta^i))^{-1} F'(\beta^i) (Y - f(\beta^i)) \end{aligned}$$

$$\beta^{i+1} = \beta^i + \left(F'(\beta^i) F(\beta^i) \right)^{-1} F'(\beta^i) (Y - f(\beta^i)) \quad (4.2)$$

şeklinde ifade edilir. Yakınsaklık kriteri için, iteratif olarak parametrelerin kararlı olduğu ya da amaç fonksiyonunun kararlı olduğu kriterler kullanılabilir. Örneğin,

$$\frac{\hat{\beta}_{i,k+1} - \hat{\beta}_{i,k}}{\hat{\beta}_{i,k}} < \varepsilon, i = 1, 2, \dots, p$$

Yakınsama sağlanıncaya kadar yineleme devam edebilir. Burada $\varepsilon = 10^{-5}$ gibi oldukça küçük değerler seçilebilir. Yakınsama kriterindeki k , iterasyon sayısını, i parametre sayısını ifade etmektedir.

Algoritmik adımlar (Hartley ve Booker, 1963):

A1) $\varepsilon > 0$ ve $\tau > 0$ keyfi sabitleri (genellikle $\varepsilon = 10^{-5}$ ve $\tau = 10^{-3}$ olarak önerilir) ve β^0 parametre başlangıç değerleri verilir.

A2) i . adım için $d^{i-1} = \left(F'(\beta^{i-1}) F(\beta^{i-1}) \right)^{-1} F'(\beta^{i-1}) (Y - f(\beta^{i-1}))$ değeri hesaplanır ve $\lambda_0 d^{i-1}$ ($0 \leq \lambda_0 \leq 1$) olmak üzere sabit bir λ_0 değerinden başlanarak $S(\beta^i) \leq S(\beta^{i-1})$ olacak biçimde seçilen bir λ ile,

$$\beta^i = \beta^{i-1} + \lambda d^{i-1} \quad i = 1, 2, \dots$$

yeni parametre değerleri hesaplanır.

A3) $\|\beta^i - \beta^{i-1}\| < \varepsilon (\|\beta^{i-1}\| + \tau)$ ve $|S(\beta^i) - S(\beta^{i-1})| < \varepsilon (S(\beta^{i-1}) + \tau)$ koşulları sağlanıncaya kadar A2' ye gidilir.

4.2 En Hızlı İniş Yöntemi

En hızlı iniş yöntemi global minimumu arayan bir yöntemdir. Amaç fonksiyonunun $\beta \in R^P$ noktasındaki gradyant vektörü,

$$\nabla S(\beta) = \begin{bmatrix} \frac{\partial S(\beta)}{\partial \beta_1} \\ \frac{\partial S(\beta)}{\partial \beta_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial S(\beta)}{\partial \beta_p} \end{bmatrix}$$

dir. Bu yöntemde, Gauss-Newton yöntemindeki d^{i-1} vektörünün yerine $-\nabla S(\beta^{i-1})$ vektörü kullanılmaktadır. Optimal çözümün elde edilip edilmediğini görmek için yine yakınsama kriteri kontrol edilir. Yakınsama kriteri yerine getirilinceye kadar işlem tekrarlanır. Buna göre algoritma, β^0 başlangıç değeri olmak üzere,

$$\beta^i = \beta^{i-1} - \lambda^{i-1} \nabla S(\beta^{i-1}), i = 1, 2, \dots$$

biçimindedir. λ^{i-1} değerleri, genel olarak $S(\beta^i) \leq S(\beta^{i-1})$ olacak biçimde ayrıca belirlenen kurallara göre seçilebilir olmasına rağmen $S(\beta^{i-1} + \lambda^{i-1} d^{i-1})$ yi en küçük yapan λ^{i-1} değeri olarak da seçilebilir. İndisler göz ardı edildiğinde $S(\beta + \lambda d)$ değerini en küçükleyen λ değerini bulmak için $S(\beta + \lambda d)$ fonksiyonunu β noktası civarında Taylor serisi açıldığında

$$S(\beta + \lambda d) = S(\beta) + \lambda \frac{\partial S(\beta)}{\partial \beta} d + \frac{1}{2} \lambda^2 d' \frac{\partial^2 S(\beta)}{\partial \beta \partial \beta'} d$$

olur. Burada λ değeri $S(\beta + \lambda d) \leq S(\beta)$ koşulunu sağlayacak biçimde seçilir. Bu durumda $S(\beta + \lambda d) - S(\beta) \leq 0$ olup

$$S(\beta + \lambda d) - S(\beta) = \lambda \frac{\partial S(\beta)}{\partial \beta} d + \frac{1}{2} \lambda^2 d' \frac{\partial^2 S(\beta)}{\partial \beta \partial \beta'} d \leq 0$$

dır. λ değerini elde etmek için $S(\beta + \lambda d) - S(\beta)$ ifadesi λ üzerinden minimize edilirse,

$$\frac{\partial S(\beta)}{\partial \beta} d + \lambda d' \frac{\partial^2 S(\beta)}{\partial \beta \partial \beta'} d = 0$$

eşitliğinden

$$\lambda^* = \frac{\frac{\partial S(\beta)}{\partial \beta} d}{d' \frac{\partial^2 S(\beta)}{\partial \beta \partial \beta'} d}$$

bulunur (Bates ve Watts 1988).

En hızlı iniş yöntemi için algoritma adımları:

A1) Başlangıç değerleri β^0 seçilir ve yakınsama kriterleri belirlenir.

A2) Gradyan fonksiyonu $i=0$ için yani başlangıç değerleri girilerek hesaplanır.

$$g_i = \nabla S(\beta^i)$$

A3) Mevcut β^i noktasına göre negatif gradyan vektörü hesaplanır.

A4) İterasyon işleminde sabit bir değer olarak kullanılan λ adım boyutu seçilir.

A5) $\beta^{i+1} = \beta^i - \lambda \nabla S(\beta^i)$ şeklinde algoritma değeri hesaplanır. Yakınsama kriteri sağlanmazsa A2 ye dönlür.

A6) Yakınsama kriteri sağlanana kadar işlemler sürdürülür.

Bu algoritma kullanılırken göz önünde bulundurulması gereken bir nokta adım boyutu olan λ değerinin hesaplanmasıdır. λ değerinin hesabı oldukça önemlidir. Çünkü bu değer yakınsama hızını etkiler. Yavaş yakınsama hızı tercih edilen bir durum değildir ve adım büyüklüğü küçük olduğunda yakınsama işlemi uzun olacaktır. Bu değeri hesaplamak için literatürde farklı yöntemler bulunmaktadır.

4.3 Levenberg-Marquardt Yöntemi

Model (2.1) de β bir β^0 başlangıç değerine bağlı olarak $\beta = \beta^0 + d$ biçiminde yazılsın.

Bu durumda model,

$$y_i = f(x_i, \beta^0 + d + \varepsilon_i) \quad i = 1, 2, \dots, n$$

olur. $f(x_i, \beta^0 + d)$ fonksiyonu β^0 noktası civarında birinci dereceden Taylor serisine açılırsa,

$$y_i = f(x_i, \beta^0) + \sum_{j=1}^p \left(\frac{\partial f(x_i, \beta^0)}{\partial \beta_j} \right) d_j + \varepsilon_i \quad i = 1, 2, \dots, n$$

olur. Vektör gösterimi ile

$$Y = f(\beta^0) + F'(\beta^0)d + \varepsilon$$

biçimindedir ve

$$u^0 = Y - f(\beta^0)$$

değişken değiştirmesi ile

$$u^0 = F(\beta^0)d + \varepsilon$$

denklemini elde edilir. Normal denklemler,

$$F'(\beta^0)d + F(\beta^0)d = F'(\beta^0)u$$

dır. $c^0 = F'(\beta^0)F(\beta)$ matrisinin köşegen elemanlarının dışındakilerin yerine sıfır ve c_{ii} köşegen elemanlarının yerine $\frac{1}{\sqrt{c_{ii}}}$ yazılmasıyla elde edilen köşegen matrisi,

$$D_0 = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{c_{11}} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1/\sqrt{c_{22}} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1/\sqrt{c_{pp}} \end{bmatrix}$$

olmak üzere,

$$g^0 = D_0 F'(\beta^0)u$$

ve

$$d^* = D_0^{-1}d^0$$

dönüşümleri altında normal denklemler;

$$c_*^0 d_*^0 = g_*^0$$

şeklinde yazılır. Zayıf koşulluluğa bir tedbir olarak c^0 matrisinde köşegen elemanlarına $\lambda(\lambda > 0)$ gibi küçük bir sayının eklenmesiyle,

$$(c_*^0 + \lambda I) d_*^0 = g_*^0$$

yazılır. Buradan

$$d_*^0 = (c_*^0 + \lambda I)^{-1} g_*^0$$

olmak üzere,

$$\beta = \beta^0 + d^0$$

iyileştirilmiş β değerine dönüştürülebilir. $d^0 = D_0 d_*^0$ yön vektörünü yani $\lambda(\lambda > 0)$ değeri $S(\beta) < S(\beta^0)$ olacak şekilde seçilmelidir. λ değerinin belirlenmesinde algoritma aşağıdaki gibi olabilir (Marquardt 1963);

A1) $\vartheta(\vartheta > 0)$ sayısı seçilir. (Örneğin, $\vartheta=10$)

A2) $\lambda_0 = 10^{-2}$ alınır.

A3) $a = \frac{\lambda_0}{\vartheta}$ $b = \lambda_0$ ve

$$S_a = S(\beta^0 + D_0(c_*^0 + \lambda_0/\vartheta I)^{-1} g_*^0)$$

$$S_b = S(\beta^0 + D_0(c_*^0 + \lambda_0 I)^{-1} g_*^0)$$

olmak üzere,

i) eğer $S_a < S(\beta^0)$ ise $\lambda = a$ alınır.

ii) eğer $S_a > S(\beta^0)$ ise $S_b < S(\beta^0)$ ise $\lambda = b$ alınır.

iii) eğer $S_a > S(\beta^0)$ ve $S_b > S(\beta^0)$ ise $\lambda = \lambda_0 \vartheta^\omega$ alınır. Burada ω , $S(\beta + D_0(c_*^0 + \lambda_0 \vartheta^\omega I)^{-1} g_*^0) < S(\beta^0)$

eşitsizliğini sağlayan en küçük pozitif tamsayıdır.

4.4 Parametrelerin Başlangıç Değerlerinin Seçimi

Doğrusal olmayan regresyon analizinde parametre tahmin problemlerini çözmek ve optimum değere ulaşmak için sayısal algoritmalarından faydalanılır. Bu algoritmalar yinelemelidir, en iyi çözüme yakınsama elde edilene kadar iterasyon tekrarlanır. İterasyonu başlatmak için başlangıç değerini belirtmek gereklidir. Başlangıç değerlerinin en iyi belirlenmesi oldukça önemlidir. İyi belirlenemeyen başlangıç değeri yavaş yakınsama veya hiç yakınsamama ile sonuçlanır.

İyi bir başlangıç noktası algoritmaya doğru yönü verir ve birçok yönden performansı kolaylaştırır. Bu nedenle doğrusal olmayan regresyon modellerinde uygun başlangıç noktasının seçimi oldukça önemlidir. İyi bir başlangıç değerini bulmak için birçok seçenek vardır. Bunlardan birisi veriyi çizmek ve yapıyı yorumlamaktır. Bir diğeri ilgili parametrelerin yorumlanmasına dayanarak tahmin edilmesidir. Bazı modeller için model parametrelerinin başlangıç değeri önceki çalışmalardan elde edilebilir.

Levenberg-Marquardt algoritması başlangıç değerinin seçimine daha az duyarlı olmakla birlikte β^0 başlangıcının dikkatli seçimi iterasyonların sayısını düşürebildiğinden bir avantaj sağlar. Modelin davranışlarını anlamak açısından parametrelerin farklı farklı değerleri için beklenen fonksiyonun grafiğinin çizimi oldukça yardımcı olabilmektedir; parametre değerindeki değişimlere bağlı olarak model davranışlarındaki etkiler gözlenebilir.

Model yapısında yapılan bazı dönüşümler yardımıyla parametrelerin başlangıç değerleri kolayca bulunabilir. Uygulanan dönüşümlerle doğrusal formda olan model doğrusal *ekk* ile dönüştürülmüş modelin parametrelerinin başlangıç değerleri benzerlik gösterir. Ancak belli dönüşümler ile elde edilen modelin hata yapısının değişimine neden olur. Bu yüzden her zaman uygulanması sağlıklı olmaz.

5. UYGULAMA ÇALIŞMALARI

Çalışmanın bu bölümü uygulama çalışmalarına ayrılmıştır. Uygulama çalışmalarında, farklı doğrusal olmayan regresyon modelleri alınmış ve parametre tahminlerini elde etmek için tez boyunca anlatılan iteratif yöntemler uygulanmaya çalışılmıştır.

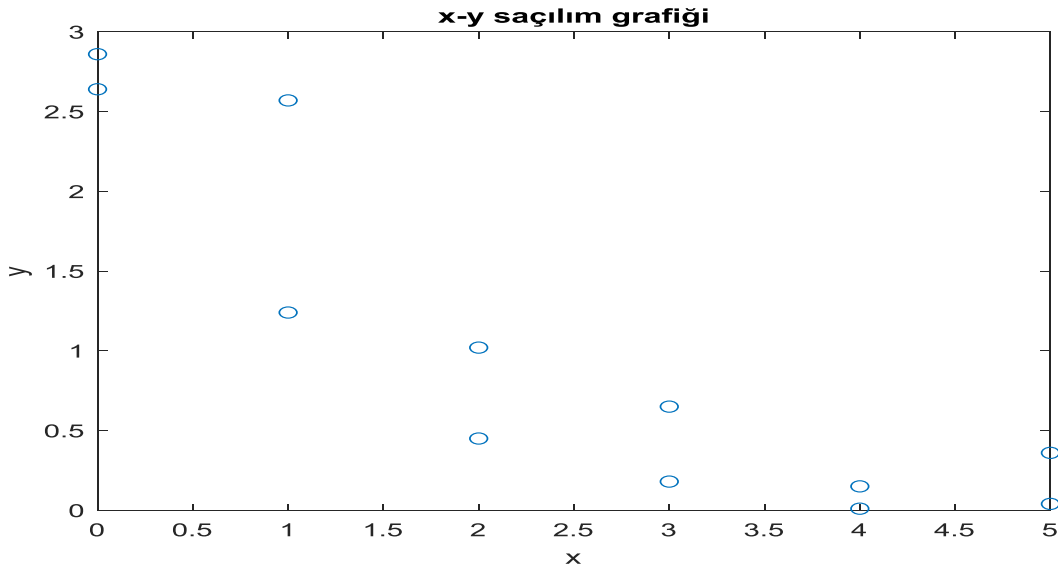
5.1 Uygulama Çalışması 1.

Bu uygulama çalışmasında $Y = \beta_1 + \beta_2 e^{-\beta_3 x}$ modeli göz önüne alınmıştır. Bu modele ilişkin veri seti https://www.stat.colostate.edu/regression_book/chapter9.pdf açık kaynak adresinden alınmış olup, verilere ilişkin değerler Çizelge 5.1 ile verilmiştir.

Çizelge 5.1 Uygulama Çalışması 1 modeli için örnek veri seti

y	2.86	2.64	2.57	1.24	0.45	1.02	0.65	0.18	0.15	0.01	0.04	0.36
x	0.0	0.0	1.0	1.0	2.0	2.0	3.0	3.0	4.0	4.0	5.0	5.0

x ve y 'ye ilişkin saçılım grafiği Şekil 5.1 ile verilmiştir.



Şekil 5.1 Uygulama çalışması 1'de yer alan modelin x-y saçılım grafiği

$Y = \beta_1 + \beta_2 e^{-\beta_3 x}$ modelinde β_1, β_2 ve β_3 bilinmeyen parametreler olmak üzere, başlangıç değerleri $\beta_1 = 0.0, \beta_2 = 2.0$ ve $\beta_3 = 0.5$ olarak alınmış ve verilen modelin parametrelerini tahmin etmek için SPSS paket programında Levenberg-Marquardt

yönteminden yararlanılmıştır. Buna göre SPSS çıktıları Şekil 5.2 ile verildiği gibi elde edilmiştir.

Iteration History^b

Iteration Number ^a	Residual Sum of Squares	Parameter		
		B1	B2	B3
1.0	1,688	,000	2,000	,500
1.1	,477	,120	2,632	,751
2.0	,477	,120	2,632	,751
2.1	,461	,032	2,719	,677
3.0	,461	,032	2,719	,677
3.1	,460	,029	2,723	,683
4.0	,460	,029	2,723	,683
4.1	,460	,029	2,723	,683
5.0	,460	,029	2,723	,683
5.1	,460	,029	2,723	,683

Derivatives are calculated numerically.

- a. Major iteration number is displayed to the left of the decimal, and minor iteration number is to the right of the decimal.
- b. Run stopped after 10 model evaluations and 5 derivative evaluations because the relative reduction between successive residual sums of squares is at most SSCON = 1,000E-008.

Parameter Estimates

Parameter	Estimate	Std. Error	95% Confidence Interval	
			Lower Bound	Upper Bound
B1	,029	,172	-,359	,417
B2	2,723	,211	2,247	3,200
B3	,683	,142	,362	1,003

Correlations of Parameter Estimates

	B1	B2	B3
B1	1,000	-,678	,846
B2	-,678	1,000	-,395
B3	,846	-,395	1,000

ANOVA^a

Source	Sum of Squares	df	Mean Squares
Regression	20,543	3	6,848
Residual	,460	9	,051
Uncorrected Total	21,003	12	
Corrected Total	10,606	11	

Dependent variable: Y

- a. R squared = 1 - (Residual Sum of Squares) / (Corrected Sum of Squares) = ,957.

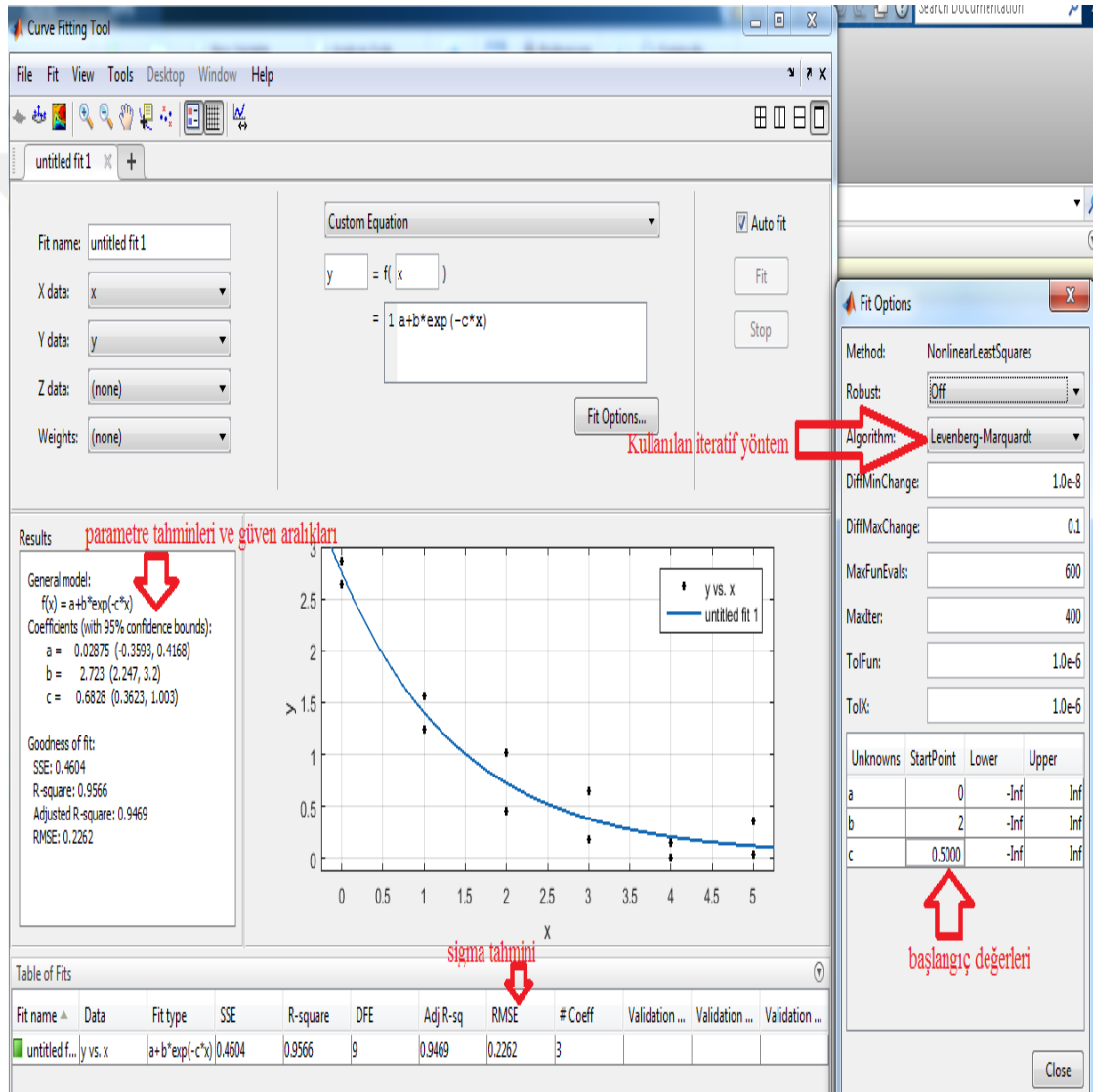
Şekil 5.2 Uygulama Çalışması 1 SPSS Çıktısı

Elde edilen sonuçlara göre, parametrelerin tahmin değerleri $\beta_1 = 0.029$, $\beta_2 = 2.723$, $\beta_3 = 0.683$ olarak 5 iterasyon sonucunda bulunmuştur.

Matlab programında parametrelere ilişkin en küçük kareler tahmini, Levenberg-Marquardt iteratif yöntemi ile elde edilebilir. Buna göre,

```
>> y=[2.86 2.64 1.57 1.24 0.45 1.02 0.65 0.18 0.15 0.01 0.04 0.36];
>> x=[0 0 1 1 2 2 3 3 4 4 5 5];
>> cftool
```

komutları işletildiğinde cftool seçeneğinden sonra aşağıda Şekil 5.3 ile verilen görüntü elde edilmiştir.



Şekil 5.3 Uygulama Çalışması 1 MATLAB Çıktısı

Bu komut kullanıldığında, eğer başlangıç değerleri belirtilmezse başlangıç değerleri otomatik olarak atanır. Buna göre, parametrelerin tahmin değerleri $\beta_1 = 0.0287$,

$\beta_2 = 2.723$ ve $\beta_3 = 0.682$ olarak bulunmuştur. SPSS programı ile Matlab programında kod yazmaya gerek kalmadan hazır olarak bulunan ilgili komutlar yardımıyla Levenberg-Marquardt yöntemi ile parametre tahmini elde edilmekle birlikte parametre tahmin sonuçları iki programda da birbirine yakın olarak gözlenmektedir.

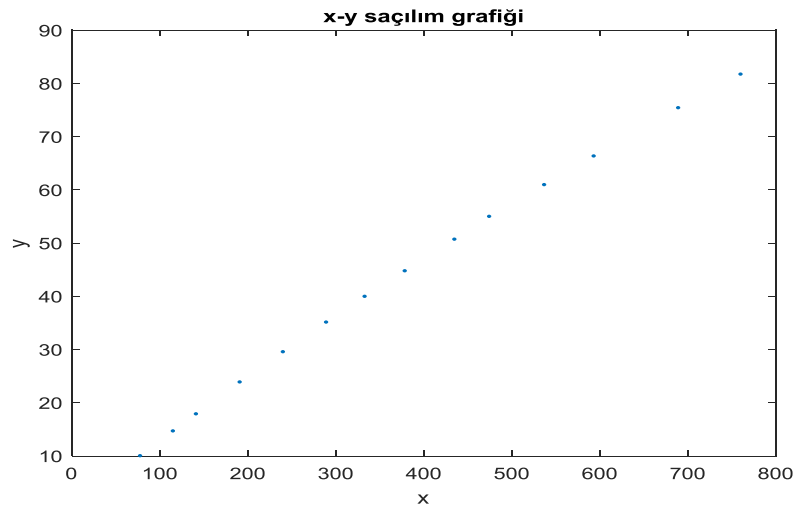
5.2 Uygulama Çalışması 2.

$y = \beta_1(1 - e^{-\beta_2 x})$ modeli için verilen örnek veri seti çizelge 5.2 de gösterilmiş olup bu verilere ilişkin değerler https://www.itl.nist.gov/div898/strd/nls/nls_main.shtml adresinden alınmıştır. Modele ait parametre tahminleri 3 farklı iteratif yöntem kullanılarak elde edilmiş ve karşılaştırmaları yapılmıştır.

Çizelge 5.2 Uygulama Çalışması 2 modeline ait veri seti

x	77.6	114.9	141.1	190.8	239.9	289.0	332.8
x	378.4	434.8	474.3	536.8	593.1	689.1	760
y	40.02	10.07	14.73	17.94	23.93	29.61	35.18
y	81.78	44.82	50.76	55.05	61.01	66.40	75.47

x ve y 'ye ilişkin saçılım grafiği Şekil 5.4 ile verilmiştir.



Şekil 5.4 Uygulama Çalışması 2 için x-y saçılım grafiği

Parametrelerin başlangıç değerleri ilk olarak $\beta_1 = 250$, $\beta_2 = 0.0005$ olarak alınmış, parametre tahminlerini elde etmek için Gauss-Newton, Levenberg-Marquardt ve En Hızlı İniş yöntemleri kullanılarak elde edilen sonuçlar karşılaştırılmıştır.

SPSS ve MINITAB programlarında en hızlı iniş yöntemi ile hesaplanma olmadığından en hızlı iniş yöntemi için MATLAB programında kod yazarak hesaplamalar yaptırılmıştır. MATLAB kodu Ek 1 kısmında verilmiştir.

Modele ilişkin verilen veri seti kullanılarak, parametre tahminleri için 3 ayrı iteratif yöntem kullanılarak elde edilen sonuçlar ve iterasyon sayıları çizelge 5.3 de verildiği gibi elde edilmiştir.

Çizelge 5.3 Uygulama Çalışması 2 modeline ait 3 farklı iteratif algoritmanın karşılaştırması

Parametre Tahmin Yöntemi	Parametre Tahmini	İterasyon Sayısı
En Hızlı İniş	$\beta_1 = 238.0233$ $\beta_2 = 0.0006$	11
Gauss-Newton	$\beta_1 = 238.0233$ $\beta_2 = 0.001$	4
Levenberg-Marquardt	$\beta_1 = 238.0233$ $\beta_2 = 0.001$	15

Başlangıç değerleri için, $\beta_1 = 500$, $\beta_2 = 0.001$ alındığında model parametreleri için elde edilen tahminler ve iterasyon sayıları çizelge 5.4'te yer almaktadır.

Çizelge 5.4 Uygulama Çalışması 2 modeline ait 3 farklı iteratif algoritmanın farklı başlangıç değerlerinde karşılaştırması

Parametre Tahmin Yöntemi	Parametre Tahmini	İterasyon Sayısı
En Hızlı İniş	$\beta_1 = 238.0233$ $\beta_2 = 0.0006$	9
Gauss-Newton	$\beta_1 = 238.0233$ $\beta_2 = 0.001$	7
Levenberg-Marquardt	$\beta_1 = 238.0233$ $\beta_2 = 0.001$	12

Başlangıç değerleri, $\beta_1 = 100$, $\beta_2 = 0.005$ alındığında model parametreleri için elde edilen tahminler ve iterasyon sayıları çizelge 5.5'te yer almaktadır.

Çizelge 5.5 Uygulama Çalışması 2 modeline ait 3 farklı iteratif algoritmanın farklı başlangıç değerlerinde karşılaştırması

Parametre Tahmin Yöntemi	Parametre Tahmini	İterasyon Sayısı
En Hızlı İniş	$\beta_1 = 238.0233$ $\beta_2 = 0.0006$	12
Gauss-Newton	$\beta_1 = 238.0233$ $\beta_2 = 0.001$	7
Levenberg-Marquardt	$\beta_1 = 238.0233$ $\beta_2 = 0.001$	28

Farklı başlangıç değerleri verilerek parametre tahminleri elde edildiğinde, Gauss-Newton yöntemi ile iterasyon sayısının en az olduğu görülmektedir. En Hızlı İniş yöntemi ise Gauss-Newton yöntemine göre daha fazla iterasyon sayısına sahiptir. Levenberg-Marquardt yönteminin ise başlangıç değerlerinden daha fazla etkilendiği, yani kötü başlangıç değerlerine göre iterasyon sayısının diğer yöntemlere göre daha fazla arttığı görülmektedir. Sonuç olarak başlangıç değerlerindeki değişime göre en çok etkilenen yöntemin bu örnek için Levenberg-Marquardt yöntemi olduğu gözlemlenmiştir. Ayrıca En Hızlı İniş yöntemindeki adım etkisi hesabı oldukça önemlidir. Uygun olmayan adım boyutu anılan yöntemde farklı yakınsama sonuçlarına sebep olacaktır.

5.3 Uygulama Çalışması 3.

Üçüncü uygulama çalışmasında,

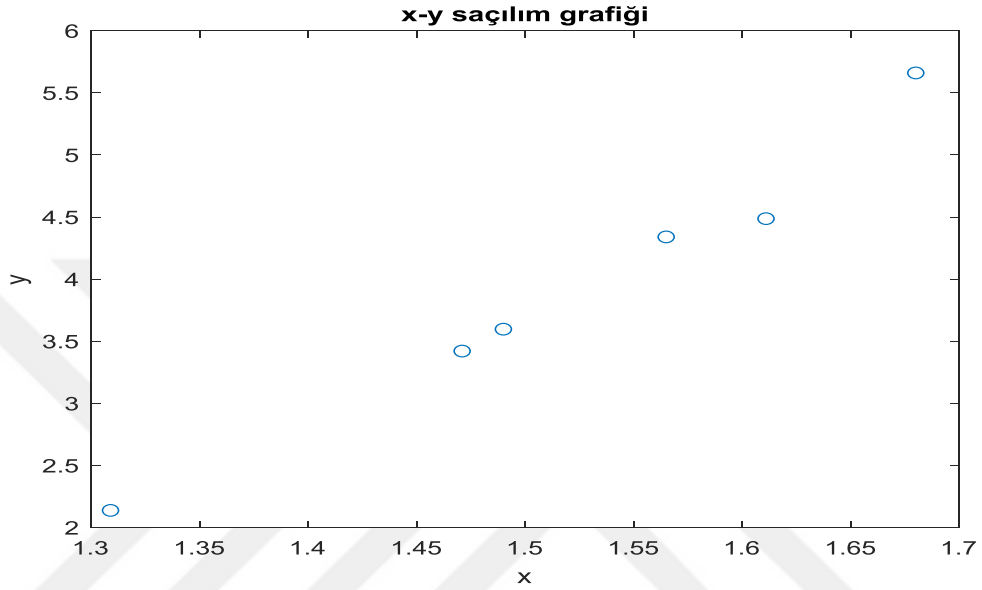
$$y = \beta_1 x^{\beta_2}$$

biçiminde parametrelerine göre doğrusal olmayan regresyon modeli göz önüne alınmıştır. “https://www.itl.nist.gov/div898/strd/nls/nls_main.shtml” web sitesinden alınmış olan veriler Çizelge 5.6 ile verilmiştir. Bu veri setine ait modelin parametre tahminleri 3 ayrı iterasyon yöntemiyle elde edilmiş ve farklı başlangıç değerleri alınarak karşılaştırmaları yapılmıştır.

Çizelge 5.6 Uygulama Çalışması 3 modeli için verilen örnek veri seti

x	1.309	1.471	1.490	1.565	1.611	1.680
y	2.138	3.421	3.597	4.340	4.482	5.660

x ve y 'ye ilişkin saçılım grafiği Şekil 5.5 ile verilmiştir.



Şekil 5.5 Uygulama Çalışması 3 için x-y saçılım grafiği

İlk olarak parametrelerin başlangıç değeri $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 5$ olarak alınmış ve parametre tahminleri Gauss-Newton, Levenberg-Marquardt ve En Hızlı İniş yöntemleriyle hesaplanarak karşılaştırmaları çizelge 5.7 ile verilmiştir.

Çizelge 5.7 Uygulama Çalışması 3 modeline ait 3 farklı iteratif algoritmanın karşılaştırması

Parametre Tahmin Yöntemi	Parametre Tahmini	İterasyon Sayısı
En Hızlı İniş	$\beta_1 = 0.7910$ $\beta_2 = 3.7572$	11
Gauss-Newton	$\beta_1 = 0.7913$ $\beta_2 = 3.7558$	6
Levenberg-Marquardt	$\beta_1 = 0.7913$ $\beta_2 = 3.7558$	6

Parametrelerin başlangıç değerleri $\beta_1 = 1.5$, $\beta_2 = 8$ olduğunda parametre tahminlerinin Gauss-Newton, Levenberg-Marquardt ve En Hızlı İniş yöntemiyle elde edilen sonuçları çizelge 5.8 ile verilmiştir.

Çizelge 5.8 Uygulama Çalışması 3 modeline ait 3 farklı iteratif algoritmanın farklı başlangıç değerlerinde karşılaştırması

Parametre Tahmin Yöntemi	Parametre Tahmini	İterasyon Sayısı
En Hızlı İniş	$\beta_1 = 0.7910$ $\beta_2 = 3.7572$	14
Gauss-Newton	$\beta_1 = 0.7913$ $\beta_2 = 3.7558$	8
Levenberg-Marquardt	$\beta_1 = 0.7913$ $\beta_2 = 3.7558$	10

3 yöntem ile elde edilen parametre tahmin sonuçlarının hemen hemen aynı olduğu gözlemlenmektedir, ancak farklı başlangıç değerlerinde iterasyon sayısının değişiklik gösterdiği ve başlangıç değerlerine göre en az iterasyon sayısının Gauss-Newton yönteminde ait olduğu görülmektedir. En fazla iterasyon sayısının En Hızlı İniş yönteminde olduğu sonuçlara göre gözlemlenmiştir.

5.4 Simülasyon Çalışması (Michaelis-Menten Kinetiği)

Biyokimyada **Michaelis–Menten kinetiği**, enzim kinetiğinin en basit ve en iyi modellerinden biridir. Alman biyokimyacı Leonor Michaelis ve Kanadalı hekim Maud Menten'e atfen adlandırılmıştır. Bu model, enzim reaksiyon hızını betimleyen bir denklem şeklindedir, reaksiyon hızı v , bir substrat S 'nin konsantrasyonu cinsinden ifade edilen model,

$$v = \frac{V_{max}S}{K_m + S}$$

ile verilir. Burada, V_{max} sistemden elde edilebilecek en yüksek reaksiyon hızıdır, enzimi doyurucu substrat konsantrasyonunda bu hıza ulaşılır.

Michaelis sabiti K_m , reaksiyon hızının V_{max} 'ın yarısı olduğu substrat konsantrasyonudur. Genelde modelin varsayımlarına bakılmadan, tek substratlı biyokimya reaksiyonlarının Michaelis–Menten kinetiğine uyduğu varsayılır (Ritz and Streibig, 2008).

Simülasyon çalışmasında, parametre değerlerini üretmek için literatürde bulunan değerler araştırılmış ve parametreler için uygun olabilecek değerler rasgele olarak üretilerek model için veriler elde edilmiştir. S konsantrasyonu (0,4) aralığındaki Düzgün dağılımdan rasgele olarak üretilmiştir. Parametreler, $V_{max} = 0.05$ ve $K_m = 0.4$ olarak alınmış ve modele gürültüler ortalaması 0, standart sapması 0.001 olan Normal dağılımdan üretilerek eklenmiştir. Buna göre, v gözlemleri

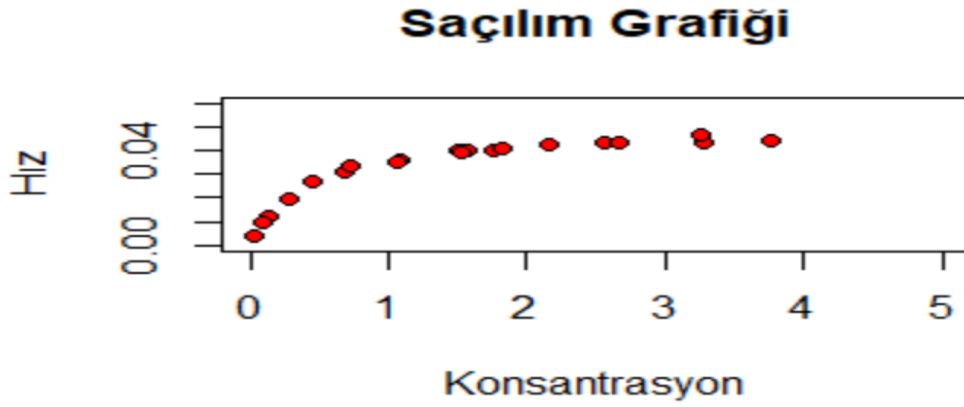
$$v_i = \frac{0.05 \times S_i}{0.4 + S_i} + u_i, u_i \sim N(0, 0.01) \text{ ve } S_i \sim U(0, 4)$$

$i = 1, 2, \dots, 20$ olmak üzere elde edilmiştir. Simülasyonla üretilen v_i ve S_i değerleri Çizelge 5.9 ile verilmiştir.

Çizelge 5.9 Michaelis–Menten kinetiği modeline ilişkin simülasyonla üretilen veriler

i	S_i	v_i	i	S_i	v_i
1	0.27744366	0.019699530	11	1.57078879	0.040075421
2	3.27110079	0.043258161	12	3.25552224	0.046536027
3	3.77048693	0.044424830	13	1.50499382	0.040513257
4	1.07752751	0.036475825	14	1.52324873	0.039298470
5	0.67739249	0.031284247	15	1.05967351	0.035273061
6	0.13558249	0.011954015	16	1.75733727	0.040461927
7	0.71514002	0.033253912	17	1.83042860	0.040834008
8	2.56666146	0.043598927	18	2.16283019	0.042327250
9	0.09151097	0.009816117	19	2.66271932	0.043615655
10	0.03329931	0.003549224	20	0.45079575	0.026854660

Buna göre, S ve v ' ye ait saçılım grafiği,



Şekil 5.6 Michaelis–Menten kinetiği modeline ait saçılım grafiği

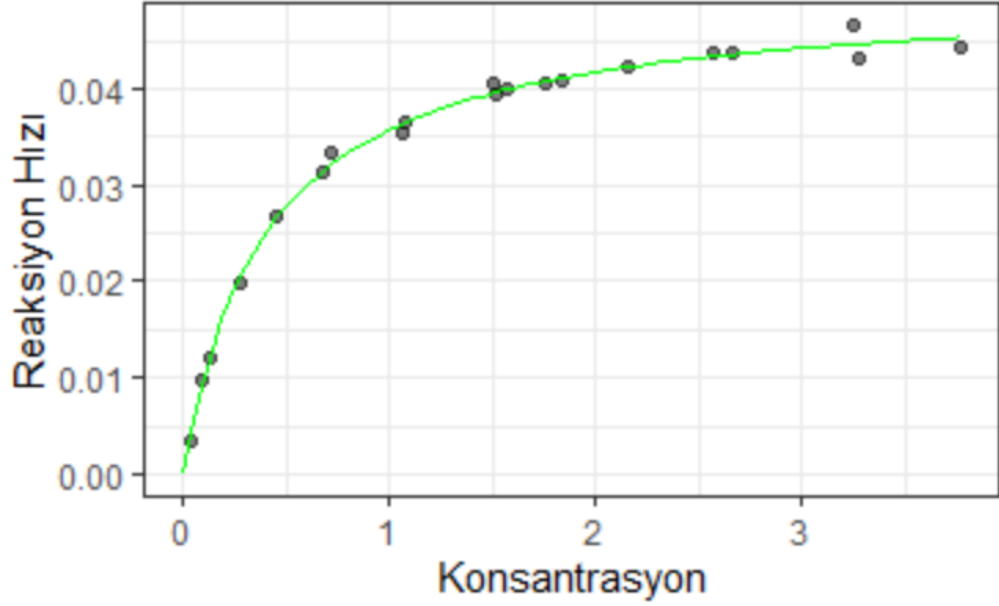
biçiminde elde edilir. R programında bulunan “*nls*” komutu kullanılarak uydurulan modele ilişkin sonuçlar Çizelge 5.10 ile verilmiştir. Çizelgede, parametrelere ilişkin tahmin sonuçları ve iterasyon sayıları bulunmaktadır. R programında bulunan “*nls*” komutu Gauss-Newton yöntemini kullanarak parametre tahmini yapmaktadır.

Çizelge 5.10 Michaelis–Menten kinetiği modeline ait R programındaki tahmin sonuçları

Parametre Tahmini	İterasyon Sayısı
K	6
V_{max}	

Parametre tahmin sonuçlarına bakıldığında, elde edilen tahminlerin simülasyon için verilen gerçek parametre değerlerine oldukça yakın olduğu görülür. Elde edilen sonuçlara göre saçılım grafiği ile uydurulan eğrinin grafiği Şekil 5.7 ile verilmiştir.

Michaelis-Menten Kinetik Modeli



Şekil 5.7 Michaelis-Menten Kinetik modeline ait verilerin saçılım grafiği ile uyduzulan eğrinin grafiği

Diğer iteratif algoritmaları kullanarak parametre tahmini yapmak için R da üretilen simülasyon değerleri Minitab ve Matlab programlarında çağrılmış ve yöntemlere göre elde edilen parametre tahminleri ve iterasyon sayıları Çizelge 5.11 ile verilmiştir.

Çizelge 5.11 Michaelis-Menten Kinetik modelindeki parametre tahmin yöntemlerinin karşılaştırılması

Parametre Tahmin Yöntemi	Parametre Tahmini	İterasyon Sayısı
En Hızlı İniş	$K = 0.4002$ $Vm = 0.0501$	3
Gauss-Newton	$K = 0.4067$ $Vm = 0.0501$	4
Levenberg-Marquardt	$K = 0.4067$ $Vm = 0.0501$	4
R programı "nls"	$K = 0.4047$ $Vm = 0.0501$	6

Diğer uygulamalarda En Hızlı İniş yöntemi en yüksek iterasyona sahip iken bu örnekte en düşük iterasyon sayısına sahip olmuştur. Bununla birlikte her uygulamada Gauss-Newton ve Levenberg-Marquardt yöntemlerindeki tahmin sonuçları yaklaşık olarak aynıdır.

6. GERÇEK VERİ UYGULAMASI

Gerçek veri ile yapılan uygulama çalışmasında kullanılan veriler “Çok Evreli Büyüme Fonksiyonları ve Bazı Uygulamaları” başlıklı yüksek lisans tezinden alınmıştır (Çelik, 2013). Kullanılan veriler Kahramanmaraş Sütçü İmam Üniversitesi Ziraat Fakültesi Zootekni Bölümü, Hayvancılık Araştırma ve Uygulama Merkezi’nden (Haymer) elde edilen gerçek verilerdir. Dişi hindilere ait 4-60 haftalar arasındaki haftalık canlı ağırlık değerleri çizelge 6.1 ile verilmiştir.

Çizelge 6.1 Gerçek veri seti uygulaması

hafta	ağırlık (dişi_hindi)	hafta	ağırlık (dişi_hindi)	hafta	ağırlık (dişi_hindi)
4	439	23	5250	42	11250
5	614,5	24	5432	43	11680
6	835	25	5578	44	11680
7	1183	26	5838,5	45	11685
8	1483	27	5807	46	11908
9	1845	28	6075,5	47	12110
10	2165	29	6283,5	48	12345
11	2520	30	6445,5	49	12460
12	2652	31	6432	50	12578
13	2935,5	32	6783	51	12614
14	3207	33	7245	52	12723
15	3505	34	7936	53	12715
16	3784	35	8746	54	12812
17	3994,5	36	9102	55	12894
18	4049,5	37	9457	56	12889
19	4342,5	38	9364	57	12892
20	4577	39	9809	58	13053
21	4823,5	40	10182	59	13046
22	5007,5	41	10895	60	13055

Bu uygulama çalışmasında amaç, dişi hindilere ilişkin haftalık ağırlık değerleri kullanılarak uygun büyüme modelinin belirlenmesidir. Bu nedenle literatürde yaygın olarak kullanılan doğrusal olmayan üç büyüme modeli alınmış ve modellere ilişkin parametre tahminleri yapılarak hangi model veriye en uygun modeldir belirlenmeye çalışılmıştır.

Karşılaştırma yapmak için alınan modeller, Gompertz modeli, Richards modeli ve Weibull modelidir. x ile haftalar, y ile dişi hindi ağırlıkları gösterilmek üzere modellerin biçimleri Çizelge 6.2 ile verilmiştir.

Çizelge 6.2 Büyüme Modelleri

Gompertz modeli	$y = \beta_1 e^{-\beta_2 e^{\beta_3 x}}$
Richaards modeli	$y = \frac{\beta_1}{(1 + \beta_2 e^{-\beta_3 x})^{\frac{1}{\beta_4}}}$
Weibull modeli	$y = \beta_1 - \beta_2 e^{-\beta_3 x^{\beta_4}}$

Modellere ilişkin parametre tahmini yapılabilmesi için en önemli şey uygun başlangıç değerlerinin belirlenmesidir. Aksi takdirde yapılan uygulama çalışmalarından da görülmüştür ki uygun başlangıç değeri verilmediğinde bilgisayar programları parametre tahmin sonuçlarını vermemekte ve hata ile karşılaşmaktadır. Bu nedenle parametre başlangıç değerlerinin uygun olarak belirlenmesi çok önemlidir. Bu modellere ilişkin parametre başlangıç değerlerinin belirlenmesinde (5.1), (5.2) ve (5.3) denklemlerine yapılan dönüşümlerden yararlanılmıştır. Her bir modele ilişkin başlangıç değerlerinin nasıl elde edildiği devam eden kısımda ayrıntılı olarak anlatılmıştır.

İlk olarak Gompertz modeli,

$$y = \beta_1 e^{-\beta_2 e^{\beta_3 x}} + \varepsilon_x$$

olmak üzere başlangıç değerlerini bulmak için modele logaritmik dönüşüm uygulanır.

Her iki tarafın doğal logaritması alındığında

$$\ln(y) = \ln(\beta_1) - \beta_2 e^{\beta_3 x} + \ln(\varepsilon_x) \quad (6.1)$$

olup gerekli düzenlemeler yapılırsa

$$\ln\left(\ln\left(\frac{\beta_1}{y}\right)\right) = \ln(\beta_2) - \beta_3 x$$

olur. Burada,

$$y^* = \ln\left(\ln\left(\frac{\beta_1}{y}\right)\right), \beta_2^* = \ln(\beta_2), \beta_3^* = -\beta_3$$

olarak alındığında

$$y^* = \beta_2^* + \beta_3^*x$$

doğrusal regresyon modeli elde edilir. β_1 için başlangıç değeri $\hat{\beta}_1^{(0)} \geq \max(y)$ olarak alınabilir. Buna göre diğer parametreler için başlangıç değerlerini bulabilmek için bahsedilen dönüşümler uygulanarak elde edilen doğrusal regresyon modelinde parametre tahminleri yapılır. Daha sonra

$$\hat{\beta}_2^{(0)} = e^{\hat{\beta}_2^*}, \hat{\beta}_3^{(0)} = -\hat{\beta}_3^*$$

ters dönüşümü ile parametreler için başlangıç değerleri elde edilir.

İkinci olarak Richards modeli göz önüne alınsın. Model,

$$y = \frac{\beta_1}{(1 + \beta_2 e^{-\beta_3 x})^{1/\beta_4}} + \varepsilon_x$$

olmak üzere başlangıç değerlerini bulmak için modele logaritmik dönüşüm uygulanır.

Her iki tarafın doğal logaritması alınır. Buna göre,

$$\ln(y) + \frac{1}{\beta_4} \ln(1 + \beta_2 e^{-\beta_3 x}) = \ln(\beta_1) \quad (6.2)$$

olup gerekli düzenlemeler yapılırsa

$$\left(\frac{\beta_1}{y}\right)^{\beta_4} - 1 = \beta_2 e^{-\beta_3 x}$$

$$\ln\left(\left(\frac{\beta_1}{y}\right)^{\beta_4} - 1\right) = \ln\beta_2 - \beta_3 x$$

olur. Burada,

$$y^* = \ln\left(\left(\frac{\beta_1}{y}\right)^{\beta_4} - 1\right), \beta_2^* = \ln\beta_2 \text{ ve } \beta_3^* = -\beta_3$$

olarak alınır

$$y^* = \beta_2^* + \beta_3^* x$$

doğrusal regresyon modeli elde edilir. β_1 için başlangıç değeri $\hat{\beta}_1^{(0)} \geq \max(y)$ ve β_4 için başlangıç değeri $\hat{\beta}_4^{(0)} = 1$ olarak alınabilir. Buna göre diğer parametreler için başlangıç değerlerini bulabilmek için bahsedilen dönüşümler uygulanarak elde edilen doğrusal regresyon modelinde parametre tahminleri yapılır. Daha sonra

$$\hat{\beta}_2^{(0)} = e^{\hat{\beta}_2^*}, \hat{\beta}_3^{(0)} = -\hat{\beta}_3^*$$

ters dönüşümü ile parametreler için başlangıç değerleri elde edilir.

Son olarak Weibull modeli göz önüne alınsın. Model,

$$y = \beta_1 - \beta_2 e^{-\beta_3 e^{\beta_3 x \beta_4}} + \varepsilon_x$$

olmak üzere başlangıç değerlerini bulmak için modele iki kez logaritmik dönüşüm uygulanıp gerekli düzenlemeler yapılırsa,

$$\beta_1 - y = \beta_2 e^{-\beta_3 e^{\beta_3 x \beta_4}} \quad (6.3)$$

$$\ln\left(-\ln\left(\frac{\beta_1 - y}{\beta_2}\right)\right) = \ln(\beta_3) + \beta_4 \cdot \ln(x)$$

elde edilir. Burada,

$$y^* = \ln\left(-\ln\left(\frac{\beta_1 - y}{\beta_2}\right)\right), \beta_3^* = \ln(\beta_3), \beta_4^* = \beta_4 \text{ ve } x^* = \ln(x)$$

olarak alınır

$$y^* = \beta_3^* + \beta_4^* x^*$$

doğrusal regresyon modeli elde edilir. β_1 için başlangıç değeri $\hat{\beta}_1^{(0)} \geq \max(y)$ olup $y_0 = \beta_1 - \beta_2$ olduğundan $\beta_1 = \beta_2$ olup β_2 için başlangıç değeri $\hat{\beta}_2^{(0)} = \hat{\beta}_1^{(0)} \geq \max(y)$ olarak alınır. Buna göre diğer parametreler için başlangıç değerlerini bulabilmek için bahsedilen dönüşümler uygulanarak elde edilen doğrusal regresyon modelinde parametre tahminleri yapılır. Daha sonra

$$\hat{\beta}_3^{(0)} = e^{\hat{\beta}_3^*}, \hat{\beta}_4^{(0)} = \hat{\beta}_4^*$$

ters dönüşümü ile parametreler için başlangıç değerleri elde edilir.

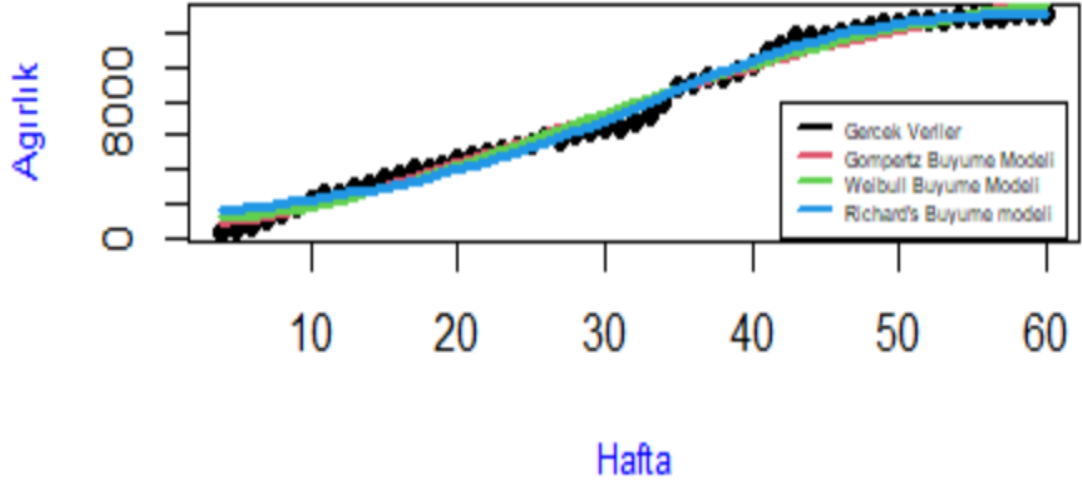
Anlatan dönüşümler uygulanarak elde edilen doğrusal regresyon modellerinde parametre tahminleri R programı kullanılarak yapılmış ve gerekli dönüşümler ile her bir model için parametrelerin başlangıç değerleri elde edilmiştir. Her bir modele ilişkin parametrelerin başlangıç değerleri Çizelge 6.3 ile verilmiştir.

Çizelge 6.3 Gompertz, Richards ve Weibull modellerinin parametre başlangıç değerleri

Model	β_1	β_2	β_3	β_4
Gompertz	13056	12.2509	0.1215	-
Richaards	14490	30.3400	0.1132	1
Weibull	13056	13056	0.0020	1.844

Elde edilen bu başlangıç değerleri kullanılarak R programında her bir modele ilişkin parametre tahminleri elde edilmiştir. Elde edilen bu parametre tahminlerine göre veriler ile uydurulan eğrilerin grafikleri Şekil 6.1 ile verildiği gibidir.

Gerçek Veriler ve Uyum Grafikleri



Şekil 6.1 Gerçek veri uygulamasına ait tahmin ve gerçek değerlerinin grafiği

Alınan doğrusal olmayan büyüme modellerinin verilere oldukça uyumlu olduğu görülmektedir. Çizelge 6.4 ile her bir modele ait parametre tahmin değerleri, standart hataları, iterasyon sayıları ve model karşılaştırması için gerekli olan Akaike Ölçütü (AIC) değerleri verilmiştir.

Çizelge 6.4 Uygulama Çalışması 6'ya ait modellerin sonuçları

Model	Parametre Tahmini	AIC	İterasyon Sayısı	SE
Gompertz	$\beta_1 = 16867$ $\beta_2 = 3.5083$ $\beta_3 = 0.0476$	874.0791	9	495.4
Richards	$\beta_1 = 13305$ $\beta_2 = 970.3794$ $\beta_3 = 0.1694$ $\beta_4 = 2.9424$	861.8387	39	441.3
Weibull	$\beta_1 = 14669$ $\beta_2 = 13573$ $\beta_3 = 0.00053$ $\beta_4 = 2.0627$	874.0259	13	491.1

Model parametrelerini tahmin için yapılan R programındaki hesaplama kodları ek 2 de verilmiştir. Çizelge 6.4 ile verilen sonuçlara göre AIC değeri en küçük olan model üçüncü model olan Richards'ın modelidir. Ayrıca en küçük standart hataya sahip model Richards modelidir. Bu nedenle, eldeki veriye göre hindi büyüme modeli için en uygun modelin bu model olduğu söylenebilir.



7. SONUÇ

Bu çalışmada, doğrusal olmayan regresyon modellerinde parametre tahmini yapmak için kullanılan yöntemler araştırılmıştır. Anılan regresyon modelinde beklenen değer fonksiyonunun parametrelere göre kısmi türevlerinden en az bir tanesi en az bir parametreye bağlıdır. Doğrusal olmama durumu modelin geometrisinden veya model parametrelerinden kaynaklanmaktadır.

Bazı regresyon modelleri dönüşüm yardımıyla doğrusallaşabilmektedir. Ancak doğrusallaşma hata terimlerinin varsayımlarını etkileyeceğinden her zaman uygulanması doğru olmayacaktır.

Doğrusal olmayan regresyon modellerinde en küçük kareler yöntemi ile parametre tahmini yapılırken elde edilen normal denklemlerin çözümü doğrusal regresyon modelindekiler kadar basit olmamaktadır. Bu nedenle, bu denklemlerin çözümü için iteratif yöntemler kullanılmaktadır. Bu çalışmada bu iteratif yöntemler anlatılmış ve bu yöntemlerin başlangıç değerlerine karşı davranışları incelenmeye çalışılmıştır. Yapılan uygulama çalışmalarında, uygun başlangıç değeri seçiminin bu yöntemler için çok önemli olduğu gözlenmiştir. Aksi takdirde parametre tahminleri elde edilememektedir.

Yapılan uygulama çalışmalarında, başlangıç değerinin seçimine göre iterasyon sayısı en düşük gözlemlenen yöntem Gauss-Newton yöntemi olmuştur. Ancak bu durumu genellemek her zaman mümkün değildir. En Hızlı İniş yönteminde, başlangıç değerinin seçimine göre iterasyon sayısının değiştiği ve uygun olmayan başlangıç değerlerinde iterasyon sayısının arttığı görülmüştür. İterasyon sayıları farklılık göstermesine rağmen hemen hemen her durumda parametre tahmin değerleri tüm iteratif yöntemlerde aynı olarak elde edilmiştir. Yakınsama hızına göre karşılaştırma yapılacak olursa, en az iterasyon sayısı ile yakınsama hızı en yüksek olan yöntem Gauss-Newton yöntemi olmuştur. İterasyon sayısı, En Hızlı İniş yönteminde fazla olmakla birlikte bu yöntemi uygularken adım etkisinin hesabı oldukça önemlidir. Uygun seçilen başlangıç değerinde ve uygun seçilen adım boyutunda En Hızlı İniş yönteminde hızlı yakınsama beklenir.

Literatürde adım etkisinin hesaplanması için çeşitli yöntemler vardır. Uygun hesaplanmayan adım boyutunun iterasyon sayısına olumsuz etkisi olacaktır.

Sonuç olarak parametre tahmin yönteminde Gauss-Newton, Levenberg-Marquardt ve En Hızlı İniş yöntemleri yaklaşık olarak aynı sonuçlar vermesine rağmen iterasyon sayısı bakımından farklılık göstermektedir. Başlangıç değerinin seçiminden en az etkilenen Gauss-Newton yöntemi olduğu gözlemlenmiş ancak bu durum her zaman beklenemez. Algoritma adımlarında bulunan adım boyutuna sahip olan En Hızlı İniş yönteminde adım boyutu doğru seçildiğinde ya da doğru hesaplandığında yakınsama hızı hızlı ve iterasyon sayısı düşük olacaktır.

Çalışmanın son bölümünde, dişi hindi ağırlıklarına ilişkin gerçek veriler göz önüne alınmış ve hangi büyüme modeline uygunluk gösterdiği belirlenmeye çalışılmıştır. Gerçek veri ile yapılan çalışmada da başlangıç değerinin önemi görülmüştür. Bu nedenle ilk olarak uygun başlangıç değeri seçimi için çeşitli dönüşümler uygulanmış ve her model için parametrelere ilişkin başlangıç değeri belirlenmiştir. Daha sonra, belirlenen bu başlangıç değerleri kullanılarak modellere ilişkin parametre tahminleri R programında yapılmıştır. Model karşılaştırması için AIC ölçütü kullanılmış ve AIC değeri en düşük olan modelin veriler için uygun model olduğu söylenmiştir. Verilerin alındığı tez çalışmasında erkek ve dişi hindilere ilişkin veriler kullanılmış ve hindilerin büyümesi çok evreli analiz ile gerçekleştirilmiştir. Bu çalışmada ise, sadece dişi hindilere ait ağırlık verileri kullanılmış ve dişi hindilerin büyümesinin Gompertz, Richards ve Weibull modellerinden hangisi ile en iyi açıklanabileceği araştırılmak istenmiştir. Elde edilen sonuçların literatürde hindi büyümesi için elde edilen sonuçlarla uygunluk sağladığı görülmüştür.

KAYNAKLAR

- Aksoy, S., “Otokorelasyonlu Hata Terimli Doğrusal Olmayan Regresyon Modellerinde Parametre Tahmini”, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Doktora Tezi, İstatistik (1996)
- Anonim 2021a. Web Sitesi:https://www.stat.colostate.edu/regression_book/chapter9.pdf
Erişim Tarihi: 05.06.2021
- Anonim 2021b. Web Sitesi:https://www.itl.nist.gov/div898/strd/nls/nls_main.shtml
Erişim Tarihi: 02.03.2021
- Aydın, C., “Kovaryans matrisi için bilgi verici olmayan önsel dağılım ve doğrusal olmayan modellerde parametre kestirimi”, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Doktora Tezi, İstatistik (1992).
- Bates, D.M. and Watts, D.G., “Nonlinear Regression Analysis and Its Applications”, Wiley, New York (1988).
- Çağlar, A., “Doğrusal Olmayan Modellerde Tahminlere İlişkin Güven Bölgelerinin Oluşturulması ve Bir Karşılaştırma”, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Yüksek Lisans Tezi, İstatistik (1995).
- Çelik, A., “Çok Evreli Büyüme Fonksiyonları ve Bazı Uygulamalar”, Kahramanmaraş Sütçü İmam Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Yüksek Lisans Tezi, Matematik (2013).
- Fekedulegn, D., Mac Siurtain, M.P. and Colbert, J. J., 1999. Parameter estimation of nonlinear growth models in forestry. *Silva Fennica*, 33(4):327-336.
- Fox, J. and Weisberg, S. ,“Nonlinear Regression and Nonlinear Least Squares in R An Appendix to An R Companion to Applied Regression”, Second edition, last revision: 13 December 2010.
- Gallant, A.R., “Nonlinear Statistical Models”, Wiley, New York (1987).
- Keskintürk, T. ve Şahin, S. , “Doğrusal Olmayan Regresyon Analizinde Gerçek Değer Kodlamalı Genetik Algoritma”, İstanbul Sosyal Ticaret Üniversitesi Bilimler Dergisi Yıl:8 Sayı:15 Bahar 2009 S.167-178.
- M. Isabel Reis Dos Santos And Acácio M.O.Porta Nova ,“Estimating and Validating Nonlinear Regression Metamodels in Simulation, Communications in Statistics.Simulation and Computation”, 36: 123.137, 2007
- Marquardt D.W., “An Algorithm for Least Squares Estimation of Nonlinear Parameters”, *J. Soc. Ind. Appl. Math.* 2, 1963, 431-441
- Mendlinger, S., “A Nonmonotone Line Search Method for Regression Analysis, *J. Serv. Sci. & Management*”, 2009, 2: 36-42 Published Online March 2009 in SciRes.

Orman,M.N ve Grcan, İ.S,“ Doğrusal olmayan regresyon analizi ve biyoistatistikte kullanımı”, Ankara Üniversitesi, Veteriner Fakltesi, Biyometri Anabilim Dalı, Ankara Ankara Üniv Vet Fak Derg. 48,195-199,2001.

Ritz, C. and Streibig, J. C. (2008). Nonlinear Regression with R, Use R!, Springer Verlag.

Ruckstuhl, A,“ Introduction to Nonlinear Regression”,IDP Institut für Datenanalyse und Prozessdesign Zürcher Hochschule für Angewandte Wissenschaften, October 2010



EKLER

EK 1 En Hızı İniş Yöntemi ile Parametre Tahmini Matlab Kodları

```
function a=EH(x,y)

tol=0.0001 %tolerance

iter_max=50; %maksimum iterasyonsayısı

a=[250,0.0005]; %başlangıç değerleri

n=length(x);

disp('iterations a0 a1 da0 da1');

for iter=1:iter_max

    a0=a(1);

    a1=a(2);

    for i=1:n

        f(i)=a0*(1-exp(-a1*x(i)));

        j(i,1)=1-exp(-a1*x(i));

        j(i,2)=a0*x(i)*exp(-a1*x(i));

        d(i)=y(i)-f(i);

    end

    da=(j'*j)\(j'*d);

    a=a+0.7*da';

    out=[iter a da'];

    disp(out);
```

```
if (abs(da(1)) < tol && abs(da(2)) < tol);  
    disp('gaussnewton yakınsadı.');
```

break

```
end  
  
end  
  
end
```



EK 2 Gompertz, Richaards, Weibull Modellerinin Parametre Tahmini için R Kodları

```
library("stats")
library("readxl")
veriseti <- read_excel("D:/YüksekLisansOgrenciler/Umut/TezSon/hindi.xlsx")
data <- structure(list(hafta,agirlik ),
                  .Names = c("hafta", "agirlik"),
                  class = "data.frame",row.names = c(NA, -57L))

library(drc)
library(ggplot2)
library(minpack.lm)
#Gompertz modeli icin baslangic kosullari
yyildiz=log(log((max(agirlik)+1)/agirlik))
baslangic=lm(yyildiz~hafta)
model1 <- nls(agirlik~teta1*exp(-teta2*exp(-
teta3*hafta)),data=data,start=list(teta1=max(agirlik)+1,teta2=exp(2.5056),teta3=0.1215
),trace=FALSE)
coef(model1)
AIC(model1)
confint(model1)
summary(model1)
#Weibull Buyume Modeli
yyildiz3=log(-log((max(agirlik)+1-agirlik)/max(agirlik)))
haftayildiz3=log(hafta)
baslangic3=lm(yyildiz3~haftayildiz3)
model3<- nls(agirlik~(teta1-teta2*exp(-
teta3*(hafta^teta4))),data=data,start=list(teta1=max(agirlik)+1,teta2=max(agirlik)+1,tet
a3=exp( -6.203),teta4=1.844 ),trace=FALSE)
summary(model3)
coef(model3)
AIC(model3)
confint(model3)
```

```

#Richards modeli
#yyildiz2=log(((max(agirlik)+1)/agirlik)-1)
#haftayildiz=hafta
#baslangic2=lm(yyildiz2~haftayildiz)
model2 <- nls(agirlik~(teta1/(1+(teta2*exp(-
teta3*hafta))))^(1/teta4)),data=data,start=list(teta1=1.449e+04,teta2=3.034e+01,teta3=1.
132e-01,teta4=1),trace=FALSE)
summary(model2)
coef(model2)
AIC(model2)
#Gercek Veriler-Uyum Grafigi
plot(hafta,agirlik,col=1,pch=16,xlab="Hafta",ylab="Agirlik",cex.lab=0.8,col.lab="blue")
lines(hafta,predict(model1),col=2,lwd=2)
lines(hafta,predict(model3),col=3,lwd=2)
lines(hafta,predict(model2),col=4,lwd=3)
legend(45,10000,legend=c("Gercek Veriler","Gompertz Buyume Modeli","Weibull
Buyume Modeli","Richard's Buyume
modeli"),col=c(1,2,3,4),cex=0.35,text.font=1,lwd=2)
title("Gercek Veriler ve Uyum Grafikleri",cex.main=.8,col.main="blue")

```