ÇUKUROVA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

DOKTORA TEZİ

Özge KURAN

LİNEER KARMA MODELLERDE PARAMETRE TAHMİNİ VE SONUÇ ÇIKARIM

İSTATİSTİK ANABİLİM DALI

ADANA-2017

ÇUKUROVA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

LİNEER KARMA MODELLERDE PARAMETRE TAHMİNİ VE SONUÇ ÇIKARIM

Özge KURAN

DOKTORA TEZİ

İSTATİSTİK ANABİLİM DALI

Bu Tez 26/07/2017 Tarihinde Aşağıdaki Jüri Üyeleri Tarafından Oybirliği/Oyçokluğu ile Kabul Edilmiştir.

……..…….….....	……..…….….....	……..…….….....
Prof. Dr. Mahmude Revan ÖZKALE	Prof. Dr. Sadullah SAKALLIOĞLU	Yrd. Doç. Dr. İlker ÜNAL
DANIŞMAN	ÜYE	ÜYE
……..…….……	……..…….……	
Doç. Dr. Semra TÜRKAN	Yrd. Doç. Dr. Neslihan İYİT	
ÜYE	ÜYE	

Bu Tez Enstitümüz İstatistik Anabilim Dalında hazırlanmıştır.
Kod No:

Prof. Dr. Mustafa GÖK
Enstitü Müdürü

Bu çalışma

- **Ç.Ü. Bilimsel Araştırma Projeleri Birimi Proje No: FDK-2015-3968**

tarafından desteklenmiştir.

Not: Bu tezde kullanılan özgün ve başka kaynaktan yapılan bildirişlerin, çizelge, şekil ve fotoğrafların kaynak gösterilmeden kullanımı, 5846 sayılı Fikir ve Sanat Eserleri Kanunundaki hükümlere tabidir.

ÖZ

DOKTORA TEZİ

LİNEER KARMA MODELLERDE PARAMETRE TAHMİNİ VE SONUÇ ÇIKARIM

Özge KURAN

ÇUKUROVA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
İSTATİSTİK ANABİLİM DALI

Danışman : Prof. Dr. Mahmude Revan ÖZKALE
Yıl: 2017, Sayfa: 174
Jüri : Prof. Dr. Mahmude Revan ÖZKALE
: Prof. Dr. Sadullah SAKALLIOĞLU
: Yrd. Doç. Dr. İlker ÜNAL
: Doç. Dr. Semra TÜRKAN
: Yrd. Doç. Dr. Neslihan İYİT

En yaygın kullanılan istatistiksel model doğrusal (lineer) regresyon modeli olmasına rağmen bazen sabit etkilere ilave olarak rastgele etkileri de içeren modellere uyan veri yapıları ile de karşılaşmak mümkündür. Bu durumda, lineer karma modeller ortaya çıkmaktadır. Lineer karma modeller, iç-içe geçmiş verilerin ve uzun süreli (tekrarlı ölçümlü) verilerin de dahil olduğu çok çeşitli verilerin analizinde kullanılan önemli bir araçtır.

Bu çalışmada ilk olarak, lineer karma modeller, lineer karma modellerin varsayımları, lineer karma modellerde parametre tahminleri, tekrarlı ölçüm verileri için model yapılandırma süreci, literatürde var olan varyans-kovaryans modelleri ve bu varyans-kovaryans modelleri arasından uygun olan modelin seçim kriterleri incelenmiştir. Daha sonra, çoklu iç ilişki olması durumunda lineer karma model literatüründe var olan ridge tahmin ve ön tahmin edicilere alternatif olarak mixed, stokastik kısıtlı ridge, Liu, temel bileşenler regresyon ve r-k sınıf tahmin ve ön tahmin edicileri önerilmiştir ve matris değerli hata kareler ortalaması kriteri kullanılarak tahmin ve ön tahmin edicilerin performansları karşılaştırılmıştır. Çalışma, R ve Matlab R2014a programlarının kullanılmasıyla yapılan uygulamalarla desteklenmiştir.

Anahtar Kelimeler: Sabit Etki, Rastgele Etki, Lineer Karma Model, Çoklu İç İlişki, Matris Değerli Hata Kareler Ortalaması

ABSTRACT

PhD THESIS

PARAMETER ESTIMATION AND INFERENCE IN LINEAR MIXED MODELS

Özge KURAN

ÇUKUROVA UNIVERSITY
INSTITUTE OF NATUREL AND APPLIED SCIENCES
DEPARTMENT OF STATISTICS

Supervisor : Prof. Dr. Mahmude Revan ÖZKALE
Year: 2017, Pages: 174
Jury : Prof. Dr. Mahmude Revan ÖZKALE
: Prof. Dr. Sadullah SAKALLIOĞLU
: Asst. Prof. Dr. İlker ÜNAL
: Assoc. Prof. Dr. Semra TÜRKAN
: Asst. Prof. Dr. Neslihan İYİT

Although the most widely-used statistical model is the linear regression model, it is sometimes possible to encounter with the data structures that accord with the models that include both fixed and random effects. In this case, linear mixed models are arised. Linear mixed models are an important tool for the analysis of a broad variety of data including clustered data and longitudinal (repeated measures) data.

In this study firstly, linear mixed models, assumptions of linear mixed models, parameter estimations in linear mixed models, model building process for repeated measures data, variance-covariance models in literature and selection criteria of appropriate model among these variance-covariance models have been examined. Later, the mixed, stochastic restricted ridge, Liu, principal components regression and r-k class estimators and predictors have been proposed alternative to the ridge estimator and predictor in linear mixed model literature when there is multicollinearity and performances of estimators and predictors have been compared by using the matrix mean square error criterion. The study is supported with applications done using R and Matlab R2014a programs.

Key Words: Fixed Effect, Random Effect, Linear Mixed Model, Multicollinearity, Matrix Mean Square Error

GENİŞLETİLMİŞ ÖZET

Lineer karma modellerde parametre tahminlerinin ve çıkarımlarının incelenmesi amacıyla oluşturulan bu tez, yedi bölümden meydana gelmektedir. Birinci bölüm giriş bölümü olup, her bir bölümün sonunda, elde edilen sonuçların daha iyi bir şekilde algılanabilmesi amacıyla, Matlab R2014a ve/veya R programlarından yararlanılarak analiz edilen uygulama çalışmaları bulunmaktadır.

İkinci bölümde, lineer karma modeller, lineer karma modellerin varsayımları ve lineer karma modellerde parametre tahminleri ifade edilmiştir.

Üçüncü bölümde, lineer karma modellerde tekrarlı ölçüm verileri için model yapılandırma süreci ile literatürde var olan 13 farklı varyans-kovaryans modeli incelenmiştir ve incelenen 13 farklı varyans-kovaryans modeli arasından uygun olan modelin seçim kriterleri üzerinde durulmuştur.

Dördüncü bölümde, lineer karma modellerde stokastik lineer kısıtlar altında yeni tanımlanan ve mixed ve stokastik kısıtlı ridge yöntemlerinin kullanılması sonucunda elde edilen *mixed ve stokastik kısıtlı ridge (stochastic restricted ridge) tahmin ve ön tahmin edicileri* verilmiştir. Lineer karma modellerde yeni tanımlanan bu parametre tahmin edicilerinin hem birbirleriyle hem de *en iyi lineer yansız tahmin edici (best linear unbiased estimator, BLUE)/en iyi lineer yansız ön tahmin edici (best linear unbiased predictor, BLUP)* ile ilişkileri ortaya konulmuş ve *matris değerli hata kareler ortalaması (matrix mean square error, mMSE) kriteri* kullanılarak tahmin edicilerin performansları karşılaştırılmıştır.

Beşinci bölümde, lineer karma modellerde *Liu tahmin ve ön tahmin edicileri* tanımlanmış ve bu tahmin edicilerin, belirli bir stokastik lineer kısıt altında mixed tahmin ve ön tahmin edicilerin özel bir durumuna karşılık geldikleri gösterilmiştir. Liu tahmin ve ön tahmin edicilerin BLUE/BLUP ile ridge tahmin ve ön tahmin edicileriyle ilişkileri ortaya konulmuş ve mMSE kriteri kullanılarak tahmin edicilerin performansları karşılaştırılmıştır. Aynı zamanda, *skaler değerli*

hata kareler ortalaması (scalar mean square error, sMSE) kriteri kullanılarak, Liu yanlılık parametresinin seçimi incelenmiştir.

Altıncı bölümde, lineer karma modellerde *temel bileşenler regresyon (principal components regression, PCR) ile r-k sınıf (r-k class) tahmin ve ön tahmin edicileri* önerilmiştir. Aynı zamanda, BLUE/BLUP, ridge ve PCR tahmin ve ön tahmin edicilerinin r-k sınıf tahmin ve ön tahmin edicilerinin özel bir durumuna karşılık geldikleri gösterilmiştir. mMSE kriteri kullanılarak, r-k sınıf tahmin ve ön tahmin edicilerin BLUE/BLUP, ridge ve PCR tahmin ve ön tahmin edicilerinden üstün olduğu gerekli ve yeterli koşullar tanımlanmıştır. Bu koşulların sağlanıp sağlanmadığının kontrol edilmesi amacıyla hipotez testlerinden yararlanılmıştır.

Yedinci bölümde, çalışmanın diğer bölümlerinde elde edilen sonuçlar özetlenmiş ve sonraki çalışmalar için önerilere yer verilmiştir.

TEŞEKKÜR

Bu çalışmanın gerçekleşmesinde bana yön veren, değerli destek ve yardımlarını esirgemeyerek her zaman yanımda olan danışman hocam Sayın Prof. Dr. M. Revan ÖZKALE'ye, bu tez çalışması boyunca olumlu önerileri ve katkıları ile bana vakit ayıran Sayın Prof. Dr. Sadullah SAKALLIOĞLU ve Sayın Yrd. Doç. Dr. İlker ÜNAL hocalarıma ve değerli jüri üyelerine, eğitim hayatım boyunca aldığım her kararın arkasında olarak beni destekleyen ve yanımda olan sevgili aileme en içten teşekkürlerimi sunarım.

İÇİNDEKİLER **SAYFA**

ÖZ I
ABSTRACT II
GENİŞLETİLMİŞ ÖZET III
TEŞEKKÜR V
İÇİNDEKİLERA VI
ÇİZELGELER DİZİNİ X
ŞEKİLLER DİZİNİ XII
SİMGELER VE KISALTMALAR XIV
1. GİRİŞ 1
2. LİNEER KARMA MODELLERDE PARAMETRE TAHMİNLERİ 11
2.1. Lineer Karma Modellerde Rastgele Etkili Parametrelerin Ön Tahmini 12
2.1.2. En İyi Lineer Ön Tahmin (BLP) Yöntemi 13
2.1.3. En İyi Lineer Yansız Ön Tahmin (BLUP) Yöntemi 13
2.1.4. Henderson nın Lineer Karma Model Eşitlikleri 15
2.2. Lineer Karma Modellerde Varyans Bileşenlerinin Tahmini 17
2.2.2. Sınırlandırılmış Maksimum Likelihood (REML) Yöntemi 19
2.2.3. ML ve REML Arasındaki Farklar 22
2.2.4. İteratif Yöntemler 23
2.2.4.1. Newton-Raphson (NR) Algoritması 23
2.2.4.2. Fisher Skorlama (FS) Algoritması 25
2.2.4.3. Expectation-Maximization (EM) Algoritması 26
2.3. Uygulama: Aerosol Verisi 27
3. LİNEER KARMA MODELLRDE TEKRARLI ÖLÇÜM OLMASI DURUMUNDA VARYANS-KOVARYANS MATRİS YAPISININ MODELLENMESİ 31
3.1. Lineer Karma Modellerde Tekrarlı Ölçüm Verileri için Model Yapılandırma Süreci 32

3.1.1. Rastgele Katsayılı (RI) Model 34
3.1.2. Rastgele Katsayılı ve Eğimli (RIS) Model 35
3.2. Lineer Karma Modellerde Tekrarlı Ölçümler için Varyans-Kovaryans Modelleri 37
3.2.1. Tekrarlı Ölçümler için Homojen Varyans-Kovaryans Modelleri 37
3.2.1.1. Varyans Bileşenleri (VC) Varyans-Kovaryans Modeli 37
3.2.1.2. Bileşik Simetri (CS) Varyans-Kovaryans Modeli 38
3.2.1.3. Toeplitz (TOEP) Varyans-Kovaryans Modeli 39
3.2.2. Tekrarlı Ölçümler için Heterojen Varyans-Kovaryans Modelleri 40
3.2.2.1. Yapılandırılmamış (UN) Varyans-Kovaryans Modeli 40
3.2.2.2. Köşegen (UN(1)) Varyans-Kovaryans Modeli 41
3.2.2.3. Heterojen Bileşik Simetri (CSH) Varyans-Kovaryans Modeli 41
3.2.2.4. Heterojen Toeplitz (TOEPH) Varyans-Kovaryans Modeli 42
3.2.2.5. Heterojen Birinci Dereceden Otoregresif (ARH(1)) Varyans-Kovaryans Modeli 42
3.2.2.6. Huynh-Feldt (HF) Varyans-Kovaryans Modeli 43
3.2.2.7. Birinci Dereceden Anti-Bağımlı (ANTE(1)) Varyans-Kovaryans Modeli 43
3.2.2.8. Birinci Dereceden Faktör Analitik (FA(1)) Varyans-Kovaryans Modeli 44
3.2.2.9. Yapılandırılmamış Korelasyonlu (UNR) Varyans-Kovaryans Modeli 44
3.3. Lineer Karma Modellerde Tekrarlı Ölçüm Olması Durumunda Uygun Varyans-Kovaryans Modelinin Seçimi 45
3.4. Uygulama: Ortodontik Büyüyen Veri 48
3.4.1. Ortodontik Büyüyen Verinin RIS Modeli ve Matlab R2014a Programı Yardımıyla Yeniden Modellenmesi 58
3.5. Uygulama: Parkinson Hastalığı Verisi 60
3.6. Uygulama: Büyüyen Fare Tümörü Verisi 61

4. MİXED VE STOKASTİK KISITLI RİDGE TAHMİN VE ÖN TAHMİN EDİCİLER 65
4.1. Mixed Yöntemi 66
4.2. Stokastik Kısıtlı Ridge Yöntemi 71
4.3. Varyans Bileşenlerinin Tahmini 75
4.3.1. ML Yöntemi 75
4.3.2. REML Yöntemi 78
4.3.3. İteratif Yöntemler 81
4.3.3.1. NR Algoritması 82
4.3.3.2. FS Algoritması 83
4.4. Tahmin Edicilerin Karşılaştırılması 84
4.5. Uygulama: Varsayımsal Veri 93
5. LİU TAHMİN VE ÖN TAHMİN EDİCİLER 99
5.1. Sabit ve Rastgele Etkilerin Liu Tahmini 99
5.2. Tahmin Edicilerin Karşılaştırılması 103
5.3. Liu Yanlılık Parametresinin Seçimi 109
5.4. Uygulama: Tahıl Verisi 114
5.5. Uygulama: Simülasyon Çalışması 119
6. TEMEL BİLEŞENLER REGRESYON VE r-k SINIF TAHMİN VE ÖN TAHMİN EDİCİLER 129
6.1. Temel Bileşenler Regresyon (PCR) Tahmin ve Ön Tahmin Ediciler 129
6.2. r-k Sınıf Tahmin ve Ön Tahmin Ediciler 133
6.3. Varyans Bileşenlerinin Tahmini 135
6.3.1. REML Yöntemi 135
6.3.2. İteratif Yöntemler 137
6.3.2.1. NR Algoritması 137
6.4. Tahmin Edicilerin Karşılaştırılması 138
6.4.1. r-k Sınıf Tahmin Edici ve BLUE 143
6.4.2. r-k Sınıf Tahmin Edici ve Ridge Tahmin Edici 145

6.4.3. r-k Sınıf Tahmin Edici ve PCR Tahmin Edici 147
6.5. Hipotez Testleri 148
6.6. Uygulama: Ortodontik Büyüyen Veri 150
7. SONUÇLAR VE ÖNERİLER 155
KAYNAKLAR 157
ÖZGEÇMİŞ 165
EKLER 166

ÇİZELGELER DİZİNİ **SAYFA**

Çizelge 1.1. Bazal hücreli kanser (bazal hücreli epitelyoma) veri formatı (McCulloch ve Searle, 2001) 1

Çizelge 1.2. Sınav başarı notları verisi (McCulloch ve Searle, 2001) 5

Çizelge 2.1. İmalatçıların yararlandığı üç filtre tipinin kullanılması ile iki aerosolden elde edilen yüzdelik penetrasyonlar (Beckman ve ark., 1987) 28

Çizelge 3.1. Lineer karma modellerde kullanılan bilgi kriterleri (Wenren, 2014) 47

Çizelge 3.2. Ortodontik büyüyen veri (Potthoff ve Roy, 1964) 49

Çizelge 3.3. Model (3.20.) ile model (3.21.) in karşılaştırılması 57

Çizelge 3.4. Yaş ve cinsiyetin hipofiz bezi ile pterygomaxillary basınç arasındaki uzaklık ölçüm değerleri üzerindeki etkisinin belirlenmesi 58

Çizelge 3.5. UN modelinin REML yöntemi altındaki Matlab R2014a program çıktısı 59

Çizelge 3.6. UN(1) modelinin REML yöntemi altındaki Matlab R2014a program çıktısı 59

Çizelge 3.7. VC modelinin REML yöntemi altındaki Matlab R2014a program çıktısı 59

Çizelge 3.8. CS modelinin REML yöntemi altındaki Matlab R2014a program çıktısı 59

Çizelge 3.9. $Var(u_i)$ yapıları için özet tablo 59

Çizelge 5.1. Farklı varyans-kovaryans yapıları için özet tablo 115

Çizelge 5.2. $\hat{k} = 0.2182$ ve $\hat{d}_h = 0.8650$ için tahmin ve ön tahmin ediciler sMSE nin aldığı değerler 117

Çizelge 5.3. $p = 2, m = 30, n_i = 5$ ve $\hat{d}_h$ ın kullanılması ile EMSE ve PMSE değerleri 122

Çizelge 5.4. $p = 2, m = 60, n_i = 5$ ve $\hat{d}_h$ ın kullanılması ile EMSE ve PMSE değerleri.....123
Çizelge 5.5. $p = 3, m = 30, n_i = 5$ ve $\hat{d}_h$ ın kullanılması ile EMSE ve PMSE değerleri.....124
Çizelge 5.6. $p = 3, m = 60, n_i = 5$ ve $\hat{d}_h$ ın kullanılması ile EMSE ve PMSE değerleri.....125
Çizelge 5.7. $p = 4, m = 30, n_i = 5$ ve $\hat{d}_h$ ın kullanılması ile EMSE ve PMSE değerleri.....126
Çizelge 5.8. $p = 4, m = 60, n_i = 5$ ve $\hat{d}_h$ ın kullanılması ile EMSE ve PMSE değerleri.....127
Çizelge 6.1. $\hat{k} = 5.2512$ için tahmin ve ön tahmin ediciler ile sMSE nin aldığı değerler.....151

ŞEKİLLER DİZİNİ **SAYFA**

Şekil 1.1. Sabit ve rastgele etkilerin belirlenmesi amacıyla kullanılan karar ağacı (Searle ve ark., 1992; McCulloch ve Searle, 2001)..... 3

Şekil 3.1. Hipofiz bezi.....50

Şekil 3.2. Pterygomaxillary basınç (I).....50

Şekil 3.3. Ortodontik büyüyen verinin grafiksel gösterimi.....51

Şekil 3.4. 12 şerli dişi farelere 4 farklı ışın tedavi yönteminin uygulanması sonucunda günlere (days) karşılık tümör hacimlerinin (tumour volume) grafiği (Fu ve ark., 2015).....63

Şekil 4.1. k ya karşı $GCV^{SRR}(k)$ nın grafiği (Kuran ve Özkale, 2016).....95

Şekil 4.2. k ya karşı $\tilde{\beta}_{me}(k)$, $\tilde{\beta}_{me}$ ve $\tilde{\beta}$ nın sMSE değerlerinin grafiği (Kuran ve Özkale, 2016).....96

Şekil 5.1. k ve d ye karşı $\hat{\beta}$, $\hat{\beta}_d$ ve $\hat{\beta}_k$ nın sMSE değerlerinin grafiği 118

Şekil 6.1. k ya karşı $\hat{\beta}_r(k)$, $\hat{\beta}(k)$ ve $\hat{\beta}$ nın sMSE değerlerinin grafiği 152

Şekil 6.2. k ya karşı $\hat{\beta}_r(k)$ ve $\hat{\beta}_r$ nin sMSE değerlerinin grafiği 153

SİMGELER VE KISALTMALAR

BP : En İyi Ön Tahmin (Best Prediction)

BLP : En İyi Lineer Ön Tahmin (Best Linear Prediction)

BLUP : En İyi Lineer Yansız Ön Tahmin (Best Linear Unbiased Prediction)

BLUE : En İyi Lineer Yansız Tahmin (Best Linear Unbiased Estimation)

ML : Maksimum Likelihood (Maximum Likelihood)

REML : Sınırlandırılmış Maksimum Likelihood (Restricted Maksimum Likelihood)

NR : Newton-Raphson Algoritması (Newton-Raphson Algorithm)

FS : Fisher Skorlama Algoritması (Fisher Scoring Algorithm)

EM : Expectation-Maximization Algoritması (Expectation-Maximization Algorithm)

mMSE : Matris Değerli Hata Kareler Ortalaması (Matrix Mean Square Error)

sMSE : Skaler Değerli Hata Kareler Ortalaması (Scalar Mean Square Error)

1. GİRİŞ

İstatistiksel modeller, verinin tanımlanması, veri yapısını en iyi temsil eden matematiksel formun belirlenmesi ve değişkenler arasındaki ilişkinin yaklaşık olarak tanımlanması amacıyla kullanılan modellerdir. Modeller sahip oldukları etki türlerine göre farklı şekillerde adlandırılmaktadırlar. Sadece sabit etkilerden oluşan modellere ***sabit etkili modeller (lineer regresyon modelleri)***, sadece rastgele etkilerden oluşan modellere ***rastgele etkili modeller*** ve hem sabit hem de rastgele etkileri içeren modellere de ***lineer karma modeller*** denilmektedir (Searle ve ark., 1992; McCulloch ve Searle, 2001). En yaygın kullanılan istatistiksel model lineer regresyon modeli olmasına rağmen bazen sabit etkilere ilave olarak rastgele etkileri de içeren modellere uyan veri yapıları ile de karşılaşmak mümkündür. Bu durumda, ***lineer karma modeller*** ortaya çıkmaktadır.

Sabit ve rastgele etki kavramlarının tanımlanabilmesi için öncelikle faktör, düzey ve hücre kavramlarının ifade edilmesi gerekmektedir. Örneğin, Abu-Libdeh ve ark. (1990) tarafından yapılan bazal hücreli kanser (bazal hücreli epitelyoma) çalışmasına benzer bir veri formatı Çizelge 1.1 ile verilmiş olsun (McCulloch ve Searle, 2001).

Çizelge 1.1. Bazal hücreli kanser (bazal hücreli epitelyoma) veri formatı (McCulloch ve Searle, 2001)

	Düşük Güneş Işığı			Yüksek Güneş Işığı		
Cinsiyet	Yaş Grubu			Yaş Grubu		
	A	B	C	A	B	C
Erkek	*	*	*	*	*	*
Kız	*	*	*	*	*	*

Çizelge 1.1 incelendiğinde bazal hücreli kanser oluşumunun belirlenebilmesi amacıyla hastaların cinsiyet (kız ve erkek), yaş grubu (A, B ve C)

ve maruz kalınan güneş ışığının boyutuna (düşük ve yüksek) göre sınıflandırıldığı görülmektedir. Burada cinsiyet, yaş grubu ve maruz kalınan güneş ışığının boyutu ***faktörleri***; kız ve erkek cinsiyetleri, A, B ve C yaş grupları, düşük ve yüksek güneş ışıkları ***düzeyleri***; * şekilleri de ***hücreleri*** oluşturmaktadır. Böylece cinsiyet (2 düzeyli), yaş grubu (3 düzeyli) ve maruz kalınan güneş ışığı boyutu (2 düzeyli) faktörleri ile toplamda $2\times3\times2=12$ hücrenin olduğu söylenebilir (McCulloch ve Searle, 2001).

Faktörlerin düzeyleri, faktörün sınırlı (veya sonlu) bir kümesinden özel olarak seçilmişse böyle etkiler ***sabit etkiler*** olarak adlandırılmaktadır. Çizelge 1.1 de verilen faktörlerin düzeyleri, faktörün sınırlı bir kümesinden özel olarak seçilmeleri nedeniyle sabit etkilere örnek olarak verilebilirler (McCulloch ve Searle, 2001).

Faktörlerin düzeyleri, faktörün sınırsız (veya sonsuz) bir kümesinden rastgele olarak seçilmişse böyle etkiler ise ***rastgele etkiler*** olarak adlandırılmaktadır. Örneğin, daha önceden özel olarak belirlenmiş üç farklı sıcaklık derecesinde pişirilmiş fırınlar dolusu ekmek kümesi içerisinden rastgele olarak seçilen 6 fırın ekmek kümesinin her birinden 4 somun ekmek alınmak istensin. Burada daha önceden özel olarak belirlenen sıcaklık dereceleri sabit etkileri, fırınlar dolusu ekmek kümesi içerisinden rastgele olarak seçilen ekmek kümeleri ise rastgele etkileri oluşturmaktadır (Searle ve ark., 1992; McCulloch ve Searle, 2001).

Sabit ve rastgele etkilerin belirlenmesi amacıyla Şekil 1.1 ile verilen karar ağacından da yararlanılmaktadır (Searle ve ark., 1992; McCulloch ve Searle, 2001).

Faktörün düzeylerinin bir olasılık dağılımından geldiği varsayımı yapılabilir mi?



Şekil 1.1. Sabit ve rastgele etkilerin belirlenmesi amacıyla kullanılan karar ağacı (Searle ve ark., 1992; McCulloch ve Searle, 2001)

Şekil 1.1 ile verilen karar ağacının bir örnek yardımıyla daha kolay bir şekilde anlaşılması sağlanacaktır. Devore ve Peck (1993), kurulamadan sonra yıkanan kumaşların düzgünlüğünün incelenmesi amacıyla bir çalışma yapmışlardır. Bu çalışmada, rastgele seçilen 9 farklı kumaşın her biri daha önceden belirlenen 5 kurulama metoduna tabi tutulmuştur. İlgilenilen faktörler kurulama metodu (5 düzeyli) ve kumaş (9 düzeyli) olmak üzere 2 tanedir. Şekil 1.1 yardımıyla 5 kurulama metodunun bir olasılık dağılımından gelmedikleri ve dolayısıyla kurulama metodunun sabit etkili olduğu söylenebilir. Bir yığın kumaş popülasyonundan (yani bir olasılık dağılımından) rastgele 9 farklı kumaşın seçilmesi nedeniyle de kumaşın, rastgele etkili olduğu ifade edilebilir (McCulloch ve Searle, 2001).

Lineer karma model tanımı ilk olarak Eisenhart (1947) tarafından verilmiştir. Eisenhart (1947) yapmış olduğu çalışmasında sabit ve rastgele etkili modelleri sırasıyla Model I ve Model II olarak sınıflandırırken, hem sabit hem de rastgele etkileri içeren lineer karma modelleri Model III olarak tanımlamıştır. Lineer karma modellerle ilgili ilk çalışmalar ise 20. yüzyılın ortalarında genetik alanında yapılmıştır. Henderson (1950, 1969, 1973, 1977, 1984) hayvan ıslahı ve genetik çalışmalarında yetiştirilecek bir sonraki hayvan ırklarının en verimli dölleri verecek şekilde üretilebilmesi amacıyla lineer karma modeller yardımıyla genetik değerlerinin tahminleri en yüksek olarak elde edilen ebeveynlerin seçimi üzerine çalışmalar yapmıştır. Böylece, lineer karma modellerin gelişimi hem genetik hem de lineer model teorilerinin gelişimine önemli katkılar sağlamıştır (Rao ve Poduri, 1997).

Lineer karma modellerin amaçlarından biri, parametre tahmini yapmaktır. Rastgele etkiler, lineer karma modeldeki rastgele değişkenlere karşılık gelen etkiler olduğu için bu etkilerin tahminlerine *ön tahmin (ön kestirim)* ve tahmin edicilerine de *ön tahmin edici (ön kestirici)* denilmektedir (McCulloch ve Searle, 2001).

Lineer karma modellerde tahmin problemi sabit etkili parametrelerin tahmini, rastgele etkili parametrelerin ön tahmini ve rastgele etkili parametrelerin varyansı ile hatanın varyansından oluşan varyans bileşenlerinin tahmininden oluşmaktadır.

Rastgele etkili parametrelerin ön tahmininin elde edilmesinde *en iyi ön tahmin (best prediction, BP), en iyi lineer ön tahmin (best linear prediction, BLP), en iyi lineer yansız ön tahmin (best linear unbiased prediction, BLUP)* yöntemleri ile Henderson ve ark. (1959) tarafından geliştirilen *lineer karma model eşitlikleri* kullanılmaktadır. Henderson ve ark. (1959) tarafından elde edilen lineer karma model eşitlikleri hem sabit etkili parametrelerin *en iyi lineer yansız tahminini (best linear unbiased estimation, BLUE)* hem de rastgele etkili parametrelerin BLUP unu eş zamanlı olarak vermektedir.

Varyans bileşenlerinin tahmini için normallik varsayımı gerektirmeyen yöntemler, Fisher (1925) tarafından tanımlanan *varyans analizi (analysis of variance, ANOVA)*, Rao (1970, 1971a, 1971b, 1972) tarafından önerilen *minimum uzunluklu karesel yansız tahmin (minimum norm quadratic unbiased estimation, MINQUE), minimum varyanslı karesel yansız tahmin (minimum variance quadratic unbiased estimation, MIVQUE)* yöntemleri ile *Henderson nın metotları*dır (Henderson, 1953).

Varyans bileşenlerinin tahmini için normallik varsayımı gerektiren yöntemler ise Crump (1947), Hartley ve Rao (1967) tarafından incelenen *maksimum likelihood (maximum likelihood, ML) yöntemi* ile *sınırlandırılmış maksimum likelihood (restricted maximum likelihood, REML) yöntemi*dir (Thompson, 1962; Patterson ve Thompson, 1971). ML yöntemi yardımıyla aynı zamanda sabit etkili parametrelerin tahmini de elde edilmektedir. Ancak ML veya

REML yöntemleriyle elde edilen eşitlikler parametrelere göre lineer olmadığından eşitliklerin çözümü zordur. Bu eşitliklerin çözülebilmesi amacıyla iteratif yöntemlere ihtiyaç duyulmaktadır. Bu iteratif yöntemler *Newton-Raphson (NR) algoritması* (Thisted, 1988), *Fisher ın skorlama (Fisher scoring, FS) algoritması* (Searle ve ark., 1992) ve *Expectation-Maximization (EM) algoritması* (Dempster ve ark., 1977) dır.

Lineer karma modeller tıp, sosyoloji, psikoloji, ekonomi, tarım, sanayi, eğitim ve benzeri birçok alanda karşılaşılan *iç-içe geçmiş veriler (nested data)*, *uzun süreli veriler (longitudinal data)* ve *tekrarlı ölçümlü veriler (repeated measures data)* gibi birden fazla veri türü için sık tercih edilen modellerdendir.

İç-içe geçmiş veriler, isminden de anlaşılabileceği üzere bir faktörün düzeylerinin diğer bir faktörün düzeylerinin içinde olduğu yani iç-içe geçmiş bir yapıya sahip olan verilerdir. Çizelge 1.2 ile verilen sınav başarı notları incelenmek istensin.

Çizelge 1.2. Sınav başarı notları verisi (McCulloch ve Searle, 2001)

	İngilizce			Jeoloji		
Cinsiyet	Seviye			Seviye		
	A	B	C	A	B	C
Erkek	+	+	+	+	+	+
Kız	+	+	+	+	+	+

Çizelge 1.2 incelendiğinde, derslerden (ingilizce ve jeoloji) alınan sınav başarı notlarının (+) seviyeye (A, B ve C) ve cinsiyete (kız ve erkek) göre sınıflandırıldığı görülmektedir. Burada dersler (2 düzeyli), seviye (3 düzeyli) ve cinsiyet (2 düzeyli) faktörleri ve + şekilleri de hücreleri göstermektedir.

Çizelge 1.1 ile Çizelge 1.2 birbirlerine çok benzemelerine rağmen aslında aynı yapıda değillerdir. Çünkü Çizelge 1.1 de yaş grubunda yer alan A, B ve C ler düşük ve yüksek güneş ışıkları için aynı olmalarına rağmen Çizelge 1.2 de

seviyede yer alan A, B ve C ler ingilizce ve jeoloji dersleri için aynı değillerdir. İngilizce ve jeoloji dersini alan öğrencilerin birbirlerinden farklı olmaları nedeniyle ingilizce dersindeki seviye A ile jeoloji dersindeki seviye A farklıdır. Aynı yorum, B ve C seviyeleri için de geçerlidir. Dolayısıyla, seviye faktörünün düzeylerinin ders faktörünün düzeylerinin içinde olduğu yani iç-içe geçmiş bir yapıya sahip oldukları ve sınav başarı notlarının da iç-içe geçmiş bir veri türü oldukları söylenebilir (McCulloch ve Searle, 2001).

Uzun süreli veriler, aynı deney birimlerinin zaman boyunca tekrarlı bir biçimde ölçülmesi sonucu elde edilen verilerdir. Ya geleceğe doğru zaman boyunca deney birimlerinin incelenmesi ile ya da geçmişe doğru eski kayıtların toplanması ile elde edilmektedirler ve uzun süreli veriler, çoğu zaman *tekrarlı ölçümlü veriler* olarak da adlandırılmaktadırlar (Fitzmaurice ve ark., 2004).

Örneğin, Brezilya da bulunan Sao Paulo Üniversitesi nin Diş Hekimliği Fakültesinde günlük kullanım sonucunda temizlenen bakteri plağı kapasitesine göre iki tip diş fırçasının karşılaştırılması amacıyla dişlerin fırçalanmasından önce ve sonra yapılan dört değerlendirme seansı sonucunda yaşları 4 ile 6 arasında değişen 32 çocuğun bakteri plak indeks değerleri elde edilmiştir (Nobre ve Singer, 2007). Bu bakteri plak indeks değerlerinin, yaşları 4 ile 6 arasında değişen aynı 32 deneğin (çocuğun) dişlerin fırçalanmasından önce ve sonra yapılan dört değerlendirme seansı sonucunda (yani zaman boyunca tekrarlı bir biçimde) elde edilmeleri nedeniyle uzun süreli (tekrarlı ölçümlü) bir veri türü oldukları ifade edilebilir.

Aynı deney birimi üzerinden tekrarlı ölçümlerin alındığı çalışmalarda veriler birbiri ile *ilişkili* ve deney birimleri arasında *değişen varyanslılık* gözlemlenmektedir. Böyle çalışmalarda, veri yapısının ilişkili olma durumunun da göz ardı edilmeden modele katılması gerekmektedir. Bu amaç doğrultusunda lineer karma modeller, aynı deney birimi üzerinden tekrarlı ölçümlerin alınması sonucunda ortaya çıkan ilişkili veride varyans-kovaryans matris yapısını modelleyebilme yeteneği sağlamaktadır.

Lineer karma modellerde tekrarlı ölçüm olması durumunda ortaya çıkan ilişkili veride varyans-kovaryans matris yapısının modellenmesi amacıyla kullanılan literatürde 13 farklı varyans-kovaryans modeli vardır.

Tekrarlı ölçümler için verilen varyans-kovaryans modellerine ilişkin matrisler ana köşegen boyunca sabit varyans değerlerine sahipse, bu matrislere ilişkin varyans-kovaryans modelleri ***homojen varyans-kovaryans modelleri*** olarak adlandırılmaktadır. Bunlar sırasıyla; ***varyans bileşenleri (variance components, VC)***, ***bileşik simetri (compound symmetry, CS)***, ***Toeplitz (TOEP)*** ve ***birinci dereceden otoregresif (first-order autoregressive, AR(1))*** modelleridir (Wolfinger, 1993; Fitzmaurice ve ark., 2004; İyit, 2008).

Tekrarlı ölçümler için verilen varyans-kovaryans modellerine ilişkin matrisler ana köşegen boyunca değişen varyans değerlerine sahipse, bu matrislere ilişkin varyans-kovaryans modelleri ***heterojen varyans-kovaryans modelleri*** olarak adlandırılmaktadır. Bunlar sırasıyla; ***yapılandırılmamış (unstructured, UN)***, ***köşegen (diagonal, UN(1))***, ***heterojen bileşik simetri (heterogeneous CS, CSH)***, ***heterojen Toeplitz (heterogeneous TOEP, TOEPH)***, ***heterojen birinci dereceden otoregresif (heterogeneous AR(1), ARH(1))***, ***Huynh-Feldt (HF)***, ***birinci dereceden anti-bağımlı (first-order ante-dependence, ANTE(1))***, ***birinci dereceden faktör analitik (first-order factor analytic, FA(1))*** ve ***yapılandırılmamış korelasyonlu (unstructured correlation, UNR)*** modelleridir (Wolfinger, 1993; Wolfinger, 1996; Fitzmaurice ve ark., 2004; İyit, 2008).

Lineer karma modellerin yapılandırılması sürecindeki en önemli aşamalardan biri de veri yapısındaki değişkenliğin modellenmesine olanak tanıyan uygun varyans-kovaryans modelinin seçimi aşamasıdır.

Lineer karma modellerde tekrarlı ölçüm olması durumunda literatürde var olan 13 farklı varyans-kovaryans modeli arasından uygun modelin seçimi aşamasında ***sınırlandırılmış maksimum likelihood oran testi (restricted maximum likelihood ratio test, REMLRT)*** ile ***bilgi kriterlerinden (information criteria, IC)*** yararlanılır (Wolfinger, 1993; Fitzmaurice ve ark., 2004; Gumedze ve Dunne,

2011). Bu bilgi kriterleri sırasıyla; *Akaike bilgi kriteri (Akaike information criterion, AIC)* (Akaike, 1974), *Bayesian bilgi kriteri (Bayesian information criterion, BIC)* (Schwarz, 1978), *Hannan ve Quinn bilgi kriteri (Hannan and Quinn information criterion, HQIC)* (Hannan ve Quinn, 1979) ile *Hurvich ve Tsai bilgi kriteri (Hurvich and Tsai information criterion, AICC)* (Sugiura, 1978; Hurvich ve Tsai, 1989) dir.

Genel olarak, sabit etkilere ilişkin tasarım matrisinin değişkenlerinin bağımsız olduğu varsayımı yapılır. Fakat, uygulamada, sabit etkilere ilişkin tasarım matrisinin değişkenleri arasında güçlü veya güçlüye yakın lineer bağımlılıklar ile karşılaşılabilir. Bu durum, *çoklu iç ilişki problemi (multicollinearity)* nin ortaya çıkmasına neden olmaktadır. Çoklu iç ilişki, BLUE nun bazı elemanlarının varyansında artışlara neden olabileceği gibi BLUE nun gerçek değerinden uzaklaşarak güvenilirliğini kaybetmesine de neden olabilmektedir. Dolayısıyla, bu çoklu iç ilişki problemlerinin ortadan kaldırılması amacıyla BLUE/BLUP a alternatif tahmin edicilere ihtiyaç duyulmaktadır. Bu amaçla, Liu ve Hu (2013) tarafından ridge yöntemin kullanılması sonucunda *ridge tahmin ve ön tahmin edicileri* elde edilmiştir. Liu ve Hu (2013) dan farklı olarak, Eliot (2011) ve Eliot ve ark. (2011) iteratif yöntemlerden biri olan EM algoritmasından yararlanarak, Özkale ve Can (2017) ise Henderson nın lineer karma model eşitliklerini kullanarak ridge tahmin ve ön tahmin edicileri elde etmişlerdir.

Bu tez, lineer karma modellerde parametre tahminlerinin ve çıkarımlarının incelenmesi amacıyla oluşturulan ve yedi bölümden meydana gelen bir çalışma olup, her bir bölümün sonunda, elde edilen sonuçların daha iyi bir şekilde algılanabilmesi amacıyla, Matlab R2014a ve/veya R programlarından yararlanılarak analiz edilen uygulama çalışmaları bulunmaktadır.

Çalışmanın ikinci bölümünde, lineer karma modeller, lineer karma modellerin varsayımları ve lineer karma modellerde parametre tahminleri ifade edilecektir.

Çalışmanın üçüncü bölümünde, lineer karma modellerde tekrarlı ölçüm verileri için model yapılandırma süreci ile literatürde var olan 13 farklı varyans-kovaryans modeli incelenecektir ve incelenen 13 farklı varyans-kovaryans modeli arasından uygun olan modelin seçim kriterleri üzerinde durulacaktır.

Çalışmanın dördüncü bölümünde, lineer karma modellerde stokastik lineer kısıtlar altında yeni tanımlanan ve mixed ve stokastik kısıtlı ridge yöntemlerinin kullanılması sonucunda elde edilen *mixed ve stokastik kısıtlı ridge (stochastic restricted ridge) tahmin ve ön tahmin edicileri* verilecektir. Lineer karma modellerde yeni tanımlanan bu parametre tahmin edicilerinin hem birbirleriyle hem de BLUE/BLUP ile ilişkileri ortaya konulacak ve *matris değerli hata kareler ortalaması (matrix mean square error, mMSE) kriteri* kullanılarak tahmin edicilerin performansları karşılaştırılacaktır.

Çalışmanın beşinci bölümünde, lineer karma modellerde *Liu tahmin ve ön tahmin edicileri* tanımlanacak ve bu tahmin edicilerin, belirli bir stokastik lineer kısıt altında mixed tahmin ve ön tahmin edicilerin özel bir durumuna karşılık geldikleri gösterilecektir. Liu tahmin ve ön tahmin edicilerin BLUE/BLUP ile ridge tahmin ve ön tahmin edicileriyle ilişkileri ortaya konulacak ve mMSE kriteri kullanılarak tahmin edicilerin performansları karşılaştırılacaktır. Aynı zamanda, *skaler değerli hata kareler ortalaması (scalar mean square error, sMSE) kriteri* kullanılarak, Liu yanlılık parametresinin seçimi incelenecektir.

Çalışmanın altıncı bölümünde, lineer karma modellerde *temel bileşenler regresyon (principal components regression, PCR) ile r-k sınıf (r-k class) tahmin ve ön tahmin edicileri* önerilecektir. Aynı zamanda, BLUE/BLUP, ridge ve PCR tahmin ve ön tahmin edicilerinin r-k sınıf tahmin ve ön tahmin edicilerinin özel bir durumuna karşılık geldikleri gösterilecektir. mMSE kriteri kullanılarak, r-k sınıf tahmin ve ön tahmin edicilerin BLUE/BLUP, ridge ve PCR tahmin ve ön tahmin edicilerinden üstün olduğu gerekli ve yeterli koşullar tanımlanacaktır. Bu koşulların sağlanıp sağlanmadığının kontrol edilmesi amacıyla hipotez testlerinden yararlanılacaktır.

Çalışmanın yedinci bölümünde, çalışmanın diğer bölümlerinde elde edilen sonuçlar özetlenecek ve sonraki çalışmalar için önerilere yer verilecektir.

2. LİNEER KARMA MODELLERDE PARAMETRE TAHMİNLERİ

Genel olarak lineer karma bir model

$$y = X\beta + Zu + \varepsilon \qquad (2.1.)$$

şeklinde ifade edilir. Burada, y $n \times 1$ tipinde gözlemlenebilir yanıt vektörünü, β $p \times 1$ tipinde sabit etkilere ilişkin parametreler vektörünü, X ve Z sırasıyla $n \times p$ ve $n \times q$ tipinde sabit ve rastgele etkilere ilişkin tasarım matrislerini, u $q \times 1$ tipinde rastgele etkilere ilişkin parametreler vektörünü ve ε, $n \times 1$ tipinde rastgele hataların bir vektörünü göstermektedir. Eşitlik $(2.1.)$ ile verilen lineer karma modelde $Z = [Z_1, \dots, Z_b]$, $u = [u_1', \dots, u_b']'$ şeklindedir ve $i = 1, \dots, b$ için $q = \sum_{i=1}^{b} q_i$ olmak üzere, u_i ve Z_i sırasıyla $q_i \times 1$ ve $n \times q_i$ tipindedir. u ve ε un karşılıklı olarak bağımsız ve normal dağılıma sahip olduğu varsayımı yapılır ve

$$\begin{bmatrix} u \\ \varepsilon \end{bmatrix} \sim N\left(\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \sigma^2 \begin{bmatrix} G(\gamma) & 0 \\ 0 & R(\rho) \end{bmatrix}\right)$$

ile verilir. Burada $G = G(\gamma)$ ve $R = R(\rho)$ şeklinde olup, γ ve ρ sırasıyla $r \times 1$ ve $s \times 1$ tipinde, u ve ε a karşılık gelen varyans bileşenlerinin vektörlerini göstermektedir. y nin varyans-kovaryans matrisi, $Var(y) = \sigma^2 H$ olarak elde edilir. Burada $H = ZGZ' + R$ dir (Gumedze ve Dunne, 2011).

Eşitlik $(2.1.)$ yardımıyla verilen lineer karma model denklemi ve lineer karma model denklemi üzerine kurulan temel varsayımlar verildikten sonraki aşama lineer karma modellerde parametre tahminlerinin yapılmasıdır.

2.1. Lineer Karma Modellerde Rastgele Etkili Parametrelerin Ön Tahmini

Rastgele etkili parametrelerin ön tahmininin elde edilmesinde en iyi ön tahmin (BP), en iyi lineer ön tahmin (BLP), en iyi lineer yansız ön tahmin (BLUP) yöntemleri ile Henderson ve ark. (1959) tarafından geliştirilen lineer karma model eşitlikleri kullanılmaktadır (Searle ve ark., 1992; McCulloch ve Searle, 2001).

2.1.1. En İyi Ön Tahmin (BP) Yöntemi

BP yönteminde

$$\begin{bmatrix} u \\ y \end{bmatrix} \sim N\left(\begin{bmatrix} \mu_u \\ \mu_y \end{bmatrix}, \sigma^2 \begin{bmatrix} G & GZ' \\ ZG & H \end{bmatrix}\right)$$

varsayımı altında

$$E\left((\hat{u}-u)'A(\hat{u}-u)\right) = \iint (\hat{u}-u)'A(\hat{u}-u)f(u,y)dydu \qquad (2.2.)$$

ile verilen "ön tahminin hata kareler ortalamasını" minimum yapan $\hat{u}$ vektörü ***en iyi ön tahmin edici (best predictor, BP)*** olarak adlandırılmaktadır. Burada A, herhangi bir pozitif tanımlı (positive definite, pd) simetrik matrisi göstermektedir ve $f(u,y)$ için u ile y nin ortak dağılımının bütün parametrelerinin bilinmesi gerekmektedir (Searle ve ark., 1992; McCulloch ve Searle, 2001).

En iyi ön tahmin edicideki "en iyi" ifadesinin yaygın olarak kullanılan varyansın minimum olması anlamıyla değil de ön tahmin hata kareler ortalamasının minimum olması anlamıyla kullanılmasının nedeni şöyle açıklanmaktadır:

Varyans sabit bir değere göre değişim demektir ve u, sabit bir değer olmadığı için Eşitlik (2.2.) deki ifade $\hat{u}$ nın varyansı değildir. Bu nedenle, rastgele etkilere ilişkin parametrelerin ön tahmini için minimum varyans kriteri yerine minimum ön tahmin hata kareler ortalaması kriteri kullanılmaktadır (Searle ve ark.,

1992; McCulloch ve Searle, 2001). Dolayısıyla, Eşitlik (2.2.) deki ifadenin minimum yapılması ve koşullu beklenen değer formülünün kullanılması sonucunda

$$\hat{u} = BP(u) = E(u|y) = \mu_u + GZ'H^{-1}(y - \mu_y)$$

olarak bulunmuştur (Searle ve ark., 1992; McCulloch ve Searle, 2001).

2.1.2. En İyi Lineer Ön Tahmin (BLP) Yöntemi

BLP yönteminde

$$\begin{bmatrix} u \\ y \end{bmatrix} \sim \left(\begin{bmatrix} \mu_u \\ \mu_y \end{bmatrix}, \sigma^2 \begin{bmatrix} G & GZ' \\ ZG & H \end{bmatrix} \right)$$

varsayımı altında Eşitlik (2.2.) ile verilen "ön tahminin hata kareler ortalamasının" $\hat{u} = a + By$ ye göre minimum yapılması sonucunda ***en iyi lineer ön tahmin edici (best linear predictor, BLP)*** olarak adlandırılan

$$\hat{u} = BLP(u) = \mu_u + GZ'H^{-1}(y - \mu_y)$$

şeklinde bulunmuştur. Burada a, herhangi bir vektörü ve B, herhangi bir matrisi göstermektedir (Searle ve ark., 1992; McCulloch ve Searle, 2001).

2.1.3. En İyi Lineer Yansız Ön Tahmin (BLUP) Yöntemi

BLUP yönteminde $\mu_u = 0$ ve $\mu_y = X\beta$ olmak üzere

$$\begin{bmatrix} u \\ y \end{bmatrix} \sim N\left(\begin{bmatrix} 0 \\ X\beta \end{bmatrix}, \sigma^2 \begin{bmatrix} G & GZ' \\ ZG & H \end{bmatrix} \right) \qquad (2.3.)$$

varsayımı altında Eşitlik (2.2.) ile verilen "ön tahminin hata kareler ortalamasını" minimum yapan, $a + By$ ye göre lineer olan, $E(\hat{u}) = E(u)$ koşulunu yani yansızlık özelliğini sağlayan, β yerine $\hat{\beta}^{GLS}$ yi kullanan ve ***en iyi lineer yansız ön tahmin edici (best linear unbiased predictor, BLUP)*** olarak adlandırılan

$$\hat{u} = BLUP(u) = GZ'H^{-1}\left(y - X\hat{\beta}^{GLS}\right)$$

biçiminde elde edilmiştir. Burada $\hat{\beta}^{GLS} = (X'H^{-1}X)^{-1}X'H^{-1}y$ şeklindedir ve $Var(y) = \sigma^2 H$ varsayımı altında $\varepsilon^* = Zu + \varepsilon$ olmak üzere, $y = X\beta + \varepsilon^*$ ile verilen lineer regresyon modelindeki ***genelleştirilmiş en küçük kareler tahmin edici (generalized least squares estimator, GLS)*** ye karşılık gelmektedir. Aynı zamanda $\hat{\beta}^{GLS}$, ***en iyi lineer yansız tahmin edici (best linear unbiased estimator, BLUE)*** olarak adlandırılmaktadır (Searle ve ark., 1992; McCulloch ve Searle, 2001).

Görüldüğü gibi BP, BLP ve BLUP yöntemlerinin uygulanması sonucunda elde edilen $\hat{u}$ lar aynı olmakla birlikte yapılan varsayımlarda farklılıklar bulunmaktadır.

Rastgele etkili parametrelerin ön tahmininde kullanılan BP, BLP ve BLUP yöntemlerinin bazı varsayımları sağlamaları gerekmektedir. Örneğin, BP yönteminin kullanılabilmesi için normallik varsayımı altında u ile y nin ortak dağılımının bütün parametrelerinin bilinmesini gerekmektedir. Fakat BLP ve BLUP yöntemlerinde u ile y nin ortak dağılımının bütün parametrelerinin bilinmesine gerek yoktur, parametrelerden bazılarının bilinmesi yeterlidir. BLP yönteminde birinci ve ikinci momentlerin bilindiği varsayımı yapılmaktadır, normallik varsayımının sağlanmasına gerek yoktur ve BP yönteminden farklı olarak lineerlik özelliğinin sağlanması gerekmektedir. BLUP yönteminde ise normallik varsayımı altında lineerlik ve yansızlık özellikleri aynı anda sağlanmalıdır ve sadece ikinci momentlerin bilindiği varsayımı yapılmaktadır (Searle ve ark., 1992; McCulloch ve Searle, 2001). Kısacası, sadece rastgele etkili

parametrelerin ön tahminlerinin elde edilmesi bazı istenmeyen sonuçlara (bazı varsayımların sağlanma zorunluluğu gibi) neden olmaktadır.

Sabit ve rastgele etkili parametrelerin aynı anda ve daha kolay bir şekilde tahmin edilebilmeleri önemlidir. Bu amaçla, Henderson ve ark. (1959) tarafından geliştirilen lineer karma model eşitlikleri kullanılarak lineer karma modellerde sabit ve rastgele etkili parametrelerin eş zamanlı tahminleri elde edilecektir.

2.1.4. Henderson nın Lineer Karma Model Eşitlikleri

Henderson ve ark. (1959), Eşitlik (2.3.) ile verilen varsayımı yapmışlardır ve β ile u un tahmin edicilerinin elde edilebilmesi için (y,u) un ortak log-likelihood dağılım fonksiyonunun maksimum yapılması gerektiğini ifade etmişlerdir. Böylece, G ve R nin bilindiği varsayımı altında $y \sim N(X\beta, \sigma^2 H)$ olur.

Eşitlik (2.3.) yardımıyla u un marjinal dağılımı $u \sim N(0, \sigma^2 G)$ ve u verilmişken y nin koşullu dağılımı $y|u \sim N(X\beta + Zu, \sigma^2 R)$ olarak elde edilir.

(y,u) un ortak log-likelihood dağılım fonksiyonu

$$
\begin{aligned}
log f(y,u) &= log f(y|u) + log f(u) \\
&= -\frac{1}{2}\ \{n log(2\pi) + n log\sigma^2 + log|R| \\
&+ (y - X\beta - Zu)' R^{-1} (y - X\beta - Zu)/\sigma^2\} \\
&-\frac{1}{2}\ \{q log(2\pi) + q log\sigma^2 + log|G| + u' G^{-1} u/\sigma^2\} \\
&= -\frac{1}{2}\{(n+q) log(2\pi) + (n+q) log\sigma^2 + log|R| + log|G| \\
&+ (y - X\beta)' R^{-1} (y - X\beta)/\sigma^2\} \\
&-\frac{1}{2\sigma^2}\{u'(ZR^{-1}Z' + G^{-1})u - 2(y - X\beta)' R^{-1} Zu\} \qquad (2.4.)
\end{aligned}
$$

biçiminde elde edilir.

Eşitlik (2.4.) ün önce β ya sonra u ya göre kısmi türevlerinin alınıp, sıfıra eşitlenmesi ve β ile u yerine $\hat{\beta}$ ile $\hat{u}$ nın yazılması sonucunda

$$X'R^{-1}X\hat{\beta} + X'R^{-1}Z\hat{u} = X'R^{-1}y \qquad (2.5.)$$

$$Z'R^{-1}X\hat{\beta} + (ZR^{-1}Z' + G^{-1})\hat{u} = Z'R^{-1}y \qquad (2.6.)$$

olarak ifade edilen ***Henderson nın lineer karma model eşitlikleri*** elde edilmektedir (Henderson, 1950; Henderson ve ark., 1959). Bu eşitlikler matris formunda

$$\begin{bmatrix} X'R^{-1}X & X'R^{-1}Z \\ Z'R^{-1}X & ZR^{-1}Z' + G^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\beta} \\ \hat{u} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X'R^{-1}y \\ Z'R^{-1}y \end{bmatrix}$$

şeklinde de yazılabilir. Eşitlik (2.6.) dan

$$\hat{u} = (ZR^{-1}Z' + G^{-1})^{-1}Z'R^{-1}\left(y - X\hat{\beta}\right) \qquad (2.7.)$$

olarak çekilsin ve Eşitlik (2.5.) de yerine konulsun.

Sherman-Morrison-Woodbury Teoremi (Marsaglia ve Styan, 1974a, b) ile elde edilen $H^{-1} = (ZGZ' + R)^{-1} = R^{-1} - R^{-1}Z(ZR^{-1}Z' + G^{-1})^{-1}Z'R^{-1}$ in kullanılmasıyla

$$\hat{\beta} = (X'H^{-1}X)^{-1}X'H^{-1}y \qquad (2.8.)$$

ve Eşitlik (2.7.) de $(ZR^{-1}Z' + G^{-1})^{-1}Z'R^{-1} = GZ'H^{-1}$ nin kullanılmasıyla da

$$\hat{u} = GZ'H^{-1}\left(y - X\hat{\beta}\right) \qquad (2.9.)$$

şeklinde elde edilmiştir ve $\hat{\beta}$, $\hat{\beta}^{GLS}$ ye eş değerdir. Dolayısıyla $\hat{\beta}$, BLUE ve $\hat{u}$, BLUP olarak ifade edilmektedir (Searle ve ark., 1992; McCulloch ve Searle, 2001).

Eşitlik (2.8.) ve (2.9.) ile verilen tahmin ediciler varyans bileşenlerinin bilindiği varsayımı altında elde edilmişlerdir. Fakat varyans bileşenleri γ, ρ, σ^2 bilinmiyorsa, Eşitlik (2.8.) ve (2.9.) un elde edilebilmesi için γ, ρ, σ^2 nin tahminleriyle yer değiştirmeleri gerekir. Bu amaçla, bir sonraki alt bölümde lineer karma modellerde varyans bileşenlerinin tahmin edilmesine değinilecektir.

2.2. Lineer Karma Modellerde Varyans Bileşenlerinin Tahmini

Bu alt bölümde ML, REML ve iteratif yöntemler yardımıyla varyans bileşenlerinin tahminleri bulunacaktır.

2.2.1. Maksimum Likelihood (ML) Yöntemi

Eşitlik (2.1.) ile verilen lineer karma modelde y yanıt vektörünün marjinal dağılımının $N(X\beta, \sigma^2 H)$ olduğu ifade edilmişti. Böylece, y nin marjinal log-likelihood fonksiyonu

$$l_{ML}(\beta, \phi; y) = -\frac{1}{2}\left\{ nlog(2\pi) + nlog\sigma^2 + log|H| + \frac{(y - X\beta)' H^{-1} (y - X\beta)}{\sigma^2} \right\} \qquad (2.10.)$$

şeklinde elde edilir (Hartley ve Rao, 1967). Burada $\phi = (\kappa', \sigma^2)'$ ve $\kappa = (\gamma', \rho')' = (\kappa_j)$ sırasıyla $(r + s + 1) \times 1$ ve $(r + s) \times 1$ tipinde bilinmeyen varyans bileşenlerinin vektörlerini göstermektedir.

Eşitlik (2.10.) un sırasıyla β, σ^2 ve κ_j ye göre kısmi türevlerinin alınmasıyla

$$\frac{\partial l_{ML}(\beta,\phi;y)}{\partial \beta} = -\frac{1}{\sigma^2}(X'H^{-1}X\beta - X'H^{-1}y) \quad (2.11.)$$

$$\frac{\partial l_{ML}(\beta,\phi;y)}{\partial \sigma^2} = -\frac{n}{2\sigma^2} + \frac{(y-X\beta)'H^{-1}(y-X\beta)}{2\sigma^4} \quad (2.12.)$$

$$\frac{\partial l_{ML}(\beta,\phi;y)}{\partial \kappa_j} = -\frac{1}{2}\,tr\left(H^{-1}\dot{H}_j\right) + \frac{(y-X\beta)'H^{-1}\dot{H}_jH^{-1}(y-X\beta)}{2\sigma^2} \quad (2.13.)$$

elde edilir. Burada $\dot{H}_j = \partial H/\partial \kappa_j$ ve "tr", trace i (izi) göstermektedir.

Eşitlik $(2.11.) - (2.13.)$ ün sıfıra eşitlenmesiyle ve β, σ^2 ve H ın yerine $\tilde{\beta}$, $\tilde{\sigma}^2$ ve $\widetilde{H}$ konulmasıyla[1]

$$X'\widetilde{H}^{-1}X\tilde{\beta} = X'\widetilde{H}^{-1}y \quad (2.14.)$$

$$n\tilde{\sigma}^2 = (y-X\tilde{\beta})'\widetilde{H}^{-1}(y-X\tilde{\beta}) \quad (2.15.)$$

$$tr(\widetilde{H}^{-1}\widetilde{\dot{H}}_j) = \frac{1}{\tilde{\sigma}^2}(y-X\tilde{\beta})'\widetilde{H}^{-1}\widetilde{\dot{H}}_j\widetilde{H}^{-1}(y-X\tilde{\beta}) \quad (2.16.)$$

elde edilir.

Eşitlik $(2.14.)$ ile $(2.15.)$ in çözülmesi ile ML tahmin edicileri

$$\tilde{\beta} = \left(X'\widetilde{H}^{-1}X\right)^{-1}X'\widetilde{H}^{-1}y \quad (2.17.)$$

[1] 2.1 inci alt bölümünde elde edilen tahmin ediciler varyans bileşenlerinin bilindiği varsayımı altında elde edilmişlerdi. 2.2 inci alt bölümünde ise varyans bileşenlerinin bilinmediği varsayımı altında tahmin ediciler elde edileceklerdir. Dolayısıyla, her iki alt bölümdeki tahmin edicilerin birbirlerinden ayrılması amacıyla "^" yerine "~" sembolü kullanılmıştır.

$$\tilde{\sigma}^2 = \frac{1}{n}(y - X\tilde{\beta})'\tilde{H}^{-1}(y - X\tilde{\beta}) \qquad (2.18.)$$

olarak bulunmuştur (Searle ve ark., 1992; McCulloch ve Searle, 2001; Gumedze ve Dunne, 2011).

Eşitlik (2.16.) varyans bileşenlerine göre lineer olmayan bir formda olup, bu denklemin çözümü için analitik ifadelerin elde edilmesi mümkün değildir. Bu yüzden, bu denklemin çözümü ancak iteratif yöntemler aracılığıyla yapılabilir (Searle ve ark., 1992).

2.2.2. Sınırlandırılmış Maksimum Likelihood (REML) Yöntemi

Varyans bileşenleri ML yöntemi ile tahmin edilirken sabit etkilerin tahmininde kullanılan serbestlik derecesi göz ardı edilmektedir. Bu durumun düzeltilmesi amacıyla Thompson (1962), Patterson ve Thompson (1971) tarafından REML yöntemi geliştirilmiştir. REML yönteminde, modelin sabit etkilere karşılık gelen parçası uydurulduktan sonra varyans bileşenlerinin tahmini rezidülere dayalı olarak elde edilmektedir.

Searle ve ark. (1992), REML yönteminde y nin yerine y nin sabit etkileri içermeyecek şekilde seçilen lineer kombinasyonlarının kullanıldığını ifade etmişlerdir. Bu lineer kombinasyonlar, sabit etkiler uydurulduktan sonra rezidülere karşılık gelmektedir. Bu durumun bir sonucu olarak, sabit etkileri içermeyecek şekilde oluşturulan $k'y = k'X\beta + k'Zu$ lineer kombinasyonunda k' vektörleri için $k'X\beta = 0 \ \forall\beta$ ve böylece $k'X = 0$ eşitlikleri sağlanmalıdır. Dolayısıyla, herhangi bir c' vektörü için $k' = c'(I_n - X(X'X)^{-1}X')$ yazılabilir.

Harville (1977), $k'y$ lineer kombinasyonunun $E(k'y) = k'X\beta = 0$ eşitliğini sağladığını ifade etmiştir. Dolayısıyla, lineer olarak bağımsız olan $k'y$ lerin sayısının X e bağlı olduğu söylenebilir. X, $n \times p$ tipinde ve rankı p olan bir tasarım matrisi olduğu için $k'X\beta = 0$ eşitliği sadece k' nün $n - p$ lineer bağımsız

değeri ile sağlanabilir. Böylece, lineer olarak bağımsız k' vektörlerinin bir kümesi K' nün satırları olarak alınır ve $K' = D(I_n - X(X'X)^{-1}X')$ için $K'y$ ile ilgilenilir. Burada K' ve D, $(n-p) \times n$ tipinde tam satır ranklı matrislerdir.

$y \sim N(X\beta, \sigma^2 H)$ ve $K'y = 0$ için $K'y \sim N(0, \sigma^2 K'HK)$ şeklindedir ve böylece REML log-likelihood fonksiyonu

$$l_R(\phi; K'y) = -\frac{1}{2}\{(n-p)log(2\pi) + (n-p)log\sigma^2 + log|K'HK|\} - \frac{1}{2}\left\{\frac{y'K(K'HK)^{-1}K'y}{\sigma^2}\right\} \quad (2.19.)$$

olarak elde edilir.

$I_n - X(X'X)^{-1}X'$ simetrik, idempotent ve rankı $n-p$ olduğu için, $K'K = I_n$ olur. Dolayısıyla, y için REML log-likelihood fonksiyonu (sabitlerin göz ardı edilmesiyle)

$$l_R(\phi; y) = -\frac{1}{2}\{(n-p)log\sigma^2 + log|H| + log|X'H^{-1}X|\} - \frac{1}{2}\left\{\frac{(y - X\hat{\beta})'H^{-1}(y - X\hat{\beta})}{\sigma^2}\right\} \quad (2.20.)$$

$$= -\frac{1}{2}\{(n-p)log\sigma^2 + log|H| + log|X'H^{-1}X|\} - \frac{1}{2}\left\{\frac{y'Py}{\sigma^2}\right\} \quad (2.21.)$$

şeklinde ifade edilir. Burada, $P = H^{-1} - H^{-1}X(X'H^{-1}X)^{-1}X'H^{-1} = K(K'HK)^{-1}K'$ ve $\hat{\beta}$ Eşitlik (2.8.) de verildiği gibidir. Bu durumun bir sonucu olarak, Eşitlik (2.19.) ile Eşitlik (2.21.) nin eşdeğer olduğu söylenebilir.

Eşitlik (2.8.) ile verilen $\hat{\beta}$ nın kullanılması ile

$$(y - X\hat{\beta}) = y - X(X'H^{-1}X)^{-1}X'H^{-1}y = (I_n - X(X'H^{-1}X)^{-1}X'H^{-1})y = HPy$$

ve $(y - X\hat{\beta})'H^{-1}(y - X\hat{\beta}) = y'PHH^{-1}HPy = y'Py$ yazılabilir. Burada, $HP = I_n - X(X'H^{-1}X)^{-1}X'H^{-1}$ ve $PHP = P$ olduğu açıktır. Dolayısıyla, Eşitlik (2.20.) ile Eşitlik (2.21.) arasındaki ilişki gösterilmiş olur.

Eşitlik (2.21.) in sırasıyla σ^2 ve κ_j ye göre türevlerinin alınmasıyla

$$\frac{\partial l_R(\phi; y)}{\partial \sigma^2} = -\frac{n-p}{2\sigma^2} + \frac{y'Py}{2\sigma^4} \qquad (2.22.)$$

$$\frac{\partial l_R(\phi; y)}{\partial \kappa_j} = -\frac{1}{2}\left\{tr\left(P\dot{H}_j\right) - \frac{y'P\dot{H}_jPy}{\sigma^2}\right\} \qquad (2.23.)$$

elde edilir.

Eşitlik (2.22.) nin sıfıra eşitlenmesiyle hata varyansı için REML tahmin edici

$$\tilde{\sigma}^2 = \frac{y'\tilde{P}y}{n-p} = \frac{(y - X\tilde{\beta})'\tilde{H}^{-1}(y - X\tilde{\beta})}{n-p} \qquad (2.24.)$$

olarak bulunmuştur ve $\tilde{P}$ aracılığıyla $\tilde{\kappa}$ ya bağlı olduğundan iteratif olarak elde edilmelidir (Searle ve ark., 1992; McCulloch ve Searle, 2001; Gumedze ve Dunne, 2011).

Eşitlik (2.23.) ise varyans bileşenlerine göre lineer olmayan bir formda olup, bu denklemin çözümü için analitik ifadelerin elde edilmesi mümkün değildir. Bu nedenle, bu denklemin çözümü ancak iteratif yöntemler aracılığıyla yapılabilir (Searle ve ark., 1992).

Varyans bileşenlerinin ML veya REML tahmin edicileri için açık ifadeler elde edilememektedir. Dahası, log-likelihood fonksiyonunun birinci dereceden türevinin sıfıra eşitlenmesiyle Eşitlik (2.16.), Eşitlik (2.23.) ve Eşitlik (2.24.) gibi lineer olmayan eşitlikler ortaya çıkmaktadır.

Lineer olmayan bu eşitliklerin çözülmesi ve varyans bileşenlerinin ML veya REML tahmin edicilerinin bulunması için literatürdeki iteratif yöntemlerden yararlanılır (Searle ve ark., 1992).

Literatürdeki iteratif yöntemler incelenmeden önce ML ve REML arasındaki farklar ifade edilecektir.

2.2.3. ML ve REML Arasındaki Farklar

ML ve REML yöntemleri, iyi bir şekilde oluşturulmuş maksimum likelihood prensibinin avantajlarına sahip olmakla birlikte hesaplamayla ilgili zorlukların aynı dezavantajlarına sahiplerdir. ML yöntemiyle sabit etkili parametrelerin tahmini elde edilirken, REML yöntemiyle sabit etkili parametrelerin tahmini elde edilememektedir. Yine de, tüm bu özellikler göz ardı edildiğinde, son yıllarda REML yöntemine duyulan ilginin giderek arttığı ve REML yönteminin ML yöntemine tercih edildiği görülmektedir (McCulloch ve Searle, 2001).

REML yönteminin ML yöntemine tercih edilmesinin nedenleri aşağıdaki gibi ifade edilmektedir:

Birincisi, varyans bileşenleri REML yöntemi ile tahmin edilirken sabit etkilerin tahmininde kullanılan serbestlik derecesi göz ardı edilmemektedir yani REML tahmin edicileri, modelin sabit etkileri için kullanılan serbestlik derecesine bağlı olarak elde edilmekte olup yansızlardır. Bu durum, X matrisinin rankı büyük olduğunda özellikle önem taşımaktadır. İkincisi, REML yöntemi β yı tahmin etmediği için elde edilen REML tahmin edicileri (yani varyans bileşenleri) β nın aldığı değere göre değişmemektedir. β nın değişmesi (değişmeyen X matrisiyle) REML tahmin edicileri değiştirmemektedir. Ve sonuncusu, REML tahmin

edicilerin ML nin aksine verideki sapan değerlere karşı hassas (duyarlı) olmamalarıdır (Searle ve ark., 1992; McCulloch ve Searle, 2001; Gumedze ve Dunne, 2011).

2.2.4. İteratif Yöntemler

Lineer karma modellerde varyans bileşenlerinin ML veya REML tahminlerinin hesaplanmasında kullanılan birbiri ile ilişkili üç iteratif yöntem bulunmaktadır. Bu iteratif yöntemler sırasıyla NR, FS ve EM algoritmaları olup, bu algoritmalar yardımıyla lineer karma modellerde varyans bileşenlerinin REML[2] tahmin edicileri elde edilecektir.

2.2.4.1. Newton-Raphson (NR) Algoritması

NR yöntemi bir kök bulma algoritması olup lineer olmayan fonksiyonları maksimize etmek için en sık kullanılan iteratif yöntemlerden biridir. Bu yöntemde log-likelihood fonksiyonu olan $l(\phi)$ yi maksimize eden

$$\frac{\partial l(\phi)}{\partial \phi} = 0 \qquad (2.25.)$$

türevinin bir kökü bulunmaya çalışılır (Thisted, 1988; Searle ve ark., 1992).

Eşitlik $(2.25.)$ ile verilen $l(\phi)$ fonksiyonunun ϕ parametre vektörüne göre birinci dereceden kısmi türevi olan $\frac{\partial l(\phi)}{\partial \phi}$ ifadesi, ϕ parametre vektörünün başlangıç tahmin değeri olarak alınan $\phi^{(0)}$ etrafında ikinci mertebeye kadar Taylor serisine açılırsa

[2] 2.2.3 de ifade edilenler nedeniyle lineer karma modellerde varyans bileşenlerinin ML yerine REML tahmin edicileri sırasıyla NR, FS ve EM algoritmaları yardımıyla elde edilecektir.

$$\frac{\partial l(\phi)}{\partial \phi} = U(\phi) \approx U\left(\phi^{(0)}\right) + \frac{\partial^2 l(\phi)}{\partial \phi \partial \phi'}\left(\phi - \phi^{(0)}\right) \qquad (2.26.)$$

elde edilir. Eşitlik (2.26.) sıfıra eşitlenirse,

$$U\left(\phi^{(0)}\right) + \frac{\partial^2 l(\phi)}{\partial \phi \partial \phi'}\left(\phi - \phi^{(0)}\right) = 0$$

olup, buradan da

$$\phi = \phi^{(0)} - \left[\frac{\partial^2 l(\phi)}{\partial \phi \partial \phi'}\right]^{-1} U\left(\phi^{(0)}\right)$$

kökü elde edilir. Bulunan bu kökten yararlanarak $(d + 1)$ inci iterasyon adımı için ϕ parametre vektörünün tahmin değeri,

$$\begin{aligned}\phi^{(d+1)} &= \phi^{(d)} - \left[\frac{\partial^2 l(\phi)}{\partial \phi \partial \phi'}\right]^{-1} U\left(\phi^{(d)}\right) \\ &= \phi^{(d)} + \left[I_O^{(d)}\right]^{-1} U\left(\phi^{(d)}\right) \qquad (2.27.)\end{aligned}$$

olarak elde edilir.

Eşitlik (2.27.) ile verilen ifadelere ***NR genel iterasyon denklemleri*** adı verilir. Burada, $I_O^{(d)} = \frac{\partial^2 l(\phi)}{\partial \phi \partial \phi'}$ olup $\phi^{(d)}$ de değerlendirilen gözlenen bilgi matrisini ve $U\left(\phi^{(d)}\right)$, d inci iterasyondaki log-likelihood fonksiyonunu göstermektedir.

Varyans bileşenlerinin REML tahmin edicileri elde edilmek istendiği için, Eşitlik (2.27.) de gösterildiği gibi, her bir NR iterasyonu gözlenen bilgi matrisinin elemanları ile REML log-likelihood fonksiyonunun hesaplanmasını gerektirir.

Eşitlik (2.22.) ve (2.23.) de yer alan σ^2 ve κ_j için REML log-likelihood fonksiyonları

$$\frac{\partial l_R(\phi;y)}{\partial \sigma^2} = U(\sigma^2) = -\frac{1}{2}\left\{\frac{(n-p)}{\sigma^2} - \frac{y'Py}{\sigma^4}\right\}$$

$$\frac{\partial l_R(\phi;y)}{\partial \kappa_j} = U(\kappa_j) = -\frac{1}{2}\left\{tr(P\dot{H}_j) - \frac{y'P\dot{H}_jPy}{\sigma^2}\right\}$$

ve gözlenen bilgi matrisinin elemanları

$$I_O(\kappa_j,\kappa_k) = \frac{1}{2}tr(P\ddot{H}_{jk}) - \frac{1}{2}tr(P\dot{H}_jP\dot{H}_k) + \frac{1}{\sigma^2}\, y'P\dot{H}_jP\dot{H}_kPy - \frac{1}{2\sigma^2}y'P\ddot{H}_{jk}Py$$

$$I_O(\sigma^2,\kappa_j) = \frac{y'P\dot{H}_jPy}{2\sigma^4}$$

$$I_O(\sigma^2,\sigma^2) = -\frac{(n-p)}{2\sigma^4} + \frac{y'Py}{\sigma^6}$$

olarak bulunmuştur ve burada $\ddot{H}_{jk} = \partial^2 H/\partial\kappa_j\kappa_k$ dir (Gumedze ve Dunne, 2011).

2.2.4.2. Fisher Skorlama (FS) Algoritması

FS yöntemi, NR yöntemine alternatif olarak lineer olmayan fonksiyonları maksimize etmek için kullanılan bir başka iteratif yöntemdir. Bu yöntemin NR yönteminden tek farkı, Eşitlik (2.27.) ile verilen NR genel iterasyon denkleminde gözlenen bilgi matrisi olan $I_O^{(d)} = \frac{\partial^2 l(\phi)}{\partial\phi\partial\phi'}$ yerine hesaplanması daima daha kolay

olan beklenen bilgi matrisinin yani $I_E^{(d)} = E\left[-\frac{\partial^2 l(\phi)}{\partial\phi\partial\phi'}\right]$ nin kullanılmasıdır (Searle ve ark., 1992).

Beklenen bilgi matrisinin elemanları

$$I_E(\kappa_j, \kappa_k) = \frac{1}{2} tr(P\dot{H}_j P\dot{H}_k)$$

$$I_E(\sigma^2, \kappa_j) = \frac{1}{2\sigma^2} tr(P\dot{H}_j)$$

$$I_E(\sigma^2, \sigma^2) = \frac{(n-p)}{2\sigma^4}$$

şeklinde elde edilmiştir (Gumedze ve Dunne, 2011).

2.2.4.3. Expectation-Maximization (EM) Algoritması

NR ve FS yöntemlerinden farklı olarak varyans bileşenlerinin tahminlerinin hesaplanmasında kullanılan bir başka iteratif yöntemse EM algoritması olup, rastgele etkilerin aldığı gerçek değerlerden bazılarının gözlemlenemediği veya kayıp olduğu durumlarda kullanılmaktadır (Dempster ve ark., 1977; Searle ve ark., 1992).

Varyans bileşenlerinin REML tahmin edicilerinin elde edilmesi amacıyla kullanılacak olan EM algoritması, E-adımı ve M-adımı olmak üzere iki adımdan oluşmaktadır ve bu iki adım aşağıdaki gibi ifade edilmektedir (Gumedze ve Dunne, 2011):

E-adımı: $u|y$ koşullu dağılımının REML log-likelihood fonksiyonunun değerlendirilmesi için d inci tahmin olan $\phi^{(d)}$ kullanılır ve $u|y$ koşullu dağılımı verilmişken ϕ nin yeni bir değeri için REML log-likelihood fonksiyonunun beklenen değeri hesaplanır.

M-adımı: $\phi^{(d+1)}$ in üretilebilmesi amacıyla E-adımda hesaplanan ve ϕ ye karşılık gelen beklenen değerin maksimum yapılması sağlanır.

Bu durum, E ve M-adımları arasında yakınsama sağlanana kadar iteratif olarak devam eder.

2.3. Uygulama: Aerosol Verisi

Aerosol verisi, New Mexico'da kurulu ABD Enerji Bakanlığı'na bağlı ulusal bir laboratuar olan Los Alamosda yüksek etkili partikül hava (HEPA-High Efficiency Particular Air) filtreleri üzerinde Kerschner ve ark. (1984) tarafından yapılan çalışma sonucunda elde edilmiştir.

HEPA filtreleri havayı hem virüslerden, solunabilir tozlardan, polen ve duman partiküllerinden hem de bakterilerden, çeşitli zehirli tozlardan ve aerosollerden korumak amacıyla oluşturulan filtrelerdir. Kerschner ve ark. (1984) amacı, filtrelerin penetrasyon (duman, toz ve benzeri yapıları çekim gücü) çeşitliliğine en fazla katkıda bulunan faktörleri belirlemek ve kalite güvenlik testinde kullanılması amacıyla standart aerosol ile yer değiştirebilecek alternatif diğer bir aerosol tipi elde etmektir. Bu amaçla, iki filtre imalatçısı tarafından üretilen iki aerosol tipinden elde edilen yüzdelik penetrasyonlar üzerinde analiz yapılmaktadır. Her bir filtre imalatçısı, iki aerosol tipinin yüzdelik penetrasyonlarını değerlendirirken üç filtre tipinden yararlanmaktadır. Aerosollerin penetrasyon yüzdelerinin çok büyük olması, filtrelerin kalite güvenlik testinde başarısız olduğu anlamına gelmektedir. Veri, Çizelge 2.1 ile gösterilmektedir.

Beckman ve ark. (1987), Los Alamosda HEPA filtreleri üzerinde yapılan çalışma sonucunda elde edilen ve Çizelge 2.1 ile verilen veriyi kullanarak lineer karma modellerde yerel etki tanılamalarını geliştirmişlerdir.

Çizelge 2.1. İmalatçıların yararlandığı üç filtre tipinin kullanılması ile iki aerosolden elde edilen yüzdelik penetrasyonlar (Beckman ve ark., 1987)

Aerosol 1 (i=1)		Aerosol 2 (i=2)	
İmalatçı 1 (j=1)	İmalatçı 2 (j=2)	İmalatçı 1 (j=1)	İmalatçı 2 (j=2)
Filtre 1 (k=1)	Filtre 4 (k=1)	Filtre 1 (k=1)	Filtre 4 (k=1)
0.750	0.600	1.120	0.910
0.770	0.680	1.100	0.830
0.840	0.870	1.120	0.950
Filtre 2 (k=2)	Filtre 5 (k=2)	Filtre 2 (k=2)	Filtre 5 (k=2)
0.082	4.100	0.160	0.660
0.085	5.000	0.110	0.830
0.096	1.800	0.260	0.610
Filtre 3 (k=3)	Filtre 6 (k=3)	Filtre 3 (k=3)	Filtre 6 (k=3)
0.082	1.000	0.150	2.170
0.076	1.800	0.120	1.520
0.077	2.700	0.120	1.580

Beckman ve ark. (1987) tarafından aerosol verisi için lineer karma model

$$y_{ijkl} = \mu + A_i + M_j + F_{jk} + \varepsilon_{ijkl} \qquad (2.28.)$$

olarak tanımlanmaktadır. Burada y_{ijkl} yüzdelik penetrasyonu, A_i aerosol için sabit etkiyi, M_j imalatçı için sabit etkiyi, F_{jk} j-inci imalatçının ürettiği k-inci filtre için rastgele etkiyi ve ε_{ijkl}, ijk-inci hücredeki l-inci ölçüme karşılık gelen hatayı göstermektedir. Ayrıca model, $i = 1,2$ ve $j = 1,2$ için $\sum_i A_i = \sum_j M_j = 0$ kısıtlamalarına sahiptir ve $F_{jk} \sim N(0, \sigma_F^2)$ ve $\varepsilon_{ijkl} \sim N(0, \sigma^2)$ şeklindedir. Aerosoller ile imalatçılar sabit etkileri ve imalatçılar içinde iç içe geçmiş filtreler de rastgele etkileri oluşturmaktadır.

Çizelge 2.1 incelendiğinde aerosollerin içinde iç içe geçmiş imalatçıların, imalatçıların içinde de iç içe geçmiş filtrelerin olması ve Çizelge 1.2 ile verilen yapıya benzemesi sebebiyle aerosol verisinin, iç içe geçmiş bir veri türü olduğu anlaşılmaktadır.

Eşitlik (2.28.) ile verilen lineer karma model matris gösterimi yardımıyla Eşitlik (2.1.) formunda ifade edilmektedir. Burada y 36×1 tipinde yüzdelik penetrasyon değerlerinden oluşan yanıt vektörünü, X 36×3 tipinde sabit etkilere ilişkin tasarım matrisini ve Z, 36×6 tipinde rastgele etkilere ilişkin tasarım matrisini göstermektedir. X matrisinin ilk sütunu 1 değerlerinden oluşan μ lere, ikinci sütunu sırasıyla 1 ve -1 değerlerinden oluşan Aerosol 1 ve Aerosol 2 lere, üçüncü sütunu ise sırasıyla -1 ve 1 değerlerinden oluşan İmalatçı 1 ve İmalatçı 2 lere karşılık gelmektedir. $\sum_i A_i = \sum_j M_j = 0$ kısıtlamaları nedeniyle, X matrisinin ikinci ve üçüncü sütunu 1 ve -1 değerlerinden oluşmaktadır. Z matrisinin ilk sütunu Filtre 1 e, ikinci sütunu Filtre 2 ye, üçüncü sütunu Filtre 3 e, dördüncü sütunu Filtre 4 e, beşinci sütunu Filtre 5 e ve altıncı sütunu da Filtre 6 ya karşılık gelmektedir.

β, 3×1 tipinde sabit etkilerden oluşan parametreler vektörü olup, $\begin{bmatrix} \mu \\ A_1 \\ M_1 \end{bmatrix}$ şeklinde ifade edilmektedir ve u, 6×1 tipinde rastgele etkilerden oluşan parametreler vektörü olup, $\begin{bmatrix} F_{11} \\ F_{12} \\ F_{13} \\ F_{21} \\ F_{22} \\ F_{23} \end{bmatrix}$ şeklindedir. $G = 0.2148 \times I_6$, $R = I_{36}$ ve $\sigma_F^2 = \sigma^2 \times 0.2148$ olmak üzere, yani varyans bileşenlerinin bilindiği varsayımı altında $u \sim N(0, \sigma^2 G)$ ve $\varepsilon \sim N(0, \sigma^2 R)$ biçimindedir. Burada I_6 ve I_{36} sırasıyla 6×6 ve 36×36 tipinde birim matrisleri göstermektedir.

Bu çalışmanın amacı, Eşitlik (2.28.) ile verilen ve aynı zamanda Eşitlik (2.1.) formunda ifade edilebilen lineer karma modeldeki parametre tahminlerini, varyans bileşenlerinin bilindiği varsayımı altında, Henderson nın lineer karma model eşitliklerini kullanarak Matlab R2014a programı yardımıyla elde etmektir.

Matlab R2014a programı yardımıyla yapılan analiz sonucunda Eşitlik (2.8.) ve (2.9.) ile verilen tahmin ediciler $\hat{\beta} = \begin{bmatrix} \hat{\mu} \\ \hat{A}_1 \\ \hat{M}_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.9924 \\ 0.1969 \\ 0.5970 \end{bmatrix}$ ve $\hat{u} = \begin{bmatrix} 0.3123 \\ -0.1482 \\ -0.1640 \\ -0.4408 \\ 0.3250 \\ 0.1157 \end{bmatrix}$ olarak elde edilmiştir. Bu tahmin edicilerin kullanılması sonucunda $\hat{\sigma}^2 = 0.6330$ ve dolayısıyla $\hat{\sigma}_F^2 = 0.1360$ şeklinde bulunmuştur.

Aynı zamanda, $Var(u) = 0.1360 \times I_6$ ve $Var(\varepsilon) = 0.6330 \times I_{36}$ olduğu da ifade edilebilmektedir.

3. LİNEER KARMA MODELLRDE TEKRARLI ÖLÇÜM OLMASI DURUMUNDA VARYANS-KOVARYANS MATRİS YAPISININ MODELLENMESİ

Deney birimlerinden elde edilen veriler çoğunlukla *kümelendirilmiş* halde olduğundan *ilişkili veri* durumu ortaya çıkmaktadır. Bu durum aynı kümede gruplandırılan birimler arasında *korelasyon*, farklı kümelerde gruplandırılan birimler arasında ise *değişen varyanslılığın* gözlemlenmesine yol açmaktadır. Özellikle de aynı deney birimi üzerinden tekrarlı ölçümlerin alındığı çalışmalarda veriler birbiri ile ilişkili ve deney birimleri arasında değişen varyanslılık gözlemlenmektedir. Bu bölümde, lineer karma modeller yardımıyla aynı deney birimi üzerinden tekrarlı ölçümlerin alınması sonucunda ortaya çıkan ilişkili veride varyans-kovaryans matris yapısının modellenmesi üzerinde durulacaktır.

Tekrarlı ölçüm verilerinin istatistiksel analizinde en sık karşılaşılan problem aynı deney birimi üzerinden alınan gözlemlerin (ölçümlerin) birbiri ile ilişkili olması durumudur. Tekrarlı ölçümlerin alındığı veya uzun süreli veriler üzerine dayandırılan çalışmalarda veri yapısının ilişkili olma durumunun da göz ardı edilmeden modele katılması gerekmektedir. Tekrarlı ölçümler ile yapılan çalışmalarda aynı deney birimi üzerinden alınan ölçümler arasındaki varyans-kovaryans matris yapısını modellemek bu tür verilerin istatistiksel analizi açısından çok önemlidir. Bu amaç doğrultusunda lineer karma modeller, aynı deney birimi üzerinden tekrarlı ölçümlerin alınması sonucunda ortaya çıkan ilişkili veride varyans-kovaryans matris yapısını modelleyebilme yeteneği sağlamaktadır (Wolfinger, 1993; Wolfinger, 1996; Fitzmaurice ve ark., 2004; İyit, 2008).

Lineer karma modellerde tekrarlı ölçüm olması durumunda ortaya çıkan ilişkili veride varyans-kovaryans matris yapısının modellenmesi aşamasına

geçilmeden önce, lineer karma modellerde tekrarlı ölçüm verileri için model yapılandırma sürecine kısaca bir göz gezdirmekte fayda vardır.

3.1. Lineer Karma Modellerde Tekrarlı Ölçüm Verileri için Model Yapılandırma Süreci

$y_i = (y_{i1}, \dots, y_{in_i})'$, $n_i \times 1$ tipinde i inci denek üzerinden alınan tüm tekrarlı ölçümlerin oluşturduğu gözlemlenebilir yanıt vektörünü ve $X_i = (x'_{i1}, \dots, x'_{in_i})'$ $j = 1, \dots, n_i$, $n_i \times p$ tipinde i inci deneğe ait sabit etkilere ilişkin tasarım matrisini temsil etsin. Burada n_i, i inci denek için tekrarlı ölçüm sayısını ve x_{ij}, $p \times 1$ tipinde i inci denek üzerinden alınan her bir tekrarlı ölçüme karşılık gelen sabit etkilerin vektörünü göstermektedir. m toplam denek sayısı olmak üzere, Laird ve Ware (1982) tarafından tekrarlı ölçüm verileri için lineer karma model

$$y_i = X_i\beta + Z_i u_i + \varepsilon_i \quad i = 1, \dots, m \tag{3.1.}$$

biçiminde ifade edilmiştir. Burada, β $p \times 1$ tipinde sabit etkilere ilişkin parametreler vektörünü, Z_i $n_i \times q$ tipinde i inci deneğe ait rastgele etkilere ilişkin tasarım matrisini, u_i $q \times 1$ tipinde i inci deneğe ait rastgele etkilere ilişkin parametreler vektörünü ve ε_i, $n_i \times 1$ tipinde i inci deneğe ait rastgele hataların bir vektörünü göstermektedir. u_i ve ε_i nin karşılıklı olarak bağımsız ve normal dağılıma sahip olduğu varsayımı altında ve $\acute{G}$ ve $R_i = \sigma_\varepsilon^2 \times I_{n_i}$ sırasıyla $q \times q$ ve $n_i \times n_i$ tipinde olmak üzere

$$\begin{bmatrix} u_i \\ \varepsilon_i \end{bmatrix} \sim N\left(\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \sigma^2 \begin{bmatrix} \acute{G} & 0 \\ 0 & R_i \end{bmatrix}\right)$$

dır. y_i nin varyans-kovaryans matrisi, $Var(y_i) = \sigma^2 H_i$ şeklinde elde edilir. Burada $H_i = Z_i \acute{G} Z_i' + R_i$ olup $Z_i \acute{G} Z_i'$ bileşeni, i inci denek üzerinden alınan tüm tekrarlı ölçümlerin oluşturduğu gözlemlenebilir yanıt vektörüne ilişkin varyans-kovaryans matris yapısının denekler-arası etki kısmını ve R_i bileşeni, i inci denek üzerinden alınan tüm tekrarlı ölçümlerin oluşturduğu gözlemlenebilir yanıt vektörüne ilişkin varyans-kovaryans matris yapısının denekler-içi etki kısmını oluşturmaktadır.

$n = \sum_{i=1}^{m} n_i$ olmak üzere,

$$y_{n\times 1} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}, X_{n\times p} = \begin{bmatrix} X_1 \\ \vdots \\ X_m \end{bmatrix}, Z_{n\times mq} = \begin{bmatrix} Z_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & Z_m \end{bmatrix}$$

ve

$$u_{mq\times 1} = \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_m \end{bmatrix}, \varepsilon_{n\times 1} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \vdots \\ \varepsilon_m \end{bmatrix}$$

olarak alındığında Eşitlik (3.1.) ile verilen modelin, kapalı formda Eşitlik (2.1.) ile verilen genel lineer karma modele dönüştüğü görülmektedir.

$$R_{n\times n} = \begin{bmatrix} R_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & R_m \end{bmatrix} \text{ ve } G_{mq\times mq} = I_m \otimes \acute{G}$$

şeklinde olmak üzere,

$$Var(y) = \sigma^2(ZGZ' + R) = \sigma^2 H_{n\times n} = \sigma^2 \begin{bmatrix} H_1 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & H_m \end{bmatrix} \qquad (3.2.)$$

biçiminde elde edilmektedir. Burada $\otimes$, Kronecker çarpımı göstermektedir.

3.1.1. Rastgele Katsayılı (RI) Model

Eşitlik (3.1.) de yer alan u_i, i inci deneğin gözlemlenebilir yanıt vektörü üzerindeki rastgele etkisini temsil etmek üzere tek bir rastgele değişkenden oluşuyorsa, elde edilen lineer karma model denkleminin özel durumu ***rastgele katsayılı (random intercept, RI) model*** olarak adlandırılır. Böylece RI model aracılığıyla denek etkisinin modele dahil edilmesi, denekler-arası heterojenliğin modellenmesi avantajını da beraberinde getirmektedir.

Eşitlik (3.1.) in özel durumuna karşılık gelen RI modeli

$$y_{ij} = x'_{ij}\beta + u_i + \varepsilon_{ij} \quad i = 1, \dots, m \quad j = 1, \dots, n_i \tag{3.3.}$$

şeklindedir. Burada $u_i \sim N(0, \sigma_u^2)$ ve $\varepsilon_{ij} \sim N(0, \sigma_\varepsilon^2)$ olmak üzere, u_i ve ε_{ij} nin karşılıklı olarak bağımsız olduğu varsayımı yapılır (Fitzmaurice ve ark., 2004).

$$Var(y_{ij}) = Var(x'_{ij}\beta + u_i + \varepsilon_{ij}) = \sigma_u^2 + \sigma_\varepsilon^2$$

ve $Cov(u_i, \varepsilon_{ij'}) = 0$ ile $Cov(\varepsilon_{ij}, \varepsilon_{ij'}) = 0$ varsayımları altında

$$\begin{aligned} Cov(y_{ij}, y_{ij'}) &= Cov\left(x'_{ij}\beta + u_i + \varepsilon_{ij}, x'_{ij'}\beta + u_i + \varepsilon_{ij'}\right) \\ &= Cov(u_i + \varepsilon_{ij}, u_i + \varepsilon_{ij'}) \\ &= Cov(u_i, u_i) \\ &= \sigma_u^2 \end{aligned}$$

olup, 3 tekrarlı ölçüm ($n_i = 3$) için y_i nin varyans-kovaryans matrisi

$$Var(y_i) = \begin{bmatrix} \sigma_u^2 + \sigma_\varepsilon^2 & \sigma_u^2 & \sigma_u^2 \\ \sigma_u^2 & \sigma_u^2 + \sigma_\varepsilon^2 & \sigma_u^2 \\ \sigma_u^2 & \sigma_u^2 & \sigma_u^2 + \sigma_\varepsilon^2 \end{bmatrix} \quad (3.4.)$$

formundadır (Fitzmaurice ve ark., 2004; Fu ve ark., 2015).

3.1.2. Rastgele Katsayılı ve Eğimli (RIS) Model

Eşitlik (3.1.) de yer alan u_i, u_{i1} i inci deneğin gözlemlenebilir yanıt vektörü üzerindeki birinci rastgele etkisi ile u_{i2} i inci deneğin tekrarlı ölçümlerin alındığı zaman faktörünün düzeylerine göre gözlemlenebilir yanıt vektörü üzerindeki ikinci rastgele etkisini temsil etmek üzere iki rastgele değişkenden oluşuyorsa, elde edilen lineer karma model denklemi ***rastgele katsayılı ve eğimli (random intercept and slope, RIS) model*** olarak adlandırılır. Böylece RIS model aracılığıyla, hem denekler-içi hem de denekler-arası heterojenliğin modellenmesi mümkün olmaktadır.

i inci denek üzerinden alınan tekrarlı ölçümlerin $t_{i1}, \dots, t_{in_i}$ zaman faktörünün düzeylerine bağlı olduğu varsayımı altında

$$X_i = Z_i = \begin{bmatrix} 1 & t_{i1} \\ \vdots & \vdots \\ 1 & t_{in_i} \end{bmatrix}, \ \beta = \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix} \text{ ve } u_i = \begin{bmatrix} u_{i1} \\ u_{i2} \end{bmatrix}$$

olmak üzere, Eşitlik (3.1.) ile tekrarlı ölçümler için verilen lineer karma modelin özel durumuna karşılık gelen RIS modeli

$$y_{ij} = (\beta_1 + u_{i1}) + (\beta_2 + u_{i2})t_{ij} + \varepsilon_{ij} \quad i = 1, \dots, m \quad j = 1, \dots, n_i \quad (3.5.)$$

şeklindedir. Burada u_i ve ε_{ij} nin karşılıklı olarak bağımsız ve normal dağılıma sahip olduğu varsayımı yapılır ve

$$u_{i1} \sim N\left(0, \sigma_{u_{i1}}^2\right),\ u_{i2} \sim N\left(0, \sigma_{u_{i2}}^2\right),\ \varepsilon_{ij} \sim N(0, \sigma_\varepsilon^2) \text{ ve } cov(u_{i1}, u_{i2}) = \sigma_{u_{i12}}$$

ile verilir (Fitzmaurice ve ark., 2004; Fu ve ark., 2015).

$$\begin{aligned} Var(y_{ij}) &= Var((\beta_1 + u_{i1}) + (\beta_2 + u_{i2})t_{ij} + \varepsilon_{ij}) \\ &= Var\left(u_{i1} + u_{i2}t_{ij} + \varepsilon_{ij}\right) \\ &= Var(u_{i1}) + 2t_{ij}Cov(u_{i1}, u_{i2}) + t_{ij}^2 Var(u_{i2}) + Var\left(\varepsilon_{ij}\right) \\ &= \sigma_{u_{i1}}^2 + 2t_{ij}\sigma_{u_{i12}} + t_{ij}^2\sigma_{u_{i2}}^2 + \sigma_\varepsilon^2 \end{aligned}$$

ve

$$Cov\left(y_{ij}, y_{ij'}\right) = \sigma_{u_{i1}}^2 + \left(t_{ij} + t_{ij'}\right)\sigma_{u_{i12}} + t_{ij}t_{ij'}\sigma_{u_{i2}}^2$$

olmak üzere, 2 tekrarlı ölçüm $(n_i = 2)$ için y_i nin varyans-kovaryans matrisi $Var(y_i)$

$$\begin{bmatrix} \sigma_{u_{i1}}^2 + 2t_{i1}\sigma_{u_{i12}} + t_{i1}^2\sigma_{u_{i2}}^2 + \sigma_\varepsilon^2 & \sigma_{u_{i1}}^2 + (t_{i1} + t_{i2})\sigma_{u_{i12}} + t_{i1}t_{i2}\sigma_{u_{i2}}^2 \\ \sigma_{u_{i1}}^2 + (t_{i1} + t_{i2})\sigma_{u_{i12}} + t_{i1}t_{i2}\sigma_{u_{i2}}^2 & \sigma_{u_{i1}}^2 + 2t_{i2}\sigma_{u_{i12}} + t_{i2}^2\sigma_{u_{i2}}^2 + \sigma_\varepsilon^2 \end{bmatrix}$$

formundadır (Fitzmaurice ve ark., 2004; Fu ve ark., 2015).

3.2. Lineer Karma Modellerde Tekrarlı Ölçümler için Varyans-Kovaryans Modelleri

Lineer karma modellerde tekrarlı ölçüm olması durumunda ortaya çıkan ilişkili veride varyans-kovaryans matris yapısının modellenmesi amacı doğrultusunda her bir deney birimi farklı birer bloklama değişkeni olarak alınmak üzere, her bir bloklama değişkeni için tekrarlı ölçümlerden oluşan veri kendi içinde ilişkili olup belli bir varyans-kovaryans matris yapısına sahiptir.

Tekrarlı ölçüm çalışmalarında temel varsayım; farklı deney birimleri üzerinden alınan ölçümlerin (gözlemlerin) birbiri ile ilişkisiz, aynı deney birimi üzerinden alınan ölçümlerin ise birbiri ile ilişkili olmasıdır. Bu durumda aynı deney birimi üzerinden alınan tekrarlı ölçümler belli varyans-kovaryans matris yapılarına sahip olmaktadır.

Bu alt bölümde, Wolfinger (1993), Wolfinger (1996), Fitzmaurice ve ark. (2004) ve İyit (2008) çalışmalarından yararlanılarak, lineer karma modellerde tekrarlı ölçüm olması durumunda Eşitlik (3.2.) ile verilen H matrisinin ve dolayısıyla her bir H_i matris yapısının 13 farklı varyans-kovaryans modeli aracılığıyla modellenmesi amaçlanmaktadır. Bu alt bölümde ele alınan varyans-kovaryans modelleri için örnek gösterimler 4 tekrarlı ölçüm ($n_i = 4$) için verilmiştir.

3.2.1. Tekrarlı Ölçümler için Homojen Varyans-Kovaryans Modelleri

Tekrarlı ölçümler için verilen varyans-kovaryans modellerine ilişkin matrisler ana köşegen boyunca sabit varyans değerlerine sahipse, bu matrislere ilişkin varyans-kovaryans modelleri *homojen varyans-kovaryans modelleri* olarak adlandırılır.

3.2.1.1. Varyans Bileşenleri (VC) Varyans-Kovaryans Modeli

Varyans bileşenleri varyans-kovaryans modeli

$$\begin{bmatrix} \sigma_\varepsilon^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_\varepsilon^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_\varepsilon^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sigma_\varepsilon^2 \end{bmatrix} \quad (3.6.)$$

matris formunda olup, aynı deney birimi üzerinden alınan tekrarlı ölçümlerin birbiri ile ilişkisiz ve homojen varyansa sahip olduğu varsayımına dayanmaktadır.

3.2.1.2. Bileşik Simetri (CS) Varyans-Kovaryans Modeli

Bileşik simetri varyans-kovaryans modeli aynı deney birimi üzerinden alınan tekrarlı ölçümlerin homojen varyans-kovaryans yapısına sahip olduğu varsayımına dayanır. Dolayısıyla aynı deney birimi üzerinden alınan tüm tekrarlı ölçüm çiftleri arasındaki korelasyon değerleri birbirine eşittir.

σ_ε^2, deney birimleri içindeki tekrarlı ölçümlerin varyansını σ_u^2, deney birimleri içindeki tekrarlı ölçümler arasındaki kovaryansı $Cov(y_{ij}, y_{ij'}) = \sigma_u^2$ göstermek üzere bu varyans-kovaryans modeli 2 parametreye sahiptir. $Var(y_{ij}) = \sigma_\varepsilon^2 + \sigma_u^2$ olmak üzere, bileşik simetri varyans-kovaryans modeli

$$\begin{bmatrix} \sigma_\varepsilon^2 + \sigma_u^2 & \sigma_u^2 & \sigma_u^2 & \sigma_u^2 \\ \sigma_u^2 & \sigma_\varepsilon^2 + \sigma_u^2 & \sigma_u^2 & \sigma_u^2 \\ \sigma_u^2 & \sigma_u^2 & \sigma_\varepsilon^2 + \sigma_u^2 & \sigma_u^2 \\ \sigma_u^2 & \sigma_u^2 & \sigma_u^2 & \sigma_\varepsilon^2 + \sigma_u^2 \end{bmatrix} \quad (3.7.)$$

formundadır.

Eşitlik (3.7.) ile verilen model incelendiğinde, Eşitlik (3.4.) ile verilen RI modelin varyans-kovaryans matrisinin CS yapısında olduğu görülmektedir.

Eşitlik (3.7.) ile verilen modelinin alternatif bir gösterimi ise $Corr(y_{ij}, y_{ij'}) = \rho \ \forall j, j' \quad (0 < \rho < 1)$ olmak üzere,

$$\sigma_{\varepsilon}^{2}\begin{bmatrix}1 & \rho & \rho & \rho\\ \rho & 1 & \rho & \rho\\ \rho & \rho & 1 & \rho\\ \rho & \rho & \rho & 1\end{bmatrix} \quad (3.8.)$$

formundadır.

3.2.1.3. Toeplitz (TOEP) Varyans-Kovaryans Modeli

Toeplitz varyans-kovaryans modeline göre aynı deney birimi üzerinden alınan tekrarlı ölçüm çiftleri eşit zaman aralıklarında iken aynı korelasyon değerine sahiptir. Buna göre $Corr(y_{ij}, y_{ij'}) = \rho_{|j-j'|}$ $(0 < \rho < 1)$ olmak üzere, Toeplitz varyans-kovaryans modeli

$$\sigma_{\varepsilon}^{2}\begin{bmatrix}1 & \rho_1 & \rho_2 & \rho_3\\ \rho_1 & 1 & \rho_1 & \rho_2\\ \rho_2 & \rho_1 & 1 & \rho_1\\ \rho_3 & \rho_2 & \rho_1 & 1\end{bmatrix} \quad (3.9.)$$

formundadır ve sadece eşit zaman aralıklarında alınan ölçümler için kullanılır.

3.2.1.4. Birinci Dereceden Otoregresif (AR(1)) Varyans-Kovaryans Modeli

Birinci dereceden otoregresif varyans-kovaryans modeli, Toeplitz varyans-kovaryans modelinin özel bir durumu olup zamanlar arasındaki uzaklıklar arttıkça tekrarlı ölçümler arasındaki korelasyon değerlerinin üstel olarak azaldığı varsayımına dayanmaktadır.

$Corr(y_{ij}, y_{ij'}) = \rho^{|j-j'|}$ $(0 < \rho < 1)$ olmak üzere, birinci dereceden otoregresif varyans-kovaryans modeli

$$\sigma_{\varepsilon}^{2}\begin{bmatrix} 1 & \rho & \rho^{2} & \rho^{3} \\ \rho & 1 & \rho & \rho^{2} \\ \rho^{2} & \rho & 1 & \rho \\ \rho^{3} & \rho^{2} & \rho & 1 \end{bmatrix} \qquad (3.10.)$$

şeklindedir.

Eşitlik (3.8.) ile Eşitlik (3.10.) den görüldüğü üzere CS ve AR(1) varyans-kovaryans modelleri birbirine benzer yapılarda olup, CS varyans-kovaryans modeline ilişkin matrisin köşegen dışı elemanlarını oluşturan kovaryans değerleri sabitken, AR(1) varyans-kovaryans modelinde üstel olarak azalmaktadır.

3.2.2. Tekrarlı Ölçümler için Heterojen Varyans-Kovaryans Modelleri

Tekrarlı ölçümler için verilen varyans-kovaryans modellerine ilişkin matrisler ana köşegen boyunca değişen varyans değerlerine sahipse, bu matrislere ilişkin varyans-kovaryans modelleri *heterojen varyans-kovaryans modelleri* olarak adlandırılır.

3.2.2.1. Yapılandırılmamış (UN) Varyans-Kovaryans Modeli

Yapılandırılmamış varyans-kovaryans modeli aynı deney birimi üzerinden alınan tekrarlı ölçümlerin her bir zaman için farklı varyans ve zamanlar-arası etki için farklı kovaryans değerlerine sahip olduğu varsayımına dayanmaktadır.

$Var(y_{ij}) = \sigma_{\varepsilon_j}^{2}$, j inci zamanda alınan tekrarlı ölçümlerin varyansını $Cov(y_{ij}, y_{ij'}) = \sigma_{\varepsilon_{jj'}}$, j inci ve j' üncü zamanlarda alınan tekrarlı ölçümler arasındaki denekler-içi kovaryansı göstermek üzere, yapılandırmamış varyans-kovaryans modeli

$$\begin{bmatrix} \sigma_{\varepsilon_1}^2 & \sigma_{\varepsilon_{12}} & \sigma_{\varepsilon_{13}} & \sigma_{\varepsilon_{14}} \\ \sigma_{\varepsilon_{21}} & \sigma_{\varepsilon_2}^2 & \sigma_{\varepsilon_{23}} & \sigma_{\varepsilon_{24}} \\ \sigma_{\varepsilon_{31}} & \sigma_{\varepsilon_{32}} & \sigma_{\varepsilon_3}^2 & \sigma_{\varepsilon_{34}} \\ \sigma_{\varepsilon_{41}} & \sigma_{\varepsilon_{42}} & \sigma_{\varepsilon_{43}} & \sigma_{\varepsilon_4}^2 \end{bmatrix} \quad (3.11.)$$

yapısındadır.

3.2.2.2. Köşegen (UN(1)) Varyans-Kovaryans Modeli

Köşegen varyans-kovaryans modeli aynı deney birimi üzerinden alınan tekrarlı ölçümlerin birbiri ile ilişkisiz ve heterojen varyansa sahip olduğu varsayımına dayanır ve

$$\begin{bmatrix} \sigma_{\varepsilon_1}^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{\varepsilon_2}^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{\varepsilon_3}^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sigma_{\varepsilon_4}^2 \end{bmatrix} \quad (3.12.)$$

matris formundadır.

3.2.2.3. Heterojen Bileşik Simetri (CSH) Varyans-Kovaryans Modeli

Heterojen bileşik simetri varyans-kovaryans modelinde tüm tekrarlı ölçüm çiftleri aynı korelasyon değerine sahip olup

$$\begin{bmatrix} \sigma_{\varepsilon_1}^2 & \sigma_{\varepsilon_1}\sigma_{\varepsilon_2}\rho & \sigma_{\varepsilon_1}\sigma_{\varepsilon_3}\rho & \sigma_{\varepsilon_1}\sigma_{\varepsilon_4}\rho \\ \sigma_{\varepsilon_2}\sigma_{\varepsilon_1}\rho & \sigma_{\varepsilon_2}^2 & \sigma_{\varepsilon_2}\sigma_{\varepsilon_3}\rho & \sigma_{\varepsilon_2}\sigma_{\varepsilon_4}\rho \\ \sigma_{\varepsilon_3}\sigma_{\varepsilon_1}\rho & \sigma_{\varepsilon_3}\sigma_{\varepsilon_2}\rho & \sigma_{\varepsilon_3}^2 & \sigma_{\varepsilon_3}\sigma_{\varepsilon_4}\rho \\ \sigma_{\varepsilon_4}\sigma_{\varepsilon_1}\rho & \sigma_{\varepsilon_4}\sigma_{\varepsilon_2}\rho & \sigma_{\varepsilon_4}\sigma_{\varepsilon_3}\rho & \sigma_{\varepsilon_4}^2 \end{bmatrix} \quad (3.13.)$$

ile verilir.

3.2.2.4. Heterojen Toeplitz (TOEPH) Varyans-Kovaryans Modeli

Heterojen Toeplitz varyans-kovaryans modelinde eşit zaman aralıklarında bulunan tekrarlı ölçüm çiftleri aynı korelasyon değerine sahip olup

$$\begin{bmatrix} \sigma_{\varepsilon_1}^2 & \sigma_{\varepsilon_1}\sigma_{\varepsilon_2}\rho_1 & \sigma_{\varepsilon_1}\sigma_{\varepsilon_3}\rho_2 & \sigma_{\varepsilon_1}\sigma_{\varepsilon_4}\rho_3 \\ \sigma_{\varepsilon_2}\sigma_{\varepsilon_1}\rho_1 & \sigma_{\varepsilon_2}^2 & \sigma_{\varepsilon_2}\sigma_{\varepsilon_3}\rho_1 & \sigma_{\varepsilon_2}\sigma_{\varepsilon_4}\rho_2 \\ \sigma_{\varepsilon_3}\sigma_{\varepsilon_1}\rho_2 & \sigma_{\varepsilon_3}\sigma_{\varepsilon_2}\rho_1 & \sigma_{\varepsilon_3}^2 & \sigma_{\varepsilon_3}\sigma_{\varepsilon_4}\rho_1 \\ \sigma_{\varepsilon_4}\sigma_{\varepsilon_1}\rho_3 & \sigma_{\varepsilon_4}\sigma_{\varepsilon_2}\rho_2 & \sigma_{\varepsilon_4}\sigma_{\varepsilon_3}\rho_1 & \sigma_{\varepsilon_4}^2 \end{bmatrix} \quad (3.14.)$$

formunda gösterilir.

3.2.2.5. Heterojen Birinci Dereceden Otoregresif (ARH(1)) Varyans-Kovaryans Modeli

Heterojen birinci dereceden otoregresif varyans-kovaryans modeli heterojen Toeplitz varyans-kovaryans modelinin özel bir durumu olup, aynı deney birimi üzerinden alınan tekrarlı ölçüm çiftleri arasındaki korelasyon değerleri hem üstel olarak azalır hem de tekrarlı ölçümlerin varyans bileşenlerinin katkısı ile varyans ve kovaryans değerleri heterojendir.

Heterojen birinci dereceden otoregresif varyans-kovaryans modeli

$$\begin{bmatrix} \sigma_{\varepsilon_1}^2 & \sigma_{\varepsilon_1}\sigma_{\varepsilon_2}\rho & \sigma_{\varepsilon_1}\sigma_{\varepsilon_3}\rho^2 & \sigma_{\varepsilon_1}\sigma_{\varepsilon_4}\rho^3 \\ \sigma_{\varepsilon_2}\sigma_{\varepsilon_1}\rho & \sigma_{\varepsilon_2}^2 & \sigma_{\varepsilon_2}\sigma_{\varepsilon_3}\rho & \sigma_{\varepsilon_2}\sigma_{\varepsilon_4}\rho^2 \\ \sigma_{\varepsilon_3}\sigma_{\varepsilon_1}\rho^2 & \sigma_{\varepsilon_3}\sigma_{\varepsilon_2}\rho & \sigma_{\varepsilon_3}^2 & \sigma_{\varepsilon_3}\sigma_{\varepsilon_4}\rho \\ \sigma_{\varepsilon_4}\sigma_{\varepsilon_1}\rho^3 & \sigma_{\varepsilon_4}\sigma_{\varepsilon_2}\rho^2 & \sigma_{\varepsilon_4}\sigma_{\varepsilon_3}\rho & \sigma_{\varepsilon_4}^2 \end{bmatrix} \quad (3.15.)$$

formundadır.

3.2.2.6. Huynh-Feldt (HF) Varyans-Kovaryans Modeli

Huynh-Feldt varyans-kovaryans modeli, λ kovaryans parametresini göstermek üzere,

$$\begin{bmatrix} \sigma_{\varepsilon_1}^2 & \frac{\sigma_{\varepsilon_1}^2+\sigma_{\varepsilon_2}^2}{2}-\lambda & \frac{\sigma_{\varepsilon_1}^2+\sigma_{\varepsilon_3}^2}{2}-\lambda & \frac{\sigma_{\varepsilon_1}^2+\sigma_{\varepsilon_4}^2}{2}-\lambda \\ \frac{\sigma_{\varepsilon_2}^2+\sigma_{\varepsilon_1}^2}{2}-\lambda & \sigma_{\varepsilon_2}^2 & \frac{\sigma_{\varepsilon_2}^2+\sigma_{\varepsilon_3}^2}{2}-\lambda & \frac{\sigma_{\varepsilon_2}^2+\sigma_{\varepsilon_4}^2}{2}-\lambda \\ \frac{\sigma_{\varepsilon_3}^2+\sigma_{\varepsilon_1}^2}{2}-\lambda & \frac{\sigma_{\varepsilon_3}^2+\sigma_{\varepsilon_2}^2}{2}-\lambda & \sigma_{\varepsilon_3}^2 & \frac{\sigma_{\varepsilon_3}^2+\sigma_{\varepsilon_4}^2}{2}-\lambda \\ \frac{\sigma_{\varepsilon_4}^2+\sigma_{\varepsilon_1}^2}{2}-\lambda & \frac{\sigma_{\varepsilon_4}^2+\sigma_{\varepsilon_2}^2}{2}-\lambda & \frac{\sigma_{\varepsilon_4}^2+\sigma_{\varepsilon_3}^2}{2}-\lambda & \sigma_{\varepsilon_4}^2 \end{bmatrix} \quad (3.16.)$$

formundadır (Huynh ve Feldt, 1970).

3.2.2.7. Birinci Dereceden Anti-Bağımlı (ANTE(1)) Varyans-Kovaryans Modeli

Macchiavelli ve Arnold (1994) tarafından tanımlanan *birinci dereceden anti-bağımlı varyans-kovaryans modeli*, aynı deney birimi üzerinden alınan tekrarlı ölçüm çiftleri arasındaki kovaryans değerlerindeki heterojenliği varyans bileşenlerinin ve korelasyon değerlerinin ardışık çarpımı seklinde sağlamaktadır ve

$$\begin{bmatrix} \sigma_{\varepsilon_1}^2 & \sigma_{\varepsilon_1}\sigma_{\varepsilon_2}\rho_1 & \sigma_{\varepsilon_1}\sigma_{\varepsilon_3}\rho_1\rho_2 & \sigma_{\varepsilon_1}\sigma_{\varepsilon_4}\rho_1\rho_2\rho_3 \\ \sigma_{\varepsilon_2}\sigma_{\varepsilon_1}\rho_1 & \sigma_{\varepsilon_2}^2 & \sigma_{\varepsilon_2}\sigma_{\varepsilon_3}\rho_2 & \sigma_{\varepsilon_2}\sigma_{\varepsilon_4}\rho_2\rho_3 \\ \sigma_{\varepsilon_3}\sigma_{\varepsilon_1}\rho_2\rho_1 & \sigma_{\varepsilon_3}\sigma_{\varepsilon_2}\rho_2 & \sigma_{\varepsilon_3}^2 & \sigma_{\varepsilon_3}\sigma_{\varepsilon_4}\rho_3 \\ \sigma_{\varepsilon_4}\sigma_{\varepsilon_1}\rho_3\rho_2\rho_1 & \sigma_{\varepsilon_4}\sigma_{\varepsilon_2}\rho_3\rho_2 & \sigma_{\varepsilon_4}\sigma_{\varepsilon_3}\rho_3 & \sigma_{\varepsilon_4}^2 \end{bmatrix} \quad (3.17.)$$

ile verilir.

3.2.2.8. Birinci Dereceden Faktör Analitik (FA(1)) Varyans-Kovaryans Modeli

Birinci dereceden faktör analitik varyans-kovaryans modeli $\Lambda\Lambda' + G$ formunda tanımlanan faktör analitik varyans-kovaryans matris yapısını temsil etmektedir.

λ_j^2, $\Lambda\Lambda'$ matrisinin köşegen elemanını ve j inci zamanda alınan tekrarlı ölçümlerin varyansı $\sigma_{\varepsilon_j}^2$, G matrisinin köşegen elemanları olmak üzere,

$$\begin{bmatrix}\lambda_1\\ \lambda_2\\ \lambda_3\\ \lambda_4\end{bmatrix}[\lambda_1 \quad \lambda_2 \quad \lambda_3 \quad \lambda_4] + \begin{bmatrix}\sigma_{\varepsilon_1}^2 & 0 & 0 & 0\\ 0 & \sigma_{\varepsilon_2}^2 & 0 & 0\\ 0 & 0 & \sigma_{\varepsilon_3}^2 & 0\\ 0 & 0 & 0 & \sigma_{\varepsilon_4}^2\end{bmatrix} \tag{3.18.}$$

dır.

3.2.2.9. Yapılandırılmamış Korelasyonlu (UNR) Varyans-Kovaryans Modeli

Yapılandırılmamış korelasyonlu varyans-kovaryans modeli $Var(y_{ij}) = \sigma_{\varepsilon_j}^2$ ve $Cov(y_{ij}, y_{ij'}) = \sigma_{\varepsilon_j}\sigma_{\varepsilon_{j'}}\rho_{max(j,j')min(j,j')}$ olmak üzere,

$$\begin{bmatrix}\sigma_{\varepsilon_1}^2 & \sigma_{\varepsilon_1}\sigma_{\varepsilon_2}\rho_{21} & \sigma_{\varepsilon_1}\sigma_{\varepsilon_3}\rho_{31} & \sigma_{\varepsilon_1}\sigma_{\varepsilon_4}\rho_{41}\\ \sigma_{\varepsilon_2}\sigma_{\varepsilon_1}\rho_{21} & \sigma_{\varepsilon_2}^2 & \sigma_{\varepsilon_2}\sigma_{\varepsilon_3}\rho_{32} & \sigma_{\varepsilon_2}\sigma_{\varepsilon_4}\rho_{42}\\ \sigma_{\varepsilon_3}\sigma_{\varepsilon_1}\rho_{31} & \sigma_{\varepsilon_3}\sigma_{\varepsilon_2}\rho_{32} & \sigma_{\varepsilon_3}^2 & \sigma_{\varepsilon_3}\sigma_{\varepsilon_4}\rho_{43}\\ \sigma_{\varepsilon_4}\sigma_{\varepsilon_1}\rho_{41} & \sigma_{\varepsilon_4}\sigma_{\varepsilon_2}\rho_{42} & \sigma_{\varepsilon_4}\sigma_{\varepsilon_3}\rho_{43} & \sigma_{\varepsilon_4}^2\end{bmatrix} \tag{3.19.}$$

yapısında olup UN varyans-kovaryans modelinin en genel halidir.

3.3. Lineer Karma Modellerde Tekrarlı Ölçüm Olması Durumunda Uygun Varyans-Kovaryans Modelinin Seçimi

Lineer karma modellerde aynı sabit etkilere ancak farklı varyans-kovaryans matris yapılarına sahip modelleri karşılaştırabilmek için

$$REMLRT = -2(l_{R_{\text{İndirgenmiş Model}}} - l_{R_{\text{Tam Model}}})$$

istatistiğinden yararlanılır. $l_{R_{\text{İndirgenmiş Model}}}$ ve $l_{R_{\text{Tam Model}}}$ sırasıyla indirgenmiş ve tam modelin REML log-likelihood fonksiyonunu ve g tam ve indirgenmiş modellerden tahmin edilen parametre sayılarının farkını göstermek üzere, $REMLRT \sim \chi^2_g$ dağılımına sahiptir (Wolfinger, 1993; Gumedze ve Dunne, 2011).

Lineer karma modellerde IC yaklaşımı, aynı sabit etkilere ancak farklı varyans-kovaryans matris yapılarına sahip modelleri maksimum yapan log-likelihood fonksiyonunun aldığı değere bağlı olarak karşılaştırabilmek amacıyla kullanılan bir yöntemdir. p, modelin sabit etkili parametre sayısını ve $l(\hat{\theta}_p) = logf(y|\hat{\theta}_p)$, $\theta_p = (\beta_p', \sigma_p, H_p)'$ parametre vektörü altında log-likelihood fonksiyonunu göstermek üzere $AIC = -2l(\hat{\theta}_p) + 2p$ şeklinde olup, lineer karma modellerde AIC ile ilgili birçok çalışma bulunmaktadır (Wenren, 2014).

Sugiura (1978) tarafından *marjinal AIC (marginal AIC, mAIC)*, $mAIC = -2l(\hat{\theta}_p) + 2a_n(p + q)$ olarak tanımlanmıştır ve q, modelin rastgele etkili parametre sayısını göstermektedir. Burada $a_n = 1$ veya sınırlı sayıda örneklem için $a_n = n/(n - p - q - 1)$ dir. Lineer karma modeller için R programında yer alan *lme* fonksiyonu varsayılan AIC olarak mAIC yi kullanmaktadır.

Lineer karma modeller için Matlab R2014a programında yer alan *fitlme* fonksiyonu varsayılan AIC olarak $mtlbAIC = -2l(\hat{\theta}_p) + 2(p + q + 1)$ formülünü kullanmaktadır (Stram ve Lee, 1994; Hox, 2002).

Shang ve Cavanaugh (2008), mAIC nin $2a_n(p+q)$ terimini tahmin etmek için bootstrap metodundan yararlanmışlardır ve AIC nin iki farklı versiyonunu

$$AIC_{b1} = -2l(\hat{\theta}_p|y) + \frac{1}{W}\sum_{i=1}^{W} -2log\frac{l(\hat{\theta}^*(i)|y)}{l(\hat{\theta}^*(i)|y^*(i))}$$

$$AIC_{b2} = -2l(\hat{\theta}_p|y) + 2\left\{\frac{1}{W}\sum_{i=1}^{W} -2\frac{l(\hat{\theta}^*(i)|y)}{l(\hat{\theta}|y)}\right\}$$

şeklinde elde etmişlerdir. Burada W, y nin bootstrap örneklemlerinin sayısını ve $l(\hat{\theta}^*(i)|y)$, W bootstrap örneklemlerinin her biri için log-likelihood fonksiyonunu göstermektedir.

Azari, Li ve Tsai (2006) tarafından varyans-kovaryans modellerindeki korelasyon problemlerinin ele alınması amacıyla ***düzeltilmiş AIC (the corrected AIC, AICc)***, $AICc = -2l(\hat{\theta}_p|y) + 2a_n(p+1)$ olarak verilmiştir. Burada $a_n = n/(n-p-2)$ dir.

Vaida ve Blanchard (2005), AIC yi BLUP a dayalı olarak yeniden tanımlamışlardır ve ***koşullu AIC (conditional AIC, cAIC)*** olarak $cAIC = -2l(\hat{\theta}_p|\hat{u}) + 2(\rho(\hat{\tau})+1)$ biçiminde elde etmişlerdir. Burada $2(\rho(\hat{\tau})+1)$ terimi, Hodges ve Sargent (2001) tarafından lineer karma modeller için önerilen serbestlik derecesi ile ilgilidir ve $\rho(\hat{\tau})$, $\hat{\tau}$ varyans parametrelerinin tahmin edilen vektörü verilmişken β ile u nun tahminleri için serbestlik derecesini göstermektedir.

Lineer karma modellerde varyans bileşenlerinin daha doğru tahminlerinin elde edilebilmesi amacıyla Vaida ve Blanchard (2005) $cAIC$ yi, τ nin REML tahmin edicisi olan τ_R yi ve dolayısıyla $\hat{\beta}_R = \hat{\beta}(\tau_R)$ ile $\hat{u}_R = \hat{u}(\tau_R)$ yi kullanarak, $cAIC_R = -2l(\hat{\theta}_{pR}|\hat{u}_R) + 2(\rho(\hat{\tau}_R)+1)$ şeklinde yeniden tanımlamışlardır.

p nin küçük değerleri için AIC ye alternatif olarak geliştirilen bir diğer bilgi kriteri $BIC = -2l(\hat{\theta}_p) + log(n)\,p$ biçiminde olup, BIC ile ilgili lineer karma modellerde yapılan çalışmalar mevcuttur. Lineer karma modellerde en yaygın kullanılan BIC, ***marjinal BIC (marginal BIC, mBIC)*** olup $mBIC = -2l(\hat{\theta}_p) + log(n)(p + q)$ şeklinde elde edilmiştir ve R programında yer alan ***lme*** fonksiyonu varsayılan BIC olarak mBIC yi kullanmaktadır (Wenren, 2014).

Lineer karma modeller için Matlab R2014a programında yer alan ***fitlme*** fonksiyonu varsayılan BIC olarak $mtlbBIC = -2l(\hat{\theta}_p) + In(n)(p + q + 1)$ formülünü kullanmaktadır (Stram ve Lee, 1994; Hox, 2002).

Çizelge 3.1. Lineer karma modellerde kullanılan bilgi kriterleri (Wenren, 2014)

Notasyon	Formül	Not
AIC	$-2l(\hat{\theta}_p) + 2p$	Akaike bilgi kriteri
$mAIC$	$-2l(\hat{\theta}_p) + 2(p + q)$	Marjinal AIC (R programında yer alan *lme* fonksiyonu)
$mAIC_2$	$-2l(\hat{\theta}_p) + 2(n/(n - p - q - 1))(p + q)$	Sınırlı sayıda örneklem için marjinal AIC
$mtlbAIC$	$-2l(\hat{\theta}_p) + 2(p + q + 1)$	Matlab R2014a programında yer alan *fitlme* fonksiyonu
AIC_{b1}	$-2l(\hat{\theta}_p \mid y) + \frac{1}{W}\sum_{i=1}^{W} -2log\frac{l(\hat{\theta}^*(i)\mid y)}{l(\hat{\theta}^*(i)\mid y^*(i))}$	Bootstrap AIC
AIC_{b2}	$-2l(\hat{\theta}_p \mid y) + 2\left\{\frac{1}{W}\sum_{i=1}^{W} -2\frac{l(\hat{\theta}^*(i)\mid y)}{l(\hat{\theta}\mid y)}\right\}$	Bootstrap AIC 2
AIC_C	$-2l(\hat{\theta}_p \mid y) + 2(n/(n - p - 2))(p + 1)$	Düzeltilmiş AIC
$cAIC$	$-2l(\hat{\theta}_p \mid \hat{u}) + 2(\rho(\hat{\tau}) + 1)$	Koşullu AIC
$cAIC_R$	$-2l(\hat{\theta}_{pR} \mid \hat{u}_R) + 2(\rho(\hat{\tau}_R) + 1)$	REML altında koşullu AIC
BIC	$-2l(\hat{\theta}_p) + log(n)\,p$	Bayesian bilgi kriteri
$mBIC$	$-2l(\hat{\theta}_p) + log(n)(p + q)$	Marjinal BIC (R programında yer alan *lme* fonksiyonu)
$mtlbBIC$	$-2l(\hat{\theta}_p) + In(n)(p + q + 1)$	Matlab R2014a programında yer alan *fitlme* fonksiyonu

Lineer karma modellerde uygun varyans-kovaryans modelinin belirlenebilmesi amacıyla yukarıda verilen bilgi kriterleri Çizelge 3.1 yardımıyla özetlenebilir.

Küçük bilgi kriterleri değerlerine sahip olan varyans-kovaryans modelleri tercih edilmektedir. Böylece, lineer karma modellerde tekrarlı ölçüm olması durumunda ortaya çıkan ilişkili veride uygun varyans-kovaryans modelinin seçimi aşaması tamamlanmış olur.

3.4. Uygulama: Ortodontik Büyüyen Veri

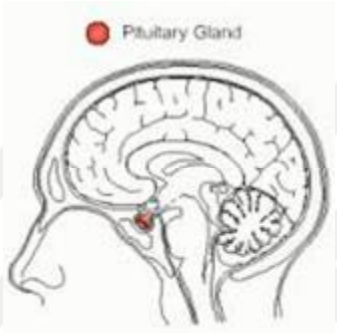
Ortodonti, çapraşık dişlerin düzeltilmesini ve çene kemiği ile dişlerin doğru yerde ve doğru konumda yerleşmesini sağlayan diş hekimliğinin bir uzmanlık dalıdır. Erken dönemde olası bir anomalinin önlemesine, ilerleyen dönemlerde ise oluşmuş olan anomalilerin düzeltilmesine yönelik "ortodontik" tedaviler uygulanmaktadır. Erken yaşta başlanılan ortodontik tedavi, küçük çocuklarda çene gelişimine yardım ederek dişlerin doğru pozisyonlarda olmalarına yardımcı olur. Yetişkinlerde ise var olan çapraşıklık ve kapanış bozukluklarının düzeltilmesini sağlar.

Potthoff ve Roy (1964), North Carolina Diş Okulu Üniversitesinin Ortodonti Bölümünde yapılan bir çalışmadan Çizelge 3.2 ile verilen veriyi elde etmişlerdir. Bu veri kümesi, 27 çocuğun (16 sı erkek (Male, M), 11 i kız (Female, F)) 8, 10, 12 ve 14 yaşlarındaki hipofiz bezleri (pituitary gland) ile pterygomaxillary basınçları (pterygomaxillary fissure) arasındaki uzaklık ölçüm değerlerinden oluşmaktadır.

Çizelge 3.2. Ortodontik büyüyen veri (Potthoff ve Roy, 1964)

Çocuk	Yaş=8	Yaş=10	Yaş=12	Yaş=14
M01	26	25	29	31
M02	21.5	22.5	23	26.5
M03	23	22.5	24	27.5
M04	25.5	27.5	26.5	27
M05	20	23.5	22.5	26
M06	24.5	25.5	27	28.5
M07	22	22	24.5	26.5
M08	24	21.5	24.5	25.5
M09	23	20.5	31	26
M10	27.5	28	31	31.5
M11	23	23	23.5	25
M12	21.5	23.5	24	28
M13	17	24.5	26	29.5
M14	22.5	25.5	25.5	26
M15	23	24.5	26	30
M16	22	21.5	23.5	25
F01	21	20	21.5	23
F02	21	21.5	24	25.5
F03	20.5	24	24.5	26
F04	23.5	24.5	25	26.5
F05	21.5	23	22.5	23.5
F06	20	21	21	22.5
F07	21.5	22.5	23	25
F08	23	23	23.5	24
F09	20	21	22	21.5
F10	16.5	19	19	19.5
F11	24.5	25	28	28

Verilen uzaklık ölçüm değerleri, çocukların kafataslarının ortodontistler tarafından röntgen cihazlarından geçirilmesiyle elde edilmiştir ve hipofiz bezi ile pterygomaxillary basınç, röntgen cihazları yardımıyla en kolay görülebilen noktalarda bulunmaktadır. Hipofiz bezi ile pterygomaxillary basıncın kafatasında bulundukları yerler sırasıyla Şekil 3.1 ve Şekil 3.2 de gösterilmektedir.

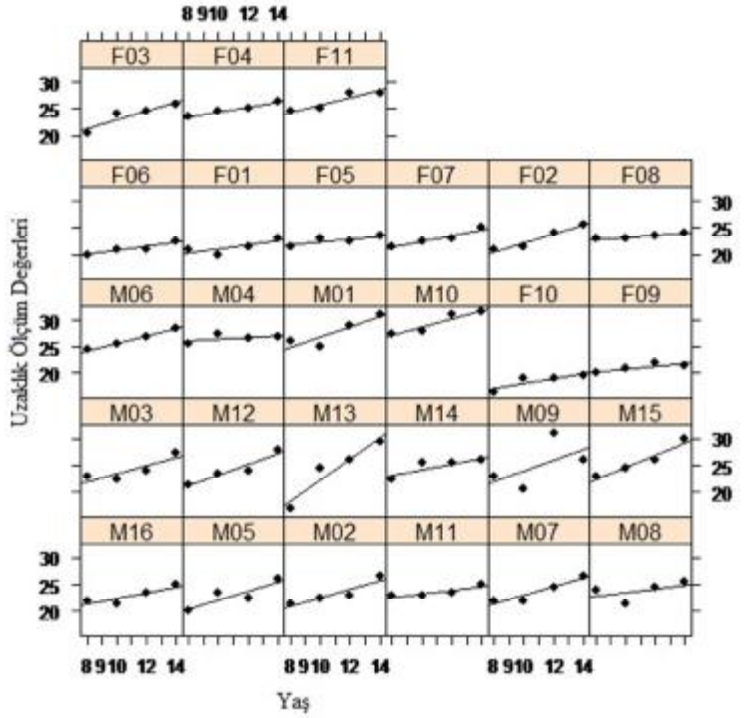


Şekil 3.1. Hipofiz bezi



Şekil 3.2. Pterygomaxillary basınç (I)

Çizelge 3.2 ile verilen ortodontik büyüyen verinin grafiksel gösterimi R programı yardımıyla Şekil 3.3 de verildiği gibi elde edilmiştir.



Şekil 3.3. Ortodontik büyüyen verinin grafiksel gösterimi

Çizelge 3.2 ve Şekil 3.3 incelendiğinde, verinin aynı deneğin (çocuğun) 8, 10, 12 ve 14 yaşlarındaki hipofiz bezi ile pterygomaxillary basınç arasındaki uzaklık ölçüm değerlerinden oluştuğu yani uzun süreli (4 tekrarlı ölçümlü) bir veri türü olduğu anlaşılmaktadır.

Bu çalışmanın amacı, yaş ve cinsiyetin hipofiz bezi ile pterygomaxillary basınç arasındaki uzaklık ölçüm değerlerini nasıl etkilediğini belirlemektir. Bu amaçla, Sheather (2009) tarafından j inci yaştaki $(j = 1,2,3,4)$ i inci denek $(i = 1, \dots, 27)$ için RI model

$$Uzaklık_{ij} = \beta_0 + \beta_1 Yaş_j + \beta_2 Cinsiyet + \beta_3 Cinsiyet \times Yaş_j + u_i + \varepsilon_{ij}^{Cinsiyet} \quad (3.20.)$$

olarak ifade edilmiştir. Burada $Uzaklık_{ij}$ uzaklık ölçüm değerlerini, $Yaş$ ve $Cinsiyet$ sabit etkileri, u_i rastgele etkileri ve $\varepsilon_{ij}^{Cinsiyet}$ hata terimini göstermektedir. $u_i \sim N(0, \sigma_u^2)$ ve $\varepsilon_{ij}^{Cinsiyet} \sim N\left(0, \sigma_{\varepsilon Cinsiyet}^2\right)$ şeklinde olup u_i ile $\varepsilon_{ij}^{Cinsiyet}$ birbirlerinden bağımsızdırlar.

$$y_{108\times 1} = [Uzaklık_1 \quad \dots \quad Uzaklık_{27}]'$$

$$= [Uzaklık_{1,1} \quad \dots \quad Uzaklık_{1,4} \dots \quad Uzaklık_{27,1} \quad \dots \quad Uzaklık_{27,4}]'$$

$$= [26.0 \quad \dots \quad 31.0 \quad \dots \quad 24.5 \quad \dots \quad 28.0]'$$

$$X_{108\times 4} = \begin{bmatrix} 1_{32} & w_{32} & 0_{32} & 0_{32} \\ 1_{32} & w_{32} & 0_{32} & 0_{32} \\ 1_{22} & w_{22} & 1_{22} & w_{22} \\ 1_{22} & w_{22} & 1_{22} & w_{22} \end{bmatrix}$$

$$Z_{108\times 27} = \begin{bmatrix} 0_{60} & 0_{16} & 0_4 & \cdots & 0_{52} \\ 1_4 & 1_4 & 1_4 & \ddots & 0_{52} \\ 0_{44} & 0_{88} & 0_{100} & \cdots & 1_4 \end{bmatrix}$$

olmak üzere, Eşitlik (3.20.) ile verilen lineer karma model matris gösterimi yardımıyla Eşitlik (2.1.) formunda ifade edilmektedir. Burada $k = 4, 22, 32$ olmak üzere 1_k, 1 lerden oluşan $k \times 1$ tipinde bir vektörü, $l = 4, 16, 32, 44, 52, 60, 88, 100$ olmak üzere 0_l, 0 lardan oluşan $l \times 1$ tipinde bir vektörü ve $\dot{m} = 22, 32$ olmak üzere $w_{\dot{m}}$, sırasıyla $8, 10, 12, 14$ değerlerinden oluşan $\dot{m} \times 1$ tipinde bir vektörü göstermektedir (Bkz. Ek 1).

$$\beta_{4\times 1} = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \end{bmatrix}, \; u_{27\times 1} = \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_{27} \end{bmatrix}, \; u \sim N(0, \sigma^2 G) \text{ ve } \varepsilon \sim N(0, \sigma^2 R) \text{ şeklindedir.}$$

Yaş ve cinsiyetin hipofiz bezi ile pterygomaxillary basınç arasındaki uzaklık ölçüm değerlerini nasıl etkilediğinin belirlenmesi amacıyla 2.2.2 alt bölümünde verilen REML yöntemi ile 2.2.4 alt bölümünde verilen iteratif yöntemlerin kullanılmasıyla ilk olarak varyans bileşenlerinin (G, R, H) daha sonra β ile u un tahminlerinin elde edilmesi ve elde edilen tahmin edicilerin kullanılmasıyla Eşitlik $(2.24.)$ ile verilen σ^2 nin tahmininin bulunması amaçlanmaktadır.

Pinherio ve Bates (2000), varyans bileşenlerinin tahmininde ***hibrid yaklaşımı*** önermişlerdir. Bu yaklaşım $\phi^{(0)}$ başlangıç değeri ile başlayıp, optimum değere yakınsamaya yardımcı birkaç EM iterasyonu ile devam edip, optimum değere yakınsamanın tamamlanması için EM iterasyonlarının NR iterasyonlarına bağlanmasıyla sonlanır.

R programında yer alan ***nlme*** paketi ile ***lme*** fonksiyonu hibrid yaklaşımını kullanmaktadır. R programında kodların ingilizce yazılması nedeniyle uzaklık yerine distance, denek yerine subject, yaş ve cinsiyet yerine sırasıyla age ve sex yazılmasıyla R kodu

```
lme(distance~age*Sex,data=Orthodont,random=~1|Subject,method="REML",weights=varIdent(form=~1|Sex))
```

olarak elde edilir. Bu kodda ***weights=varIdent(form=~1|Sex)*** argümanı $G = \sigma_u^2 \times I_{27}$ deki σ_u^2 ya ek olarak $R = \sigma^2_{\varepsilon Cinsiyet} \times I_{108}$ deki $\sigma^2_{\varepsilon Cinsiyet}$ i $\sigma^2_{\varepsilon Kız}$ ve $\sigma^2_{\varepsilon Erkek}$ olmak üzere ayrı ayrı tahmin eder. Varyans bileşenlerinin tahminleri $\tilde{\sigma}_u^2 = 3.414$, $\tilde{\sigma}^2_{\varepsilon Kız} = 0.610$ ve $\tilde{\sigma}^2_{\varepsilon Erkek} = 2.788$ ve dolayısıyla

$$\tilde{G}_{27\times 27} = \tilde{\sigma}_u^2 \times I_{27} = 3.414 \times I_{27}$$

$$\tilde{R}_{108\times108} = \tilde{\sigma}^2_{\varepsilon Cinsiyet} \times I_{108} = \begin{bmatrix} \tilde{\sigma}^2_{\varepsilon Erkek} \times I_{64} & 0_{44\times44} \\ 0_{44\times44} & \tilde{\sigma}^2_{\varepsilon Kız} \times I_{44} \end{bmatrix}$$
$$= \begin{bmatrix} 2.788 \times I_{64} & 0_{44\times44} \\ 0_{44\times44} & 0.610 \times I_{44} \end{bmatrix}$$

$$\tilde{H}_{108\times108} = Z\tilde{G}Z' + \tilde{R}$$

olarak elde edilir. Burada I_{64} ve I_{44} sırasıyla 64×64 ve 44×44 tipinde birim matrisleri ve $0_{44\times44}$, 44×44 tipinde 0 lardan oluşan matrisi göstermektedir.

Olabilecek yakınsama problemlerinin belirlenebilmesi amacıyla EM ve NR iterasyonları da incelenmek istenirse R programında *lme* fonksiyonuna sırasıyla *control=list(msVerbose=TRUE,niterEM=0)* ve *control=list(msVerbose=TRUE)* argümanlarının da eklenmesi gerekir.

Varyans bileşenleri tahmin edildikten sonra β, u ve σ^2 nin tahminleri

$$\tilde{\beta}_{4\times1} = \begin{bmatrix} 16.340 \\ 0.784 \\ 1.032 \\ -0.304 \end{bmatrix}, \tilde{u}_{27\times1} = \begin{bmatrix} -1.634 \\ \vdots \\ 3.567 \end{bmatrix}, \quad \tilde{\sigma}^2 = 1$$

şeklinde elde edilir.

$$\tilde{H}_{Erkek} = \begin{bmatrix} \tilde{\sigma}^2_{\varepsilon Erkek} + \tilde{\sigma}^2_u & \tilde{\sigma}^2_u & \tilde{\sigma}^2_u & \tilde{\sigma}^2_u \\ \tilde{\sigma}^2_u & \tilde{\sigma}^2_{\varepsilon Erkek} + \tilde{\sigma}^2_u & \tilde{\sigma}^2_u & \tilde{\sigma}^2_u \\ \tilde{\sigma}^2_u & \tilde{\sigma}^2_u & \tilde{\sigma}^2_{\varepsilon Erkek} + \tilde{\sigma}^2_u & \tilde{\sigma}^2_u \\ \tilde{\sigma}^2_u & \tilde{\sigma}^2_u & \tilde{\sigma}^2_u & \tilde{\sigma}^2_{\varepsilon Erkek} + \tilde{\sigma}^2_u \end{bmatrix}_{4\times4}$$

ve

$$\widetilde{H}_{Kız} = \begin{bmatrix} \tilde{\sigma}^2_{\varepsilon Kız} + \tilde{\sigma}^2_u & \tilde{\sigma}^2_u & \tilde{\sigma}^2_u & \tilde{\sigma}^2_u \\ \tilde{\sigma}^2_u & \tilde{\sigma}^2_{\varepsilon Kız} + \tilde{\sigma}^2_u & \tilde{\sigma}^2_u & \tilde{\sigma}^2_u \\ \tilde{\sigma}^2_u & \tilde{\sigma}^2_u & \tilde{\sigma}^2_{\varepsilon Kız} + \tilde{\sigma}^2_u & \tilde{\sigma}^2_u \\ \tilde{\sigma}^2_u & \tilde{\sigma}^2_u & \tilde{\sigma}^2_u & \tilde{\sigma}^2_{\varepsilon Kız} + \tilde{\sigma}^2_u \end{bmatrix}_{4\times 4}$$

olmak üzere,

$$Var(y) = \begin{bmatrix} \widetilde{H}_{Erkek} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \widetilde{H}_{Erkek} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \widetilde{H}_{Kız} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \widetilde{H}_{Kız} \end{bmatrix}_{108\times 108}$$

biçimindedir. Burada $\widetilde{H}_{Erkek}$ ve $\widetilde{H}_{Kız}$ varyans-kovaryans matrisleri, homojen varyans-kovaryans modellerinden Eşitlik (3.4.) ve Eşitlik (3.7.) ile verilen CS modeline, y nin varyans-kovaryans matrisi ise heterojen varyans-kovaryans modellerinden Eşitlik (3.12.) ile verilen UN(1) modeline karşılık gelmektedir.

Eşitlik (3.20.) ile verilen RI modele alternatif olarak, Sheather (2009) tarafından j inci yaştaki $(j = 1,2,3,4)$ i inci denek $(i = 1,\dots,27)$ için diğer bir RI model

$$Uzaklık_{ij} = \beta_0 + \beta_1 Yaş_j + \beta_2 Cinsiyet + \beta_3 Cinsiyet \times Yaş_j + u_i + \varepsilon_{ij} \quad (3.21.)$$

olarak ifade edilmiştir. Burada $Uzaklık_{ij}$ uzaklık ölçüm değerlerini, $Yaş$ ve $Cinsiyet$ sabit etkileri, u_i rastgele etkileri ve ε_{ij} hata terimini göstermektedir. $u_i \sim N(0, \sigma^2_u)$ ve $\varepsilon_{ij} \sim N(0, \sigma^2_\varepsilon)$ şeklinde olup u_i ile ε_{ij} birbirlerinden bağımsızdırlar.

$y_{108\times1}$ vektörü ile $X_{108\times4}$ ve $Z_{108\times27}$ matrisleri, Eşitlik (3.20.) ile verilen modelde elde edildiği gibidir.

R programında yer alan *nlme* paketi ile *lme* fonksiyonu kullanılmasıyla, R kodu

*lme(distance~age*Sex,data=Orthodont,random=~1|Subject,method="REML")*

olarak elde edilir. Varyans bileşenlerinin tahminleri $\tilde{\sigma}_u^2 = 3.298$, $\tilde{\sigma}_\varepsilon^2 = 1.922$ ve dolayısıyla

$$\tilde{G}_{27\times27} = \tilde{\sigma}_u^2 \times I_{27} = 3.298 \times I_{27}$$

$$\tilde{R}_{108\times108} = \tilde{\sigma}_\varepsilon^2 \times I_{108} = 1.922 \times I_{108}$$

$$\tilde{H}_{108\times108} = Z\tilde{G}Z' + \tilde{R}$$

olarak elde edilir.

Varyans bileşenleri tahmin edildikten sonra β, u ve σ^2 nin tahminleri

$$\tilde{\beta}_{4\times1} = \begin{bmatrix} 16.340 \\ 0.784 \\ 1.032 \\ -0.304 \end{bmatrix},\ \tilde{u}_{27\times1} = \begin{bmatrix} -1.718 \\ \vdots \\ 3.253 \end{bmatrix},\ \tilde{\sigma}^2 = 1$$

şeklinde elde edilir.

$$\tilde{H} = \begin{bmatrix} \tilde{\sigma}_\varepsilon^2 + \tilde{\sigma}_u^2 & \tilde{\sigma}_u^2 & \tilde{\sigma}_u^2 & \tilde{\sigma}_u^2 \\ \tilde{\sigma}_u^2 & \tilde{\sigma}_\varepsilon^2 + \tilde{\sigma}_u^2 & \tilde{\sigma}_u^2 & \tilde{\sigma}_u^2 \\ \tilde{\sigma}_u^2 & \tilde{\sigma}_u^2 & \tilde{\sigma}_\varepsilon^2 + \tilde{\sigma}_u^2 & \tilde{\sigma}_u^2 \\ \tilde{\sigma}_u^2 & \tilde{\sigma}_u^2 & \tilde{\sigma}_u^2 & \tilde{\sigma}_\varepsilon^2 + \tilde{\sigma}_u^2 \end{bmatrix}_{4\times4}$$

olmak üzere,

$$Var(y) = \begin{bmatrix} \tilde{H} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{H} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \tilde{H} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \tilde{H} \end{bmatrix}_{108\times 108}$$

biçimindedir. Burada $\tilde{H}$ varyans-kovaryans matrisi, homojen varyans-kovaryans modellerinden Eşitlik (3.4.) ve Eşitlik (3.7.) ile verilen CS modeline, y nin varyans-kovaryans matrisi ise homojen varyans-kovaryans modellerinden Eşitlik (3.6.) ile verilen VC modeline karşılık gelmektedir.

Eşitlik (3.20.) ve Eşitlik (3.21.) ile verilen modellerin karşılaştırılması amacıyla, Çizelge 3.3 incelendiğinde, hem $p < .0001$ olması hem de en küçük AIC ve BIC değerlerine sahip olması nedeniyle Eşitlik (3.20.) ile verilen RI modeli tercih edilmektedir.

Çizelge 3.3. Model (3.20.) ile model (3.21.) in karşılaştırılması

	Model	df	AIC	BIC	logLik	Test	L.Ratio	p-value
Model3.21.	1	6	445.75	461.62	-216.87			
Model3.20.	2	7	429.22	447.73	-207.61	1 vs 2	18.536	<.0001

Eşitlik (3.20.) ile verilen ve aynı zamanda Eşitlik (2.1.) formunda ifade edilebilen RI model altında, yaş ve cinsiyetin hipofiz bezi ile pterygomaxillary basınç arasındaki uzaklık ölçüm değerlerini nasıl etkilediğinin belirlenebilmesi amacıyla hipotez testinden yararlanılacaktır.

H_0: Yaş ve cinsiyetin hipofiz bezi ile pterygomaxillary basınç arasındaki uzaklık ölçüm değerleri üzerinde bir etkisi yoktur.

H_1: Kızların hipofiz bezi ile pterygomaxillary basınç arasındaki uzaklık ölçüm değerleri erkeklerin hipofiz bezi ile pterygomaxillary basınç arasındaki uzaklık ölçüm değerlerinden daha düşüktür.

şeklindeki tek yönlü hipotezi %95 lik güven aralığında test edilmek istensin.

Çizelge 3.4 incelendiğinde cinsiyet (kız) ve yaş arasındaki etkileşim terimine karşılık gelen sabit etki için p değeri 0.0057 olarak elde edilmiştir.

Çizelge 3.4. Yaş ve cinsiyetin hipofiz bezi ile pterygomaxillary basınç arasındaki uzaklık ölçüm değerleri üzerindeki etkisinin belirlenmesi

Fixed effects: distance ~ age * Sex

	Value	Std. Error	DF	t-value	p-value
(Intercept)	16.340625	1.1450945	79	14.270111	0.0000
age	0.784375	0.0933459	79	8.402883	0.0000
SexFemale	1.032102	1.4039842	25	0.735124	0.4691
age:SexFemale	-0.304830	0.1071828	79	-2.844016	0.0057

$p = 0.0057 < \alpha = 0.05$ olması nedeniyle H_0 hipotezi reddedilmektedir. Böylece, kızların hipofiz bezi ile pterygomaxillary basınç arasındaki uzaklık ölçüm değerlerinin erkeklerin hipofiz bezi ile pterygomaxillary basınç arasındaki uzaklık ölçüm değerlerinden önemli ölçüde daha düşük olduğu sonucuna varılmaktadır.

3.4.1. Ortodontik Büyüyen Verinin RIS Modeli ve Matlab R2014a Programı Yardımıyla Yeniden Modellenmesi

Sheather (2009) tarafından ifade edilen ve 3.4. üncü alt bölümde verilen RI modellerinden farklı olarak, bu çalışmada j inci yaştaki $(j = 1,2,3,4)$ i inci denek $(i = 1, \dots, 27)$ için RIS modeli

$$Uzaklık_{ij} = \beta_0 + \beta_1 Yaş_j + \beta_2 Cinsiyet + \beta_3 Cinsiyet \times Yaş_j + u_{i1} + u_{i2} Yaş_{ij} + \varepsilon_{ij} \quad (3.22.)$$

şeklinde tanımlanmıştır. Burada $Uzaklık_{ij}$ uzaklık ölçüm değerlerini, $Yaş$ ve $Cinsiyet$ sabit etkileri, $u_i = \begin{bmatrix} u_{i1} \\ u_{i2} \end{bmatrix}$ rastgele etkileri ve ε_{ij} hata terimini göstermektedir. u_i ve ε_{ij} nin karşılıklı olarak bağımsız ve normal dağılıma sahip olduğu varsayımı yapılır ve

$$u_{i1} \sim N\left(0, \sigma^2_{u_{i1}}\right),\ u_{i2} \sim N\left(0, \sigma^2_{u_{i2}}\right),\ \varepsilon_{ij} \sim N(0, \sigma^2_{\varepsilon}) \text{ ve } cov(u_{i1}, u_{i2}) = \sigma_{u_{i12}}$$

ile verilir.

Eşitlik (3.22.) ile verilen RIS modeli, Matlab R2014a programında yer alan *fitlme* fonksiyonunun REML yöntemini kullanılmasıyla, farklı $Var(u_i)$ yapıları altında incelenecektir.

Çizelge 3.5-3.8 (Bkz. Ek 2) ile verilen $Var(u_i)$ yapılarından hangisinin daha iyi olduğunun belirlenebilmesi amacıyla AIC ve BIC kriterlerinden yararlanılacaktır. Bu amaçla, Çizelge 3.5-3.8 (Bkz. Ek 2) in Çizelge 3.9 ile verilen özet tablosu incelenir.

Çizelge 3.9. $Var(u_i)$ yapıları için özet tablo

	REML	
$Var(u_i)$ yapıları	**AIC**	**BIC**
Full(UN)	448.58	469.79
Diagonal(UN(1))	**447.15**	465.66
Isotropic(VC)	448.64	**464.51**
CompSymm(CS)	450.07	468.59

Çizelge 3.9 incelendiğinde, 'Diagonal (UN(1))' ve 'Isotropic (VC)' yapılarının REML yöntemi altında en küçük AIC ve BIC değerlerine sahip

olmaları nedeniyle, Eşitlik (3.22.) ile verilen RIS modeli için tercih edilebilir oldukları sonucuna varılmaktadır.

3.5. Uygulama: Parkinson Hastalığı Verisi

Parkinson hastalığı, ilk kez İngiliz doktor James Parkinson tarafından 1817 yılında "titrek felç" olarak tanımlanmıştır. Beynimizde hareketlerimizi kontrol eden ve bundan sorumlu olan hücreler bulunur. Bu hücrelerden kimyasal maddeler salgılanır. Bunlardan birisi de dopamindir. Dopamin beyine gelen bilgileri bir sinir hücresinden diğerine aktarır. Böylece vücut dengesi sağlanmış olur. Fakat bu hücrelerin bir kısmı hasar gördüğünde ya da azaldığında dopamin salgılanamaz. İşte azalmış dopamin sonucu vücutta titreme, yavaş hareket etme gibi vücudun dengesinin bozulmasıyla ortaya çıkan hastalığa *"Parkinson hastalığı"* denilmektedir.

Parkinson, yavaş ve sinsi seyreden bir hastalıktır. Hastalık on yıl gibi bir süre boyunca sürekli ilerler. Başlangıcında tek taraflı belirtiler görülürken daha sonra bu bütün vücuda yayılır. Genelde ilk belirti elde veya bir vücut yarımında titremedir. Hastanın daha önceki yılları incelendiğinde öne eğik durma ya da yürürken kolunu sallamama görülebilir. Temel olarak hastada titreme görülür. Parkinson hastalarının çoğunda bu vardır. İstirahat halinde bile titreme devam eder. Tabi ki her titreme parkinson belirtisi değildir. Günlük aktivite sırasında, heyecan, sinir gibi durumlarda titreme olur. Bu durum normaldir.

Bir diğer belirti, hareketlerde yavaşlama olmasıdır. Hasta günlük işlerini yaparken zorlanır. Yemek yerken, bir tarafa dönerken, yavaşlama söz konusudur ve bunlar güçlükle yapılır. Bunun yanında konuşma bozukluğu, donuk yüz ifadesi, yazma bozukluğu, terleme gibi sorunlar da görülür. Belirtilerin şiddeti her hastada farklıdır. Hastalık genelde 40 yaşından sonra görülür ve erkeklerde görülme sıklığı biraz daha fazladır.

Parkinson hastalığının tedavisinin amacı hastanın aktif, bağımsız, kendi başına işini yapabilen hale gelmesini sağlamaktır. Parkinson hastalığında kullanılan sınırlı sayıda ilaç çeşidi vardır. Bu ilaçlar ya eksik dopamini sağlar, ya onun gibi etki yapar ya da dopaminin parçalanmasını engelleyerek kullanımını arttırır. İlaç tedavisiyle kas sertliği, titreme, hareketlerdeki yavaşlığın düzelme ihtimali yüksektir. Tamamen düzelmese de azalmasını sağlayacaktır. Bunun yanında konuşma bozukluğu, donuk yüz ifadesi, yazma bozukluğu, terleme gibi sorunlar da düzelebilir.

Parkinson hastalığının tedavisinde kullanılan Bromocriptine ilacına alternatif olarak yeni geliştirilen Ropinirole ilacının, Parkinson hastalığının tedavisine olan katkısının belirlenebilmesi amacıyla Korczyn ve ark. (1999) tarafından 3 yıl boyunca devam eden bir çalışma yapılmıştır.

Bu çalışmada, rastgele seçilen 167 hastaya Bromocriptine ilacı ve yine rastgele seçilen 168 hastaya da Ropinirole ilacı verilmiştir. Verilen ilaçlar doğrultusunda, hastanın günlük hareket etme yeteneği yanıt değişken olarak alınmış ve günlük yapılan aktivitelerin (activites of daily living, ADL) skorları 4, 12, 24, 48, 72, 96, 120, 140 ve devam eden haftalar boyunca kaydedilmiştir.

Bamia ve ark. (2013), Korczyn ve ark. (1999) nın Parkinson hastalığında kullanılan ilaç tedavisi üzerine yaptıkları çalışmadan yararlanarak, Parkinson hastalığının tedavisinde kullanılan Bromocriptine ile yeni geliştirilen Ropinirole ilaçlarını, REMLRT kriteri altında Eşitlik (3.3.) ve Eşitlik (3.5.) ile verilen RI ve RIS modellerini ve Stata istatistiksel paket programını kullanarak, karşılaştırmışlardır.

3.6. Uygulama: Büyüyen Fare Tümörü Verisi

Farmakokinetik, farmakoloji (ecza) biliminin ilaçların vücuda emilimi (absorbsiyon), dağılımı (distribüsyon), dönüşümü (biyotransformasyon) ve atılması

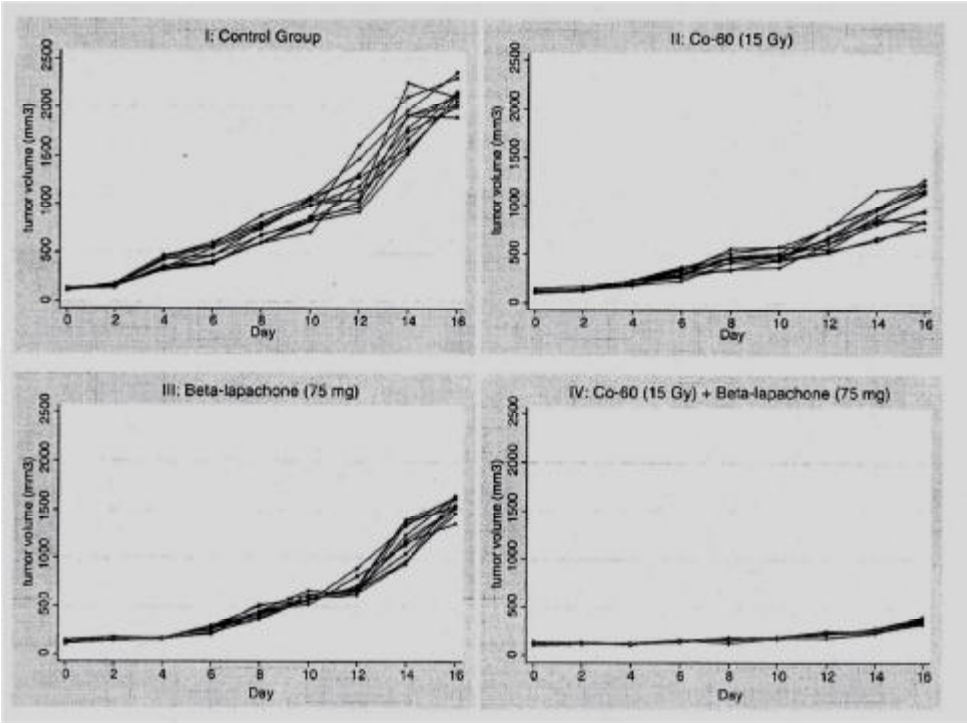
(eliminasyon) gibi süreçlerini matematiksel modeller kurarak inceleyen bir alt dalıdır.

Emilim (absorbsiyon), ilacın uygulama yerinden kan veya lenf dolaşımına geçmesidir. İlaç emilimini değiştiren bazı etkenler vardır. Bunlar, ilaç molekülüne ait olabileceği gibi (örneğin molekül büyüklüğü, ilacın yağda çözünürlüğü, iyonize olup olmadığı) ilaç uygulanan bireye ait de olabilir (örneğin ilacın uygulandığı dokunun emilimi sağlayacak yüzey alanının büyüklüğü, oradan geçen kan miktarı, kan akımını yavaşlatan bazı hastalıkların olup olmaması).

Dağılım (distribüsyon), ilacın uygulandığı yerden emildikten sonra, önce kan dolaşımına ardından da vücuda dağılması olayıdır. İlaçlar, kanda albümin gibi büyük proteinlere bağlanarak taşınır. Bu bağlanma % olarak ifade edilir ve albümine bağlı olan ilaç kısmı damardan dışarı çıkamaz (ne dokuya geçip etki gösterir, ne de yıkım veya atılım organına geçer). Bu nedenle, proteine yüksek oranda bağlanan ilaçların etki süresi uzundur.

Dönüşüm (biyotransformasyon), ilacın karaciğer veya diğer dokular tarafından kimyasal olarak başka maddelere (metabolit) dönüştürülmesidir. Vücuda giren çeşitli kimyasal maddeleri etkisizleştirmek için "karaciğer oksidaz enzim sistemi" bu olaydan sorumludur. Vücuttaki diğer enzimlerden farklı olarak mikrozomal enzimler daha önce hiç karşılaşılmamış olan bir maddeyi (örneğin bir ilacı) tanıyıp onu etkisizleştirmek için molekülü parçalamak ve/veya bir başka molekül eklemek suretiyle başka maddelere dönüştürür.

Atılım (eliminasyon), ilacın ve/veya metabolitinin idrar, safra, solunum havası gibi yollar aracılığıyla vücuttan atılmasıdır. Bu işlev, başlıca böbrekten atılım ile gerçekleştirilir. İdrar oluşumunun hızı, miktarı, ilacın proteinlere bağlanma oranı, idrar pH sı gibi etkenler ilacın veya metabolitinin atılım hızı ve miktarını belirler.



Şekil 3.4. 12 şerli dişi farelere 4 farklı ışın tedavi yönteminin uygulanması sonucunda günlere (days) karşılık tümör hacimlerinin (tumour volume) grafiği (Fu ve ark., 2015)

Büyüyen fare tümörü verisi, farelerde büyüyen tümör hücrelerinin tedavi edilmesinde kullanılan farklı tedavi yöntemlerinin karşılaştırılması amacıyla toplanmış bir veridir (Fu ve ark., 2015). Toplamda 48 dişi fare bulunmaktadır ve bu 48 dişi fare, rastgele seçilen 12 şerli dişi fareler olarak 4 gruba ayrılmaktadır. Büyüyen tümör hücrelerinin yaklaşık olarak 120-150 mm3 e ulaşması istenmektedir ve bu amaçla, her bir gruba farklı ışın tedavi yöntemleri uygulanmaktadır. Birinci grup *kontrol grubu (control group)*, ikinci grup *Co-60 (15 Gy) grubu*, üçüncü grup *Beta-lapachone (75 mg) grubu* ve dördüncü grup *Co-60 (15 Gy)+Beta-lapachone (75 mg) grubu*dur. Bu 4 grup, Farmakokinetik

yardımıyla modellenmiştir ve tümör hücrelerinin hacimleri 0, 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14 ve 16 günleri boyunca ölçülmüştür (Şekil 3.4).

Fu ve ark. (2015), farelerde büyüyen tümör hücrelerinin tedavi edilmesinde kullanılan farklı ışın tedavi yöntemlerini, REMLRT ile AIC kriterleri altında Eşitlik (3.3.) ve Eşitlik (3.5.) ile verilen RI ve RIS modellerini (sırasıyla Eşitlik (3.6.), Eşitlik (3.7.), Eşitlik (3.10.), Eşitlik (3.12.) ve Eşitlik (3.15.) ile verilen VC, CS, AR(1), UN(1) ve ARH(1) yapılarıyla beraber) ve Stata ile MLwiN istatistiksel paket programlarını kullanarak, karşılaştırmışlardır.

4. MİXED VE STOKASTİK KISITLI RİDGE TAHMİN VE ÖN TAHMİN EDİCİLER

İkinci bölümde Eşitlik (2.1.) ile verilen lineer karma model altında varyans bileşenleri γ, ρ, σ^2 nin bilindiği varsayımı ile sırasıyla BLUE ve BLUP

$$\hat{\beta} = (X'H^{-1}X)^{-1}X'H^{-1}y \qquad (4.1.)$$

$$\hat{u} = GZ'H^{-1}(y - X\hat{\beta}) \qquad (4.2.)$$

olarak adlandırılan tahmin ediciler elde edilmiştir (Henderson, 1950; Henderson ve ark., 1959). Varyans bileşenleri bilinmiyorsa, varyans bileşenlerinin tahmin edilmesinde kullanılan ML, REML ve iteratif yöntemlerden yararlanılmaktadır (Searle ve ark., 1992).

Genel olarak, sabit etkilere ilişkin tasarım matrisinin değişkenlerinin bağımsız olduğu varsayımı yapılır. Fakat, uygulamada, sabit etkilere ilişkin tasarım matrisinin değişkenleri arasında güçlü veya güçlüye yakın lineer bağımlılıklar ile karşılaşılabilir. Bu durumda, çoklu iç ilişki problemi ortaya çıkmaktadır. Çoklu iç ilişki probleminin ortaya çıkması bazı istenmeyen sonuçlar doğurabilir. Örneğin, $X'H^{-1}X$ matrisinde meydana gelen küçük değişimler $(X'H^{-1}X)^{-1}$ matrisinde büyük değişimlere neden olabilir. Dahası, $Var(\hat{\beta}) = \sigma^2(X'H^{-1}X)^{-1}$ olması nedeniyle, $\hat{\beta}$ nın bazı elemanlarının varyanslarında artışlar gözlemlenebilir. Böylece $\hat{\beta}$, gerçek değerinden uzaklaşabilir ve Eşitlik (4.1.) ve (4.2.) ile verilen tahmin ediciler güvenilirliklerini kaybedebilirler. Tüm bu çoklu iç ilişki problemlerinin ortadan kaldırılması amacıyla alternatif tahmin ediciler önerilmiştir.

Lineer regresyon modellerinde Hoerl ve Kennard (1970) tarafından önerilen ridge tahmin edicinin lineer karma modellerdeki benzeri Liu ve Hu (2013) tarafından önerilmiştir. Lineer karma modellerde varyans bileşenlerinin bilindiği

varsayımı altında verilen alternatif tahmin edicilerden biri, ridge yönteminin kullanılması sonucunda elde edilen ve sırasıyla ***ridge tahmin edici (ridge estimator)*** ve ***ridge ön tahmin edici (ridge predictor)***

$$\hat{\beta}(k) = \left(X'H^{-1}X + kI_p\right)^{-1}X'H^{-1}y \qquad (4.3.)$$

$$\hat{u}(k) = GZ'H^{-1}(y - X\hat{\beta}(k)) \qquad (4.4.)$$

olarak tanımlanan tahmin edicilerdir. Burada pozitif k sabiti, ridge parametresi olarak adlandırılır. Liu ve Hu (2013) dan farklı olarak, Eliot (2011) ve Eliot ve ark. (2011) iteratif yöntemlerden biri olan EM algoritmasından yararlanarak, Özkale ve Can (2017) ise Henderson nın lineer karma model eşitliklerini kullanarak Eşitlik (4.3.) ve (4.4.) ile verilen ridge tahmin ve ön tahmin edicileri elde etmişlerdir.

Bu bölümde, Gilmour ve ark. (1995) nın yaklaşımı yardımıyla varyans bileşenlerinin bilindiği varsayımı altında önerilecek olan diğer alternatif tahmin ediciler, mixed ve stokastik kısıtlı ridge yöntemlerinin kullanılması sonucunda elde edilen ve sırasıyla ***mixed tahmin edici (mixed estimator)*** ve ***mixed ön tahmin edici (mixed predictor)*** ile ***stokastik kısıtlı ridge tahmin edici (stochastic restricted ridge estimator)*** ve ***stokastik kısıtlı ridge ön tahmin edici (stochastic restricted ridge predictor)*** olarak adlandırılan tahmin edicilerdir. Aynı zamanda, varyans bileşenlerinin bilinmediği varsayımı da incelenecek ve varyans bileşenlerinin tahmininde ML, REML ve iteratif yöntemlerden faydalanılacaktır.

4.1. Mixed Yöntemi

Çoklu iç ilişki problemlerinin ortadan kaldırılması amacıyla önerilen mixed yöntemi, ön bilginin toplanmasına veya kullanılmasına bağlıdır. Ön bilginin stokastik lineer kısıt formunda olması, Eşitlik (4.1.) ve (4.2.) ile verilen tahmin

edicilerden daha güvenilir ve iyi tahmin edicilerin elde edilmesine olanak sağlar. Bu amaçla, stokastik lineer kısıt

$$r = \mathcal{R}\beta + \varphi \qquad (4.5.)$$

olarak tanımlansın. Burada, r $m \times 1$ tipinde bilinen bir rastgele vektör, $\mathcal{R}$ $m \times p$ tipinde $rank\, m \leq p$ olan bilinen bir ön bilgi matrisi ve φ, $E(\varphi) = 0$ $Var(\varphi) = \sigma^2 V(v)$ ile normal dağılıma sahip olan ε dan bağımsız bir rastgele vektördür. Burada $V = V(v)$ şeklinde olup, v $v \times 1$ tipinde φ ye karşılık gelen varyans bileşenlerinin vektörünü göstermektedir.

Eşitlik (2.1.) in Eşitlik (4.5.) ile verilen stokastik lineer kısıt altında tahmin edilebilmesi amacıyla, Theil ve Goldberger (1961) in mixed yönteminden yararlanılarak, Eşitlik (2.1.) ile Eşitlik (4.5.)

$$\begin{bmatrix} y \\ r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X \\ \mathcal{R} \end{bmatrix}\beta + \begin{bmatrix} Z \\ 0 \end{bmatrix}u + \begin{bmatrix} \varepsilon \\ \varphi \end{bmatrix} \qquad (4.6.)$$

veya

$$y_* = X_*\beta + Z_*u + \varepsilon_* \qquad (4.7.)$$

biçiminde birleştirilir. Burada $y_* = \begin{bmatrix} y \\ r \end{bmatrix}$, $X_* = \begin{bmatrix} X \\ \mathcal{R} \end{bmatrix}$, $Z_* = \begin{bmatrix} Z \\ 0 \end{bmatrix}$ ve $\varepsilon_* = \begin{bmatrix} \varepsilon \\ \varphi \end{bmatrix}$ şeklindedir.

Eşitlik (4.6.) veya Eşitlik (4.7.) ile verilen model oluşturulduktan sonra, u ile y_* ın ortak dağılımı

$$\begin{bmatrix} u \\ y_* \end{bmatrix} \sim N\left(\begin{bmatrix} 0 \\ X_*\beta \end{bmatrix}, \sigma^2 \begin{bmatrix} G & GZ_*' \\ Z_*G & S \end{bmatrix}\right) \qquad (4.8.)$$

olarak elde edilir ve burada, $S = \begin{bmatrix} H & 0 \\ 0 & V \end{bmatrix}$ biçimindedir. Böylece, varyans bileşenlerinin bilindiği varsayımı altında $y_* \sim N(X_*\beta, \sigma^2 S)$ olur. Eşitlik (4.8.) den u nun marjinal dağılımı $u \sim N(0, \sigma^2 G)$ ve u verilmişken y_* ın koşullu dağılımı (Searle, 1971, Bölüm 2.4f), $T = \begin{bmatrix} R & 0 \\ 0 & V \end{bmatrix}$ olmak üzere, $y_*|u \sim N(X_*\beta + Z_*u, \sigma^2 T)$ şeklinde elde edilir.

(y_*, u) un ortak log-likelihood dağılım fonksiyonu

$$\begin{aligned} logf(y_*, u) &= logf(y_*|u) + logf(u) \\ &= -\frac{1}{2}\{(n+m)log(2\pi) + (n+m)log\sigma^2 + log|T| \\ &+ (y_* - X_*\beta - Z_*u)'T^{-1}(y_* - X_*\beta - Z_*u)/\sigma^2\} \\ &-\frac{1}{2}\{qlog(2\pi) + qlog\sigma^2 + log|G| + u'G^{-1}u/\sigma^2\} \\ &= -\frac{1}{2}\{(n+m+q)log(2\pi) + (n+m+q)log\sigma^2 + log|T| \\ &+ log|G| + (y_* - X_*\beta)'T^{-1}(y_* - X_*\beta)/\sigma^2\} \\ &-\frac{1}{2\sigma^2}\{u'(Z_*T^{-1}Z_*' + G^{-1})u - 2(y_* - X_*\beta)'T^{-1}Z_*u\} \end{aligned} \qquad (4.9.)$$

biçiminde elde edilir. Eşitlik (4.9.) un önce β ya sonra u ya göre kısmi türevlerinin alınıp, sıfıra eşitlenmesi ve β ile u yerine sırasıyla mixed tahmin edicinin ve mixed ön tahmin edicinin çözümlerine karşılık gelen $\hat{\beta}_{me}$ ile $\hat{u}_{mp}$ nin yazılması sonucunda

$$X_*'T^{-1}(y_* - X_*\hat{\beta}_{me}) - X_*'T^{-1}Z_*\hat{u}_{mp} = 0 \qquad (4.10.)$$

$$Z_*'T^{-1}(y_* - X_*\hat{\beta}_{me}) - (Z_*'T^{-1}Z_* + G^{-1})\hat{u}_{mp} = 0 \qquad (4.11.)$$

olarak ifade edilen eşitlikler bulunur.

Henderson (1950) ve Henderson ve ark. (1959) incelendiğinde, Eşitlik (4.10.) ve Eşitlik (4.11.) in Henderson ın lineer karma model eşitliklerine benzediği yorumu yapılabilir. Fakat aralarında ufak bir farklılık bulunmaktadır. Bu farklılık, Eşitlik (4.10.) ve (4.11.) in $\hat{\beta}_{me}$ ile $\hat{u}_{mp}$ ye, Henderson ın lineer karma model eşitliklerinin ise Eşitlik (4.1.) ve (4.2.) ile verilen $\hat{\beta}$ ile $\hat{u}$ ya uygulanması şeklinde açıklanabilir.

Eşitlik (4.10.) ve Eşitlik (4.11.) matris formunda

$$\begin{bmatrix} X_*'T^{-1}X_* & X_*'T^{-1}Z_* \\ Z_*'T^{-1}X_* & Z_*'T^{-1}Z_* + G^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\beta}_{me} \\ \hat{u}_{mp} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X_*'T^{-1}y_* \\ Z_*'T^{-1}y_* \end{bmatrix} \qquad (4.12.)$$

biçiminde yazılabilir. Gilmour ve ark. (1995) nın yaklaşımı yardımıyla, Eşitlik (4.12.)

$$C\widehat{\Psi} = \omega'T^{-1}y_* \qquad (4.13.)$$

olarak da yazılabilir. Burada $\omega = [X_*, Z_*]$, $\widehat{\Psi} = (\hat{\beta}'_{me}, \hat{u}'_{mp})'$ve

$$G^* = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & G \end{bmatrix} \text{ ve } G^{*+} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & G^{-1} \end{bmatrix}$$

olmak üzere,

$$C = \omega'T^{-1}\omega + G^{*+}$$

şeklinde olup, "+" Moore-Penrose tersi göstermektedir. Eşitlik (4.13.) ün çözülmesi sonucunda

$$\widehat{\Psi} = C^{-1}\omega' T^{-1} y_* \qquad (4.14.)$$

elde edilir. Burada C^{-1}, $\nabla = (Z_*' T^{-1} Z_* + G^{-1})^{-1}$ olmak üzere,

$$\begin{bmatrix} (X_*' S^{-1} X_*)^{-1} & -(X_*' S^{-1} X_*)^{-1} X_*' S^{-1} Z_* G \\ -G Z_*' S^{-1} X_* (X_*' S^{-1} X_*)^{-1} & \nabla + G Z_*' S^{-1} X_* (X_*' S^{-1} X_*)^{-1} X_*' S^{-1} Z_* G \end{bmatrix}$$

şeklinde olup, parçalanmış matris ters formülü (Marsaglia ve Styan, 1974a, b) yardımıyla bulunabilir. C^{-1}, y_*, X_*, Z_*, T ve S nin Eşitlik (4.14.) de yerine yazılmasından ve bazı matematiksel işlemlerin yapılmasından sonra sırasıyla *mixed tahmin edici (mixed estimator)* ve *mixed ön tahmin edici (mixed predictor)*

$$\begin{aligned} \hat{\beta}_{me} &= (X_*' S^{-1} X_*)^{-1} X_*' S^{-1} y_* \\ &= (X' H^{-1} X + \mathcal{R}' V^{-1} \mathcal{R})^{-1} (X' H^{-1} y + \mathcal{R}' V^{-1} r) \end{aligned} \qquad (4.15.)$$

$$\hat{u}_{mp} = G Z' H^{-1} \left(y - X \hat{\beta}_{me}\right) \qquad (4.16.)$$

olarak adlandırılan tahmin ediciler elde edilirler (Kuran ve Özkale, 2016).

Sherman-Morrison-Woodbury Teoremi (Marsaglia ve Styan, 1974a, b) yardımıyla

$$\begin{aligned} (X' H^{-1} X + \mathcal{R}' V^{-1} \mathcal{R})^{-1} &= (X' H^{-1} X)^{-1} - (X' H^{-1} X)^{-1} \mathcal{R}' \\ &\quad \times (V + \mathcal{R}(X' H^{-1} X)^{-1} \mathcal{R}')^{-1} \mathcal{R} (X' H^{-1} X)^{-1} \end{aligned} \qquad (4.17.)$$

biçiminde yazılabilir.

Eşitlik (4.17.) nin kullanılmasıyla Eşitlik (4.15.)

$$\hat{\beta}_{me} = \hat{\beta} + (X' H^{-1} X)^{-1} \mathcal{R}' (V + \mathcal{R}(X' H^{-1} X)^{-1} \mathcal{R}')^{-1} \left(r - \mathcal{R}\hat{\beta}\right)$$

şeklinde de yazılabilir (Kuran ve Özkale, 2016). Burada $\hat{\beta}$, Eşitlik (4.1.) ile verilen BLUE yu göstermektedir.

4.2. Stokastik Kısıtlı Ridge Yöntemi

Eşitlik (4.6.) veya Eşitlik (4.7.) ile verilen modelde çoklu iç ilişki problemleri varsa veya tanımlanan stokastik lineer kısıt, çoklu iç ilişki problemlerini gidermede yeterince iyi sonuçlara sahip değilse $\hat{\beta}_{me}$ nin boyu beklenenden daha uzun olur. Böylece, Eşitlik (4.15.) ve (4.16.) ile verilen tahmin edicilerden daha güvenilir tahmin edicilerin araştırılması gerekir. Bu durumda, Özkale (2009) dan yararlanılarak, mixed tahmin ve ön tahmin edicilere alternatif olarak stokastik kısıtlı ridge tahmin ve ön tahmin ediciler elde edileceklerdir.

(y_*, u) un ortak log-likelihood dağılım fonksiyonu

$$\begin{aligned} logf(y_*,u) &= logf(y_*|u) + logf(u) \\ &= -\frac{1}{2}\ \{(n+m)log(2\pi) + (n+m)log\sigma^2 + log|T| \\ &+ (y_* - X_*\beta - Z_*u)'T^{-1}(y_* - X_*\beta - Z_*u)/\sigma^2 + \hbar(\beta'\beta - c)\} \\ &- \frac{1}{2}\{qlog(2\pi) + qlog\sigma^2 + log|G| + u'G^{-1}u/\sigma^2\} \\ &= -\frac{1}{2}\{(n+m+q)log(2\pi) + (n+m+q)log\sigma^2 + log|T| \\ &+ log|G| + (y_* - X_*\beta)'T^{-1}(y_* - X_*\beta)/\sigma^2 + \hbar(\beta'\beta - c)\} \\ &- \frac{1}{2\sigma^2}\{u'(Z_*T^{-1}Z_*' + G^{-1})u - 2(y_* - X_*\beta)'T^{-1}Z_*u\} \end{aligned} \qquad (4.18.)$$

biçiminde elde edilir. Burada c, bir sabiti göstermektedir.

Eşitlik (4.18.) in önce β ya sonra u ya göre kısmi türevlerinin alınıp, sıfıra eşitlenmesi ve β ile u yerine sırasıyla stokastik kısıtlı ridge tahmin edicinin ve

stokastik kısıtlı ridge ön tahmin edicinin çözümlerine karşılık gelen $\hat{\beta}_{me}(k)$ ile $\hat{u}_{mp}(k)$ nın yazılması sonucunda

$$X_*'T^{-1}\left(y_* - X_*\hat{\beta}_{me}(k)\right) - X_*'T^{-1}Z_*\hat{u}_{mp}(k) = 0 \qquad (4.19.)$$

$$Z_*'T^{-1}\left(y_* - X_*\hat{\beta}_{me}(k)\right) - (Z_*'T^{-1}Z_* + G^{-1})\hat{u}_{mp}(k) = 0 \qquad (4.20.)$$

olarak ifade edilen eşitlikler bulunur.

Eşitlik (4.19.) ve (4.20.), Henderson ın lineer karma model eşitliklerine (Henderson, 1950; Henderson ve ark., 1959) benzemeleri nedeniyle ***stokastik kısıtlı ridge lineer karma model eşitlikleri*** olarak adlandırılabilir.

Eşitlik (4.19.) ve Eşitlik (4.20.) matris formunda

$$\begin{bmatrix} X_*'T^{-1}X_* + kI_p & X_*'T^{-1}Z_* \\ Z_*'T^{-1}X_* & Z_*'T^{-1}Z_* + G^{-1} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \hat{\beta}_{me}(k) \\ \hat{u}_{mp}(k) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X_*'T^{-1}y_* \\ Z_*'T^{-1}y_* \end{bmatrix} \qquad (4.21.)$$

biçiminde yazılabilir. Gilmour ve ark. (1995) nın yaklaşımı yardımıyla, Eşitlik (4.21.)

$$C(k)\widehat{\Psi}(k) = \omega'T^{-1}y_* \qquad (4.22.)$$

olarak da yazılabilir. Burada $\widehat{\Psi}(k) = (\hat{\beta}_{me}'(k), \hat{u}_{mp}'(k))'$ şeklindedir.

Eşitlik (4.22.) nin çözülmesi sonucunda

$$\widehat{\Psi}(k) = C^{-1}(k)\omega'T^{-1}y_* \qquad (4.23.)$$

elde edilir. Buradaki $C^{-1}(k)$ matrisinin Eşitlik (4.14.) de yer alan C^{-1} matrisinden tek farkı, C^{-1} matrisindeki $(X_*'S^{-1}X_*)^{-1}$ yerine $C^{-1}(k)$ matrisinde $(X_*'S^{-1}X_* + kI_p)^{-1}$ nin gelmesidir. $C^{-1}(k)$, y_*, X_*, Z_*, T ve S nin Eşitlik (4.23.) de yerine yazılmasından ve bazı matematiksel işlemlerin yapılmasından sonra sırasıyla *stokastik kısıtlı ridge tahmin edici (stochastic restricted ridge estimator)* ve *stokastik kısıtlı ridge ön tahmin edici (stochastic restricted ridge predictor)*

$$\begin{aligned}\hat{\beta}_{me}(k) &= \left(X_*'S^{-1}X_* + kI_p\right)^{-1}X_*'S^{-1}y_* \\ &= \left(X'H^{-1}X + \mathcal{R}'V^{-1}\mathcal{R} + kI_p\right)^{-1}(X'H^{-1}y + \mathcal{R}'V^{-1}r) \end{aligned} \quad (4.24.)$$

$$\hat{u}_{mp}(k) = GZ'H^{-1}\left(y - X\hat{\beta}_{me}(k)\right) \quad (4.25.)$$

olarak adlandırılan tahmin ediciler elde edilirler (Kuran ve Özkale, 2016).

Sherman-Morrison-Woodbury Teoremi (Marsaglia ve Styan, 1974a, b) yardımıyla,

$$\begin{aligned}\left(X'H^{-1}X + \mathcal{R}'V^{-1}\mathcal{R} + kI_p\right)^{-1} &= \left(X'H^{-1}X + kI_p\right)^{-1} - \left(X'H^{-1}X + kI_p\right)^{-1}\mathcal{R}' \\ &\times \left(V + \mathcal{R}\left(X'H^{-1}X + kI_p\right)^{-1}\mathcal{R}'\right)^{-1}\mathcal{R} \\ &\times \left(X'H^{-1}X + kI_p\right)^{-1} \end{aligned} \quad (4.26.)$$

biçiminde yazılabilir.

Eşitlik (4.26.) nın kullanılmasıyla Eşitlik (4.24.)

$$\hat{\beta}_{me}(k) = \hat{\beta}(k) + \left(X'H^{-1}X + kI_p\right)^{-1}\mathcal{R}'\left(V + \mathcal{R}\left(X'H^{-1}X + kI_p\right)^{-1}\mathcal{R}'\right)^{-1} \times \left(r - \mathcal{R}\hat{\beta}(k)\right)$$

şeklinde de yazılabilir (Kuran ve Özkale, 2016). Burada $\hat{\beta}(k)$, Eşitlik (4.3.) ile verilen ridge tahmin ediciyi göstermektedir.

Stokastik kısıtlı ridge tahmin ve ön tahmin ediciler için k parametresinin seçimi önemlidir. Bu amaçla, Eliot (2011) ile Eliot ve ark. (2011) nın ridge tahmin ve ön tahmin edicilerde k nın seçimi için önerdikleri genelleştirilmiş çapraz geçerlilik (generalized cross-validation, GCV) istatistiğinden yararlanılarak, stokastik kısıtlı ridge tahmin ve ön tahmin ediciler için GCV ($GCV^{SRR}(k)$) istatistiği

$$GCV^{SRR}(k) = n^{-1}(y - \hat{y})'(y - \hat{y}) / \left(1 - \frac{tr(\mathcal{S})}{n}\right)^2 \qquad (4.27.)$$

olarak tanımlanır (Kuran ve Özkale, 2016). Burada $\hat{y} = X\hat{\beta}_{me}(k) + Z\hat{u}_{mp}(k)$ ve

$$\mathcal{S} = X\left(X'H^{-1}X + \mathcal{R}'V^{-1}\mathcal{R} + kI_p\right)^{-1}X'H^{-1} + ZGZ'H^{-1}(I_n - X\left(X'H^{-1}X + \mathcal{R}'V^{-1}\mathcal{R} + kI_p\right)^{-1}X'H^{-1})$$

şeklinde olup, $GCV^{SRR}(k)$ minimum olacak şekilde k önerilir.

Eşitlik (4.15.), (4.16.), (4.24.) ve (4.25.) ile k nın seçimi için tanımlanan $GCV^{SRR}(k)$ istatistiği, varyans bileşenlerinin bilindiği varsayımı altında elde edilmişlerdir. Varyans bileşenleri γ, ρ, σ^2 bilinmiyorsa, mixed ve stokastik kısıtlı ridge tahmin ve ön tahmin ediciler ile $GCV^{SRR}(k)$ nın elde

edilebilmeleri için γ, ρ, σ^2 nin tahminleriyle yer değiştirmeleri gerekir. Bu amaçla, bir sonraki alt bölümde varyans bileşenlerinin tahmin edilmesine değinilecektir.

4.3. Varyans Bileşenlerinin Tahmini

Bu alt bölümde ML, REML ve iteratif yöntemler yardımıyla varyans bileşenlerinin tahminleri bulunacaktır.

4.3.1. ML Yöntemi

y_* ın marjinal log-likelihood fonksiyonu

$$l_{ML}(\beta, \phi; y_*) = -\frac{1}{2}\{(n+m)log(2\pi) + (n+m)log\sigma^2 + log|S| + (y_* - X_*\beta)'S^{-1}(y_* - X_*\beta)/\sigma^2\} \quad (4.28.)$$

şeklinde elde edilir. Burada $\phi = (\kappa', \sigma^2)'$ ve $\kappa = (\gamma', \rho', v')' = (\kappa_j)$ sırasıyla $(r + s + v + 1) \times 1$ ve $(r + s + v) \times 1$ tipinde bilinmeyen varyans bileşenlerinin vektörlerini göstermektedir.

Eşitlik $(4.28.)$ in sırasıyla β, σ^2 ve κ_j ye göre kısmi türevlerinin alınmasıyla

$$\frac{\partial l_{ML}(\beta, \phi; y_*)}{\partial \beta} = -\frac{1}{\sigma^2}(X_*'S^{-1}X_*\beta - X_*'S^{-1}y_*) \quad (4.29.)$$

$$\frac{\partial l_{ML}(\beta, \phi; y_*)}{\partial \sigma^2} = -\frac{(n+m)}{2\sigma^2} + \frac{(y_* - X_*\beta)'S^{-1}(y_* - X_*\beta)}{2\sigma^4} \quad (4.30.)$$

$$\frac{\partial l_{ML}(\beta, \phi; y_*)}{\partial \kappa_j} = -\frac{1}{2}\, tr\left(S^{-1}\dot{S}_j\right)$$

$$+ \frac{(y_* - X_*\beta)'S^{-1}\dot{S}_j S^{-1}(y_* - X_*\beta)}{2\sigma^2} \qquad (4.31.)$$

elde edilir. Burada $\dot{S}_j = \partial S/\partial \kappa_j$ şeklindedir.

Eşitlik $(4.29.) - (4.31.)$ in sıfıra eşitlenmesiyle ve β, σ^2 ve S nin yerine $\tilde{\beta}_{me}$, $\tilde{\sigma}^2_{me}$ve $\tilde{S}$ konulmasıyla[3]

$$X_*'\tilde{S}^{-1}X_*\tilde{\beta}_{me} = X_*'\tilde{S}^{-1}y_* \qquad (4.32.)$$

$$(n + m)\tilde{\sigma}^2_{me} = (y_* - X_*\tilde{\beta}_{me})'\tilde{S}^{-1}(y_* - X_*\tilde{\beta}_{me}) \qquad (4.33.)$$

ve

$$tr(\tilde{S}^{-1}\tilde{\dot{S}}_j) = \frac{1}{\tilde{\sigma}^2_{me}}(y_* - X_*\tilde{\beta}_{me})'\tilde{S}^{-1}\tilde{\dot{S}}_j\tilde{S}^{-1}\left(y_* - X_*\tilde{\beta}_{me}\right) \qquad (4.34.)$$

elde edilir. Eşitlik $(4.32.)$ ile $(4.33.)$ ün çözülmesiyle

$$\begin{aligned}\tilde{\beta}_{me} &= \left(X_*'\tilde{S}^{-1}X_*\right)^{-1}X_*'\tilde{S}^{-1}y_* \\ &= \left(X'\tilde{H}^{-1}X + \mathcal{R}'\tilde{V}^{-1}\mathcal{R}\right)^{-1}\left(X'\tilde{H}^{-1}y + \mathcal{R}'\tilde{V}^{-1}r\right)\end{aligned} \qquad (4.35.)$$

$$\tilde{\sigma}^2_{me} = \frac{1}{(n + m)}(y_* - X_*\tilde{\beta}_{me})'\tilde{S}^{-1}(y_* - X_*\tilde{\beta}_{me})$$

[3] 4.1 ve 4.2 inci alt bölümünde elde edilen tahmin ediciler varyans bileşenlerinin bilindiği varsayımı altında elde edilmişlerdi. 4.3 üncü alt bölümünde ise varyans bileşenlerinin bilinmediği varsayımı altında tahmin ediciler elde edileceklerdir. Dolayısıyla, her iki alt bölümdeki tahmin edicilerin birbirlerinden ayrılması amacıyla "^" yerine "~" sembolü kullanılmıştır.

$$= \frac{1}{(n+m)}\left[(y - X\tilde{\beta}_{me})'\tilde{H}^{-1}(y - X\tilde{\beta}_{me}) + (r - \mathcal{R}\tilde{\beta}_{me})'\tilde{V}^{-1} \times (r - \mathcal{R}\tilde{\beta}_{me})\right] \quad (4.36.)$$

olarak bulunur (Kuran ve Özkale, 2016).

Benzer şekilde

$$\tilde{\beta}_{me}(\tilde{k}) = \left(X_*'\tilde{S}^{-1}X_* + \tilde{k}I_p\right)^{-1}X_*'\tilde{S}^{-1}y_* = \left(X'\tilde{H}^{-1}X + \mathcal{R}'\tilde{V}^{-1}\mathcal{R} + \tilde{k}I_p\right)^{-1}\left(X'\tilde{H}^{-1}y + \mathcal{R}'\tilde{V}^{-1}r\right) \quad (4.37.)$$

$$\tilde{\sigma}^2_{me}(\tilde{k}) = \frac{1}{(n+m)}(y_* - X_*\tilde{\beta}_{me}(\tilde{k}))'\tilde{S}^{-1}(y - X\tilde{\beta}_{me}(\tilde{k})) = \frac{1}{(n+m)}\left[(y - X\tilde{\beta}_{me}(\tilde{k}))'\tilde{H}^{-1}(y - X\tilde{\beta}_{me}(\tilde{k})) + (r - \mathcal{R}\tilde{\beta}_{me}(\tilde{k}))'\tilde{V}^{-1}(r - \mathcal{R}\tilde{\beta}_{me}(\tilde{k}))\right] \quad (4.38.)$$

ve

$$tr(\tilde{S}^{-1}\tilde{S}_j) = \frac{1}{\tilde{\sigma}^2_{me}(\tilde{k})}(y_* - X_*\tilde{\beta}_{me}(\tilde{k}))'\tilde{S}^{-1}\tilde{S}_j\tilde{S}^{-1}(y - X\tilde{\beta}_{me}(\tilde{k})) \quad (4.39.)$$

olarak bulunur (Kuran ve Özkale, 2016). Burada $\tilde{k}$ nın seçimi önemlidir ve Eşitlik (4.27.) ile verilen $GCV^{SRR}(k)$ istatistiğinden yararlanılarak,

$$GCV^{SRR}(\tilde{k}) = n^{-1}(y - \tilde{y})'(y - \tilde{y}) / \left(1 - \frac{tr(\tilde{S})}{n}\right)^2 \quad (4.40.)$$

olarak tanımlanır (Kuran ve Özkale, 2016). Burada $\tilde{y} = X\tilde{\beta}_{me}(\tilde{k}) + Z\tilde{u}_{mp}(\tilde{k})$, $\tilde{u}_{mp}(\tilde{k}) = \tilde{G}Z'\tilde{H}^{-1}(y - X\tilde{\beta}_{me}(\tilde{k}))$ ve

$$\tilde{S} = X\left(X'\tilde{H}^{-1}X + \mathcal{R}'\tilde{V}^{-1}\mathcal{R} + \tilde{k}I_p\right)^{-1}X'\tilde{H}^{-1} + Z\tilde{G}Z'\tilde{H}^{-1}\left(I_n - X\left(X'\tilde{H}^{-1}X + \mathcal{R}'\tilde{V}^{-1}\mathcal{R} + \tilde{k}I_p\right)^{-1}X'\tilde{H}^{-1}\right)$$

şeklinde olup, $GCV^{SRR}(\tilde{k})$ minimum olacak şekilde $\tilde{k}$ önerilir.

Eşitlik (4.34.) ve Eşitlik (4.39.) varyans bileşenlerine göre lineer olmayan bir formda olup, bu denklemlerin çözümü için analitik ifadelerin elde edilmesi mümkün değildir. Bu yüzden, Eşitlik (4.34.) ve Eşitlik (4.39.) un çözümü ancak iteratif yöntemler aracılığıyla yapılabilir.

4.3.2. REML Yöntemi

REML yönteminde y_* ın yerine y_* ın sabit etkileri içermeyecek şekilde seçilen lineer kombinasyonlarının kullanıldığı ifade edilebilir. Bu lineer kombinasyonlar, sabit etkiler uydurulduktan sonra rezidülere karşılık gelmektedir. Bu durumun bir sonucu olarak, sabit etkileri içermeyecek şekilde oluşturulan $k'y_* = k'X_*\beta + k'Z_*u$ lineer kombinasyonunda k' vektörleri için $E(k'y_*) = k'X_*\beta = 0\ \forall\beta$ ve böylece $k'X_* = 0$ eşitlikleri sağlanmalıdır. Dolayısıyla, herhangi bir c' vektörü için $k' = c'(I_{n+m} - X_*(X_*'X_*)^{-1}X_*')$ (Searle ve ark., 1992, Bölüm M.4e) yazılabilir ve lineer olarak bağımsız olan $k'y_*$ ların sayısının X_* a bağlı olduğu söylenebilir. X_*, $(n + m) \times p$ tipinde ve rankı p olan bir tasarım matrisi olduğu için $k'X_*\beta = 0$ eşitliği sadece k' nün $n + m - p$ lineer bağımsız değeri ile sağlanabilir. Böylece, lineer olarak bağımsız k' vektörlerinin bir kümesi K' nün satırları olarak alınır ve $K' = D(I_{n+m} - X_*(X_*'X_*)^{-1}X_*')$ için $K'y_*$ ile ilgilenilir. Burada K' ve D, $(n + m - p) \times n$ tipinde tam satır ranklı matrislerdir.

$y_* \sim N(X_*\beta, \sigma^2 S)$ ve $K'y_* = 0$ için $K'y_* \sim N(0, \sigma^2 K'SK)$ şeklindedir ve böylece REML log-likelihood fonksiyonu

$$l_R(\phi; K'y_*) = -\frac{1}{2}\{(n+m-p)log(2\pi) + (n+m-p)log\sigma^2 + log|K'SK|\} - \frac{1}{2}\left\{\frac{y_*'K(K'SK)^{-1}K'y_*}{\sigma^2}\right\} \quad (4.41.)$$

olarak elde edilir.

$I_{n+m} - X_*(X_*'X_*)^{-1}X_*'$ simetrik, idempotent ve rankı $n+m-p$ olduğu için $K'K = I_{n+m}$ olur. Dolayısıyla, $|S| = |K'SK||X_*'S^{-1}X_*|$ (Searle ve ark., 1992, Bölüm E9.12f) olmak üzere, y_* için REML log-likelihood fonksiyonu (sabitlerin göz ardı edilmesiyle)

$$l_R(\phi; y_*) = -\frac{1}{2}\{(n+m-p)log\sigma^2 + log|S| + log|X_*'S^{-1}X_*|\} - \frac{1}{2}\left\{\frac{(y_* - X_*\hat{\beta}_{me})'S^{-1}(y_* - X_*\hat{\beta}_{me})}{\sigma^2}\right\} \quad (4.42.)$$

şeklinde elde edilir.

Eşitlik (4.15.) ile verilen $\hat{\beta}_{me}$ nin kullanılması ile

$$(y_* - X_*\hat{\beta}_{me}) = y_* - X_*(X_*'S^{-1}X_*)^{-1}X_*'S^{-1}y_* = (I_{n+m} - X_*(X_*'S^{-1}X_*)^{-1}X_*'S^{-1})y_* = SP_*y_*$$

ve $P_*SP_* = P_*$ olduğundan

$$(y_* - X_*\hat{\beta}_{me})'S^{-1}(y_* - X_*\hat{\beta}_{me}) = y_*'P_*SS^{-1}SP_*y_* = y_*'P_*y_*$$

yazılabilir. Burada $P_* = S^{-1} - S^{-1}X_*(X_*'S^{-1}X_*)^{-1}X_*'S^{-1} = K(K'SK)^{-1}K'$ dir. Böylece, Eşitlik (4.42.)

$$l_R(\phi; y_*) = -\frac{1}{2}\{(n + m - p)log\sigma^2 + log|S| + log|X_*'S^{-1}X_*|\} - \frac{1}{2}\left\{\frac{y_*'P_*y_*}{\sigma^2}\right\} \quad (4.43.)$$

şeklinde ifade edilir ve Eşitlik (4.41) ile Eşitlik (4.43) ün eşdeğer olduğu söylenebilir.

Eşitlik (4.43.) ün sırasıyla σ^2 ve κ_j ye göre türevlerinin alınmasıyla

$$\frac{\partial l_R(\phi; y_*)}{\partial \sigma^2} = -\frac{(n + m - p)}{2\sigma^2} + \frac{y_*'P_*y_*}{2\sigma^4} \quad (4.44)$$

$$\frac{\partial l_R(\phi; y_*)}{\partial \kappa_j} = -\frac{1}{2}\left\{tr\left(P_*\dot{S}_j\right) - \frac{y_*'P_*\dot{S}_jP_*y_*}{\sigma^2}\right\} \quad (4.45)$$

elde edilir.

Eşitlik (4.44) ün sıfıra eşitlenmesiyle ve P_* yerine $\tilde{P}_*$ yazılmasıyla

$$\tilde{\sigma}_{me}^2 = \frac{y_*'\tilde{P}_*y_*}{(n + m - p)} = \frac{\left(y_* - X_*\tilde{\beta}_{me}\right)'\tilde{S}^{-1}\left(y_* - X_*\tilde{\beta}_{me}\right)}{(n + m - p)}$$
$$= \frac{1}{(n + m - p)}\left[(y - X\tilde{\beta}_{me})'\tilde{H}^{-1}(y - X\tilde{\beta}_{me})\right.$$
$$\left.+(r - \mathcal{R}\tilde{\beta}_{me})'\tilde{V}^{-1}(r - \mathcal{R}\tilde{\beta}_{me})\right] \quad (4.46)$$

olarak bulunur (Kuran ve Özkale, 2016). $\tilde{\sigma}_{me}^2$, $\tilde{P}_*$ aracılığıyla $\tilde{\kappa}$ ya bağlı olduğundan iteratif olarak elde edilmelidir.

Benzer şekilde, $\tilde{P}_*(\tilde{\kappa}) = \tilde{S}^{-1} - \tilde{S}^{-1}X_*\left(X_*'\tilde{S}^{-1}X_* + \tilde{\kappa}I_p\right)^{-1}X_*'\tilde{S}^{-1}$ olmak üzere,

$$\begin{aligned}\tilde{\sigma}_{me}^2(\tilde{\kappa}) &= \frac{y_*'\tilde{P}_*(\tilde{\kappa})y_*}{(n+m-p)} \\ &= \frac{1}{(n+m-p)}(y - X\tilde{\beta}_{me}(\tilde{\kappa}))'\tilde{S}^{-1}(y - X\tilde{\beta}_{me}(\tilde{\kappa})) \\ &= \frac{1}{(n+m-p)}\left[(y - X\tilde{\beta}_{me}(\tilde{\kappa}))'\tilde{H}^{-1}(y - X\tilde{\beta}_{me}(\tilde{\kappa}))\right. \\ &\left.+(r - \mathcal{R}\tilde{\beta}_{me}(\tilde{\kappa}))'\tilde{V}^{-1}(r - \mathcal{R}\tilde{\beta}_{me}(\tilde{\kappa}))\right] \qquad (4.47.)\end{aligned}$$

olarak bulunur (Kuran ve Özkale, 2016). $\tilde{\sigma}_{me}^2(\tilde{\kappa})$, $\tilde{P}_*(\tilde{\kappa})$ aracılığı ile $\tilde{\kappa}$ ya bağlı olduğundan iteratif olarak elde edilmelidir. Burada $\tilde{\kappa}$ nın seçimi için Eşitlik (4.40) dan yararlanılabilir.

ML veya REML log-likelihood fonksiyonlarının birinci dereceden türevlerinin sıfıra eşitlenmesiyle (4.34.), (4.39.), (4.45.), (4.46.) ve (4.47.) gibi lineer olmayan eşitlikler ortaya çıkmaktadır. Bu nedenle, lineer olmayan bu eşitliklerin çözülmesi ve varyans bileşenlerinin ML veya REML tahmin edicilerinin bulunması için literatürdeki iteratif yöntemlerden yararlanılacaktır.

4.3.3. İteratif Yöntemler

Varyans bileşenlerinin REML[4] tahmin edicileri sırasıyla NR, FS ve EM algoritmaları yardımıyla elde edilecektir.

[4] 2.2.3 de ifade edilenler nedeniyle varyans bileşenlerinin ML yerine REML tahmin edicileri sırasıyla NR, FS ve EM algoritmaları yardımıyla elde edilecektir.

4.3.3.1. NR Algoritması

Eşitlik (2.27.) de gösterildiği gibi, her bir NR iterasyonu gözlenen bilgi matrisinin elemanları ile REML log-likelihood fonksiyonunun hesaplanmasını gerektirir.

Eşitlik (4.44.) ve (4.45.) de yer alan σ^2 ve κ_j için REML log-likelihood fonksiyonları

$$\frac{\partial l_R(\phi; y_*)}{\partial \sigma^2} = U(\sigma^2) = -\frac{1}{2}\left\{\frac{(n + m - p)}{\sigma^2} - \frac{y_*' P_* y_*}{\sigma^4}\right\}$$

$$\frac{\partial l_R(\phi; y_*)}{\partial \kappa_j} = U(\kappa_j) = -\frac{1}{2}\left\{tr(P_* \dot{S}_j) - \frac{y_*' P_* \dot{S}_j P_* y_*}{\sigma^2}\right\}$$

ve gözlenen bilgi matrisinin elemanları

$$I_O(\kappa_j, \kappa_k) = \frac{1}{2} tr(P_* \ddot{S}_{jk}) - \frac{1}{2} tr(P_* \dot{S}_j P_* \dot{S}_k) + \frac{1}{\sigma^2}\, y_*' P_* \dot{S}_j P_* \dot{S}_k P_* y_* - \frac{1}{2\sigma^2} y_*' P_* \ddot{S}_{jk} P_* y_*$$

$$I_O(\sigma^2, \kappa_j) = \frac{y_*' P_* \dot{S}_j P_* y_*}{2\sigma^4}$$

$$I_O(\sigma^2, \sigma^2) = -\frac{(n + m - p)}{2\sigma^4} + \frac{y_*' P_* y_*}{\sigma^6}$$

olarak bulunur (Kuran ve Özkale, 2016) ve burada $\ddot{S}_{jk} = \partial^2 S / \partial \kappa_j \kappa_k$ dir.

Benzer şekilde, Eşitlik (4.47.) nin elde edilmesinde kullanılan σ^2 ve κ_j için REML log-likelihood fonksiyonları

$$\frac{\partial l_R(\phi; y_*)}{\partial \sigma^2} = U(\sigma^2) = -\frac{1}{2}\left\{\frac{(n+m-p)}{\sigma^2} - \frac{y_*' P_*(k) y_*}{\sigma^4}\right\}$$

$$\frac{\partial l_R(\phi; y_*)}{\partial \kappa_j} = U(\kappa_j) = -\frac{1}{2}\left\{tr\left(P_*(k)\dot{S}_j\right) - \frac{y_*' P_*(k)\dot{S}_j P_*(k) y_*}{\sigma^2}\right\}$$

ve gözlenen bilgi matrisinin elemanları

$$I_O{}^{SRR}(\kappa_j, \kappa_k) = \frac{1}{2}tr\left(P_*(k)\ddot{S}_{jk}\right) - \frac{1}{2}tr\left(P_*(k)\dot{S}_j P_*(k)\dot{S}_k\right) + \frac{1}{\sigma^2}\, y_*' P_*(k)\dot{S}_j P_*(k)\dot{S}_k P_*(k) y_* - \frac{1}{2\sigma^2}\, y_*' P_*(k)\ddot{S}_{jk} P_*(k) y_*$$

$$I_O{}^{SRR}\left(\sigma^2, \kappa_j\right) = \frac{y_*' P_*(k)\dot{S}_j P_*(k) y_*}{2\sigma^4}$$

$$I_O{}^{SRR}(\sigma^2, \sigma^2) = -\frac{(n+m-p)}{2\sigma^4} + \frac{y_*' P_*(k) y_*}{\sigma^6}$$

olarak elde edilir (Kuran ve Özkale, 2016) ve burada $I_O{}^{SRR}$, stokastik kısıtlı ridge tahmin ediciler için gözlenen bilgi matrisinin elemanlarını göstermektedir.

4.3.3.2. FS Algoritması

Eşitlik (4.44.) ve (4.45.) de yer alan σ^2 ve κ_j için beklenen bilgi matrisinin elemanları

$$I_E\left(\kappa_j, \kappa_k\right) = \frac{1}{2}tr\left(P_*\dot{S}_j P_*\dot{S}_k\right)$$

$$I_E(\sigma^2, \kappa_j) = \frac{1}{2\sigma^2} tr\left(P_* \dot{S}_j\right)$$

$$I_E(\sigma^2, \sigma^2) = \frac{(n + m - p)}{2\sigma^4}$$

şeklinde elde edilir (Kuran ve Özkale, 2016).

Benzer şekilde, Eşitlik (4.47.) nin elde edilmesinde kullanılan σ^2 ve κ_j için beklenen bilgi matrisinin elemanları

$$I_E{}^{SRR}(\kappa_j, \kappa_k) = \frac{1}{2} tr\left(P_*(k)\dot{S}_j P_*(k)\dot{S}_k\right)$$

$$I_E{}^{SRR}\left(\sigma^2, \kappa_j\right) = \frac{1}{2\sigma^2} tr\left(P_*(k)\dot{S}_j\right)$$

$$I_E{}^{SRR}(\sigma^2, \sigma^2) = \frac{(n + m - p)}{2\sigma^4}$$

olarak elde edilir (Kuran ve Özkale, 2016) ve burada $I_E{}^{SRR}$, stokastik kısıtlı ridge tahmin ediciler için beklenen bilgi matrisinin elemanlarını göstermektedir.

4.4. Tahmin Edicilerin Karşılaştırılması

β ile u un lineer kombinasyonlarının ön tahmini, çoğunlukla $\acute{s} = 1$, iken $\mathcal{L} \in \mathbb{R}^{p \times \acute{s}}$ ve $\mathcal{M} \in \mathbb{R}^{q \times \acute{s}}$ olacak şekilde özel olarak belirlenen $\mathcal{L}$ ve $\mathcal{M}$ matrisleri için, $\mu = \mathcal{L}'\beta + \mathcal{M}'u$ şeklinde ifade edilmiştir (Henderson, 1975; Robinson, 1991; Das ve ark., 2004).

Eşitlik (4.1.) ve Eşitlik (4.2.) ile verilen tahmin ediciler için μ nün BLUP değeri

$$\hat{\mu} = \mathcal{L}'\hat{\beta} + \mathcal{M}'\hat{u} = \mathcal{Q}\hat{\beta} + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}y$$

olarak elde edilmiştir (Henderson, 1975) ve burada $\mathcal{Q} = \mathcal{L}' - \mathcal{M}'GZ'H^{-1}X$ şeklindedir.

Eşitlik (4.3.) ve Eşitlik (4.4.) ile verilen ridge tahmin ediciler için μ nün ridge ön tahmin edicisi ise

$$\hat{\mu}(k) = \mathcal{L}'\hat{\beta}(k) + \mathcal{M}'\hat{u}(k) = \mathcal{Q}\hat{\beta}(k) + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}y$$

şeklinde elde edilmiştir (Liu ve Hu, 2013).

Benzer şekilde, Eşitlik (4.15.) ve Eşitlik (4.16.) ile verilen mixed ve Eşitlik (4.24.) ve Eşitlik (4.25.) ile verilen stokastik kısıtlı ridge tahmin ve ön tahmin ediciler için μ nün mixed ve stokastik kısıtlı ridge ön tahmin edicileri, sırasıyla,

$$\begin{aligned}\hat{\mu}_{mp} &= \mathcal{L}'\hat{\beta}_{me} + \mathcal{M}'\hat{u}_{mp} \\ &= \mathcal{L}'\hat{\beta}_{me} + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}\left(y - X\hat{\beta}_{me}\right) \\ &= \mathcal{Q}\hat{\beta}_{me} + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}y \end{aligned} \quad (4.48.)$$

ve

$$\begin{aligned}\hat{\mu}_{mp}(k) &= \mathcal{L}'\hat{\beta}_{me}(k) + \mathcal{M}'\hat{u}_{mp}(k) \\ &= \mathcal{L}'\hat{\beta}_{me}(k) + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}\left(y - X\hat{\beta}_{me}(k)\right) \\ &= \mathcal{Q}\hat{\beta}_{me}(k) + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}y \end{aligned} \quad (4.49.)$$

olarak bulunur.

$\hat{\mu}$, $\hat{\mu}(\hbar)$, $\hat{\mu}_{mp}$ ve $\hat{\mu}_{mp}(\hbar)$ verildikten sonra, $\hat{\mu}$ ile $\hat{\mu}(\hbar)$ ve $\hat{\mu}_{mp}$ ile $\hat{\mu}_{mp}(\hbar)$ karşılaştırmaları mMSE kriteri aracılığıyla yapılacaktır.

Štulajter (1997) yardımıyla, Eşitlik (4.48.) için

$$\begin{aligned} mMSE(\hat{\mu}_{mp}) &= E\left((\hat{\mu}_{mp}-\mu)(\hat{\mu}_{mp}-\mu)'\right) \\ &= Var(\hat{\mu}_{mp}) + Var(\mu) + Bias(\hat{\mu}_{mp})Bias(\hat{\mu}_{mp})' \\ &\quad -Cov(\hat{\mu}_{mp},\mu) - Cov(\mu,\hat{\mu}_{mp}) \end{aligned} \tag{4.50.}$$

olarak yazılır ve burada, $Bias(\hat{\mu}_{mp}) = E(\hat{\mu}_{mp}-\mu)$ şeklindedir.

Eşitlik (4.50.) nin elde edilebilmesi amacıyla sırasıyla $Var(\hat{\mu}_{mp})$, $Var(\mu)$, $Bias(\hat{\mu}_{mp})$ ve $Cov(\hat{\mu}_{mp},\mu)$ bulunacaktır.

$$\begin{aligned} Var(\hat{\mu}_{mp}) &= Var(\mathcal{Q}\hat{\beta}_{me} + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}y) \\ &= \mathcal{Q}Var(\hat{\beta}_{me})\mathcal{Q}' + \mathcal{Q}Cov(\hat{\beta}_{me},y)H^{-1}ZG\mathcal{M} \\ &\quad +\mathcal{M}'GZ'H^{-1}Cov(y,\hat{\beta}_{me})\mathcal{Q}' \\ &\quad +\mathcal{M}'\,GZ'H^{-1}Var(y)H^{-1}ZG\mathcal{M} \end{aligned} \tag{4.51.}$$

biçiminde olup,

$$Var(\hat{\beta}_{me}) = \sigma^2(X'H^{-1}X + \mathcal{R}'V^{-1}\mathcal{R})^{-1}$$

$$Cov(\hat{\beta}_{me},y) = \sigma^2(X'H^{-1}X + \mathcal{R}'V^{-1}\mathcal{R})^{-1}X'$$

ile verilir.

$$Var(\mu) = Var(\mathcal{L}'\beta + \mathcal{M}'u) = \mathcal{M}'Var(u)\mathcal{M} = \sigma^2\mathcal{M}'G\mathcal{M} \tag{4.52.}$$

$$\begin{aligned} Bias(\hat{\mu}_{mp}) &= E(\hat{\mu}_{mp} - \mu) \\ &= E(\mathcal{Q}\hat{\beta}_{me} + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}y - \mathcal{L}'\beta - \mathcal{M}'u) \\ &= \mathcal{Q}E(\hat{\beta}_{me}) + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}E(y) - \mathcal{L}'\beta - \mathcal{M}'E(u) \\ &= \mathcal{Q}\left(E\left(\hat{\beta}_{me} - \beta\right)\right) = \mathcal{Q}Bias\left(\hat{\beta}_{me}\right) \end{aligned} \quad (4.53.)$$

şeklinde elde edilir ve burada, $E(y) = X\beta$, $E(u) = 0$ ve $Bias(\hat{\beta}_{me}) = 0$ dır.

$$\begin{aligned} Cov(\hat{\mu}_{mp}, \mu) &= Cov(\mathcal{Q}\hat{\beta}_{me} + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}y, \mathcal{L}'\beta + \mathcal{M}'u) \\ &= \mathcal{Q}Cov(\hat{\beta}_{me}, u)\mathcal{M} + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}Cov(y, u)\mathcal{M} \end{aligned} \quad (4.54.)$$

biçiminde olup,

$$Cov(\hat{\beta}_{me}, u) = \sigma^2(X'H^{-1}X + \mathcal{R}'V^{-1}\mathcal{R})^{-1}X'H^{-1}ZG$$

ve $Cov(y, u) = \sigma^2 ZG$ dir.

Eşitlik (4.51.), (4.52.), (4.53.) ve (4.54.) ün Eşitlik (4.50.) de yerine yazılmasıyla

$$mMSE(\hat{\mu}_{mp}) = \mathcal{Q}mMSE(\hat{\beta}_{me})\mathcal{Q}' + \sigma^2\mathcal{M}'(G - GZ'H^{-1}ZG)\mathcal{M} \quad (4.55.)$$

olarak elde edilir ve

$$\begin{aligned} mMSE(\hat{\beta}_{me}) &= Var(\hat{\beta}_{me}) + Bias(\hat{\beta}_{me})Bias(\hat{\beta}_{me})' \\ &= \sigma^2(X'H^{-1}X + \mathcal{R}'V^{-1}\mathcal{R})^{-1} \end{aligned} \quad (4.56.)$$

şeklindedir.

Štulajter (1997) yardımıyla, Eşitlik (4.49.) için

$$mMSE(\hat{\mu}_{mp}(\hbar)) = E\left(\left(\hat{\mu}_{mp}(\hbar)-\mu\right)\left(\hat{\mu}_{mp}(\hbar)-\mu\right)'\right)$$
$$= Var(\hat{\mu}_{mp}(\hbar)) + Var(\mu) + Bias(\hat{\mu}_{mp}(\hbar))Bias(\hat{\mu}_{mp}(\hbar))'$$
$$-Cov(\hat{\mu}_{mp}(\hbar),\mu) - Cov(\mu,\hat{\mu}_{mp}(\hbar)) \qquad (4.57.)$$

olarak yazılır ve burada, $Bias(\hat{\mu}_{mp}(\hbar)) = E(\hat{\mu}_{mp}(\hbar)-\mu)$ şeklindedir.

Eşitlik (4.57.) nin elde edilebilmesi amacıyla sırasıyla $Var(\hat{\mu}_{mp}(\hbar))$, $Var(\mu)$, $Bias(\hat{\mu}_{mp}(\hbar))$ ve $Cov(\hat{\mu}_{mp}(\hbar),\mu)$ bulunacaktır.

$$Var(\hat{\mu}_{mp}(\hbar)) = Var(\mathcal{Q}\hat{\beta}_{me}(\hbar) + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}y)$$
$$= \mathcal{Q}Var(\hat{\beta}_{me}(\hbar))\mathcal{Q}' + \mathcal{Q}Cov(\hat{\beta}_{me}(\hbar),y)H^{-1}ZG\mathcal{M}$$
$$+\mathcal{M}'GZ'H^{-1}Cov(y,\hat{\beta}_{me}(\hbar))\mathcal{Q}'$$
$$+\mathcal{M}'GZ'H^{-1}Var(y)H^{-1}ZG\mathcal{M} \qquad (4.58.)$$

şeklinde olup,

$$Var(\hat{\beta}_{me}(\hbar)) = \sigma^2\left(X'H^{-1}X + \mathcal{R}'V^{-1}\mathcal{R} + \hbar I_p\right)^{-1}(X'H^{-1}X + \mathcal{R}'V^{-1}\mathcal{R})$$
$$\times\left(X'H^{-1}X + \mathcal{R}'V^{-1}\mathcal{R} + \hbar I_p\right)^{-1}$$

$$Cov(\hat{\beta}_{me}(\hbar),y) = \sigma^2\left(X'H^{-1}X + \mathcal{R}'V^{-1}\mathcal{R} + \hbar I_p\right)^{-1}X'$$

ile verilir.

$$Bias(\hat{\mu}_{mp}(\hbar)) = E(\hat{\mu}_{mp}(\hbar)-\mu)$$
$$= E(\mathcal{Q}\hat{\beta}_{me}(\hbar) + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}y - \mathcal{L}'\beta - \mathcal{M}'u)$$
$$= \mathcal{Q}E(\hat{\beta}_{me}(\hbar)) + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}E(y) - \mathcal{L}'\beta - \mathcal{M}'E(u)$$
$$= \mathcal{Q}(E(\hat{\beta}_{me}(\hbar)-\beta)) = \mathcal{Q}Bias(\hat{\beta}_{me}(\hbar)) \qquad (4.59.)$$

şeklindedir ve $Bias(\hat{\beta}_{me}(\hbar)) = -\hbar Q\left(X'H^{-1}X + \mathcal{R}'V^{-1}\mathcal{R} + \hbar I_p\right)^{-1}\beta$ dır.

$$\begin{aligned} Cov(\hat{\mu}_{mp}(\hbar), \mu) &= Cov(Q\hat{\beta}_{me}(\hbar) + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}y, \mathcal{L}'\beta + \mathcal{M}'u) \\ &= QCov\left(\hat{\beta}_{me}(\hbar), u\right)\mathcal{M} + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}Cov(y,u)\mathcal{M} \quad (4.60.) \end{aligned}$$

biçiminde olup, $Cov(\hat{\beta}_{me}(\hbar), u) = \sigma^2\left(X'H^{-1}X + \mathcal{R}'V^{-1}\mathcal{R} + \hbar I_p\right)^{-1}X'H^{-1}ZG$ dir.

Eşitlik (4.58.), (4.52.), (4.59.) ve (4.60.) ın Eşitlik (4.57.) de yerine yazılmasıyla

$$mMSE(\hat{\mu}_{mp}(\hbar)) = QmMSE(\hat{\beta}_{me}(\hbar))Q' + \sigma^2\mathcal{M}'(G - GZ'H^{-1}ZG)\mathcal{M} \quad (4.61.)$$

olarak elde edilir ve

$$\begin{aligned} mMSE(\hat{\beta}_{me}(\hbar)) &= \sigma^2\left(X'H^{-1}X + \mathcal{R}'V^{-1}\mathcal{R} + \hbar I_p\right)^{-1}(X'H^{-1}X + \mathcal{R}'V^{-1}\mathcal{R}) \\ &\quad \times \left(X'H^{-1}X + \mathcal{R}'V^{-1}\mathcal{R} + \hbar I_p\right)^{-1} \\ &\quad + \hbar^2\left(X'H^{-1}X + \mathcal{R}'V^{-1}\mathcal{R} + \hbar I_p\right)^{-1} \\ &\quad \times \beta\beta'\left(X'H^{-1}X + \mathcal{R}'V^{-1}\mathcal{R} + \hbar I_p\right)^{-1} \quad (4.62.) \end{aligned}$$

şeklindedir.

Benzer şekilde, Liu ve Hu (2013) tarafından,

$$mMSE(\hat{\mu}) = QmMSE(\hat{\beta})Q' + \sigma^2\mathcal{M}'(G - GZ'H^{-1}ZG)\mathcal{M} \quad (4.63.)$$

$$mMSE(\hat{\mu}(\hbar)) = QmMSE(\hat{\beta}(\hbar))Q' + \sigma^2\mathcal{M}'(G - GZ'H^{-1}ZG)\mathcal{M} \quad (4.64.)$$

olarak elde edilmiştir. $Var(\hat{\beta}) = \sigma^2(X'H^{-1}X)^{-1}$, $Bias(\hat{\beta}) = 0$ ve

$$Var(\hat{\beta}(k)) = \sigma^2\left(X'H^{-1}X + kI_p\right)^{-1}X'H^{-1}X\left(X'H^{-1}X + kI_p\right)^{-1}$$

$$Bias(\hat{\beta}(k)) = -k\left(X'H^{-1}X + kI_p\right)^{-1}\beta$$

olmak üzere, Eşitlik (4.63.) ve Eşitlik (4.64.) de yer alan

$$mMSE(\hat{\beta}) = \sigma^2(X'H^{-1}X)^{-1} \qquad (4.65.)$$

ve

$$mMSE(\hat{\beta}(k)) = \sigma^2\left(X'H^{-1}X + kI_p\right)^{-1}X'H^{-1}X\left(X'H^{-1}X + kI_p\right)^{-1} + k^2\left(X'H^{-1}X + kI_p\right)^{-1}\beta\beta'\left(X'H^{-1}X + kI_p\right)^{-1} \qquad (4.66.)$$

şeklindedir.

Eşitlik (4.55.), (4.61.), (4.63.) ve (4.64.) incelendiğinde, $mMSE(\hat{\mu}_{mp})$ ile $mMSE(\hat{\mu}_{mp}(k))$ ve $mMSE(\hat{\mu})$ ile $mMSE(\hat{\mu}(k))$ karşılaştırmalarının sırasıyla $mMSE(\hat{\beta}_{me})$ ile $mMSE(\hat{\beta}_{me}(k))$ ve $mMSE(\hat{\beta})$ ile $mMSE(\hat{\beta}(k))$ karşılaştırmalarına denk olduğu söylenebilir.

$\Delta = mMSE\left(\hat{\beta}_{me}\right) - mMSE(\hat{\beta}_{me}(k))$ olarak tanımlansın. Δ nın negatif olmayan tanımlı (non-negative definite, nnd) bir matris yani $\Delta \geq 0$ olması durumunda $\hat{\beta}_{me}(k)$ nın $\hat{\beta}_{me}$ den mMSE kriterine göre daha üstün olduğu söylenir.

Eşitlik (4.56.) ve Eşitlik (4.62.) yardımıyla,

$\mathcal{N}(k) = \left(X'H^{-1}X + \mathcal{R}'V^{-1}\mathcal{R} + kI_p\right)^{-1}$ ve $\mathcal{N} = (X'H^{-1}X + \mathcal{R}'V^{-1}\mathcal{R})^{-1}$ olmak üzere,

$$\begin{aligned}\Delta &= \sigma^2\mathcal{N} - \sigma^2\mathcal{N}(k)\mathcal{N}^{-1}\mathcal{N}(k) - k^2\mathcal{N}(k)\beta\beta'\mathcal{N}(k)\\ &= \mathcal{N}(k)[\sigma^2\mathcal{N}^{-1}(k)\mathcal{N}\mathcal{N}^{-1}(k) - \sigma^2\mathcal{N}^{-1} - k^2\beta\beta']\mathcal{N}(k)\\ &= \mathcal{N}(k)[\sigma^2\left(2kI_p + k^2\mathcal{N}\right) - k^2\beta\beta']\mathcal{N}(k) \qquad (4.67.)\end{aligned}$$

olarak elde edilir.

Δ nın nnd olması ancak ve ancak $\sigma^2\left(2kI_p + k^2\mathcal{N}\right) - k^2\beta\beta'$ ifadesinin nnd olmasıyla sağlanabilir. $\sigma^2\left(2kI_p + k^2\mathcal{N}\right) - k^2\beta\beta'$ ifadesinin nnd olması için gerek ve yeter koşul, Farebrother (1976) ve Özkale (2009) dan yararlanarak, aşağıdaki teorem ile verilecektir:

Teorem 4.1 (Kuran ve Özkale, 2016). $\hat{\beta}_{me}(k)$ nın $\hat{\beta}_{me}$ den mMSE kriterine göre daha üstün olması için gerek ve yeter koşul

$$\beta'\left(\frac{2}{k}I_p + (X'H^{-1}X + \mathcal{R}'V^{-1}\mathcal{R})^{-1}\right)^{-1}\beta \leq \sigma^2 \qquad (4.68.)$$

eşitsizliğinin sağlanmasıdır ve burada $k > 0$ dır.

$\sigma^2\left(2kI_p + k^2\mathcal{N}\right) - k^2\beta\beta'$ ifadesinde $\mathcal{N}$ nin yerine yazılmasıyla

$$\sigma^2\left[2kI_p + k^2(X'H^{-1}X + \mathcal{R}'V^{-1}\mathcal{R})^{-1}\right] - k^2\beta\beta'$$

olarak elde edilir. $\sigma^2k^2(X'H^{-1}X + \mathcal{R}'V^{-1}\mathcal{R})^{-1}$ ifadesi her zaman nnd olduğu için $\sigma^2\left(2kI_p + k^2\mathcal{N}\right) - k^2\beta\beta'$ ifadesinin nnd olması

$$\sigma^2\frac{2}{k}I_p - \beta\beta' \qquad (4.69.)$$

simetrik matrisinin nnd olmasıyla sağlanabilir. Bu durumda, Eşitlik (4.69.) un nnd olması için yeter koşul, Farebrother (1976) dan yararlanarak,

$$0 < \kappa \leq \frac{2\sigma^2}{\beta'\beta} \tag{4.70.}$$

şeklinde elde edilir.

Benzer şekilde, Eşitlik (4.65.) ve Eşitlik (4.66.) ile verilen $mMSE(\hat{\beta})$ ve $mMSE(\hat{\beta}(\kappa))$ nın karşılaştırılması amacıyla aşağıdaki teorem verilir:

Teorem 4.2 (Liu ve Hu, 2013). $\hat{\beta}(\kappa)$ nın $\hat{\beta}$ dan mMSE kriterine göre daha üstün olması için gerek ve yeter koşul

$$\beta'\left(\frac{2}{\kappa}I_p + (X'H^{-1}X)^{-1}\right)^{-1}\beta \leq \sigma^2 \tag{4.71.}$$

şeklindedir. $mMSE(\hat{\beta}) - mMSE(\hat{\beta}(\kappa))$ nın nnd olması için yeter koşul

$$0 < \kappa \leq \frac{2\sigma^2}{\beta'\beta} \tag{4.72.}$$

olarak elde edilmiştir.

Eşitlik (4.70.) ve Eşitlik (4.72.) birbirlerinin aynısı olmaları nedeniyle, $\hat{\beta}_{me}(\kappa)$ nın $\hat{\beta}_{me}$ den mMSE kriterine göre daha üstün olmasını sağlayan κ değeri aynı zamanda $\hat{\beta}(\kappa)$ nın $\hat{\beta}$ dan mMSE kriterine göre daha üstün olmasını da sağlar ve bu durumun tersi de doğrudur.

4.5. Uygulama: Varsayımsal Veri

Kerschner ve ark. (1984) ve Beckman ve ark. (1987) tarafından incelenen ve 2.3 üncü alt bölümde de verilen aerosol verisi, çoklu iç ilişkiye sahip değildir. Ancak, bu çalışmada elde edilen sonuçların gösterilebilmesi amacıyla çoklu iç ilişkiye sahip olan bir veriye ihtiyaç duyulmaktadır. Bu nedenle, aerosol verisinin ve Eşitlik (2.28.) ile verilen modelin kullanılmasıyla çoklu iç ilişkiye sahip olan varsayımsal veri aşağıdaki gibi üretilir.

Çoklu iç ilişkinin sabit etkilere karşılık gelen X matrisinde olması nedeniyle, sabit etkilere karşılık gelen veri, McDonald ve Galarneau (1975) yardımıyla,

$$x_{ij} = (1-\delta^2)^{1/2} z_{ij} + \delta\, z_{i4} \qquad i = 1,\dots,36 \;\; j = 1,2,3 \qquad (4.73.)$$

eşitliğinden elde edilir. Burada, z_{ij} ler Eşitlik (2.28.) ile verilen modeldeki X matrisinin elemanlarını ve δ^2, herhangi iki sabit etki arasındaki korelasyonu göstermektedir. Bu çalışmada, $\delta^2 = 0.99$ olarak seçilir.

Eşitlik (4.5.) ile verilen stokastik lineer kısıtta $\varkappa = 5.000$, $\mathcal{R} = [1.0950 \quad 1.0950 \quad 1.0950]$, $\varphi \sim N(0, \sigma^2 V(v) = \sigma^2 V)$ şeklindedir. Burada, Eşitlik (2.28.) ile verilen modeldeki y vektörünün 14 üncü elemanının en yüksek yüzdelik penetrasyon değerine sahip olması nedeniyle $\varkappa$, y vektörünün 14 üncü elemanını $\mathcal{R}$, Eşitlik (4.73.) yardımıyla elde edilen X matrisinin 14 üncü satırını göstermektedir ve keyfi $\beta = [2 \quad 1.5 \quad 9]'$ şeklinde alınır.

Bu çalışmanın amacı, stokastik lineer kısıt altında ilk olarak varyans bileşenlerinin REML tahmin edicilerini daha sonra da mixed ve stokastik kısıtlı ridge tahmin ve ön tahmin edicileri elde etmektir. Mixed ve stokastik kısıtlı ridge tahmin ve ön tahmin edicileri elde edildikten sonra, bu tahmin edicilerin lineer kombinasyonlarının ön tahmin edicilerinin $tr(mMSE)$ ye karşılık gelen sMSE kriterine göre karşılaştırılması amaçlanmaktadır (Kuran ve Özkale, 2016).

Varsayımsal veri oluşturulduktan ve stokastik lineer kısıt verildikten sonra, model Eşitlik (4.6.) veya Eşitlik (4.7.) deki gibi yazılır ve ilk olarak, varyans bileşenlerinin REML tahmin edicileri iteratif yöntemler yardımıyla R programında elde edilir.

R programında yer alan ***nlme*** paketi ile ***lme*** fonksiyonu hibrid yaklaşımını kullanmaktadır. R programında kodların ingilizce yazılması nedeniyle penetrasyon yerine penetration, imalatçı yerine manufacturer ve filtre yerine filter yazılmasıyla R kodu,

lme(penetration~intercept+aerosol+manufacturer,random=~0|filter,aerosoldata, method="REML",weights=varIdent(form=~1|filter=="filter0"))

olarak elde edilir. Bu kodda, *weights=varIdent(form=~1|filter=="filter0")* argümanı G ve R ye ek olarak V yi de tahmin eder ve *"filter0"*, $\curlyvee$ ye karşılık gelen yüzdelik penetrasyon değerini gösterir. Yazılan bu R kodunun sırasıyla 2.2.4.3 ve 4.3.3.1 de yer alan EM ve NR iterasyonlarını hibrid yaklaşımında ifade edildiği gibi kullanmasıyla varyans bileşenlerinin tahminleri $\tilde{G} = 0.2534 \times I_7$, $\tilde{R} = 9.9353 \times I_{37}$ ve $\tilde{V} = 0.6547 \times I_1$ ve dolayısıyla $\tilde{H} = Z\tilde{G}Z' + \tilde{R}$ olarak elde edilir.

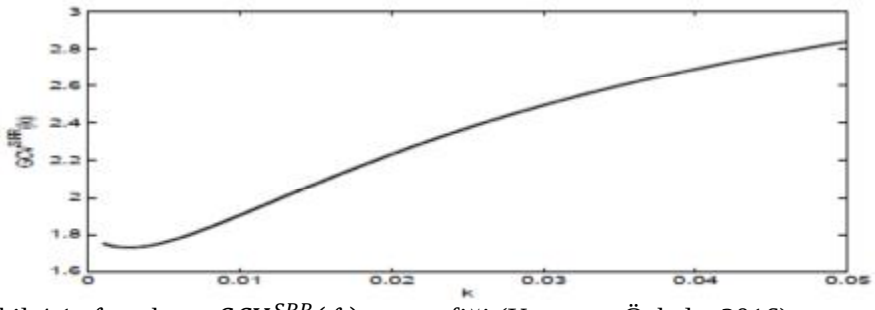
Varyans bileşenlerinin REML tahmin edicileri bulunduktan sonra sırasıyla BLUE ve BLUP

$$\tilde{\beta} = \begin{bmatrix} 10.8672 \\ -15.9017 \\ 6.9127 \end{bmatrix}, \ \tilde{u} = \begin{bmatrix} 0.0000 \\ 0.0736 \\ -0.0349 \\ -0.0387 \\ -0.1289 \\ 0.0516 \\ 0.0023 \end{bmatrix}$$

olarak elde edilir ve burada, $sMSE(\tilde{\beta}) = 38.7791$ dir. Daha sonra sırasıyla mixed tahmin ve ön tahmin edicileri

$$\tilde{\beta}_{me} = \begin{bmatrix} 20.0638 \\ -28.3389 \\ 11.8321 \end{bmatrix}, \ \tilde{u}_{mp} = \begin{bmatrix} -0.4277 \\ 0.0736 \\ -0.0349 \\ -0.0387 \\ -0.2595 \\ -0.0790 \\ -0.1283 \end{bmatrix} \qquad (4.74.)$$

şeklinde bulunur. Mixed tahmin ve ön tahmin edicileri bulunduktan sonra $\tilde{H}$, $\tilde{V}$ ve $\tilde{\beta}_{me}$ nin Eşitlik (4.46.) da yerine yazılmasıyla $\tilde{\sigma}^2_{me} = 0.2454$ olarak elde edilir.



Şekil 4.1. k ya karşı $GCV^{SRR}(k)$ nın grafiği (Kuran ve Özkale, 2016)

Stokastik kısıtlı ridge tahmin ve ön tahmin edicilerin elde edilebilmeleri için Eşitlik (4.27.) ile verilen $GCV^{SRR}(k)$ istatistiğinden yararlanılarak k değeri 0.0027 olarak bulunur. Şekil 4.1 de verilen k ya karşı $GCV^{SRR}(k)$ nın grafiği, $GCV^{SRR}(k)$ yı minimum yapan k değerini göstermektedir.

$k = 0.0027$ için sırasıyla stokastik kısıtlı ridge tahmin ve ön tahmin edicileri

$$\tilde{\beta}_{me}(\hbar) = \begin{bmatrix} 16.7971 \\ -24.0884 \\ 10.5708 \end{bmatrix},\ \tilde{u}_{mp}(\hbar) = \begin{bmatrix} -0.2807 \\ 0.0807 \\ -0.0278 \\ -0.0316 \\ -0.2189 \\ -0.0384 \\ -0.0877 \end{bmatrix} \qquad (4.75.)$$

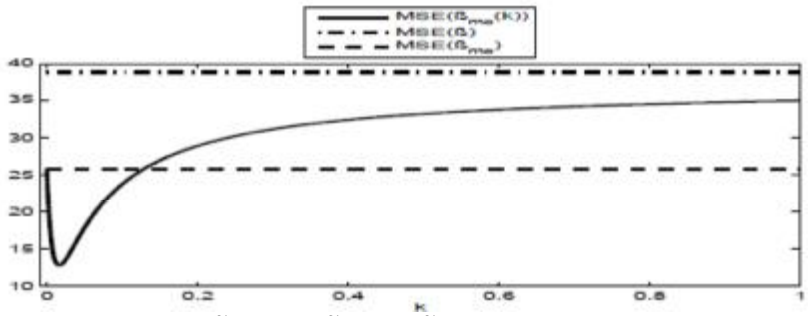
biçiminde elde edilir. Bu çalışmada Eşitlik (4.46.) ile verilen $\tilde{\sigma}^2_{me}$, Eşitlik (4.47.) ile verilen $\tilde{\sigma}^2_{me}(\hbar)$ ye göre yansız olması nedeniyle tercih edilmektedir.

Eşitlik (4.74.) ve Eşitlik (4.75.) yardımıyla, $\tilde{\beta}_{me}$ ve $\tilde{\beta}_{me}(\hbar)$ için sırasıyla sMSE değerleri

$$sMSE(\tilde{\beta}_{me}) = 25.7631\,,\ sMSE(\tilde{\beta}_{me}(\hbar)) = 19.7910$$

şeklinde bulunur ve dolayısıyla, $\tilde{\beta}_{me}(\hbar)$ nın $\tilde{\beta}_{me}$ ye göre sMSE kriteri altında daha üstün olduğu söylenir.

$\hbar = 0.0027$ için Teorem 4.1 ile verilen koşul, $0.1153 < \tilde{\sigma}^2_{me} = 0.2454$ olarak hesaplanır ve böylece, $\tilde{\beta}_{me}(\hbar)$ nın $\tilde{\beta}_{me}$ ye göre mMSE kriteri altında da daha üstün olduğu gösterilmiş olur.



Şekil 4.2. $\hbar$ ya karşı $\tilde{\beta}_{me}(\hbar)$, $\tilde{\beta}_{me}$ ve $\tilde{\beta}$ nın sMSE değerlerinin grafiği (Kuran ve Özkale, 2016)

Şekil 4.2 incelendiğinde, sMSE kriteri altında $\tilde{\beta}_{me}(\hbar)$ ve $\tilde{\beta}_{me}$ nin tüm $\hbar$ değerleri için $\tilde{\beta}$ dan daha üstün oldukları fakat $\tilde{\beta}_{me}(\hbar)$ nın küçük $\hbar$ değerleri (bu veri kümesinde $\hbar$ için eşik değer=0.133) için $\tilde{\beta}_{me}$ den daha üstün olduğu ifade edilir.

5. LİU TAHMİN VE ÖN TAHMİN EDİCİLER

Lineer regresyon modellerinde Liu tahmin ediciler, Liu (1993) tarafından incelenmiştir. Bu bölümde, lineer karma modellerdeki alternatif tahmin edicilere ek olarak Eşitlik (3.1.) ile verilen ve kapalı formda Eşitlik (2.1.) ile ifade edilen lineer karma model altında varyans-kovaryans matrisinin bilindiği varsayımı ile Liu tahmin ve ön tahmin edicileri tanımlanacak ve bu tahmin edicilerin, belirli bir stokastik lineer kısıt altında aslında mixed tahmin ve ön tahmin edicilerin özel bir durumuna karşılık geldikleri gösterilecektir. Liu tahmin ve ön tahmin edicilerin BLUE/BLUP ile ridge tahmin ve ön tahmin edicileriyle ilişkileri ortaya konulacak ve mMSE kriteri kullanılarak tahmin edicilerin performansları karşılaştırılacaktır. Aynı zamanda, sMSE kriteri kullanılarak, Liu yanlılık parametresinin seçimi incelenecektir.

5.1. Sabit ve Rastgele Etkilerin Liu Tahmini

Cezalandırılmış log-likelihood yaklaşımı (penalized log-likelihood approach) yardımıyla sabit ve rastgele etkilerin parametre vektörleri tahmin edilecektir.

Eşitlik (2.1.) ile verilen model altında u ile y nin ortak dağılımı

$$\begin{bmatrix} u \\ y \end{bmatrix} \sim N\left(\begin{bmatrix} 0 \\ X\beta \end{bmatrix}, \sigma^2 \begin{bmatrix} G & GZ' \\ ZG & H \end{bmatrix}\right)$$

olarak elde edilir ve u verilmişken y nin koşullu dağılımı (Searle, 1971, Bölüm 2.4f) $y|u \sim N(X\beta + Zu, \sigma^2 R)$ şeklinde bulunur.

(y, u) nun ortak log-likelihood dağılım fonksiyonu

$$logf(y,u) = logf(y|u) + logf(u)$$

olmak üzere,

$$logf(y,u) = -\frac{1}{2}\{(n+mq)log(2\pi) + (n+mq)log\sigma^2 + log|R| + log|G| + [(y-X\beta-Zu)'R^{-1}(y-X\beta-Zu) + u'G^{-1}u]/\sigma^2\}$$

biçiminde elde edilir.

$logf(y,u)$ ya $\delta = \frac{1}{2\sigma^2} \geq 0$ ***düzeltme parametresine (regularization parameter)*** sahip ***cezalandırma teriminin (penalization term)*** eklenmesiyle

$$logf(y,u) - \frac{1}{2\sigma^2}(\beta - d\hat{\beta})'(\beta - d\hat{\beta}) \qquad (5.1.)$$

elde edilir. Burada d, $0 < d < 1$ olacak şekildeki Liu yanlılık parametresini ve $\hat{\beta}$, Eşitlik (4.1.) ile verilen BLUE yu göstermektedir.

$logf(y,u)$ ya cezalandırma teriminin eklenmesinin nedeni, β ya $\hat{\beta}$ dan daha yakın olan yeni bir tahmin edici elde etmektir. Bu amaçla, orijin yani $\hat{\beta}$ yerine verilmiş bir nokta ile bir tahmin edici arasındaki farkın minimum yapılması istenmektedir. Swindel (1976), verilmiş bir noktanın ***ön bilgiye (prior information)*** dayalı olarak seçilmesi gerektiğini ifade etmiştir ve bu çalışmada, ön bilgi $d\hat{\beta}$ olarak seçilmiştir.

Eşitlik (5.1.) in önce β ya sonra u ya göre kısmi türevlerinin alınıp, sıfıra eşitlenmesi ve β ile u yerine sırasıyla Liu tahmin edicinin ve Liu ön tahmin edicinin çözümlerine karşılık gelen $\hat{\beta}_d$ ile $\hat{u}_d$ nin yazılması sonucunda

$$X'R^{-1}\left(y - X\hat{\beta}_d\right) + d\hat{\beta} - \hat{\beta}_d - X'R^{-1}Z\hat{u}_d = 0 \qquad (5.2.)$$

$$Z'R^{-1}\left(y - X\hat{\beta}_d\right) - \left(Z'R^{-1}Z + G^{-1}\right)\hat{u}_d = 0 \qquad (5.3.)$$

olarak ifade edilen eşitlikler bulunur.

Henderson (1950) ve Henderson ve ark. (1959) incelendiğinde, Eşitlik (5.2.) ve Eşitlik (5.3.) ün Henderson ın lineer karma model eşitliklerine benzediği yorumu yapılabilir. Fakat aralarında ufak bir farklılık bulunmaktadır. Bu farklılık, Eşitlik (5.2.) ve (5.3.) ün $\hat{\beta}_d$ ile $\hat{u}_d$ ye, Henderson ın lineer karma model eşitliklerinin ise Eşitlik (4.1.) ve (4.2.) ile verilen $\hat{\beta}$ ile $\hat{u}$ ya uygulanması şeklinde açıklanabilir.

Eşitlik (5.2.) ve Eşitlik (5.3.) matris formunda

$$\begin{bmatrix} X'R^{-1}X + I_p & X'R^{-1}Z \\ Z'R^{-1}X & Z'R^{-1}Z + G^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\beta}_d \\ \hat{u}_d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X'R^{-1}y + d\hat{\beta} \\ Z'R^{-1}y \end{bmatrix} \quad (5.4.)$$

biçiminde yazılabilir. Gilmour ve ark. (1995) nın yaklaşımı yardımıyla, Eşitlik (5.4.)

$$C\hat{\Psi} = \omega'R^{-1}y + \vartheta \quad (5.5.)$$

olarak da yazılabilir. Burada $\omega = [X, Z]$, $\hat{\Psi} = (\hat{\beta}_d', \hat{u}_d')'$, $\vartheta = (d\hat{\beta}', 0')'$, ve

$$G^{**} = \begin{bmatrix} I_p & 0 \\ 0 & G \end{bmatrix} \text{ ve } G^{**+} = \begin{bmatrix} I_p & 0 \\ 0 & G^{-1} \end{bmatrix}$$

olmak üzere, $C = \omega'R^{-1}\omega + G^{**+}$ şeklinde olup, "+" Moore-Penrose tersi göstermektedir.

Eşitlik (5.5.) in çözülmesi sonucunda

$$\hat{\Psi} = C^{-1}\omega'R^{-1}y + C^{-1}\vartheta \quad (5.6.)$$

elde edilir. Burada C^{-1}, $\nabla = (Z'R^{-1}Z + G^{-1})^{-1}$ olmak üzere,

$$\begin{bmatrix} \left(X'H^{-1}X + I_p\right)^{-1} & -\left(X'H^{-1}X + I_p\right)^{-1}X'H^{-1}ZG \\ -GZ'H^{-1}X\left(X'H^{-1}X + I_p\right)^{-1} & \nabla + GZ'H^{-1}X\left(X'H^{-1}X + I_p\right)^{-1}X'H^{-1}ZG \end{bmatrix}$$

şeklinde olup, parçalanmış matris ters formülü (Marsaglia ve Styan, 1974a, b) yardımıyla bulunabilir. C^{-1} in Eşitlik (5.6.) da yerine yazılmasından ve bazı matematiksel işlemlerin yapılmasından sonra sırasıyla ***Liu tahmin edici (Liu estimator)*** ve ***Liu ön tahmin edici (Liu predictor)***

$$\hat{\beta}_d = \left(X'H^{-1}X + I_p\right)^{-1}\left(X'H^{-1}y + d\hat{\beta}\right) \tag{5.7.}$$

$$\hat{u}_d = GZ'H^{-1}\left(y - X\hat{\beta}_d\right) \tag{5.8.}$$

olarak adlandırılan tahmin ediciler elde edilirler.

Liu tahmin ve ön tahmin edicilerin, $\mathcal{R} = I_p$ ile $V = I_p$ stokastik lineer kısıt altında Eşitlik (4.15.) ve Eşitlik (4.16.) ile verilen mixed tahmin ve ön tahmin edicilerin özel bir durumuna karşılık geldikleri görülmektedir.

Sherman-Morrison-Woodbury Teoremi (Marsaglia ve Styan, 1974a, b) yardımıyla

$$\begin{aligned}\left(X'H^{-1}X + I_p\right)^{-1} = {} & (X'H^{-1}X)^{-1} - (X'H^{-1}X)^{-1}\left(I_p + (X'H^{-1}X)^{-1}\right) \\ & \times (X'H^{-1}X)^{-1}\end{aligned} \tag{5.9.}$$

biçiminde yazılabilir.

Eşitlik (5.9.) un kullanılmasıyla Eşitlik (5.7.)

$$\hat{\beta}_d = \hat{\beta} + (X'H^{-1}X)^{-1}\left(I_p + (X'H^{-1}X)^{-1}\right)^{-1}\left(d\hat{\beta} - \hat{\beta}\right) \tag{5.10.}$$

kısıtlı tahmin edici formunda yazılabilir ve burada $\hat{\beta}$, Eşitlik (4.1.) ile verilen BLUE yu göstermektedir.

Eşitlik (5.10.) aynı zamanda

$$\hat{\beta}_d = \left[I_p - \left(X'H^{-1}X + I_p\right)^{-1}(1-d)\right]\hat{\beta} = \left(X'H^{-1}X + I_p\right)^{-1}\left(X'H^{-1}X + dI_p\right)\hat{\beta}$$

shrinkage tahmin edici formunda da yazılabilir. Böylece, $\hat{\beta}_d$ nin $d = 1$ için Eşitlik (4.1.) ile verilen BLUE ve $d = 0$ için Eşitlik (4.3.) ile verilen $k = 1$ olan ridge tahmin edici arasında bir yol izlediği söylenebilir.

5.2. Tahmin Edicilerin Karşılaştırılması

4.4 üncü bölümde verilen $\hat{\mu}$ ve $\hat{\mu}(k)$ yardımıyla

$$\hat{\mu}_d = \mathcal{L}'\hat{\beta}_d + \mathcal{M}'\hat{u}_d = Q\hat{\beta}_d + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}y \qquad (5.11.)$$

şeklinde elde edilmektedir.

$\hat{\mu}$, $\hat{\mu}(k)$ ve $\hat{\mu}_d$ verildikten sonra, $\hat{\mu}_d$ ile $\hat{\mu}$ ve $\hat{\mu}_d$ ile $\hat{\mu}(k)$ karşılaştırmaları mMSE kriteri aracılığıyla yapılacaktır.

Štulajter (1997) yardımıyla, Eşitlik (5.11.) için

$$\begin{aligned} mMSE(\hat{\mu}_d) &= E\left((\hat{\mu}_d - \mu)(\hat{\mu}_d - \mu)'\right) \\ &= Var(\hat{\mu}_d) + Var(\mu) + Bias(\hat{\mu}_d)Bias(\hat{\mu}_d)' \\ &\quad -Cov(\hat{\mu}_d, \mu) - Cov(\mu, \hat{\mu}_d) \end{aligned} \qquad (5.12.)$$

olarak yazılır ve burada, $Bias(\hat{\mu}_d) = E(\hat{\mu}_d - \mu)$ şeklindedir.

Eşitlik (5.12.) nin elde edilebilmesi amacıyla sırasıyla $Var(\hat{\mu}_d)$, $Var(\mu)$, $Bias(\hat{\mu}_d)$ ve $Cov(\hat{\mu}_d, \mu)$ bulunacaktır.

$$\begin{aligned} Var(\hat{\mu}_d) &= Var(\mathcal{Q}\hat{\beta}_d + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}y) \\ &= \mathcal{Q}Var(\hat{\beta}_d)\mathcal{Q}' + \mathcal{Q}Cov(\hat{\beta}_d, y)H^{-1}Z G\mathcal{M} \\ &+ \mathcal{M}'GZ'H^{-1}Cov(y, \hat{\beta}_d)\mathcal{Q}' \\ &+ \mathcal{M}'GZ'H^{-1}Var(y)H^{-1}ZG\mathcal{M} \end{aligned} \quad (5.13.)$$

biçiminde olup,

$$\begin{aligned} Var(\hat{\beta}_d) &= \sigma^2\left(X'H^{-1}X + I_p\right)^{-1}\left(X'H^{-1}X + dI_p\right)(X'H^{-1}X)^{-1} \\ &\times \left(X'H^{-1}X + dI_p\right)\left(X'H^{-1}X + I_p\right)^{-1} \end{aligned}$$

$$Cov(\hat{\beta}_d, y) = \sigma^2\left(X'H^{-1}X + I_p\right)^{-1}\left(X'H^{-1}X + dI_p\right)(X'H^{-1}X)^{-1}X'$$

ile verilir.

$$\begin{aligned} Bias(\hat{\mu}_d) &= E(\hat{\mu}_d - \mu) \\ &= E(\mathcal{Q}\hat{\beta}_d + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}y - \mathcal{L}'\beta - \mathcal{M}'u) \\ &= \mathcal{Q}E(\hat{\beta}_d) + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}E(y) - \mathcal{L}'\beta - \mathcal{M}'E(u) \\ &= \mathcal{Q}(E(\hat{\beta}_d - \beta)) = \mathcal{Q}Bias(\hat{\beta}_d) \end{aligned} \quad (5.14.)$$

şeklinde elde edilir ve burada, $Bias\left(\hat{\beta}_d\right) = -(1-d)\left(X'H^{-1}X + I_p\right)^{-1}\beta$ dır.

$$\begin{aligned} Cov(\hat{\mu}_d, \mu) &= Cov(\mathcal{Q}\hat{\beta}_d + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}y, \mathcal{L}'\beta + \mathcal{M}'u) \\ &= \mathcal{Q}Cov(\hat{\beta}_d, u)\mathcal{M} + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}Cov(y, u)\mathcal{M} \end{aligned} \quad (5.15.)$$

biçiminde olup,

$$Cov(\hat{\beta}_d, u) = \sigma^2\left(X'H^{-1}X + I_p\right)^{-1}\left(X'H^{-1}X + dI_p\right)(X'H^{-1}X)^{-1}X'ZG$$

ve $Cov(y,u) = \sigma^2 ZG$ dir.

Eşitlik (5.13.), (4.52.), (5.14.) ve (5.15.) in Eşitlik (5.12.) de yerine yazılmasıyla

$$mMSE(\hat{\mu}_d) = \mathcal{Q} mMSE(\hat{\beta}_d)\mathcal{Q}' + \sigma^2 \mathcal{M}'(G - GZ'H^{-1}ZG)\mathcal{M} \qquad (5.16.)$$

olarak elde edilir ve $mMSE(\hat{\beta}_d) = Var(\hat{\beta}_d) + Bias(\hat{\beta}_d)Bias(\hat{\beta}_d)'$ olup,

$$\begin{aligned} mMSE(\hat{\beta}_d) = \; & \sigma^2\left(X'H^{-1}X + I_p\right)^{-1}\left(X'H^{-1}X + dI_p\right)(X'H^{-1}X)^{-1} \\ & \times \left(X'H^{-1}X + dI_p\right)\left(X'H^{-1}X + I_p\right)^{-1} \\ & + (1-d)^2\left(X'H^{-1}X + I_p\right)^{-1}\beta\beta'\left(X'H^{-1}X + I_p\right)^{-1} \end{aligned} \qquad (5.17.)$$

şeklindedir.

Eşitlik (5.16.), (4.63.) ve (4.64.) incelendiğinde, $mMSE(\hat{\mu}_d)$, $mMSE(\hat{\mu})$ ve $mMSE(\hat{\mu}(k))$ karşılaştırmalarının sırasıyla $mMSE(\hat{\beta}_d)$, $mMSE(\hat{\beta})$ ve $mMSE(\hat{\beta}(k))$ karşılaştırmalarına denk olduğu söylenebilir.

İşlem kolaylığının sağlanması amacıyla Eşitlik (2.1.) ile verilen model, ortogonal dönüşüm yardımıyla kanonik forma dönüştürülmüştür. H pd bir matris olduğu için $H = N'N$ olacak şekilde tersi alınabilir simetrik bir N matrisi vardır. Eşitlik (2.1.) in her iki tarafının N^{-1} ile çarpılması sonucunda

$$y^* = X^*\beta + Z^*u + \varepsilon^* \qquad (5.18.)$$

elde edilir. Burada $y^* = N^{-1}y$, $X^* = N^{-1}X$, $Z^* = N^{-1}Z$, $\varepsilon^* = N^{-1}\varepsilon$ ve $Var(y^*) = \sigma^2 I$ dır.

$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_p \geq 0$ iken $\Lambda = diag(\lambda_i)$, $X'H^{-1}X$ matrisinin λ_i $(i = 1, \ldots, p)$ özdeğerlerinden oluşan $p \times p$ tipinde köşegen bir matris ve $\mathrm{P} =$

$[\mathcal{P}_1 \dots \mathcal{P}_p]$ kolonları $X'H^{-1}X$ matrisinin standartlaştırılmış özvektörleri olan $p \times p$ tipinde ortogonal bir matris olmak üzere, $X'H^{-1}X = \mathcal{P}'\Lambda\mathcal{P}$ spektral ayrışımı yapılsın. O halde, Eşitlik (5.18.) ile verilen model

$$y^* = \mathcal{Q}^*\alpha + Z^*u + \varepsilon^*$$

olarak yazılır. Burada $\mathcal{Q}^* = X^*\mathcal{P}'$ ve $\alpha = \mathcal{P}\beta$ olup, herhangi bir $\tilde{\alpha}$ tahmin edicisi için $mMSE(\tilde{\alpha}) = \mathcal{P}mMSE(\tilde{\beta})\mathcal{P}'$ elde edilir. Böylece, Eşitlik (5.17.), Eşitlik (4.65.) ve Eşitlik (4.66.)

$$mMSE(\hat{\alpha}_d) = \sigma^2(\Lambda + I_p)^{-1}(\Lambda + dI_p)\Lambda^{-1}(\Lambda + dI_p)(\Lambda + I_p)^{-1} + (1-d)^2(\Lambda + I_p)^{-1}\alpha\alpha'(\Lambda + I_p)^{-1} \quad (5.19.)$$

$$mMSE(\hat{\alpha}) = \sigma^2\Lambda^{-1} \quad (5.20.)$$

ve

$$mMSE(\hat{\alpha}(k)) = \sigma^2(\Lambda + kI_p)^{-1}\Lambda(\Lambda + kI_p)^{-1} + k^2(\Lambda + kI_p)^{-1}\alpha\alpha'(\Lambda + kI_p)^{-1} \quad (5.21.)$$

şeklinde elde edilir.

Teorem 5.1. $\hat{\beta}_d$ nin $\hat{\beta}$ dan mMSE kriterine göre daha üstün olması için gerek ve yeter koşul

$$\beta'\left(I_p + \frac{1+d}{2}(X'H^{-1}X)^{-1}\right)^{-1}\beta < \frac{2\sigma^2}{1-d}$$

eşitsizliğinin sağlanmasıdır.

İspat. Eşitlik (5.19.) ve Eşitlik (5.20.) yardımıyla

$$mMSE(\hat{\beta}) - mMSE(\hat{\beta}_d) = \mathcal{P}'[mMSE(\hat{\alpha}) - mMSE(\hat{\alpha}_d)]\mathcal{P}$$
$$= \mathcal{P}'(\Lambda + I_p)^{-1}\acute{S}(\Lambda + I_p)^{-1}\mathcal{P}$$

olarak yazılır ve burada $c = \frac{2\sigma^2}{1-d}$ pozitif bir skaleri ve $A = I_p + \frac{1+d}{2}(\mathcal{P}X'H^{-1}X\,\mathcal{P}')^{-1}$ pd bir matrisi göstermek üzere,
$\acute{S} = (1-d)\{[2\sigma^2 I_p + (1+d)\sigma^2\Lambda^{-1}] - (1-d)\alpha\alpha'\}$ şeklindedir.

$$\acute{S} = (1-d)\left\{(1-d)\left[\frac{\sigma^2(2I_p + (1+d)\Lambda^{-1})}{(1-d)} - \alpha\alpha'\right]\right\}$$
$$= (1-d)^2\left[\frac{2\sigma^2}{1-d}\left(I_p + \frac{1+d}{2}(\mathcal{P}X'H^{-1}X\,\mathcal{P}')^{-1}\right) - (\mathcal{P}\beta)(\mathcal{P}\beta)'\right]$$
$$= (1-d)^2[cA - (\mathcal{P}\beta)(\mathcal{P}\beta)']$$

düzenlemesi yapılır. Farebrother (1976) yardımıyla, $cA - (\mathcal{P}\beta)(\mathcal{P}\beta)'$ nün pd bir matris olması için gerek ve yeter koşul ise $(\mathcal{P}\beta)'A^{-1}(\mathcal{P}\beta) < c$ olduğu ifade edilir ve böylece, teoremin ispatı tamamlanmış olur. Lineer regresyon modellerinde Sakallıoğlu ve ark. (1996) tarafından verilen teoremin lineer karma modellere uyarlanmış olduğu görülmektedir. Benzer şekilde, Sakallıoğlu ve ark. (2001) yardımıyla aşağıdaki teorem elde edilecektir.

Teorem 5.2. $0 < k < 1$ olacak şekilde sabit bir k değeri alınsın ve $d_{1i} = \frac{\lambda_i(1-k)}{\lambda_i+k}$ $(i = 1, \dots, p)$ için $0 < d < \max_{i=1,\dots,p}\{d_{1i}\} < 1$ olsun. $\hat{\beta}_d$ nin $\hat{\beta}(k)$ dan mMSE kriterine göre daha üstün olması için gerek koşul

$$Bias(\hat{\beta}_d)'\left(Var(\hat{\beta}(k)) - Var(\hat{\beta}_d)\right)^{-1} Bias(\hat{\beta}_d) \leq 1$$

şeklindedir.

İspat. Eşitlik (5.19.) ve Eşitlik (5.21.) yardımıyla $mMSE(\hat{\beta}(k)) - mMSE(\hat{\beta}_d)$

$$Var(\hat{\beta}(k)) - Var(\hat{\beta}_d) + Bias(\hat{\beta}(k))Bias(\hat{\beta}(k))' - Bias(\hat{\beta}_d)Bias(\hat{\beta}_d)'$$

olarak yazılır ve burada

$$\begin{aligned} Var(\hat{\beta}(k)) - Var(\hat{\beta}_d) &= \sigma^2 P'[(\Lambda + kI_p)^{-1}\Lambda(\Lambda + kI_p)^{-1} \\ &\quad -(\Lambda + I_p)^{-1}(\Lambda + dI_p)\Lambda^{-1}(\Lambda + dI_p)(\Lambda + I_p)^{-1}]P \\ &= \sigma^2 \left[P' diag\left\{\frac{\lambda_i}{(\lambda_i + k)^2} - \frac{(\lambda_i + d)^2}{\lambda_i(\lambda_i + 1)^2}\right\}_{i=1}^{p} P\right] \quad (5.22.) \end{aligned}$$

şeklindedir. Eşitlik (5.22.) ile verilen ifadenin pd olması için gerek ve yeter koşul $f(d) = \lambda_i^2(\lambda_i + 1)^2 - (\lambda_i + d)^2(\lambda_i + k)^2 > 0$ eşitsizliğinin sağlanmasıdır. Sabit bir k değeri için $f(d)$ fonksiyonu, sırasıyla, $d_{1i} = \frac{\lambda_i(1-k)}{\lambda_i+k}$ ve $d_{2i} = \frac{-2\lambda_i^2-\lambda_i k-\lambda_i}{\lambda_i+k}$ olmak üzere, iki köke sahiptir.

$0 < d_{1i} < 1$ ve $0 < k < 1$ için $f(d)$ pozitiftir. $Bias(\hat{\beta}(k))Bias(\hat{\beta}(k))'$ pd olduğundan, $mMSE(\hat{\beta}(k)) - mMSE(\hat{\beta}_d)$ pd olması için gerek koşul $Var(\hat{\beta}(k)) - Var(\hat{\beta}_d) - Bias(\hat{\beta}_d)Bias(\hat{\beta}_d)'$ ifadesi pozitif yarı tanımlı (positive semi definite, psd) bir matris olmalıdır.

Farebrother (1976) yardımıyla,

$$Var(\hat{\beta}(k)) - Var(\hat{\beta}_d) - Bias(\hat{\beta}_d)Bias(\hat{\beta}_d)'$$

ifadesinin psd olması için gerek koşul $0 < \hbar < 1$ için

$$Bias(\hat{\beta}_d)'\big(Var(\hat{\beta}(\hbar)) - Var(\hat{\beta}_d)\big)^{-1} Bias(\hat{\beta}_d) \leq 1$$

sağlanmasıdır. Dolayısıyla, teoremin ispatı tamamlanmış olur.

5.3. Liu Yanlılık Parametresinin Seçimi

Bu bölümde, sMSE kriteri kullanılarak, Liu yanlılık parametresinin seçimi incelenecektir.

$$sMSE(\hat{\alpha}_d) = tr\big(mMSE(\hat{\alpha}_d)\big) = \sigma^2 \sum_{i=1}^{p} \frac{(\lambda_i + d)^2}{\lambda_i(\lambda_i + 1)^2} + (1-d)^2 \sum_{i=1}^{p} \frac{\alpha_i^2}{(\lambda_i + 1)^2}$$

ve

$$\frac{\partial\, sMSE(\hat{\alpha}_d)}{\partial d} = 2\sigma^2 \sum_{i=1}^{p} \frac{\lambda_i + d}{\lambda_i(\lambda_i + 1)^2} - 2(1-d) \sum_{i=1}^{p} \frac{\alpha_i^2}{(\lambda_i + 1)^2}$$

yardımıyla $sMSE(\hat{\alpha}_d)$ ifadesi minimum yapılır ve

$$d = \frac{\sum_{i=1}^{p} \frac{\alpha_i^2 - \sigma^2}{(\lambda_i + 1)^2}}{\sum_{i=1}^{p} \frac{\sigma^2 + \lambda_i \alpha_i^2}{\lambda_i(\lambda_i + 1)^2}}$$

olarak elde edilir. α_i^2 ve σ^2 yerine sırasıyla $\hat{\alpha}_i^2 - \frac{\hat{\sigma}^2}{\lambda_i}$ ve

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{(y^* - X^*\hat{\beta})'(y^* - X^*\hat{\beta})}{n-p} = \frac{(y - X\hat{\beta})'H^{-1}(y - X\hat{\beta})}{n-p}$$

yansız tahminlerinin yazılmasıyla

$$\hat{d} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{p} \frac{\hat{\sigma}^2}{\lambda_i(\lambda_i + 1)}}{\sum_{i=1}^{p} \frac{\hat{\alpha}_i^2}{(\lambda_i + 1)^2}}$$

bulunur. $\hat{d}$ nın her zaman 1 den küçük ve $\frac{\sum_{i=1}^{p} \frac{\hat{\sigma}^2}{\lambda_i(\lambda_i+1)}}{\sum_{i=1}^{p} \frac{\hat{\alpha}_i^2}{(\lambda_i+1)^2}} < 1$ olduğu sürece pozitif bir değer aldığı açıktır. d nin $(0,1)$ aralığındaki tahminini elde etmek için

$$\hat{d}_h = 1 - h\frac{\sum_{i=1}^{p} \frac{\hat{\sigma}^2}{\lambda_i(\lambda_i + 1)}}{\sum_{i=1}^{p} \frac{\hat{\alpha}_i^2}{(\lambda_i + 1)^2}}$$

tanımlanır ve burada h, $0 < h < \frac{\sum_{i=1}^{p} \frac{\hat{\alpha}_i^2}{(\lambda_i+1)^2}}{\sum_{i=1}^{p} \frac{\hat{\sigma}^2}{\lambda_i(\lambda_i+1)}}$ eşitliğini sağlayan keyfi bir sabit olarak belirlenir.

Bununla birlikte, h ın aldığı değere bağlı olarak $\hat{d}_h$, $sMSE(\hat{\alpha}_d)$ yı minimum yapmayabilir ve bu durumda, $sMSE(\hat{\alpha}_d)$ ın $sMSE(\hat{\alpha})$ dan daha küçük olmasını sağlayacak $(0,1)$ aralığındaki $\hat{d}_h$ a ihtiyaç duyulur.

Teorem 5.3. $X'H^{-1}X$ matrisinin özdeğerleri $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_p \geq 0$ olmak üzere h,

$$\sum_{i=1}^{p} \frac{1}{\lambda_i(\lambda_i + 1)} > \frac{2}{\lambda_p(\lambda_p + 1)}$$

için

$$0 < h < min\left\{\frac{2(n-p)}{n-p+2}\left(1 - \frac{2}{\sum_{i=1}^{p} \frac{\lambda_p(\lambda_p+1)}{\lambda_i(\lambda_i+1)}}\right), \frac{\sum_{i=1}^{p} \frac{\hat{\alpha}_i^2}{(\lambda_i+1)^2}}{\sum_{i=1}^{p} \frac{\hat{\sigma}^2}{\lambda_i(\lambda_i+1)}}\right\}$$

koşulunu sağlarsa tüm α ve σ^2 değerleri için $\hat{\alpha}_{\hat{d}_h}$, $\hat{\alpha}$ dan sMSE kriterine göre daha üstün olur.

İspat. $\hat{\alpha}_{\hat{d}_h}$, $\tilde{\alpha}$ ile gösterilsin. O halde, $\tilde{\alpha} = \left(\Lambda + I_p\right)^{-1}\left(\Lambda + \hat{d}_h I_p\right)\hat{\alpha}$ olur ve $\tilde{\alpha}$ nın i inci elemanı $\tilde{\alpha}_i = \frac{\lambda_i + \hat{d}_h}{\lambda_i + 1}\hat{\alpha}_i$ $(i = 1, \dots, p)$ elde edilir. Böylece,

$$\begin{aligned} E((\tilde{\alpha}_i - \alpha_i)^2) &= E\left(\left(\hat{\alpha}_i - \alpha_i + \frac{\hat{d}_h - 1}{\lambda_i + 1}\hat{\alpha}_i\right)^2\right) \\ &= E((\hat{\alpha}_i - \alpha_i)^2) + \frac{2}{\lambda_i + 1} E\left((\hat{d}_h - 1)\hat{\alpha}_i(\hat{\alpha}_i - \alpha_i)\right) \\ &\quad + \frac{1}{(\lambda_i + 1)^2} E\left(\left(\hat{d}_h - 1\right)^2 \hat{\alpha}_i^2\right) \end{aligned} \qquad (5.23.)$$

elde edilir. Burada

$$E\left((\hat{d}_h - 1)\hat{\alpha}_i(\hat{\alpha}_i - \alpha_i)\right) = -hE\left(\left(\frac{\sum_{i=1}^{p} \frac{\hat{\sigma}^2}{\lambda_i(\lambda_i+1)}}{\sum_{i=1}^{p} \frac{\hat{\alpha}_i^2}{(\lambda_i+1)^2}}\right)\hat{\alpha}_i(\hat{\alpha}_i - \alpha_i)\right)$$

dır. $\hat{\alpha}_i \sim N\left(0, \frac{\sigma^2}{\lambda_i}\right)$ olması sebebiyle, Stein (1981) yardımıyla,

$$E\left((\hat{d}_h - 1)\hat{\alpha}_i(\hat{\alpha}_i - \alpha_i)\right) =$$

$$-h\frac{\sigma^2}{\lambda_i}E\left(\left(\frac{\sum_{i=1}^{p}\frac{\hat{\sigma}^2}{\lambda_i(\lambda_i+1)}}{\sum_{i=1}^{p}\frac{\hat{\alpha}_i^2}{(\lambda_i+1)^2}}\right) - \frac{2\hat{\alpha}_i^2}{(\lambda_i+1)^2}\frac{\sum_{i=1}^{p}\frac{\hat{\sigma}^2}{\lambda_i(\lambda_i+1)}}{\left(\sum_{i=1}^{p}\frac{\hat{\alpha}_i^2}{(\lambda_i+1)^2}\right)^2}\right)$$

bulunur. Dolayısıyla, Eşitlik (5.23.)

$$E((\tilde{\alpha}_i - \alpha_i)^2) = E((\hat{\alpha}_i - \alpha_i)^2) + E\left[\frac{\sum_{i=1}^{p}\frac{\hat{\sigma}^2}{\lambda_i(\lambda_i+1)}}{\sum_{i=1}^{p}\frac{\hat{\alpha}_i^2}{(\lambda_i+1)^2}}\left(-\frac{2h\sigma^2}{\lambda_i(\lambda_i+1)} + \frac{4h\sigma^2}{\lambda_i(\lambda_i+1)^3}\frac{1}{\sum_{i=1}^{p}\frac{\hat{\alpha}_i^2}{(\lambda_i+1)^2}} + \frac{h^2\hat{\alpha}_i^2}{(\lambda_i+1)^2}\frac{\sum_{i=1}^{p}\frac{\hat{\sigma}^2}{\lambda_i(\lambda_i+1)}}{\sum_{i=1}^{p}\frac{\hat{\alpha}_i^2}{(\lambda_i+1)^2}}\right)\right]$$

olur.

$$sMSE(\hat{\alpha}) = tr\left(mMSE(\hat{\alpha})\right) = \sigma^2\sum_{i=1}^{p}\frac{1}{\lambda_i}$$

yardımıyla $\Delta = sMSE(\tilde{\alpha}) - sMSE(\hat{\alpha})$

$$\Delta = E\left[\frac{\sum_{i=1}^{p}\frac{\hat{\sigma}^2}{\lambda_i(\lambda_i+1)}}{\sum_{i=1}^{p}\frac{\hat{\alpha}_i^2}{(\lambda_i+1)^2}}\left(\sum_{i=1}^{p}\frac{-2h\sigma^2}{\lambda_i(\lambda_i+1)}+\sum_{i=1}^{p}\frac{4h\sigma^2\hat{\alpha}_i^2}{\lambda_i(\lambda_i+1)^3}\frac{1}{\sum_{i=1}^{p}\frac{\hat{\alpha}_i^2}{(\lambda_i+1)^2}}\right.\right.$$
$$\left.\left.+\sum_{i=1}^{p}\frac{h^2\hat{\alpha}_i^2}{(\lambda_i+1)^2}\frac{\sum_{i=1}^{p}\frac{\hat{\sigma}^2}{\lambda_i(\lambda_i+1)}}{\sum_{i=1}^{p}\frac{\hat{\alpha}_i^2}{(\lambda_i+1)^2}}\right)\right]$$

bulunur. $\hat{\alpha}$ ve $\hat{\sigma}^2$ nın bağımsızlığından, $E(\hat{\sigma}^2) = \sigma^2$ ve $E(\hat{\sigma}^4) = \frac{n-p+2}{n-p}\sigma^4$ yazılır ve

$$\Delta = E\left[\frac{\sum_{i=1}^{p}\frac{\hat{\sigma}^2}{\lambda_i(\lambda_i+1)}}{\sum_{i=1}^{p}\frac{\hat{\alpha}_i^2}{(\lambda_i+1)^2}}h\left(\sum_{i=1}^{p}\frac{-2\sigma^4}{\lambda_i(\lambda_i+1)}+\frac{4\sigma^4}{\lambda_i(\lambda_i+1)}\right.\right.$$
$$\left.\left.+h\sum_{i=1}^{p}\frac{n-p+2}{n-p}\frac{\sigma^4}{\lambda_i(\lambda_i+1)}\right)\right]$$
$$\leq E\left[\frac{\sum_{i=1}^{p}\frac{1}{\lambda_i(\lambda_i+1)}}{\sum_{i=1}^{p}\frac{\hat{\alpha}_i^2}{(\lambda_i+1)^2}}h\left(\sum_{i=1}^{p}\frac{-2\sigma^4}{\lambda_i(\lambda_i+1)}+\frac{4\sigma^4}{\lambda_p(\lambda_p+1)}\right.\right.$$
$$\left.\left.+h\sum_{i=1}^{p}\frac{n-p+2}{n-p}\frac{\sigma^4}{\lambda_i(\lambda_i+1)}\right)\right]$$

elde edilir. Δ nın negatif olması için

$$s(h) = h\left(\sum_{i=1}^{p}\frac{-2\sigma^4}{\lambda_i(\lambda_i+1)}+\frac{4\sigma^4}{\lambda_p(\lambda_p+1)}+h\sum_{i=1}^{p}\frac{n-p+2}{n-p}\frac{\sigma^4}{\lambda_i(\lambda_i+1)}\right)$$

ifadesi negatif olmalıdır. $s(h)$ ifadesi, $\sum_{i=1}^{p}\frac{1}{\lambda_i(\lambda_i+1)} > \frac{2}{\lambda_p(\lambda_p+1)}$ için

$$0 < h < \frac{2(n-p)}{n-p+2}\left(1-\frac{2}{\sum_{i=1}^{p}\frac{\lambda_p(\lambda_p+1)}{\lambda_i(\lambda_i+1)}}\right)$$

ve $\sum_{i=1}^{p}\frac{1}{\lambda_i(\lambda_i+1)} < \frac{2}{\lambda_p(\lambda_p+1)}$ için

$$\frac{2(n-p)}{n-p+2}\left(1-\frac{2}{\sum_{i=1}^{p}\frac{\lambda_p(\lambda_p+1)}{\lambda_i(\lambda_i+1)}}\right) < h < 0 \qquad (5.24.)$$

altında negatif olur. $\hat{d}_h$ ın $(0,1)$ aralığında olması istendiğinden Eşitlik $(5.24.)$ ile verilen aralıktaki h için $\hat{d}_h \notin (0,1)$ dir. Böylece, teoremin ispatı tamamlanmış olur.

Yardımcı Teorem 5.4. $\sum_{i=1}^{p}\frac{\lambda_p(\lambda_p+1)}{\lambda_i(\lambda_i+1)} < 2$ koşulunu sağlayan bir veri kümesi ile karşılaşılırsa $\hat{d}_h$, $d\epsilon(0,1)$ olacak şekilde seçilebilir.

5.4. Uygulama: Tahıl Verisi

Bu uygulama çalışmasında, 2005-2015 yılları boyunca rastgele seçilen 27 bölgeden (Belçika, Bulgaristan, Çek Cumhuriyeti, Danimarka, Almanya, Estonya, Yunanistan, İspanya, Fransa, Hırvatistan, İtalya, Letonya, Litvanya, Lüksemburg, Macaristan, Hollanda, Avusturya, Polonya, Portekiz, Romanya, Slovenya, Slovakya, Finlandiya, İsveç, Birleşik Krallık, Norveç, İsviçre) alınan ve temel fiyat (mal üzerindeki vergiyi içermeyen fiyat) altında elde edilen 297 tahılın üretim değerlerinden (milyon Euro cinsinden) oluşan veri seti kullanılmıştır (http://appsso.eurostat.ec.europa.eu/nui/show.do?dataset=aact eaa01/).

Temel fiyat altındaki tahıl üretim değerlerinin belirlenmesi amacıyla kızıl (veya kılçıksız) buğday, yumuşak kızıl (veya kılçıksız) buğday ve son olarak da çavdar tahıl ürünleri üzerinden tekrarlı gözlemler alınmıştır.

Temel fiyat altındaki tahıl üretim değerleri yanıt değişken olan y yi, kızıl (veya kılçıksız) buğday, yumuşak kızıl (veya kılçıksız) buğday ve çavdar ise sırasıyla x_1, x_2 ve x_3 açıklayıcı değişkenlerini göstermektedir. Yani, kızıl (veya kılçıksız) buğday, yumuşak kızıl (veya kılçıksız) buğday ve çavdar sabit etkileri, rastgele seçilen 27 bölge de rastgele etkileri göstermekte olup, RIS modeli

$$y_{ij} = \beta_1 x_{ij1} + \beta_2 x_{ij2} + \beta_3 x_{ij3} + u_1 + u_2 t_{ij} + \varepsilon_{ij} \quad i = 1,\dots,27 \; j = 1,\dots,11$$

şeklinde tanımlanmıştır. Burada y_{ij}, yanıt değişkenin j inci bölgesinin i inci gözlemini, $s = 1,2,3$ olmak üzere x_{ijs}, x_s açıklayıcı değişkeninin j inci bölgesinin i inci gözlemini ve t_{ij}, y_{ij} ye karşılık gelen zamanı göstermektedir.

Modelin oluşturulmasının ardından önce Matlab R2014a programında yer alan ***fitlme*** fonksiyonunun ML ve REML yöntemlerini kullanılmasıyla farklı varyans-kovaryans yapıları elde edilmiş sonra da AIC ve BIC kriterlerinden yararlanılarak en uygun varyans-kovaryans yapısı belirlenmiştir.

Çizelge 5.1. Farklı varyans-kovaryans yapıları için özet tablo

	ML		**REML**	
Var-Kov yapıları	**AIC**	**BIC**	**AIC**	**BIC**
UN	4504.0	4529.9	4513.4	4539.2
UN(1)	4502.0	4524.2	4511.5	4533.6
VC	4505.9	4524.4	4515.3	4533.7
CS	4507.9	4530.1	4517.3	4539.4

Çizelge 5.1 incelendiğinde, UN(1) varyans-kovaryans yapısının ML ve REML yöntemleri altında en küçük AIC ve BIC değerlerine sahip olduğu görülmektedir. UN(1) modeli altında,

$$\hat{G}_{ML} = \begin{bmatrix} 3.6452e+04 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \hat{G}_{REML} = \begin{bmatrix} 3.6749e+04 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

ve $\hat{R}_{ML} = 2.1253e+05I_{297}$, $\hat{R}_{REML} = 2.1470e+05I_{297}$ olarak elde edilmiştir. Fakat, $\hat{G}_{ML}$ ve $\hat{G}_{REML}$ nin pd olmamaları sebebiyle, Çizelge 5.1 in yeniden incelenmesi gerekmektedir.

Çizelge 5.1 yeniden incelendiğinde, ML ve REML yöntemleri altında UN varyans-kovaryans yapısının en küçük AIC değerine ve VC varyans-kovaryans yapısının en küçük BIC değerine sahip olduğu görülmektedir. Kass ve Raftery (1995) nin AIC kriterinin BIC kriterine göre daha kompleks modellerde tercih edilebilir olduğu düşüncesinden yararlanılarak, VC varyans-kovaryans modeli tercih edilmiştir ve

$$\hat{G}_{ML} = \begin{bmatrix} 1.5357e+04 & 0 \\ 0 & 1.5357e+04 \end{bmatrix}, \hat{R}_{ML} = 2.1337e+05I_{297}$$

$$\hat{G}_{REML} = \begin{bmatrix} 1.5389e+04 & 0 \\ 0 & 1.5389e+04 \end{bmatrix}, \hat{R}_{REML} = 2.1556e+05I_{297}$$

olarak bulunmuştur. ML yöntemi altındaki VC varyans-kovaryans yapısının REML yöntemi altındakinden daha küçük AIC ve BIC değerlerine sahip olması ve ML ile REML yöntemlerinin kullanılması sonucunda elde edilen değerler arasında büyük farklar olmaması (Özkale ve Can, 2017) sebebiyle, ML yöntemi altındaki VC varyans-kovaryans yapısı kullanılmıştır.

$X'\hat{H}_{ML}^{-1}X$ matrisinin özdeğerleri sırasıyla $\lambda_1 = 5.1189e+03$, $\lambda_2 = 44.1452$ ve $\lambda_3 = 13.6413$ şeklinde hesaplanmıştır. Çoklu iç ilişkinin

belirlenmesinde kullanılan koşul sayısı, λ_{max} ve λ_{min} sırasıyla $X'\widehat{H}_{ML}{}^{-1}X$ matrisinin en büyük ve en küçük özdeğerlerini göstermek üzere, $\lambda_{max}/\lambda_{min}$ = 375.2525 > 100 olarak elde edilmiştir. Bu durum, orta şiddetli çoklu iç ilişkinin varlığını ifade etmektedir.

Özkale ve Can (2017) deki k nın seçiminden yararlanılarak, $\hat{\sigma}^2$ = 1.0102 olmak üzere, $\hat{k}$ = $p\hat{\sigma}^2/\hat{\beta}'\hat{\beta}$ = 0.2182 olarak hesaplanmıştır. Ve, Liu yanlılık parametresi d, $\hat{d}_h$ olarak seçilmiştir. Burada h, $\sum_{i=1}^{p}\frac{1}{\lambda_i(\lambda_i+1)} > \frac{2}{\lambda_p(\lambda_p+1)}$ koşulunun sağlanması durumunda Teorem 5.3 de tanımlanan üst sınırın keyfi olarak belirlenen 0.99 ile çarpılmasıyla ve $\sum_{i=1}^{p}\frac{1}{\lambda_i(\lambda_i+1)} < \frac{2}{\lambda_p(\lambda_p+1)}$ koşulunun sağlanması durumunda ise Teorem 5.3 de verilen alt sınırın keyfi olarak belirlenen 0.8650 ile çarpılmasıyla belirlenmiştir.

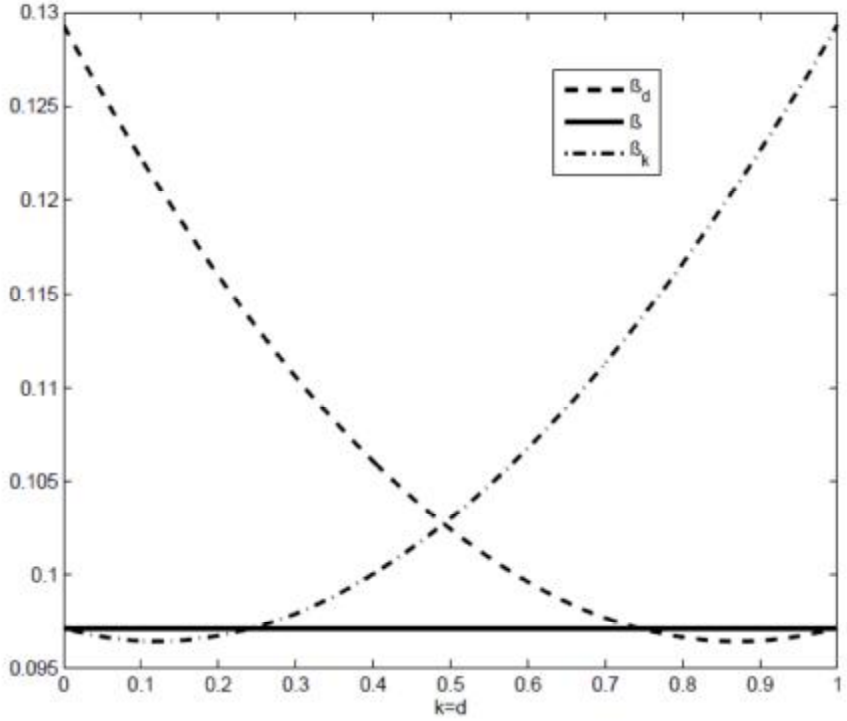
Tahmin ve ön tahmin edicilerin aldıkları değerler ile sMSE kriterinin aldığı değerler Çizelge 5.2 de verilmiştir.

Çizelge 5.2. $\hat{k}$ = 0.2182 ve $\hat{d}_h$ = 0.8650 için tahmin ve ön tahmin ediciler ile sMSE nin aldığı değerler

	$\hat{\beta}$	$\hat{u}$	$\hat{\beta}_{\hat{k}}$	$\hat{u}_{\hat{k}}$	$\hat{\beta}_{\hat{d}_h}$	$\hat{u}_{\hat{d}_h}$
β_1	2.5618	–	2.5495	–	2.5545	–
β_2	−0.9588	–	−0.9441	–	−0.9501	–
β_3	2.5307	–	2.4870	–	2.5051	–
u_1	–	167.1305	–	168.1030	–	167.7055
u_2	–	2.7617	–	2.7719	–	2.7678
$sMSE$	0.097136	–	0.096875	–	0.096423	–

Çizelge 5.2 incelendiğinde, $\hat{\beta}_{\hat{d}_h}$ ın sMSE kriteri altında en üstün performansa sahip olduğu görülmektedir. $\hat{k}$ = 0.2182 ve $\hat{d}_h$ = 0.8650 için Teorem 5.1 ile verilen koşul, 13.2509<$2\hat{\sigma}^2/(1-\hat{d}_h)$ = 14.9659 olarak hesaplanır ve böylece, $\hat{\beta}_{\hat{d}_h}$ nın $\hat{\beta}$ ya göre mMSE kriteri altında da daha üstün olduğu gösterilmiş olur.

Farklı k ve d değerleri için k ve d ye karşı $\hat{\beta}$, $\hat{\beta}_d$ ve $\hat{\beta}_k$ nın sMSE değerlerinin grafiği Şekil 5.1 de verilmiştir.



Şekil 5.1. k ve d ye karşı $\hat{\beta}$, $\hat{\beta}_d$ ve $\hat{\beta}_k$ nın sMSE değerlerinin grafiği

Şekil 5.1 incelendiğinde, sMSE anlamında $\hat{\beta}_d$ nin tüm $0.744 < d < 1$ aralığındaki d değerleri için ve $\hat{\beta}_k$ nın tüm $0 < k < 0.248$ aralığındaki k değerleri için $\hat{\beta}$ dan daha üstün oldukları görülmektedir. $\hat{\beta}_k$ nın küçük k ve d değerleri (bu veri kümesinde k ve d için eşik değer=0.5) için $\hat{\beta}_d$ den daha üstün olduğu ifade edilmektedir. Diğer yandan, k ve d değerleri büyüdükçe (0.5 den büyük) $\hat{\beta}_d$, sMSE anlamında $\hat{\beta}_k$ dan daha üstün olmaktadır. Aynı zamanda Şekil 5.1, d değerleri arttıkça $\hat{\beta}_d$ nin sMSE değerlerinin önce azaldığını daha sonra 1 e

yaklaştıkça biraz arttığını; k değerleri arttıkça $\hat{\beta}_k$ nın sMSE değerlerinin önce azaldığını daha sonra arttığını da göstermektedir.

Bu uygulama çalışması bize, k ve d nin uygun seçimi için sMSE kriteri altında $\hat{\beta}_d$ nin $\hat{\beta}_k$ ve $\hat{\beta}$ dan daha üstün olduğunu göstermektedir.

5.5. Uygulama: Simülasyon Çalışması

Bu bölümde $\hat{\beta}$, $\hat{\beta}_d$ ile $\hat{u}$, $\hat{u}_d$ nin performansları sırasıyla *tahmin edilen hata kareler ortalaması (estimated mean square error, EMSE)* ile *ön tahmin edilen hata kareler ortalaması (predicted mean square error, PMSE)* kriterleri altında incelenecektir.

Çoklu iç ilişkinin sabit etkilere karşılık gelen X matrisinde olması nedeniyle, sabit etkilere karşılık gelen veri, McDonald ve Galarneau (1975) yardımıyla,

$$x_{ijk} = (1-\gamma^2)^{1/2} w_{ijk} + \gamma\, w_{ijp+1} \qquad i = 1,\dots,m \;\; j = 1,\dots,n_i \;\; k = 1,\dots,p$$

eşitliğinden elde edilmiştir. Burada, w_{ijk} ler bağımsız standart normal rastgele sayıları ve γ^2, herhangi iki sabit etki arasındaki korelasyonu göstermektedir. Bu çalışmada, $\gamma^2 = 0.85,0.90,0.95,0.99$, $p = 2,3,4$, $m = 30,60$ ve $n_i = 5$ olarak alınmıştır.

Newhouse ve Oman (1971) yardımıyla parametre vektörü $\beta = (\beta_1,\dots,\beta_p)'$, $\beta'\beta = 1$ olacak şekilde $X'H^{-1}X$ matrisinin en büyük özdeğerine karşılık gelen normalleştirilmiş özvektör olarak seçilmiştir. O halde, $q = 2$ rastgele etkiye sahip model, $u_i \sim N(0, \sigma_u^2 I_q)$ $\varepsilon_{ij} \sim N(0, \sigma_\varepsilon^2 I_{n_i})$ olmak üzere,

$$y_{ij} = \beta_1 x_{ij1} + \cdots + \beta_p x_{ijp} + u_{i1} z_{ij1} + \cdots + u_{iq} z_{ijq} + \varepsilon_{ij}$$

şeklinde verilmiştir. Burada $l = 1, \dots, q$ için z_{ijl}, $[-2,2]$ aralığında düzgün dağılımdan üretilmiştir ve σ_u^2 ile σ_ε^2 için 0.1,0.5 ve 1 değerleri alınmıştır. Yanıt değişkenler üretilirken p, m, γ, σ_u^2 ve σ_ε^2 un her seçimi için deney 500 kez tekrar edilmiştir.

Liu yanlılık parametresi d, $\hat{d}_h$ olarak seçilmiştir. Burada h, $\sum_{i=1}^{p} \frac{1}{\lambda_i(\lambda_i+1)} > \frac{2}{\lambda_p(\lambda_p+1)}$ koşulunun sağlanması durumunda Teorem 5.3 de tanımlanan üst sınırın keyfi olarak belirlenen 0.05 ile çarpılmasıyla ve $\sum_{i=1}^{p} \frac{1}{\lambda_i(\lambda_i+1)} < \frac{2}{\lambda_p(\lambda_p+1)}$ koşulunun sağlanması durumunda ise Teorem 5.3 de verilen alt sınırın keyfi olarak belirlenen 0.7 ile çarpılmasıyla belirlenmiştir.

β nın herhangi bir tahmin edicisi olan $\tilde{\beta}$ nın EMSE değerleri ile u nun herhangi bir tahmin edicisi olan $\tilde{u}$ nın PMSE değerleri, sırasıyla,

$$EMSE(\tilde{\beta}) = \frac{1}{500}\sum_{t=1}^{500}(\tilde{\beta}_{(t)} - \beta)'(\tilde{\beta}_{(t)} - \beta)$$

ve

$$PMSE(\tilde{u}) = \frac{1}{500}\sum_{t=1}^{500}(\tilde{u}_{(t)} - u)'(\tilde{u}_{(t)} - u)$$

şeklinde hesaplanmıştır. Burada (t), t inci deneyi göstermektedir ve hesaplamalar, Matlab R2014a yardımıyla yapılmıştır.

Çizelge 5.3-5.8 ile verilen simülasyon sonuçları aşağıdaki şekilde özetlenebilir:

(1) p, m, γ^2 ve σ_u^2 un sabit değerleri altında, $\hat{\beta}$ ve $\hat{\beta}_{\hat{d}_h}$ ın EMSE değerleri σ_ε^2 nin artışıyla beraber artmaktadır. Ancak, σ_u^2 un yerine σ_ε^2 sabit olduğunda, σ_u^2 da meydana gelen artış $\hat{\beta}$ ve $\hat{\beta}_{\hat{d}_h}$ nin EMSE değerleri üzerinde düzenli bir etkiye sahip olmamaktadır.

(2) Tüm durumlarda, $EMSE\left(\hat{\beta}_{\hat{d}_h}\right)$ değerleri $EMSE\left(\hat{\beta}\right)$ değerlerinden küçüktür. Fakat, sabit p, γ^2, σ_u^2 ve σ_ε^2 değerleri altında, m değerleri arttıkça $\hat{\beta}_{\hat{d}_h}$ ile $\hat{\beta}$ nın EMSE değerleri arasındaki fark azalmaktadır.

(3) (2) numara ile verilen sonuç yardımıyla, $\hat{\beta}_{\hat{d}_h}$ ın $\hat{\beta}$ üzerindeki üstünlüğünün küçük m değerleri ile sabit p, γ^2, σ_u^2 ve σ_ε^2 değerleri altında daha iyi bir şekilde görülebildiği ifade edilmektedir.

(4) Sabit p, m, σ_u^2 ve σ_ε^2 değerleri altında γ^2 değerleri arttıkça, $EMSE\left(\hat{\beta}_{\hat{d}_h}\right)$ ve $EMSE\left(\hat{\beta}\right)$ değerleri artmaktadır ve özellikle $\gamma^2 = 0.99$ için $EMSE\left(\hat{\beta}_{\hat{d}_h}\right)$ ve $EMSE\left(\hat{\beta}\right)$ değerleri arasındaki fark artmaktadır. Bu durum, p nin büyük değerlerinde daha açık bir şekilde görülmektedir.

(5) Çoklu iç ilişkinin sabit etkilere karşılık gelen X matrisinde olması nedeniyle rastgele etkiler, çoklu iç ilişkiden sabit etkiler kadar etkilenmemektedirler. Dolayısıyla, tüm durumlarda $PMSE\left(\hat{u}_{\hat{d}_h}\right)$ değerleri $PMSE(\hat{u})$ değerlerinden daha küçük olmalarına rağmen $PMSE\left(\hat{u}_{\hat{d}_h}\right)$ ile $PMSE(\hat{u})$ değerleri arasındaki fark çok değildir.

(6) (1) numara ile verilen sonuç yardımıyla, $\hat{u}_{\hat{d}_h}$ ve $\hat{u}$ ın PMSE değerlerinin sabit p, m, γ^2 ve σ_u^2 un değerleri için σ_ε^2 değerlerinin artışıyla beraber arttığı ifade edilmektedir. Bununla birlikte, σ_u^2 un yerine σ_ε^2 sabit olduğunda, σ_u^2 da meydana gelen artış $\hat{u}$ ve $\hat{u}_{\hat{d}_h}$ ın PMSE değerleri üzerinde düzenli bir etkiye sahip olmamaktadır.

(7) Sabit $p, \gamma^2, \sigma_\varepsilon^2$ ve σ_u^2 un değerleri için, $PMSE\left(\hat{u}_{\hat{d}_h}\right)$ ile $PMSE(\hat{u})$ değerleri m değerleri arttıkça artmaktadır. Bu durum, yüksek γ^2 değerlerinde daha açık bir

şekilde görülmektedir. Fakat, (2) numara ile verilen sonucun aksine, sabit $p, \gamma^2, \sigma_\varepsilon^2$ ve σ_u^2 un değerleri altında m değerlerinde meydana gelen artışın $PMSE\left(\hat{u}_{\hat{d}_h}\right)$ ile $PMSE(\hat{u})$ değerleri arasındaki fark üzerinde düzenli bir etkisi bulunmamaktadır.

Çizelge 5.3. $p = 2, m = 30, n_i = 5$ ve $\hat{d}_h$ ın kullanılması ile EMSE ve PMSE değerleri

γ^2	σ_u^2	σ_ε^2	$EMSE(\hat{\beta})$	$PMSE(\hat{u})$	$EMSE(\hat{\beta}_{\hat{d}_h})$	$PMSE(\hat{u}_{\hat{d}_h})$
0.85	0.1	0.1	0.007301	1.063037	0.007273	1.063009
		0.5	0.033080	3.130361	0.032562	3.130151
		1	0.058143	3.686117	0.056536	3.685708
	0.5	0.1	0.007569	1.582392	0.007537	1.582329
		0.5	0.035610	5.822154	0.035019	5.821390
		1	0.076974	8.658703	0.074201	8.655829
	1	0.1	0.007592	1.274006	0.007565	1.273969
		0.5	0.038140	6.243469	0.037478	6.242572
		1	0.071684	11.923242	0.069044	11.919493
0.90	0.1	0.1	0.011944	1.062507	0.011870	1.062430
		0.5	0.044032	2.897924	0.043000	2.897631
		1	0.094602	3.874731	0.090406	3.873965
	0.5	0.1	0.011421	1.517259	0.011354	1.517186
		0.5	0.048622	5.430095	0.047376	5.429048
		1	0.094209	8.409436	0.089741	8.406966
	1	0.1	0.012137	1.643164	0.012056	1.642961
		0.5	0.053713	6.891277	0.052274	6.889764
		1	0.097749	11.513550	0.092801	11.509241
0.95	0.1	0.1	0.021129	1.052151	0.020880	1.052060
		0.5	0.089872	3.008561	0.085840	3.007903
		1	0.162327	3.738008	0.150114	3.737359
	0.5	0.1	0.026750	1.569848	0.026356	1.569348
		0.5	0.098191	5.631275	0.093524	5.629361
		1	0.194305	8.430600	0.176849	8.426158
	1	0.1	0.020933	1.574062	0.020683	1.573855
		0.5	0.115616	6.619300	0.108776	6.615874
		1	0.193193	12.528203	0.175510	12.521295
0.99	0.1	0.1	0.106552	0.985720	0.100756	0.985261
		0.5	0.447147	2.631635	0.371645	2.629587
		1	0.819810	3.725764	0.614271	3.723080
	0.5	0.1	0.109019	1.354315	0.102713	1.353540
		0.5	0.464592	5.780831	0.381603	5.774184
		1	0.899101	8.579240	0.659772	8.566079
	1	0.1	0.107784	1.725078	0.101612	1.723969
		0.5	0.610975	6.453169	0.489085	6.435087
		1	0.862155	12.312341	0.635537	12.297236

Çizelge 5.4. $p = 2, m = 60, n_i = 5$ ve $\hat{d}_h$ ın kullanılması ile EMSE ve PMSE değerleri

γ^2	σ_u^2	σ_ε^2	$EMSE(\hat{\beta})$	$PMSE(\hat{u})$	$EMSE(\hat{\beta}_{\hat{d}_h})$	$PMSE(\hat{u}_{\hat{d}_h})$
0.85	0.1	0.1	0.003585	2.025109	0.003578	2.025107
		0.5	0.015647	5.798573	0.015518	5.798473
		1	0.028335	7.636152	0.027923	7.636045
	0.5	0.1	0.003813	3.074600	0.003806	3.074588
		0.5	0.017944	10.746050	0.017772	10.745745
		1	0.032263	18.207104	0.031719	18.206072
	1	0.1	0.004060	3.146779	0.004051	3.146721
		0.5	0.017785	13.507899	0.017627	13.507496
		1	0.035340	22.117924	0.034694	22.116362
0.90	0.1	0.1	0.005083	2.238323	0.005068	2.238293
		0.5	0.023570	5.794335	0.023269	5.794146
		1	0.038311	7.284251	0.037455	7.284035
	0.5	0.1	0.005613	2.858382	0.005596	2.858323
		0.5	0.024346	11.284819	0.023995	11.284234
		1	0.049352	18.410994	0.048115	18.409661
	1	0.1	0.006339	3.365114	0.006317	3.365031
		0.5	0.036193	12.559157	0.035524	12.557367
		1	0.051804	20.915866	0.050227	20.913375
0.95	0.1	0.1	0.009335	2.288424	0.009284	2.288383
		0.5	0.042702	5.873450	0.041613	5.873151
		1	0.078447	7.539131	0.075005	7.538690
	0.5	0.1	0.010847	3.022173	0.010776	3.022088
		0.5	0.051438	11.074880	0.049947	11.073482
		1	0.087854	18.326038	0.083615	18.324198
	1	0.1	0.009697	3.314349	0.009635	3.314287
		0.5	0.053255	13.241229	0.051802	13.239854
		1	0.096790	20.334882	0.091756	20.331276
0.99	0.1	0.1	0.045155	2.121422	0.043793	2.121239
		0.5	0.224271	5.688380	0.200522	5.686951
		1	0.401218	7.683421	0.333605	7.681412
	0.5	0.1	0.049416	2.620010	0.047886	2.619692
		0.5	0.244961	10.355957	0.216232	10.352084
		1	0.471230	18.145720	0.383410	18.134914
	1	0.1	0.042027	2.574279	0.040872	2.574072
		0.5	0.227738	11.792331	0.201598	11.788116
		1	0.513086	21.506564	0.413532	21.490630

Çizelge 5.5. $p = 3, m = 30, n_i = 5$ ve $\hat{d}_h$ ın kullanılması ile EMSE ve PMSE değerleri

γ^2	σ_u^2	σ_ε^2	$EMSE(\hat{\beta})$	$PMSE(\hat{u})$	$EMSE(\hat{\beta}_{\hat{d}_h})$	$PMSE(\hat{u}_{\hat{d}_h})$
0.85	0.1	0.1	0.014010	1.192687	0.013956	1.192620
		0.5	0.065073	2.872343	0.063958	2.871873
		1	0.114045	3.847748	0.110680	3.847148
	0.5	0.1	0.014774	1.367426	0.014714	1.367362
		0.5	0.068827	5.365583	0.067487	5.364067
		1	0.136572	8.661461	0.131674	8.657503
	1	0.1	0.017751	1.390331	0.017658	1.390161
		0.5	0.072637	7.758036	0.071166	7.755772
		1	0.140678	11.095967	0.135375	11.090682
0.90	0.1	0.1	0.019696	1.166950	0.019583	1.166867
		0.5	0.091414	2.877989	0.089116	2.877433
		1	0.169382	3.791428	0.161844	3.790604
	0.5	0.1	0.022528	1.642848	0.022377	1.642667
		0.5	0.121460	5.368166	0.117596	5.364471
		1	0.194504	8.474831	0.184591	8.470512
	1	0.1	0.024109	1.765367	0.023941	1.765109
		0.5	0.126645	6.620506	0.122410	6.614800
		1	0.211236	12.595885	0.199595	12.587355
0.95	0.1	0.1	0.047215	1.076741	0.046570	1.076451
		0.5	0.190529	2.973658	0.181010	2.972392
		1	0.336581	3.952738	0.309132	3.951211
	0.5	0.1	0.048095	1.459141	0.047427	1.458690
		0.5	0.230856	4.994125	0.217038	4.988536
		1	0.428427	8.377796	0.385543	8.365368
	1	0.1	0.046595	1.900715	0.045968	1.900114
		0.5	0.223079	5.172209	0.209355	5.165876
		1	0.384975	10.922005	0.349487	10.911672
0.99	0.1	0.1	0.222523	1.032079	0.210253	1.031236
		0.5	0.880990	2.879953	0.726212	2.876345
		1	1.659142	3.893419	1.241458	3.888898
	0.5	0.1	0.216302	1.470333	0.204294	1.469072
		0.5	1.026025	4.759467	0.831750	4.747706
		1	2.198307	7.875494	1.575104	7.840985
	1	0.1	0.249326	1.623462	0.233710	1.620831
		0.5	1.082551	7.320312	0.865519	7.298448
		1	1.990639	11.037311	1.443951	10.997649

Çizelge 5.6. $p = 3, m = 60, n_i = 5$ ve $\hat{d}_h$ ın kullanılması ile EMSE ve PMSE değerleri

γ^2	σ_u^2	σ_ε^2	$EMSE(\hat{\beta})$	$PMSE(\hat{u})$	$EMSE(\hat{\beta}_{\hat{d}_h})$	$PMSE(\hat{u}_{\hat{d}_h})$
0.85	0.1	0.1	0.007314	2.374344	0.007299	2.374313
		0.5	0.028754	5.692756	0.028532	5.692595
		1	0.052874	7.659606	0.052116	7.659336
	0.5	0.1	0.007440	2.581798	0.007425	2.581754
		0.5	0.034937	11.266439	0.034598	11.265492
		1	0.072425	17.920834	0.071136	17.918215
	1	0.1	0.007381	3.336448	0.007364	3.336368
		0.5	0.037632	12.624005	0.037249	12.622738
		1	0.065239	23.305011	0.064045	23.302389
0.90	0.1	0.1	0.009886	2.279090	0.009857	2.279038
		0.5	0.044211	5.798847	0.043689	5.798599
		1	0.077727	7.542561	0.076049	7.542187
	0.5	0.1	0.011042	3.006157	0.011007	3.006050
		0.5	0.047334	11.391191	0.046711	11.390322
		1	0.096390	16.393859	0.093816	16.390818
	1	0.1	0.010851	3.015767	0.010819	3.015666
		0.5	0.056282	13.455264	0.055460	13.453041
		1	0.096365	23.522911	0.093816	23.518693
0.95	0.1	0.1	0.020411	2.252931	0.020290	2.252834
		0.5	0.083120	5.814934	0.081181	5.814408
		1	0.158946	7.526780	0.152268	7.525999
	0.5	0.1	0.020643	3.147026	0.020523	3.146869
		0.5	0.108655	11.338069	0.105578	11.335302
		1	0.176141	17.514791	0.167634	17.510456
	1	0.1	0.020658	3.161016	0.020532	3.160833
		0.5	0.108666	13.035865	0.105374	13.031982
		1	0.219480	24.152552	0.207212	24.140531
0.99	0.1	0.1	0.094715	2.234050	0.092208	2.233658
		0.5	0.418668	5.879700	0.377299	5.877679
		1	0.807847	7.459274	0.676821	7.455656
	0.5	0.1	0.117161	2.815414	0.113594	2.814380
		0.5	0.473200	10.423991	0.422309	10.417853
		1	0.975842	18.206931	0.798748	18.183884
	1	0.1	0.104896	2.686850	0.101808	2.686113
		0.5	0.569899	12.281108	0.499700	12.266392
		1	0.948312	23.196212	0.777100	23.169905

Çizelge 5.7. $p = 4, m = 30, n_i = 5$ ve $\hat{d}_h$ ın kullanılması ile EMSE ve PMSE değerleri

γ^2	σ_u^2	σ_ε^2	$EMSE(\hat{\beta})$	$PMSE(\hat{u})$	$EMSE(\hat{\beta}_{\hat{d}_h})$	$PMSE(\hat{u}_{\hat{d}_h})$
0.85	0.1	0.1	0.021039	0.954140	0.020909	0.954011
		0.5	0.087722	2.925006	0.085472	2.924263
		1	0.164857	3.734520	0.157709	3.732617
	0.5	0.1	0.023513	1.558634	0.023386	1.558329
		0.5	0.116204	5.978073	0.112800	5.974585
		1	0.187150	9.110466	0.181686	9.107382
	1	0.1	0.022784	1.582555	0.022680	1.582348
		0.5	0.119430	5.686944	0.116164	5.682292
		1	0.205171	11.350125	0.197809	11.343375
0.90	0.1	0.1	0.029599	1.110936	0.029056	1.110489
		0.5	0.130936	2.906764	0.126696	2.905682
		1	0.239109	3.849386	0.231030	3.848514
	0.5	0.1	0.037458	1.406794	0.037176	1.406396
		0.5	0.151661	5.633774	0.148391	5.631271
		1	0.291116	8.639112	0.283129	8.634290
	1	0.1	0.035414	1.470909	0.035154	1.470541
		0.5	0.172349	6.485477	0.166690	6.479842
		1	0.298717	12.017889	0.289836	12.013195
0.95	0.1	0.1	0.060147	1.049057	0.058789	1.048558
		0.5	0.268924	3.100327	0.260004	3.099027
		1	0.488052	3.876431	0.470322	3.875463
	0.5	0.1	0.061079	1.689600	0.060026	1.688907
		0.5	0.294228	5.603761	0.286170	5.601642
		1	0.606115	8.275485	0.590835	8.270286
	1	0.1	0.067338	1.973973	0.066438	1.973212
		0.5	0.319773	7.257718	0.317318	7.256562
		1	0.616182	11.333072	0.590797	11.321911
0.99	0.1	0.1	0.302787	1.141537	0.290023	1.140578
		0.5	1.367291	2.952614	1.321978	2.951387
		1	2.312123	3.908538	2.197353	3.907505
	0.5	0.1	0.352880	1.787030	0.350931	1.786745
		0.5	1.550566	5.512517	1.512327	5.509137
		1	2.935252	8.243792	2.818078	8.237726
	1	0.1	0.367294	1.536266	0.367182	1.536250
		0.5	1.556712	6.465556	1.498561	6.459650
		1	2.941775	11.587226	2.801095	11.577487

Çizelge 5.8. $p = 4, m = 60, n_i = 5$ ve $\hat{d}_h$ ın kullanılması ile EMSE ve PMSE değerleri

γ^2	σ_u^2	σ_ε^2	$EMSE(\hat{\beta})$	$PMSE(\hat{u})$	$EMSE(\hat{\beta}_{\hat{d}_h})$	$PMSE(\hat{u}_{\hat{d}_h})$
0.85	0.1	0.1	0.010543	2.167905	0.010406	2.167597
		0.5	0.044776	5.904395	0.043674	5.903795
		1	0.079035	7.682513	0.076713	7.681757
	0.5	0.1	0.011577	2.972319	0.011564	2.972275
		0.5	0.050225	11.000124	0.049671	10.998739
		1	0.096815	16.410516	0.095384	16.408010
	1	0.1	0.012096	3.322329	0.012068	3.322202
		0.5	0.054617	11.828433	0.052973	11.823836
		1	0.107977	21.793870	0.105015	21.785935
0.90	0.1	0.1	0.014099	2.165653	0.013978	2.165482
		0.5	0.065076	5.857708	0.063601	5.856667
		1	0.117137	7.560723	0.112894	7.559782
	0.5	0.1	0.017034	3.034423	0.016933	3.034203
		0.5	0.076326	12.353961	0.075340	12.353036
		1	0.147552	16.896699	0.144427	16.893551
	1	0.1	0.016861	3.033624	0.016640	3.033115
		0.5	0.082983	13.227853	0.079260	13.218541
		1	0.162139	20.900951	0.159509	20.895995
0.95	0.1	0.1	0.032132	2.148272	0.031631	2.147798
		0.5	0.126402	5.778693	0.123480	5.778103
		1	0.243406	7.557943	0.236253	7.557046
	0.5	0.1	0.033684	2.869249	0.033230	2.868704
		0.5	0.160937	11.054514	0.154408	11.049243
		1	0.281519	17.197893	0.271272	17.192238
	1	0.1	0.035562	3.125571	0.035185	3.125212
		0.5	0.159422	11.831766	0.158643	11.830878
		1	0.307712	21.827170	0.307581	21.827038
0.99	0.1	0.1	0.161097	2.268601	0.158680	2.268106
		0.5	0.632401	5.694599	0.610522	5.693621
		1	1.189691	7.717458	1.153128	7.716817
	0.5	0.1	0.162089	2.958449	0.159641	2.957890
		0.5	0.735431	11.070557	0.715262	11.067209
		1	1.460848	17.475048	1.418664	17.470785
	1	0.1	0.167901	2.900266	0.162434	2.898987
		0.5	0.774301	13.139543	0.741142	13.132342
		1	1.499071	22.368454	1.451014	22.359901

6. TEMEL BİLEŞENLER REGRESYON VE r-k SINIF TAHMİN VE ÖN TAHMİN EDİCİLER

Bu bölümde, lineer karma modellerdeki alternatif tahmin edicilere ek olarak ikinci bölümde Eşitlik (2.1.) ile verilen lineer karma model altında varyans-kovaryans matrisinin bilindiği varsayımı ile *temel bileşenler regresyon (principal components regression, PCR)* ile *r-k sınıf (r-k class) tahmin ve ön tahmin edicileri* tanımlanacaktır ve BLUE/BLUP, ridge ve PCR tahmin ve ön tahmin edicilerinin aslında r-k sınıf tahmin ve ön tahmin edicilerinin özel bir durumuna karşılık geldikleri gösterilecektir. Aynı zamanda, varyans bileşenlerinin bilinmediği varsayımı da incelenecek ve varyans bileşenlerinin tahmininde REML ve iteratif yöntemlerden faydalanılacaktır. mMSE kriteri kullanılarak, r-k sınıf tahmin ve ön tahmin edicilerin BLUE/BLUP, ridge ve PCR tahmin ve ön tahmin edicilerinden üstün olduğu gerekli ve yeterli koşullar tanımlanacaktır. Bu koşulların sağlanıp sağlanmadığının kontrol edilmesi amacıyla hipotez testlerinden yararlanılacaktır.

6.1. Temel Bileşenler Regresyon (PCR) Tahmin ve Ön Tahmin Ediciler

Lineer regresyon modellerinde ilk olarak Hotelling (1993) tarafından önerilen PCR yöntemi, Eşitlik (2.1.) ile verilen modelin sabit etkilere karşılık gelen kısmının boyutunun indirgenmesi (veya azaltılması) ile çoklu iç ilişki problemlerinin ortadan kaldırılmasını amaçlamaktadır.

H ın bilinen pd bir matris olduğu varsayımı altında, $H^{-1} = N'N$ olacak şekilde tersi alınabilir simetrik bir N matrisi vardır. Eşitlik (2.1.) in her iki tarafının N ile çarpılması sonucunda

$$y^* = X^*\beta + Z^*u + \varepsilon^* \qquad (6.1.)$$

elde edilir. Burada $y^* = Ny, X^* = NX, Z^* = NZ, \varepsilon^* = N\varepsilon$ ve $Var(y^*) = \sigma^2 I$ dır.

Eşitlik (6.1.) ile verilen model için

$$y^* = X^*TT'\beta + Z^*u + \varepsilon^* \qquad (6.2.)$$

dönüşümü yapılsın. Burada $T = (t_1, \dots, t_p)$, $T'X^{*\prime}X^*T = \Lambda$ ile $p \times p$ tipinde ortogonal bir matris ve $\Lambda = diag(\lambda_1, \dots, \lambda_p)$, $X^{*\prime}X^*$ matrisinin özdeğerlerinden oluşan $p \times p$ tipinde köşegen bir matristir. Dahası, $r \leq p$ olmak üzere, T nin $(p-r)$ sütununun silinmesinden sonra kalan sütunlar $T_r = (t_1, \dots, t_r)$ olsun. Böylece, $T_r'X^{*\prime}X^*T_r = \Lambda_r = diag(\lambda_1, \dots, \lambda_r)$ ve $T_{p-r} = (t_{r+1}, \dots, t_p)$ olmak üzere, $T_{p-r}'X^{*\prime}X^*T_{p-r} = \Lambda_{p-r} = diag(\lambda_{r+1}, \dots, \lambda_p)$ şeklindedir.

$T = (T_r, T_{p-r})$ şeklinde parçalanmasından sonra, Eşitlik (6.2.) ile verilen model

$$y^* = X^*T_rT_r'\beta + X^*T_{p-r}T_{p-r}'\beta + Z^*u + \varepsilon^* \qquad (6.3.)$$

olarak yazılıp, indirgenmiş (veya azaltılmış) model

$$y^* = K_r^*\alpha_r + Z^*u + \varepsilon^*$$

biçiminde elde edilir. Burada $K_r^* = X^*T_r$ ve $\alpha_r = T_r'\beta$ dır.

u ile y^* ın ortak dağılımı

$$\begin{bmatrix} u \\ y^* \end{bmatrix} \sim N\left(\begin{bmatrix} 0 \\ K_r^*\alpha_r \end{bmatrix}, \sigma^2 \begin{bmatrix} G & GZ^{*\prime} \\ Z^*G & I \end{bmatrix}\right) \qquad (6.4.)$$

olarak elde edilir ve varyans bileşenlerinin bilindiği varsayımı altında $y^* \sim N(K_r^*\alpha_r, \sigma^2 I)$ olur.

Eşitlik (6.4.) den u nun marjinal dağılımı $u \sim N(0, \sigma^2 G)$ ve u verilmişken y^* ın koşullu dağılımı (Searle, 1971, Bölüm 2.4f), $y^*|u \sim N(K_r^* \alpha_r + Z^* u, \sigma^2 NRN')$ şeklinde elde edilir.

(y^*, u) un ortak log-likelihood dağılım fonksiyonu

$$\begin{aligned} logf(y^*, u) &= logf(y^*|u) + logf(u) \\ &= -\frac{1}{2}\{nlog(2\pi) + nlog\sigma^2 + log|NRN'| \\ &+ (y^* - K_r^* \alpha_r - Z^* u)'(NRN')^{-1}(y^* - K_r^* \alpha_r - Z^* u)/\sigma^2\} \\ &- \frac{1}{2}\{qlog(2\pi) + qlog\sigma^2 + log|G| + u'G^{-1}u/\sigma^2\} \\ &= -\frac{1}{2}\{(n+q)log(2\pi) + (n+q)log\sigma^2 + log|NRN'| + log|G| \\ &+ (y^* - K_r^* \alpha_r)'(NRN')^{-1}(y^* - K_r^* \alpha_r)/\sigma^2\} \\ &- \frac{1}{2\sigma^2}\{u'(Z^*(NRN')^{-1}Z^{*\prime} + G^{-1})u - 2(y^* \\ &- K_r^* \alpha_r)'(NRN')^{-1}Z^* u\} \end{aligned} \qquad (6.5.)$$

biçiminde elde edilir. Eşitlik (6.5.) in önce α ya sonra u ya göre kısmi türevlerinin alınıp, sıfıra eşitlenmesi ve α ile u yerine sırasıyla $\hat{\alpha}_r$ ile $\hat{u}_r$ nin yazılması sonucunda

$$K_r^{*\prime}(NRN')^{-1}(y^* - K_r^* \hat{\alpha}_r) - K_r^{*\prime}(NRN')^{-1}Z^* \hat{u}_r = 0 \qquad (6.6.)$$

$$Z^{*\prime}(NRN')^{-1}(y^* - K_r^* \hat{\alpha}_r) - (Z^{*\prime}(NRN')^{-1}Z^* + G^{-1})\hat{u}_r = 0 \qquad (6.7.)$$

olarak ifade edilen eşitlikler bulunur.

Henderson (1950) ve Henderson ve ark. (1959) incelendiğinde, Eşitlik (6.6.) ve Eşitlik (6.7.) nin Henderson ın lineer karma model eşitliklerine

benzediği yorumu yapılabilir. Fakat aralarında ufak bir farklılık bulunmaktadır. Bu farklılık, Eşitlik (6.6.) ve (6.7.) nin PCR tahmin ve ön tahmin edicilerine, Henderson ın lineer karma model eşitliklerinin ise Eşitlik (4.1.) ve (4.2.) ile verilen $\hat{\beta}$ ile $\hat{u}$ ya uygulanması şeklinde açıklanabilir.

Eşitlik (6.6.) ve Eşitlik (6.7.) matris formunda

$$\begin{bmatrix} K_r^{*\prime}(NRN')^{-1}K_r^* & K_r^{*\prime}(NRN')^{-1}Z^* \\ Z^{*\prime}(NRN')^{-1}K_r^* & Z^{*\prime}(NRN')^{-1}Z^* + G^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\alpha}_r \\ \hat{u}_r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_r^{*\prime}(NRN')^{-1}y^* \\ Z^{*\prime}(NRN')^{-1}y^* \end{bmatrix} \quad (6.8.)$$

biçiminde yazılabilir. Gilmour ve ark. (1995) nın yaklaşımı yardımıyla, Eşitlik (6.8.)

$$C\widehat{\Psi} = \omega'\left(NRN'\right)^{-1}y^* \quad (6.9.)$$

olarak da yazılabilir. Burada $\omega = [K_r^*, Z^*]$, $\widehat{\Psi} = (\hat{\alpha}_r', \hat{u}_r')'$ ve

$$C = \omega'(NRN')^{-1}\omega + G^{*+}$$

şeklinde olup, Eşitlik (6.9.) un çözülmesi sonucunda

$$\widehat{\Psi} = C^{-1}\omega'\left(NRN'\right)^{-1}y^* \quad (6.10.)$$

elde edilir. Burada C^{-1}

$$\begin{bmatrix} (K_r^{*\prime}K_r^*)^{-1} & -(K_r^{*\prime}K_r^*)^{-1}K_r^{*\prime}Z^*G \\ -GZ^{*\prime}K_r^*(K_r^{*\prime}K_r^*)^{-1} & (Z^{*\prime}(NRN')^{-1}Z^* + G^{-1})^{-1} + GZ^{*\prime}K_r^*(K_r^{*\prime}K_r^*)^{-1}K_r^{*\prime}Z^*G \end{bmatrix}$$

şeklinde olup, parçalanmış matris ters formülü (Marsaglia ve Styan, 1974a, b) yardımıyla bulunabilir. C^{-1}, y^*, K_r^*, X^* ve Z^* ın Eşitlik (6.10.) da yerine yazılmasından ve $\hat{\beta}_r = T_r\hat{\alpha}_r$ kullanılmasından sonra, bazı matematiksel işlemlerin yapılmasından ardından sırasıyla ***PCR tahmin edici (PCR estimator)*** ve ***PCR ön tahmin edici (PCR predictor)*** olarak adlandırılan tahmin ediciler

$$\begin{aligned}\hat{\beta}_r &= T_r(T_r'X'H^{-1}XT_r)^{-1}T_r'X'H^{-1}y \\ &= T_r\Lambda_r^{-1}T_r'X'H^{-1}y \end{aligned} \quad (6.11.)$$

$$\hat{u}_r = GZ'H^{-1}\left(y - X\hat{\beta}_r\right) \quad (6.12.)$$

şeklinde elde edilirler.

6.2. r-k Sınıf Tahmin ve Ön Tahmin Ediciler

PCR ve ridge tahmin ve ön tahmin ediciler, çoklu iç ilişki problemlerinin ortadan kaldırılması amacıyla önerilen iki farklı karar kuralı olup, bu alt bölümde, lineer regresyon modellerindeki Baye ve Parker (1984) yararlanılmasıyla, bu iki farklı karar kuralının beraber kullanılması sonucunda r-k sınıf tahmin ve ön tahmin edicileri tanımlanacaktır.

Eşitlik (6.8.) ile verilen matris formunda $K_r^{*\prime}(NRN')^{-1}K_r^*$ ifadesine kI_r teriminin eklenmesi ve $\hat{\alpha}_r$ ile $\hat{u}_r$ yerine sırasıyla $\hat{\alpha}_r(k)$ ile $\hat{u}_r(k)$ kullanılması sonucunda

$$\begin{bmatrix} K_r^{*\prime}(NRN')^{-1}K_r^* + kI_r & K_r^{*\prime}(NRN')^{-1}Z^* \\ Z^{*\prime}(NRN')^{-1}K_r^* & Z^{*\prime}(NRN')^{-1}Z^* + G^{-1} \end{bmatrix}\begin{bmatrix}\hat{\alpha}_r(k) \\ \hat{u}_r(k)\end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_r^{*\prime}(NRN')^{-1}y^* \\ Z^{*\prime}(NRN')^{-1}y^* \end{bmatrix} \quad (6.13.)$$

elde edilir. Gilmour ve ark. (1995) nın yaklaşımı yardımıyla, Eşitlik (6.13.)

$$C(\kappa)\widehat{\Psi}(\kappa) = \omega'\left(NRN'\right)^{-1}y^* \qquad (6.14.)$$

olarak da yazılabilir. Burada $\widehat{\Psi}(\kappa) = (\hat{\alpha}_r'(\kappa), \hat{u}_r'(\kappa))'$ şeklindedir.

Eşitlik (6.14.) ün çözülmesi sonucunda

$$\widehat{\Psi}(\kappa) = C^{-1}(\kappa)\omega'\left(NRN'\right)^{-1}y^* \qquad (6.15.)$$

elde edilir. Buradaki $C^{-1}(\kappa)$ matrisinin Eşitlik (6.10.) da yer alan C^{-1} matrisinden tek farkı, C^{-1} matrisindeki $(K_r^{*\prime}K_r^*)^{-1}$ yerine $C^{-1}(\kappa)$ matrisinde $(K_r^{*\prime}K_r^* + \kappa I_r)^{-1}$ nin gelmesidir.

$C^{-1}(\kappa)$, y^*, K_r^*, X^* ve Z^* ın Eşitlik (6.15.) de yerine yazılmasından ve $\hat{\beta}_r(\kappa) = T_r\hat{\alpha}_r(\kappa)$ kullanılmasından sonra, bazı matematiksel işlemlerin yapılmasından ardından sırasıyla ***r-k sınıf tahmin edici (r-k class estimator)*** ve ***r-k sınıf ön tahmin edici (r-k class predictor)***

$$\hat{\beta}_r(\kappa) = T_r(T_r'X'H^{-1}XT_r + \kappa I_r)^{-1}T_r'X'H^{-1}y \qquad (6.16.)$$

$$\hat{u}_r(\kappa) = GZ'H^{-1}(y - X\hat{\beta}_r(\kappa)) \qquad (6.17.)$$

şeklinde elde edilirler.

(1) $r = p$ ve $\kappa = 0$ iken $\hat{\beta}_p(0) = (X'H^{-1}X)^{-1}X'H^{-1}y$ BLUE yu ve $\hat{u}_p(0) = GZ'H^{-1}(y - X\hat{\beta})$ BLUP ı

(2) $r = p$ iken $\hat{\beta}_p(\kappa) = \left(X'H^{-1}X + \kappa I_p\right)^{-1}X'H^{-1}y$ ridge tahmin ediciyi ve $\hat{u}_p(\kappa) = GZ'H^{-1}(y - X\hat{\beta}(\kappa))$ ridge tahmin ön ediciyi

(3) $\hbar = 0$ iken $\hat{\beta}_r(0) = T_r(T_r'X'H^{-1}XT_r)^{-1}T_r'X'H^{-1}y$ PCR tahmin ediciyi ve $\hat{u}_r(0) = GZ'H^{-1}\left(y - X\hat{\beta}_r\right)$ PCR ön tahmin ediciyi

göstermekte olup, böylece, BLUE/BLUP, ridge ve PCR tahmin ve ön tahmin edicilerinin Eşitlik $(6.16.)$ ve $(6.17.)$ ile verilen r-k sınıf tahmin ve ön tahmin edicilerinin özel bir durumuna karşılık geldikleri ifade edilmiş olur.

Varyans bileşenleri γ, ρ, σ^2 bilinmiyorsa, PCR r-k sınıf tahmin ve ön tahmin edicilerin elde edilebilmeleri için γ, ρ, σ^2 nin tahminleriyle yer değiştirmeleri gerekir. Bu amaçla, bir sonraki alt bölümde varyans bileşenlerinin tahmin edilmesine değinilecektir.

6.3. Varyans Bileşenlerinin Tahmini

Bu alt bölümde, REML ve iteratif yöntemler yardımıyla varyans bileşenlerinin tahminleri bulunacaktır.

6.3.1. REML Yöntemi

$y^* \sim N(K_r^*\alpha_r, \sigma^2 I)$ ve $A'K_r^* = 0$ için $A'y^* \sim N(0, \sigma^2 A'A)$ şeklindedir ve böylece REML log-likelihood fonksiyonu

$$l_R(\phi; A'y^*) = -\frac{1}{2}\{(n-p)log(2\pi) + (n-p)log\sigma^2 + log|A'A|\} - \frac{1}{2}\left\{\frac{y^{*\prime}A(A'A)^{-1}A'y^*}{\sigma^2}\right\} \qquad (6.18.)$$

olarak elde edilir. Burada $\phi = (\kappa', \sigma^2)'$ ve $\kappa = (\gamma', \rho')' = \left(\kappa_j\right)$ sırasıyla $(r + s + 1) \times 1$ ve $(r + s) \times 1$ tipinde bilinmeyen varyans bileşenlerinin vektörlerini göstermektedir ve herhangi bir D matrisi için $A' = D(I_n - K_r^*(K_r^{*\prime}K_r^*)^{-1}K_r^{*\prime})$ şeklinde olup, A' ve D, $(n-p) \times n$ tipinde tam satır ranklı matrisleri göstermektedir.

$I_n - K_r^*(K_r^{*\prime}K_r^*)^{-1}K_r^{*\prime}$ simetrik, idempotent ve rankı $n-p$ olduğu için $A'A = I_n$ olur. Dolayısıyla, y^* için REML log-likelihood fonksiyonu (sabitlerin göz ardı edilmesiyle)[5]

$$l_R(\phi; y^*) = -\frac{1}{2}\{(n-p)log\sigma^2 + log|K_r^{*\prime}K_r^*|\} - \frac{1}{2}\left\{\frac{(y^* - K_r^*\tilde{\alpha}_r)'(y^* - K_r^*\tilde{\alpha}_r)}{\sigma^2}\right\} \quad (6.19.)$$

$$= -\frac{1}{2}\left\{(n-p)log\sigma^2 + log|K_r^{*\prime}K_r^*| + \frac{y^{*\prime}P^*y^*}{\sigma^2}\right\} \quad (6.20.)$$

şeklinde elde edilir. Burada, $P^* = I_n - K_r^*(K_r^{*\prime}K_r^*)^{-1}K_r^{*\prime} = A(A'A)^{-1}A'$ şeklinde olup, Eşitlik (6.18.) ile Eşitlik (6.20.) nin eşdeğer olduğu söylenebilir.

Eşitlik (6.19.) ile Eşitlik (6.20.) arasındaki ilişki,

$$(y^* - K_r^*\tilde{\alpha}_r) = (I_n - K_r^*(K_r^{*\prime}K_r^*)^{-1}K_r^{*\prime})y^* = P^*y^*$$

ve $(y^* - K_r^*\tilde{\alpha}_r)'(y^* - K_r^*\tilde{\alpha}_r) = y^{*\prime}P^*y^*$ yardımıyla, gösterilmiş olur.

Eşitlik (6.20.) nin sırasıyla σ^2 ve κ_j ye göre türevlerinin alınmasıyla

$$\frac{\partial l_R(\phi; y^*)}{\partial \sigma^2} = -\frac{(n-p)}{2\sigma^2} + \frac{y^{*\prime}P^*y^*}{2\sigma^4} \quad (6.21.)$$

$$\frac{\partial l_R(\phi; y^*)}{\partial \kappa_j} = -\frac{1}{2}\left\{tr(P^*) - \frac{y^{*\prime}P^*y^*}{\sigma^2}\right\} \quad (6.22.)$$

[5] 6.1 ve 6.2 inci alt bölümünde elde edilen tahmin ediciler varyans bileşenlerinin bilindiği varsayımı altında elde edilmişlerdi. 6.3 üncü alt bölümünde ise varyans bileşenlerinin bilinmediği varsayımı altında tahmin ediciler elde edileceklerdir. Dolayısıyla, her iki alt bölümdeki tahmin edicilerin birbirlerinden ayrılması amacıyla "^" yerine "~" sembolü kullanılmıştır.

elde edilir.

Eşitlik (6.21.) in sıfıra eşitlenmesiyle ve P^* yerine $\tilde{P}^*$ yazılmasıyla

$$\tilde{\sigma}_r^2 = \frac{y^{*\prime}\tilde{P}^* y^*}{n-p} = \frac{(y^* - K_r^*\tilde{\alpha}_r)'(y^* - K_r^*\tilde{\alpha}_r)}{n-p} = \frac{(y - X\tilde{\beta}_r)'\tilde{H}^{-1}\left(y - X\tilde{\beta}_r\right)}{n-p} \qquad (6.23.)$$

olarak bulunur. $\tilde{\sigma}_r^2$, $\tilde{P}^*$ aracılığıyla $\tilde{\kappa}$ ya bağlı olduğundan iteratif olarak elde edilmelidir.

REML log-likelihood fonksiyonlarının birinci dereceden türevlerinin sıfıra eşitlenmesiyle (6.22.) ve (6.23.) gibi lineer olmayan eşitlikler ortaya çıkmaktadır. Bu nedenle, lineer olmayan bu eşitliklerin çözülmesi ve varyans bileşenlerinin REML tahmin edicilerinin bulunması için literatürdeki iteratif yöntemlerden yararlanılacaktır.

6.3.2. İteratif Yöntemler

Varyans bileşenlerinin REML tahmin edicileri sırasıyla NR ve EM algoritmaları yardımıyla elde edilecektir.

6.3.2.1. NR Algoritması

Eşitlik (2.27.) de gösterildiği gibi, her bir NR iterasyonu gözlenen bilgi matrisinin elemanları ile REML log-likelihood fonksiyonunun hesaplanmasını gerektirir.

Eşitlik (6.21.) ve (6.22.) de yer alan σ^2 ve κ_j için REML log-likelihood fonksiyonları

$$\frac{\partial l_R(\phi; y^*)}{\partial \sigma^2} = U(\sigma^2) = -\frac{1}{2}\left\{\frac{(n-p)}{\sigma^2} - \frac{y^{*\prime}P^*y^*}{\sigma^4}\right\}$$

$$\frac{\partial l_R(\phi; y^*)}{\partial \kappa_j} = U(\kappa_j) = -\frac{1}{2}\left\{tr(P^*) - \frac{y^{*\prime}P^*y^*}{\sigma^2}\right\}$$

ve gözlenen bilgi matrisinin elemanları

$$I_O(\kappa_j, \kappa_k) = \frac{y^{*\prime}P^*y^*}{2\sigma^2}$$

$$I_O(\sigma^2, \kappa_j) = \frac{y^{*\prime}P^*y^*}{2\sigma^4}$$

$$I_O(\sigma^2, \sigma^2) = -\frac{(n-p)}{2\sigma^4} + \frac{y^{*\prime}P^*y^*}{\sigma^6}$$

olarak bulunur.

6.4. Tahmin Edicilerin Karşılaştırılması

4.4 üncü bölümde verilen $\hat{\mu}$, $\hat{\mu}(k)$ ve 5.2 inci bölümde verilen $\hat{\mu}_d$ yardımıyla μ nün PCR ve r-k sınıf ön tahmin edicileri, sırasıyla,

$$\begin{aligned}\hat{\mu}_r &= \mathcal{L}'\hat{\beta}_r + \mathcal{M}'\hat{u}_r \\ &= \mathcal{L}'\hat{\beta}_r + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}\left(y - X\hat{\beta}_r\right) \\ &= \mathcal{Q}\hat{\beta}_r + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}y \end{aligned} \qquad (6.24.)$$

ve

$$\hat{\mu}_r(k) = \mathcal{L}'\hat{\beta}_r(k) + \mathcal{M}'\hat{u}_r(k)$$

$$= \mathcal{L}'\hat{\beta}_r(\hbar) + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}\left(y - X\hat{\beta}_r(\hbar)\right)$$
$$= \mathcal{Q}\hat{\beta}_r(\hbar) + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}y \qquad (6.25.)$$

olarak bulunur.

$\hat{\mu}$, $\hat{\mu}(\hbar)$, $\hat{\mu}_r$ ve $\hat{\mu}_r(\hbar)$ verildikten sonra, $\hat{\mu}_r(\hbar)$ ile $\hat{\mu}$, $\hat{\mu}(\hbar)$, $\hat{\mu}_r$ karşılaştırmaları mMSE kriteri aracılığıyla yapılacaktır.

Štulajter (1997) yardımıyla, Eşitlik (6.24.) için

$$mMSE(\hat{\mu}_r) = E\left((\hat{\mu}_r - \mu)(\hat{\mu}_r - \mu)'\right)$$
$$= Var(\hat{\mu}_r) + Var(\mu) + Bias(\hat{\mu}_r)Bias(\hat{\mu}_r)'$$
$$-Cov(\hat{\mu}_r, \mu) - Cov(\mu, \hat{\mu}_r) \qquad (6.26.)$$

olarak yazılır ve burada, $Bias(\hat{\mu}_r) = E(\hat{\mu}_r - \mu)$ şeklindedir.

Eşitlik (6.16.) nın elde edilebilmesi amacıyla sırasıyla $Var(\hat{\mu}_r)$, $Var(\mu)$, $Bias(\hat{\mu}_r)$ ve $Cov(\hat{\mu}_r, \mu)$ bulunacaktır.

$$Var(\hat{\mu}_r) = Var(\mathcal{Q}\hat{\beta}_r + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}y)$$
$$= \mathcal{Q}Var(\hat{\beta}_r)\mathcal{Q}' + \mathcal{Q}Cov(\hat{\beta}_r, y)H^{-1}ZG\mathcal{M}$$
$$+\mathcal{M}'GZ'H^{-1}Cov(y, \hat{\beta}_r)\mathcal{Q}'$$
$$+\mathcal{M}'GZ'H^{-1}Var(y)H^{-1}ZG\mathcal{M} \qquad (6.27.)$$

biçiminde olup,

$$Var(\hat{\beta}_r) = \sigma^2 T_r \Lambda_r^{-1} T_r'$$

$$Cov(\hat{\beta}_r, y) = \sigma^2 T_r \Lambda_r^{-1} T_r' X'$$

ile verilir.

$$\begin{aligned} Bias(\hat{\mu}_r) &= E(\hat{\mu}_r - \mu) \\ &= E(\mathcal{Q}\hat{\beta}_r + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}y - \mathcal{L}'\beta - \mathcal{M}'u) \\ &= \mathcal{Q}E(\hat{\beta}_r) + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}E(y) - \mathcal{L}'\beta - \mathcal{M}'E(u) \\ &= \mathcal{Q}\left(E\left(\hat{\beta}_r - \beta\right)\right) = \mathcal{Q}Bias(\hat{\beta}_r) \end{aligned} \qquad (6.28.)$$

şeklinde elde edilir ve burada, $Bias\left(\hat{\beta}_r\right) = (T_rT_r' - I_p)\beta$ dır.

$$\begin{aligned} Cov(\hat{\mu}_r, \mu) &= Cov(\mathcal{Q}\hat{\beta}_r + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}y, \mathcal{L}'\beta + \mathcal{M}'u) \\ &= \mathcal{Q}Cov(\hat{\beta}_r, u)\mathcal{M} + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}Cov(y, u)\mathcal{M} \end{aligned} \qquad (6.29.)$$

biçiminde olup,

$$Cov(\hat{\beta}_r, u) = \sigma^2 T_r \Lambda_r^{-1} T_r' X' H^{-1} ZG$$

dir.

Eşitlik (6.27.), (4.52.), (6.28.) ve (6.29.) un Eşitlik (6.26.) da yerine yazılmasıyla

$$mMSE(\hat{\mu}_r) = \mathcal{Q}mMSE(\hat{\beta}_r)\mathcal{Q}' + \sigma^2\mathcal{M}'(G - GZ'H^{-1}ZG)\mathcal{M} \qquad (6.30.)$$

olarak elde edilir ve

$$\begin{aligned} mMSE(\hat{\beta}_r) &= Var(\hat{\beta}_r) + Bias(\hat{\beta}_r)Bias(\hat{\beta}_r)' \\ &= \sigma^2 T_r \Lambda_r^{-1} T_r' + (T_rT_r' - I_p)\beta\beta'(T_rT_r' - I_p) \end{aligned} \qquad (6.31.)$$

şeklindedir.

Štulajter (1997) yardımıyla, Eşitlik (6.25.) için

$$\begin{aligned} mMSE(\hat{\mu}_r(k)) &= E\big((\hat{\mu}_r(k)-\mu)(\hat{\mu}_r(k)-\mu)'\big) \\ &= Var(\hat{\mu}_r(k)) + Var(\mu) + Bias(\hat{\mu}_r(k))Bias(\hat{\mu}_r(k))' \\ &\quad -Cov(\hat{\mu}_r(k),\mu) - Cov\big(\mu,\hat{\mu}_r(k)\big) \end{aligned} \tag{6.32.}$$

olarak yazılır ve burada, $Bias(\hat{\mu}_r(k)) = E(\hat{\mu}_r(k)-\mu)$ şeklindedir.

Eşitlik (6.32.) nin elde edilebilmesi amacıyla sırasıyla $Var(\hat{\mu}_r(k))$, $Var(\mu)$, $Bias(\hat{\mu}_r(k))$ ve $Cov(\hat{\mu}_r(k),\mu)$ bulunacaktır.

$$\begin{aligned} Var(\hat{\mu}_r(k)) &= Var(Q\hat{\beta}_r(k) + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}y) \\ &= QVar(\hat{\beta}_r(k))Q' + QCov(\hat{\beta}_r(k),y)H^{-1}ZG\mathcal{M} \\ &\quad +\mathcal{M}'GZ'H^{-1}Cov(y,\hat{\beta}_r(k))Q' \\ &\quad +\mathcal{M}'GZ'H^{-1}Var(y)H^{-1}ZG\mathcal{M} \end{aligned} \tag{6.33.}$$

şeklinde olup,

$$Var(\hat{\beta}_r(k)) = \sigma^2 T_r(\Lambda_r + kI_r)^{-1}\Lambda_r(\Lambda_r + kI_r)^{-1}T_r'$$

$$Cov(\hat{\beta}_r(k),y) = \sigma^2 T_r(\Lambda_r + kI_r)^{-1}T_r'X'$$

ile verilir.

$$\begin{aligned} Bias(\hat{\mu}_r(k)) &= E(\hat{\mu}_r(k)-\mu) \\ &= E(Q\hat{\beta}_r(k) + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}y - \mathcal{L}'\beta - \mathcal{M}'u) \\ &= QE(\hat{\beta}_r(k)) + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}E(y) - \mathcal{L}'\beta - \mathcal{M}'E(u) \end{aligned}$$

$$= \mathcal{Q}(E(\hat{\beta}_r(\kappa) - \beta)) = \mathcal{Q}Bias(\hat{\beta}_r(\kappa)) \quad (6.34.)$$

şeklindedir ve $Bias(\hat{\beta}_r(\kappa)) = (T_r(\Lambda_r + \kappa I_r)^{-1}\Lambda_r T_r' - I_p)\beta$ dır.

$$\begin{aligned} Cov(\hat{\mu}_r(\kappa), \mu) &= Cov(\mathcal{Q}\hat{\beta}_r(\kappa) + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}y, \mathcal{L}'\beta + \mathcal{M}'u) \\ &= \mathcal{Q}Cov\big(\hat{\beta}_r(\kappa), u\big)\mathcal{M} + \mathcal{M}'GZ'H^{-1}Cov(y, u) \end{aligned} \quad (6.35.)$$

biçiminde olup, $Cov(\hat{\beta}_r(\kappa), u) = \sigma^2 T_r(\Lambda_r + \kappa I_r)^{-1}T_r'X'H^{-1}ZG$ dir.

Eşitlik (6.33.), (4.52.), (6.34.) ve (6.35.) in Eşitlik (6.32.) de yerine yazılmasıyla

$$mMSE\big(\hat{\mu}_r(\kappa)\big) = \mathcal{Q}mMSE\left(\hat{\beta}_r(\kappa)\right)\mathcal{Q}' + \sigma^2\mathcal{M}'(G - GZ'H^{-1}ZG)\mathcal{M} \quad (6.36.)$$

olarak elde edilir ve

$$\begin{aligned} mMSE(\hat{\beta}_r(\kappa)) &= \sigma^2 T_r(\Lambda_r + \kappa I_r)^{-1}\Lambda_r(\Lambda_r + \kappa I_r)^{-1}T_r' \\ &+ \big(T_r(\Lambda_r + \kappa I_r)^{-1}\Lambda_r T_r' - I_p\big) \\ &\times \beta\beta'\big(T_r\Lambda_r(\Lambda_r + \kappa I_r)^{-1}T_r' - I_p\big) \end{aligned} \quad (6.37.)$$

şeklindedir.

Benzer şekilde, Liu ve Hu (2013) tarafından Eşitlik (4.63.) ve Eşitlik (4.64.) elde edilmiştir. $Var(\hat{\beta}) = \sigma^2 T\Lambda^{-1}T'$, $Bias(\hat{\beta}) = 0$ ve

$$Var(\hat{\beta}(\kappa)) = \sigma^2 T(\Lambda + \kappa I_p)^{-1}\Lambda(\Lambda + \kappa I_p)^{-1}T'$$

$$Bias(\hat{\beta}(\kappa)) = (T(\Lambda + \kappa I_p)^{-1}\Lambda T')\beta$$

olmak üzere, Eşitlik (4.65.) ve Eşitlik (4.66.)

$$mMSE(\hat{\beta}) = \sigma^2 T\Lambda^{-1}T' \tag{6.38.}$$

ve

$$\begin{aligned} mMSE(\hat{\beta}(k)) &= \sigma^2 T(\Lambda + kI_p)^{-1}\Lambda(\Lambda + kI_p)^{-1}T' \\ &+(T\left(\Lambda + kI_p\right)^{-1}\Lambda T')\beta\beta'(T\Lambda\left(\Lambda + kI_p\right)^{-1}T') \end{aligned} \tag{6.39.}$$

formuna dönüşür.

Eşitlik (6.30.), (6.36.), (4.63.) ve (4.64.) incelendiğinde, $mMSE(\hat{\mu}_r)$ ile $mMSE(\hat{\mu}_r(k))$ ve $mMSE(\hat{\mu})$ ile $mMSE(\hat{\mu}(k))$ karşılaştırmalarının sırasıyla $mMSE(\hat{\beta}_r)$ ile $mMSE(\hat{\beta}_r(k))$ ve $mMSE(\hat{\beta})$ ile $mMSE(\hat{\beta}(k))$ karşılaştırmalarına denk olduğu söylenebilir. Lineer regresyon modellerindeki Sarkar (1996) dan yararlanılarak aşağıdaki mMSE karşılaştırmaları ve hipotez testleri yapılacaktır.

6.4.1. r-k Sınıf Tahmin Edici ve BLUE

Eşitlik (6.37.) ve Eşitlik (6.38.) yardımıyla

$$\begin{aligned} mMSE(\hat{\beta}) - mMSE(\hat{\beta}_r(k)) &= \sigma^2(T\Lambda^{-1}T' - T_r(\Lambda_r + kI_r)^{-1}\Lambda_r(\Lambda_r + kI_r)^{-1}T_r') \\ &-\left(T_r(\Lambda_r + kI_r)^{-1}\Lambda_r T_r' - I_p\right) \\ &\times \beta\beta'\left(T_r\Lambda_r(\Lambda_r + kI_r)^{-1}T_r' - I_p\right) \end{aligned} \tag{6.40.}$$

elde edilir.

$$\begin{aligned} T_r(\Lambda_r + kI_r)^{-1}\Lambda_r T_r' - I_p &= T_r T_r' - kT_r(\Lambda_r + kI_r)^{-1}T_r' - I_p \\ &= -\left(T_{p-r}T_{p-r}' + kT_r(\Lambda_r + kI_r)^{-1}T_r'\right) \end{aligned}$$

olması sebebiyle Eşitlik (6.40.),

$$mMSE(\hat{\beta}) - mMSE(\hat{\beta}_r(k)) = k^2 T_r(\Lambda_r + kI_r)^{-1} \times \left[\sigma^2\left(\frac{2}{k}I_r + \Lambda_r^{-1}\right) - T_r'\beta\beta'T_r\right](\Lambda_r + kI_r)^{-1}T_r' + T_{p-r}\left[\sigma^2\Lambda_{p-r}^{-1} - T_{p-r}'\beta\beta'T_{p-r}\right]T_{p-r}' - kT_r(\Lambda_r + kI_r)^{-1}T_r'\beta\beta'T_{p-r}T_{p-r}' - kT_{p-r}T_{p-r}'\beta\beta'T_r(\Lambda_r + kI_r)^{-1}T_r'$$

veya eşdeğer olarak

$$mMSE(\hat{\beta}) - mMSE(\hat{\beta}_r(k)) = T\big(\Gamma(k)\big)^{-1}[\sigma^2\Delta(k)^{-1} - T'\beta\beta'T]\big(\Gamma(k)\big)^{-1}T' \quad (6.41.)$$

şeklinde yazılır. Burada,

$$\Gamma(k) = \begin{pmatrix} \frac{1}{k}(\Lambda_r + kI_r) & \underline{0} \\ \underline{0}' & I_{p-r} \end{pmatrix}$$

ve

$$\Delta(k)^{-1} = \begin{pmatrix} \left(\frac{2}{k}I_r + \Lambda_r^{-1}\right) & \underline{0} \\ \underline{0}' & \Lambda_{p-r}^{-1} \end{pmatrix}$$

ile verilir.

Eşitlik (6.41.) in nnd bir matris olması ancak ve ancak $\sigma^2\Delta(k)^{-1} - T'\beta\beta'T$ ifadesinin nnd olmasıyla sağlanabilir.

$\sigma^2\Delta(k)^{-1} - T'\beta\beta'T$ ifadesinin nnd olması için gerek ve yeter koşul, Rao (1974) den yararlanarak, aşağıdaki teorem ile verilir.

Teorem 6.1. $\hat{\beta}_r(k)$ nın $\hat{\beta}$ dan mMSE kriterine göre daha üstün olması için gerek ve yeter koşul

$$\left[\beta' T_r \left(\frac{2}{k} I_r + \Lambda_r^{-1}\right)^{-1} T_r'\beta + \beta' T_{p-r}\Lambda_{p-r}T_{p-r}'\beta\right] \leq \sigma^2$$

eşitsizliğinin sağlanmasıdır.

6.4.2. r-k Sınıf Tahmin Edici ve Ridge Tahmin Edici

Eşitlik (6.37.) ve Eşitlik (6.39.) yardımıyla

$$\begin{aligned} mMSE(\hat{\beta}(k)) - mMSE(\hat{\beta}_r(k)) = \\ &\sigma^2 T_{p-r}\left(\Lambda_{p-r} + kI_{p-r}\right)^{-1}\Lambda_{p-r}\left(\Lambda_{p-r} + kI_{p-r}\right)^{-1}T_{p-r}' \\ &+ \left(T\left(\Lambda + kI_p\right)^{-1}\Lambda T' - I_p\right)\beta\beta'\left(T\Lambda\left(\Lambda + kI_p\right)^{-1}T' - I_p\right) \\ &+ \left(T_r(\Lambda_r + kI_r)^{-1}\Lambda_r T_r' - I_p\right) \\ &\times \beta\beta'\left(T_r\Lambda_r(\Lambda_r + kI_r)^{-1}T_r' - I_p\right) \end{aligned} \qquad (6.42.)$$

elde edilir.

Baksalary ve Trenkler (1991) teoremi (Bkz. Ek 3) gereğince,

$$A = T_{p-r}\left(\Lambda_{p-r} + kI_{p-r}\right)^{-1}\Lambda_{p-r}\left(\Lambda_{p-r} + kI_{p-r}\right)^{-1}T_{p-r}',$$

$$a_1 = \left(T\left(\Lambda + kI_p\right)^{-1}\Lambda T' - I_p\right)\beta$$

ve

$$a_2 = \left(T_r(\Lambda_r + \kappa I_r)^{-1}\Lambda_r T_r' - I_p\right)\beta$$

olmak üzere Eşitlik (6.42.),

$$mMSE\left(\hat{\beta}(\kappa)\right) - mMSE\left(\hat{\beta}_r(\kappa)\right) = \sigma^2 A + a_1\, a_1' - a_2\, a_2'$$

formunda yazılır. Aynı zamanda A^+, A nın Moore-Penrose tersini göstermek üzere, $AA^+ = T_{p-r}T_{p-r}'$ olup,

$$A^+ = \frac{1}{\sigma^2}T_{p-r}\left(\Lambda_{p-r} + \kappa I_{p-r}\right)\Lambda_{p-r}^{-1}\left(\Lambda_{p-r} + \kappa I_{p-r}\right)T_{p-r}'$$

nnd matrisi elde edilir. Baksalary ve Trenkler (1991) teoreminin (Bkz. Ek 3) (b) şıkkı yardımıyla, $\check{s} = 1$ ve
$a_2 - a_1 = -T_{p-r}\left(\Lambda_{p-r} + \kappa I_{p-r}\right)^{-1}\Lambda_{p-r}\left(\Lambda_{p-r} + \kappa I_{p-r}\right)^{-1}\beta = A\xi$ olup, burada

$$\xi = -\frac{1}{\sigma^2}T_{p-r}\left(\Lambda_{p-r} + \kappa I_{p-r}\right)T_{p-r}'\beta$$

biçimindedir ve $(a_2 - a_1)'A^-(a_2 - a_1) \leq 0$ elde edilir ve bu durum, bizi aşağıdaki teoreme götürür.

Teorem 6.2. $\hat{\beta}_r(\kappa)$ nın $\hat{\beta}(\kappa)$ dan mMSE kriterine göre daha üstün olması için gerek ve yeter koşul $T_{p-r}'\beta = 0$ olmasıdır.

6.4.3. r-k Sınıf Tahmin Edici ve PCR Tahmin Edici

Eşitlik (6.31.) ve Eşitlik (6.37.) yardımıyla

$$mMSE(\hat{\beta}_r) - mMSE(\hat{\beta}_r(k)) = \sigma^2 T_r(\Lambda_r^{-1} - (\Lambda_r + kI_r)^{-1}\Lambda_r(\Lambda_r + kI_r)^{-1})T_r' + (T_rT_r' - I_p)\beta\beta'(T_rT_r' - I_p) - \left(T_r(\Lambda_r + kI_r)^{-1}\Lambda_r T_r' - I_p\right) \times \beta\beta'\left(T_r\Lambda_r(\Lambda_r + kI_r)^{-1}T_r' - I_p\right) \quad (6.43.)$$

elde edilir.

Eşitlik (6.43.) ün $T_r(\Lambda_r^{-1} - (\Lambda_r + kI_r)^{-1}\Lambda_r(\Lambda_r + kI_r)^{-1})T_r'$ kısmı

$$T_r(\Lambda_r^{-1} - (\Lambda_r + kI_r)^{-1}\Lambda_r(\Lambda_r + kI_r)^{-1})T_r' = k^2 T_r(\Lambda_r + kI_r)^{-1}\left(\frac{2}{k}I_r + \Lambda_r^{-1}\right)(\Lambda_r + kI_r)^{-1}T_r' \quad (6.44.)$$

formunda yazılır ise nnd tanımlı bir matris olduğu görülür.

Eşitlik (6.44.) nnd tanımlı bir matris olduğu için, Baksalary ve Trenkler (1991) teoremi (Bkz. Ek 3) kullanılarak, $B = \Lambda_r^{-1} - (\Lambda_r + kI_r)^{-1}\Lambda_r(\Lambda_r + kI_r)^{-1}$ olmak üzere, $A = \sigma^2 T_r B T_r'$ nnd tanımlı matrisi elde edilir.

$$A^+ = \frac{1}{\sigma^2}T_r B^{-1} T_r'$$

iken $AA^+ = T_rT_r'$ olur. Böylece, $a_1 = (T_rT_r' - I_p)\beta \in \Re(A)$ ancak $a_1 = 0$ olduğunda sağlanır. Bu durum, Baksalary ve Trenkler (1991) teoreminin (Bkz. Ek 3) (c) şıkkı ile çelişir. $\check{s} = 1$ ve

$$a_2 = \left(T_r(\Lambda_r + \kappa I_r)^{-1}\Lambda_r T_r' - I_p\right)\beta = a_1 - \kappa T_r(\Lambda_r + \kappa I_r)^{-1}T_r'\beta = a_1 + A\eta$$

olup, burada

$$\eta = -\frac{1}{\kappa\sigma^2}\left[T_r(\Lambda_r + \kappa I_r)\left(\frac{2}{\kappa}I_r + \Lambda_r^{-1}\right)^{-1}T_r'\beta\right]$$

dır. Böylece, $a_2 \in \Re(A: a_1)$ olup, Baksalary ve Trenkler (1991) teoreminin (Bkz. Ek 3) (b) şıkkı kullanılır. $a_2 = a_1 + A\eta$ yardımıyla $(a_2 - a_1)'A^-(a_2 - a_1) \leq 0$ koşulu $\eta' AA^-\eta \leq 0$ şeklinde yazılması sonucunda $\eta' AA^+A\eta = 0$ olur ve

$$\beta' T_r\left(\frac{2}{\kappa}I_r + \Lambda_r^{-1}\right)^{-1}T_r'\beta = 0$$

koşulu ancak ve ancak $T_r'\beta = 0$ olduğunda sağlanır.

Teorem 6.3. $\hat{\beta}_r(\kappa)$ nın $\hat{\beta}_r$ den mMSE kriterine göre daha üstün olması için gerek ve yeter koşul $T_r'\beta = 0$ olmasıdır.

6.5. Hipotez Testleri

Bu bölümde, Teorem 6.1, 6.2 ve 6.3 ile verilen koşulların sağlanıp sağlanmadıklarının kontrolü için üç adet hipotez testi önerilecektir:

(1) $\hat{\beta} \sim N(\beta, \sigma^2 T\Lambda^{-1}T')$ ve dolayısıyla, $\Lambda^{1/2}T'\hat{\beta} \sim N(\Lambda^{\frac{1}{2}}T'\beta, \sigma^2 I_p)$ iken $H_0: \beta' T\Lambda T'\beta/\sigma^2 \leq 1$ ile $H_1: \beta' T\Lambda T'\beta/\sigma^2 > 1$ hipotezi altında p ve $n-p$ serbestlik dereceli merkezi olmayan F dağılımı ile test edilebilir olup $F_1 = \frac{\hat{\beta}' T\Lambda T'\hat{\beta}/p}{\hat{\sigma}^2}$ dir ve burada, $\hat{\sigma}^2 = (y - X\hat{\beta})'H^{-1}(y - X\hat{\beta})/(n-p)$ dir.

(2) $\hat{\beta}_{p-r}(k) = T_{p-r}\left(T'_{p-r}X'H^{-1}XT_{p-r} + kI_{p-r}\right)^{-1}T'_{p-r}X'H^{-1}y$

$$T'\hat{\beta}_{p-r}(k) \sim N((T'_{p-r}X'H^{-1}XT_{p-r} + kI_{p-r})^{-1}T'_{p-r}X'H^{-1}X\beta, \sigma^2(T'_{p-r}X'H^{-1}XT_{p-r} + kI_{p-r})^{-1}\Lambda_{p-r}(T'_{p-r}X'H^{-1}XT_{p-r} + kI_{p-r})^{-1})$$

iken $H_0: T'_{p-r}\beta = 0$ hipotezi altında F dağılımı ile test edilebilir ve

$$\mathcal{U} = \hat{\beta}'_{p-r}(k)T_{p-r}\left(T'_{p-r}X'H^{-1}XT_{p-r} + kI_{p-r}\right)\Lambda^{-1}_{p-r} \times \left(T'_{p-r}X'H^{-1}XT_{p-r} + kI_{p-r}\right)T'_{p-r}\hat{\beta}_{p-r}(k)/(p-r)$$

olmak üzere, $F_2 = \frac{\mathcal{U}}{\hat{\sigma}^2} \sim F_{p-r,n-p}$ dir.

(3) $\hat{\beta}_r(k)$

$$T'\hat{\beta}_r(k) \sim N(T_r(T'_rX'H^{-1}XT_r + kI_r)^{-1}T'_rX'H^{-1}X\beta, \sigma^2(T'_rX'H^{-1}XT_r + kI_r)^{-1}\Lambda_r(T'_rX'H^{-1}XT_r + kI_r)^{-1})$$

iken $H_0: T'_r\beta = 0$ hipotezi altında F dağılımı ile test edilebilir ve

$$\mathcal{V} = \hat{\beta}'_r(k)T_r(T'_rX'H^{-1}XT_r + kI_r)\Lambda_r^{-1}(T'_rX'H^{-1}XT_r + kI_r)T'_r\hat{\beta}_r(k)/r$$

olmak üzere, $F_3 = \frac{\mathcal{V}}{\hat{\sigma}^2} \sim F_{r,n-p}$ dir.

6.6. Uygulama: Ortodontik Büyüyen Veri

Potthoff ve Roy (1964) tarafından incelenen ve 3.4 üncü alt bölümde de verilen ortodontik büyüyen veriden yararlanılacaktır. Eşitlik (3.20.) ile verilen model altında, R programında yer alan ***nlme*** paketi ile ***lme*** fonksiyonunun hibrid yaklaşımını kullanmasıyla, bu bölümde elde edilen sonuçların daha iyi bir şekilde algılanması sağlanacaktır.

Temel bileşenlerin seçiminde *toplam değişim yüzdesi (percentage of the total variability, PTV)*

$$PTV = \frac{\sum_{j=1}^{r} \lambda_j}{\sum_{j=1}^{p} \lambda_j} \times 100 \quad , \quad j = 1,2,3$$

den yararlanılmıştır ve PTV, keyfi olarak 0.99 olarak alınmıştır.

Özkale ve Can (2017) deki k nın seçiminden yararlanılarak, $\hat{\sigma}_r^2 = 9.5395$ olmak üzere, $\hat{k} = r\hat{\sigma}_r^2 / \hat{\beta}_r'\hat{\beta}_r = 5.2512$ olarak hesaplanmıştır.

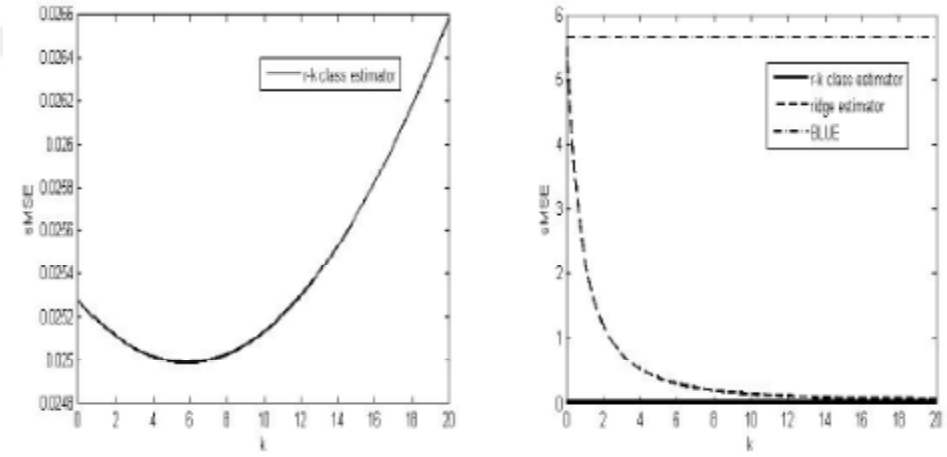
Tahmin ve ön tahmin edicilerin aldıkları değerler ile sMSE kriterinin aldığı değerler Çizelge 6.1 de verilmiştir.

Çizelge 6.1 incelendiğinde, $\hat{\beta}_r(\hat{k})$ nın sMSE kriteri altında en üstün performansa sahip olduğu görülmektedir. $\hat{k} = 5.2512$ için Teorem 6.1 ile verilen koşul, $9.5090 < \hat{\sigma}_r^2 = 9.5395$ olarak hesaplanır ve böylece, $\hat{\beta}_r(\hat{k})$ nın $\hat{\beta}_r$ ye göre mMSE kriteri altında da daha üstün olduğu gösterilmiş olur.

Çizelge 6.1. $\hat{k} = 5.2512$ için tahmin ve ön tahmin ediciler ile sMSE nin aldığı değerler

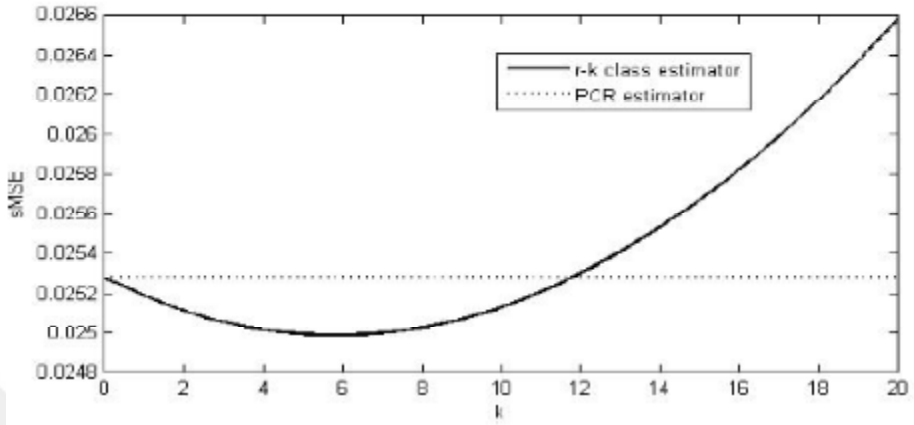
	$\widehat{\beta}$	$\widehat{\beta}(\widehat{k})$	$\widehat{\beta}_r$	$\widehat{\beta}_r(\widehat{k})$
β_1	2.0099	1.9088	1.8905	1.8796
β_2	18.0436	4.3878	−0.0302	−0.0293
β_3	−1.5642	−0.5543	−0.2419	−0.2311
	$\widehat{u}$	$\widehat{u}(\widehat{k})$	$\widehat{u}_r$	$\widehat{u}_r(\widehat{k})$
u_1	0.7400	1.6637	1.8311	1.9303
u_2	0.7400	1.6637	1.8311	1.9303
u_3	1.0514	1.9751	2.1425	2.2418
u_4	1.2590	2.1827	2.3501	2.4494
u_5	1.3628	2.2865	2.4539	2.5532
u_6	1.4666	2.3903	2.5577	2.6570
u_7	1.7780	2.7017	2.8692	2.9684
u_8	1.7780	2.7017	2.8692	2.9684
u_9	1.2021	1.9670	2.1056	2.1878
u_{10}	2.7742	3.5391	3.6777	3.7599
u_{11}	2.5047	3.4284	3.5958	3.6951
u_{12}	2.2971	3.2208	3.3882	3.4874
u_{13}	3.5428	4.4665	4.6339	4.7331
u_{14}	3.7504	4.6741	4.8415	4.9407
u_{15}	4.6846	5.6083	5.7758	5.8750
u_{16}	6.1379	7.0616	7.2291	7.3283
u_{17}	−4.2564	−0.7537	0.3793	0.3792
u_{18}	−1.7715	1.0549	1.9691	1.9690
u_{19}	−1.7437	1.7590	2.8921	2.8920
u_{20}	−0.7026	0.3622	0.5551	0.6695
u_{21}	−0.6736	2.1527	3.0670	3.0669
u_{22}	0.4101	3.9128	5.0459	5.0458
u_{23}	−0.5901	1.8091	2.4614	2.5549
u_{24}	0.1161	2.9424	3.8567	3.8566
u_{25}	1.4870	4.9897	6.1228	6.1227
u_{26}	1.5286	4.3549	5.2691	5.2691
u_{27}	3.2818	6.7845	7.9176	7.9175
	$\widehat{\beta}$	$\widehat{\beta}(\widehat{k})$	$\widehat{\beta}_r$	$\widehat{\beta}_r(\widehat{k})$
$sMSE$	5.6418	0.3605	0.0253	0.0250

Farklı k değerleri için k ya karşı $\hat{\beta}_r(k)$, $\hat{\beta}(k)$ ve $\hat{\beta}$ nın sMSE değerlerinin grafiği ile k ya karşı $\hat{\beta}_r(k)$ ve $\hat{\beta}_r$ nin sMSE değerlerinin grafiği sırasıyla Şekil 6.1 ve Şekil 6.2 de verilmiştir. $\hat{\beta}_r(k)$ nın sMSE değerlerinin 0 a çok yakın değerlerden oluşması ve Şekil 6.1 in daha net bir şekilde görülebilmesi amacıyla Şekil 6.1 iki grafikten oluşmaktadır.



Şekil 6.1. k ya karşı $\hat{\beta}_r(k)$, $\hat{\beta}(k)$ ve $\hat{\beta}$ nın sMSE değerlerinin grafiği

Şekil 6.1 incelendiğinde, sMSE anlamında $\hat{\beta}_r(k)$ nın tüm k değerleri için $\hat{\beta}(k)$ ve $\hat{\beta}$ den daha üstün oldukları fakat k değerleri arttıkça $\hat{\beta}_r(k)$ ile $\hat{\beta}(k)$ nın aldıkları sMSE değerleri arasındaki farkın azaldığı ifade edilmektedir.



Şekil 6.2. k ya karşı $\hat{\beta}_r(k)$ ve $\hat{\beta}_r$ nin sMSE değerlerinin grafiği

Şekil 6.2 ye bakıldığında, sMSE kriteri altında $0 < k < 11.91$ için $\hat{\beta}_r(k)$ nın $\hat{\beta}_r$ den, $11.91 < k < 20$ için ise $\hat{\beta}_r$ nin $\hat{\beta}_r(k)$ dan daha üstün olduğu görülmektedir.

Bu uygulama çalışması bize, k nın uygun seçimi için sMSE kriteri altında $\hat{\beta}_r(k)$ nın $\hat{\beta}_r$, $\hat{\beta}(k)$ ve $\hat{\beta}$ dan daha üstün olduğunu göstermektedir.

6. TEMEL BİLEŞENLER REGRESYON VE r-k SINIF TAHMİN VE ÖN TAHMİN EDİCİLER Özge KURAN

7. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Bu çalışmanın konusunu, lineer karma modellerde parametre tahmini ve sonuç çıkarım oluşturmaktadır.

Bu çalışmada ilk olarak, lineer karma modeller, lineer karma modellerin varsayımları, lineer karma modellerde parametre tahminleri, tekrarlı ölçüm verileri için model yapılandırma süreci, literatürde var olan varyans-kovaryans modelleri ve bu varyans-kovaryans modelleri arasından uygun olan modelin seçim kriterleri incelenmiştir. Daha sonra, çoklu iç ilişkinin lineer karma modeller üzerindeki etkileri ifade edilmiştir. Çoklu iç ilişki olması durumunda lineer karma model literatüründe var olan ridge tahmin ve ön tahmin edicilere alternatif olarak mixed, stokastik kısıtlı ridge, Liu, PCR ve r-k sınıf tahmin ve ön tahmin edicileri önerilmiştir ve hem mMSE hem de sMSE kriterleri kullanılarak tahmin ve ön tahmin edicilerin performansları karşılaştırılmıştır. R ve Matlab R2014a programlarının kullanılmasıyla yapılan gerçek veri analizleri ve simülasyon uygulamalarıyla elde edilen sonuçların daha iyi bir şekilde algılanması sağlanmıştır.

Lineer karma modellerde çoklu iç ilişki olması durumunda yeni tanımlanan mixed ve stokastik kısıtlı ridge, Liu, PCR ve r-k sınıf tahmin ve ön tahmin edicilere alternatif olarak, jackknifed ridge veya stokastik kısıtlı jackknifed ridge gibi bazı yeni yanlı tahmin ve ön tahmin edicilerin tanımlanması gelecek çalışmaların konusunu oluşturabilir. Benzer şekilde, yeni tanımlanan tahmin ve ön tahmin edicilerin, lineer karma model literatüründe var olan tahmin ve ön tahmin edicileriyle ilişkileri ortaya konulup, hem mMSE hem de sMSE kriterleri kullanılarak tahmin edicilerin performansları karşılaştırılabilir.

KAYNAKLAR

Abu-Libdeh, H., Turnbull, B. W., Clark, L. C., 1990. Analysis of Multi-Type Recurrent Events in Longitudinal Studies: Application to a Skin Cancer Prevention Trial. Biometrics 46, 1017-1034.

Akaike, H., 1974. A New Look at the Statistical Model Identification. IEEE Trans. Automat. Control 19, 716-723.

Azari, R., Li, L., Tsai, C-L., 2006. Longitudinal Data Model Selection. Comput. Statist. Data Anal. 50, 3053-3066.

Baksalary, J. K., Trenkler, G., 1991. Nonnegative and Positive Definitness of Matrices Modifed by Two Matrices of Rank One. Linear Algebra Appl. 151, 169-184.

Bamia, C., White, I-R., Kenward, M-G., 2013. Some Consequences of Assuming Simple Patterns for the Treatment Effect Over Time in a Linear Mixed Model. Stat. Med. 32, 2585-2594.

Baye, M. R., Parker, D. F., 1984. Combining Ridge and Principal Component Regression: A Money Demand Illustration. Comm. Statist. Theory Methods 13, 197-205.

Beckman, R. J., Nachtsheim, C. J., Cook, R. D., 1987. Diagnostics for Mixed Model Analysis of Variance. Technometrics 29, 413-426.

Crump, S. L., 1947. The Estimation of Variance in Multiple Classification. PhD. Thesis, Iowa State University, Ames, Iowa.

Das, K., Jiang, J., Rao, J. N. K., 2004. Mean Squared Error of Emprical Predictor. Ann. Statist. 32, 818-840.

Dempster, A. P., Laird, N. M., Rubin, D. B., 1977. Maximum Likelihood from Incomplete Data via the EM Algorithm (with Discussion). J. R. Stat. Soc. Ser. B 39, 1-38.

Devore, J., Peck, R., 1993. Statistics: The Exploration and Analysis of Data, 2nd edn. Brooks/Cole, Pacific Grove, Calif.

Eisenhart, C., 1947. The Assumptions Underlying the Analysis of Variance. Biometrics 3, 1-21.

Eliot, M., 2011. Tree-Based Methods and a Mixed Ridge Estimator for Analyzing Longitudinal Data with Correlated Predictors. PhD. Thesis, University of Massachusetts Amherst, Graduate School of the University of Massachusetts Amherst, Department of Biostatistics, Amherst, ABD.

Eliot, M., Ferguson, J., Reillt, M. P., Foulkes, A. S., 2011. Ridge Regression for Longitudinal Biomarker Data. Int. J. Biostat. 7, 1-11.

Farebrother, R. W., 1976. Further Results on the Mean Square Error of Ridge Regression. J. R. Stat. Soc. Ser. B 38, 248-250.

Fisher, R. A. 1925. Statistical Methods for Research Workers, 1nd edn. Oliver&Boyd, Edinburg and London.

Fitzmaurice, G. M., Laird, N. M., Ware, J. H., 2004. Applied Longitudinal Analysis. John Wiley&Sons, New York.

Fu, C. H., Huang, H.-Y., Ou, Y.-H., 2015. The Effects of Missing Serial Effects and/or Heteroscedastic Errors on Mixed Models Using Repeated Growth Data. J. Stat. Comput. Simul. 85, 3367-3382.

Gilmour, A. R., Thompson, R., Cullis, B. R., 1995. Average Information REML: An Efficient Algorithm for Variance Parameter Estimation in Linear Mixed Models. Biometrics 51, 1440–1450.

Gumedze, F. N., Dunne, T. T., 2011. Parameter Estimation and Inference in the Linear Mixed Model. Linear Algebra Appl. 435, 1920-1944.

Hannan, E. J., Quinn, B. G., 1979. The Determination of the Order of an Autoregression. J. R. Stat. Soc. Ser. B 41, 190-195.

Hartley, H. O., Rao, J. N. K., 1967. Maximum Likelihood Estimation for the Mixed Analysis of Variance Model. Biometrika 54, 93-108.

Harville, D. A., 1977. Maximum Likelihood Approaches to Variance Component Estimation and to Related Problems. J. Amer. Statist. Assoc. 72, 320–340.

Henderson, C. R., 1950. Estimation of Genetic Parameters. Ann. Math. Stat. 21, 309-310.

Henderson, C. R., 1953. Estimation of Variance and Covariance Components. Biometrics 9, 226–252.

Henderson, C. R., Kempthorne, O., Searle, S. R., Von Krosigk, C. N., 1959. Estimation of Environmental and Genetic Trends from Records Subject to Culling. Biometrics 15, 192-218.

Henderson, C. R., 1969. Design and Analysis of Animal Husbandry Experiments. In Techniques and Procedures in Animal Science Research, 2nd edn., Chapter 1, American Society of Animal Science Monograph, Quality Corporation, Albany, New York.

Henderson, C. R., 1973. Sire Evaluation and Genetic Trends. In Proceedings Animal Breeding and Genetics Symposium in Honor of Dr Jay L. Lush, American Society of Animal Science and American Dairy Science Association, Champaign, Illinois 10-41.

Henderson, C. R., 1975. Best Linear Unbiased Estimation and Prediction Under a Selection Model. Biometrics 31, 423-447.

Henderson, C. R., 1977. Best Linear Unbiased Prediction of Breeding Values not in the Model for Records. J. Dairy Sci. 60, 783-787.

Henderson, C. R., 1984. Applications of Linear Models in Animal Breeding. University of Guelph, Guelph, Ontario.

Hodges, J. S., Sargent, D. J., 2001. Counting Degrees of Freedom in Hierarchical and Other Richy Parameterized Models. Biometrika 88, 367-379.

Hoerl, A. E., Kennard, R. W., 1970. Ridge Regression: Biased Estimation for Nonorthogonal Problems. Technometrics 12, 55-67.

Hotelling, H., 1993. Analysis of a Complex of Statistical Variables into Principal Components. J. Educational Pschology 24, 417-441 and 489-520.

Hox, J., 2002. Multilevel Analysis: Techniques and Applications. Mahwah, New Jersey.

http://appsso.eurostat.ec.europa.eu/nui/show.do?dataset=aact_eaa01/(Erişim Tarihi: Aralık 2016)

Hurvich, C. M., Tsai, C. L., 1989. Regression and Time Series Model Selection in Small Samples. Biometrika 76, 297-307.

Huynh, H., Feldt, L. S., 1970. Conditions Under Which Mean Square Ratios in Repeated Measurements Designs have Exact F-Distributions. J. Amer. Statist. Assoc. 65, 1582-1589.

İyit, N., 2008. Constitution of Linear Mixed Models in the Analysis of Correlated Data. PhD. Thesis, Selçuk University, Graduate School of Natural and Applied Sciences, Department of Mathematics, Konya, Turkey.

Kass, R. E., Raftery, A. E., 1995. Bayes Factors. J. Amer. Statist. Assoc. 90, 773-795.

Kerschner, H. F., Ettinger, H. J., Defield, J. D., Beckman, R. J., 1984. A Comparison Study of HEPA Filter Efficiencies When Challenged with Thermal and Air-Jet Generated Di-2-Ethylhexyl Sebecate, Di-2-Ethylhexyl Phthalate and Sodium Chloride. Laboratory Report LA-9985-MS, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos.

Korczyn, A. D., Brunt, E. R., Larsen, J. P., Nagy, Z., Poewe, W. H., Ruggieri, S., 1999. For the 053 Study Group: A 3-Year Randomized Trial of Ropinirole and Bromocriptine in Early Parkinson s Disease. Neurology 53, 364-370.

Kuran, Ö., Özkale, M. R., 2016. Gilmour's Approach to Mixed and Stochastic Restricted Ridge Predictions in Linear Mixed Models. Linear Algebra Appl. 508, 22-47.

Laird, N. M., Ware, J. H., 1982. Random Effects Models for Longitudinal Data. Biometrics 38, 963-974.

Liu, K., 1993. A New Class of Biased Estimate in Linear Regression. Comm. Statist. Theory Methods 22, 393-402.

Liu, X. Q., Hu, P., 2013. General Ridge Predictors in a Mixed Linear Model. J. Theory Appl. Statist. 47, 363-378.

Macchiavelli, R. E., Arnold, S. F., 1994. Variable Order Ante-Dependence Models. Comm. Statist. Theory Methods 23, 2683-2699.

Marsaglia, G., Styan, G. P. H., 1974a. Equalities and Inequalities for Ranks of Matrices. Linear and Multilinear Algebra 2, 269-292.

Marsaglia, G., Styan, G. P. H., 1974b. Rank Conditions for Generalized Inverses of Partitioned Matrices. Sankhyā 36, 437-442.

McCulloch, C. E., Searle, S. R., 2001. Generalized, Linear and Mixed Models. John Wiley&Sons, New York.

McDonald, M. C., Galarneau, D. I., 1975. A Monte Carlo Evaluation of Some Ridge-Type Estimators. J. Amer. Statist. Assoc. 70, 407–416.

Newhouse, J. P., Oman, S.D., 1971. An Evaluation of Ridge Estimators. Rand. Corporation R-716-PR, 1-28.

Nobre, J. S., Singer, J. M., 2007. Residual Analysis for Linear Mixed Models. Biom. J. 49, 863-875.

Özkale, M. R., 2009. A Stochastic Restricted Ridge Regression Estimator. J. Multivariate Anal. 100, 1706-1716.

Özkale, M. R., Can, F., 2017. An Evaluation of Ridge Estimator in Linear Mixed Models: An Example from Kidney Failure Data. J. Appl. Stat. 44, 2251-2269.

Patterson, H. D., Thompson, R., 1971. Recovery of Inter-Block Information When Block Sizes are Unequal. Biometrika 58, 545-554.

Pinherio, J. C., Bates, D. M., 2000. Mixed-Effects Models in S and S-Plus. Springer, New York.

Potthoff, R. F., Roy, S. N., 1964. A Generalized Multivariate Analysis of Variance Model Especially Useful for Growth Curve Problems. Biometrika 51, 313-326.

Rao, C. R. 1970. Estimation of Heteroscedastic Variances in Linear Models. J. Amer. Statist. Assoc. 65, 161–172.

Rao, C. R. 1971a. Estimation of Variance and Covariance Components—MINQUE Theory. J. Multivariate Anal. 1, 257–275.

Rao, C. R. 1971b. Minimum Variance Quadratic Unbiased Estimation of Variance Components. J. Multivariate Anal. 1, 445-456.

Rao, C. R. 1972. Estimation of Variance and Covariance Components in Linear models. J. Amer. Statist. Assoc. 67, 112–115.

Rao, C. R. 1974. Linear Statistical Inference and Its Applications. Wiley Eastern, New Delhi.

Rao, S. R., Poduri, S., 1997. Variance Components Estimation: Mixed models, Methodologies and Applications. Chapman&Hall, London, UK.

Robinson, G. K., 1991. That BLUP is a Good Thing: The Estimation of Random Effects (with Discussion). Statist. Sci. 6, 15-51.

Sarkar, N., 1996. Mean Square Error Matrix Comparison of Some Estimators in Linear Regressions with Multicollinearity. Statist. Probab. Lett. 30, 133-138.

Sakallıoğlu, S., Kaçıranlar, S., Akdeniz, F., 1996. A Note on Combining Ridge and Least Squares Estimator. J. Math. Comput. Sci. 9, 193-198.

Sakallıoğlu, S., Kaçıranlar, S., Akdeniz, F., 2001. Mean Squared Error Comparisons of Some Biased Regression Estimators. Comm. Statist. Theory Methods 30, 347-361.

Schwarz, G., 1978. Estimating the Dimension of a Model. Ann. Statist. 6, 461-464.

Searle, S. R., 1971. Linear Models. John Wiley&Sons, New York.

Searle, S. R., Casella, G., McCulloch, C. E., 1992. Variance Components. John Wiley&Sons, USA.

Shang, J., Cavanaugh, J. E., 2008. Bootstrap Variants of the Akaike Information Criterion for Mixed Model Selection. Comput. Statist. Data Anal. 52, 2004-2021.

Sheather, S. J., 2009. A Modern Approach to Regression with R. Springer, New York.

Stein, C., 1981. Estimation of the Mean of a Multivariate Normal Distribution. Ann. Statist. 9, 1135-1151.

Stram, D. O., Lee, J. W., 1994. Variance Components Testing in the Longitudinal Mixed-Effects Model. Biometrics 50, 1171-1177.

Štulajter, F., 1997. Predictions in Nonlinear Regression Models. Acta Math. Univ. Comenian LXVI, 71-81.

Sugiura, N., 1978. Further Analysis of the Data by Akaike's Information Criterion and the Finite Corrections. Comm. Statist. Theory Methods 7, 13-16.

Swindel, B. F., 1976. Good Estimators Based on Prior Information. Comm. Statist. Theory Methods 5, 1065-1075.

Theil, H., Goldberger, A. S., 1961. On Pure and Mixed Statistical Estimation in Economics. Internat. Econom. Rev. 2, 65-78.

Thisted, R. A. 1988. Elements of Statistical Computing—Numerical Computation. Chapman and Hall, London.

Thompson, W. A., 1962. The Problem of Negative Estimates of Variance Components. Ann. Math. Stat. 33, 273-289.

Vaida, F., Blanchard, S., 2005. Conditional Akaike Information for Mixed Effects Models. Biometrika 92, 351-370.

Wenren, C., 2014. Mixed Model Selection Based on the Conceptual Predictive Statistic. PhD. Thesis, Graduate College of Bowling Green State University, Department of Mathematics and Statistics, Bowling Green, USA.

Wolfinger, R. D., 1993. Covariance Structure Selection in General Mixed Models. Comm. Statist. Simulation Comput. 22, 1079-1106.

Wolfinger, R. D., 1996. Heterogeneous Variance-Covariance Structures for Repeated Measures. J. Agric. Biol. Environ. Stat. 1, 205-230.

ÖZGEÇMİŞ

1989 yılında İskenderun'da doğdu. İlk, orta ve lise öğrenimini İskenderun'da tamamladı. 2007 yılında Çukurova Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi İstatistik Bölümü'nde lisans öğrenimine başladı. 2008 yılında Çukurova Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Matematik Bölümü'nde çift anadal yapmaya hak kazandı. 2011 yılında Çukurova Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi İstatistik Bölümü'nden bölüm ikincisi olarak mezun oldu. Aynı yıl Çukurova Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Matematik Bölümü'nden de mezun olduktan sonra, Çukurova Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü İstatistik Anabilim Dalı'nda yüksek lisans öğrenimine başladı. 2013 yılında tamamlanan yüksek lisans öğreniminin ardından Çukurova Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü İstatistik Anabilim Dalı'nda doktora öğrenimine başladı ve 2017 yılında "Lineer Karma Modellerde Parametre Tahmini ve Sonuç Çıkarım" başlıklı doktora tez çalışmasını Sayın Prof. Dr. M. Revan ÖZKALE'nin danışmanlığında tamamladı.

EKLER

EK 1. Ortodontik Büyüyen Verinin R kodları

```
library(nlme)
library(lattice)
data(Orthodont)
attach(Orthodont)
xyplot(distance~age|Subject,panel=function(x,y){
                    panel.lmline(x,y,type="l")
                    panel.xyplot(x,y,col=1,pch=16)})
model<-
lme(distance~age*Sex,data=Orthodont,random=~1|Subject,method="REML",
weights=varIdent(form=~1|Sex))
summary(model)
anova(model)
fixed.effects(model)
random.effects(model)
model.y<-matrix(c(distance),108,1)
model.y
model.a <- lm(distance~age*Sex, data=Orthodont)
model.a
model.b <- lm(distance~(Subject-1), data=Orthodont)
model.b
model.X <- model.matrix(model.a)
model.X
model.Z <- model.matrix(model.b)
model.Z
```

EK 2. Çizelge 3.5-3.8 Verilmesi

Çizelge 3.5. UN modelinin REML yöntemi altındaki Matlab R2014a program çıktısı

```
lme=fitlme(Orto,'Distance~1+Age+Sex+Age*Sex+(Age|Subject)','FitMethod','REML',
'CovariancePattern','Full')

lme =

Linear mixed-effects model fit by REML
Model information:
Number of observations             108
Fixed effects coefficients           4
Random effects coefficients         54
Covariance parameters                4

Formula:
Distance ~ 1 + Age*Sex + (1 + Age | Subject)

Model fit statistics:
AIC        BIC        LogLikelihood        Deviance
448.58     469.74     -216.29              432.58

Fixed effects coefficients (95% CIs):
Name                Estimate    SE          tStat     DF    pValue        Lower      Upper
'(Intercept)'       16.341      1.0185      16.043    104   6.8474e-30    14.321     18.36
'Age'               0.784       0.08599     9.1207    104   6.1787e-15    0.61383    0.954
'Sex_Female'        1.0321      1.5957      0.64679   104   0.51919       -2.1323    4.1965
'Age:Sex_Female'    -0.3048     0.13474     -2.2624   104   0.02575       -0.57201   -0.0376


Random effects covariance parameters (95% CIs):
Group: Subject (27 Levels)
    Name1           Name2           Type     Estimate    Lower       Upper
    '(Intercept)'   '(Intercept)'   'std'    2.4055      1.0081      5.74
    'Age'           '(Intercept)'   'corr'   -0.66762    -0.96045    0.32639
    'Age'           'Age'           'std'    0.18035     0.058576    0.55525


Group: Error
    Name          Estimate    Lower     Upper
    'Res Std'     1.31        1.0849    1.5819

[Var_ui,Var_epsilonij] = covarianceParameters(lme)
Var_ui =    5.7864   -0.2896        Var_epsilonij =     1.7162
           -0.2896    0.0325
```

Çizelge 3.6. UN(1) modelinin REML yöntemi altındaki Matlab R2014a program çıktısı

```
lme2=fitlme(Orto,'Distance~1+Age+Sex+Age*Sex+(Age|Subject)','FitMethod','REML',
'CovariancePattern','Diagonal')

lme2 =

Linear mixed-effects model fit by REML

Model information:
   Number of observations             108
   Fixed effects coefficients           4
   Random effects coefficients         54
   Covariance parameters                3

Formula:
   Distance ~ 1 + Age*Sex + (1 + Age | Subject)

Model fit statistics:
   AIC        BIC        LogLikelihood        Deviance
   447.15     465.66     -216.58               433.15

Fixed effects coefficients (95% CIs):
   Name                Estimate    SE          tStat     DF     pValue        Lower     Upper
   '(Intercept)'         16.341    0.94087     17.368    104    1.6524e-32     14.475    18.206
   'Age'                  0.784    0.079442     9.8735   104    1.2902e-16      0.62684   0.941
   'Sex_Female'           1.0321   1.4741       0.70018  104    0.48538        -1.891     3.9552
   'Age:Sex_Female'      -0.3048   0.12446     -2.4492   104    0.015989       -0.551     0.0580


Random effects covariance parameters (95% CIs):
Group: Subject (27 Levels)
   Name1          Name2          Type     Estimate     Lower      Upper
   '(Intercept)'  '(Intercept)'  'std'     1.5546      0.85834    2.8157
   'Age'          'Age'          'std'     0.088017    0.023248   0.33323


Group: Error
   Name          Estimate    Lower     Upper
   'Res Std'      1.3655     1.1628    1.6035


[Var_ui,Var_epsilonij] = covarianceParameters(lme2)
Var_ui =    2.4168         0      Var_epsilonij =      1.8646
                 0    0.0077
```

Çizelge 3.7. VC modelinin REML yöntemi altındaki Matlab R2014a program çıktısı

```
lme3=fitlme(Orto,'Distance~1+Age+Sex+Age*Sex+(Age|Subject)','FitMethod','REML',
'CovariancePattern','Isotropic')

lme3 =

Linear mixed-effects model fit by REML

Model information:
    Number of observations             108
    Fixed effects coefficients           4
    Random effects coefficients         54
    Covariance parameters                2

Formula:
    Distance ~ 1 + Age*Sex + (1 + Age | Subject)

Model fit statistics:
    AIC       BIC       LogLikelihood      Deviance
    448.64    464.51    -218.32            436.64

Fixed effects coefficients (95% CIs):
    Name                Estimate      SE         tStat      DF      pValue          Lower      Upper
    '(Intercept)'         16.341      0.88894    18.382     104     1.8978e-34      14.578     18.103
    'Age'                  0.784      0.08855     8.8575    104     2.3767e-14      0.60877    0.959
    'Sex_Female'           1.0321     1.3927      0.74108   104     0.46032         -1.7297    3.7939
    'Age:Sex_Female'      -0.3048     0.13874    -2.1971    104     0.030229        -0.57995   -0.0297


Random effects covariance parameters (95% CIs):
Group: Subject (27 Levels)
    Name1             Name2             Type          Estimate    Lower     Upper
    '(Intercept)'     '(Intercept)'     'std'         0.15915     0.11538   0.2195


Group: Error
    Name           Estimate    Lower     Upper
    'Res Std'      1.4152      1.2107    1.6543


[Var_ui,Var_epsilonij] = covarianceParameters(lme3)
Var_ui =   0.0253         0              Var_epsilonij =      2.0029
               0    0.0253
```

Çizelge 3.8. CS modelinin REML yöntemi altındaki Matlab R2014a program çıktısı

```
lme4=fitlme(Orto,'Distance~1+Age+Sex+Age*Sex+(Age|Subject)','FitMethod','REML',
'CovariancePattern','CompSymm')

lme4 =

Linear mixed-effects model fit by REML

Model information:
   Number of observations           108
   Fixed effects coefficients         4
   Random effects coefficients       54
   Covariance parameters              3

Formula:
   Distance ~ 1 + Age*Sex + (1 + Age | Subject)

Model fit statistics:
   AIC        BIC        LogLikelihood      Deviance
   450.07     468.59     -218.04             436.07

Fixed effects coefficients (95% CIs):
   Name              Estimate    SE         tStat     DF    pValue       Lower     Upper
   '(Intercept)'      16.341     0.88551    18.453    104   1.3931e-34   14.585    18.097
   'Age'               0.784     0.08699     9.0168   104   1.0521e-14    0.61187   0.956
   'Sex_Female'        1.0321    1.3873      0.74395  104    0.45858     -1.719     3.7832
   'Age:Sex_Female' -0.3048      0.13629    -2.2367   104    0.027443    -0.57509  -0.0345


Random effects covariance parameters (95% CIs):
Group: Subject (27 Levels)
   Name1             Name2             Type          Estimate    Lower     Upper
   '(Intercept)'     '(Intercept)'     'std'          0.14724    0.10684   0.20291
   'Age'             '(Intercept)'     'corr'         0.99999   -1         1


Group: Error
   Name          Estimate    Lower    Upper
   'Res Std'     1.41        1.2064   1.6479


[Var_ui,Var_epsilonij] = covarianceParameters(lme4)
Var_ui =   0.0217      0.0217        Var_epsilonij =     1.9880
           0.0217      0.0217
```

EK 3. Baksalary ve Trenkler Teoremi (Baksalary ve Trenkler, 1991)

$\zeta_{n\times p}$ $n \times p$ tipinde kompleks matrisler kümesi ve H_n Hermityen matrisleri içeren $\zeta_{n\times n}$ nin alt kümesi olsun. Ayrıca, Ł$\in \zeta_{n\times p}$ verilsin, Ł*, $\Re$ (Ł), ς(Ł) gösterimleri sırasıyla Ł nin eşlenik transpozu, kolon uzayı ve genelleştirilmiş terslerin kümesi olsun. Şimdi, $A \in \text{H}_n$, a_1 ve $a_2 \in \zeta_{n\times 1}$ lineer bağımsız, $A^- \in \varsigma(A)$ için $\check{s} = [a_1^*(I_n - AA^-)^*(I_n - AA^-)a_2]/[a_1^*(I_n - AA^-)^*(I_n - AA^-)a_1]$ ve $f_{ij} = a_i^* A^- a_j$, i,j = 1,2 olsun ve $a_1 \notin \Re(A)$ sağlansın. Bu durumda, $A + a_1a_1^* - a_2a_2^*$ nnd tanımlı bir matristir ancak ve ancak aşağıdaki koşullardan biri sağlanırsa:

(a) A nnd tanımlı bir matris, $a_1 \in \Re(A)$, $a_2 \in \Re(A)$ ve
$(f_{11} + 1)(f_{22} - 1) \leq |f_{12}|^2$;
(b) A nnd tanımlı bir matris, $a_1 \notin \Re(A)$, $a_2 \in \Re(A{:}\, a_1)$ ve
$(a_2 - \check{s}a_1)^* A^- (a_2 - \check{s}a_1) \leq 1 - |\check{s}|^2$;
(c) $A = U\Delta U^* - \delta vv^*$, $a_1 \in \Re(A)$, $a_2 \in \Re(A)$, $v'a_1 \neq 0$ ve
$(f_{11} + 1) \leq 0$, $(f_{22} - 1) \leq 0$, $(f_{11} + 1)(f_{22} - 1) \geq |f_{12}|^2$

burada $(U{:}\, v)$ altuniter matris, Δ pd köşegen bir matris (U varken ortaya çıkan) ve δ pozitif bir skalerdir. Üstelik, (a)-(c) koşullarının tamamı $A^- \in \varsigma(A)$ seçiminden bağımsızdır.