EGE ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

(YÜKSEK LİSANS TEZİ)

YANIT YÜZEY METODOLOJİSİNE BAYESÇİ LİNEER REGRESYON YAKLAŞIMLARI

Elif KOZAN

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Onur KÖKSOY

İstatistik Anabilim Dalı

Sunuş Tarihi: 15.01.2016

Bornova-İZMİR

2016

Elif KOZAN tarafından yüksek lisans tezi olarak sunulan "Yanıt Yüzey Metodolojisine Bayesçi Lineer Regresyon Yaklaşımları" başlıklı bu çalışma EÜ Lisansüstü Eğitim ve Öğretim Yönetmeliği ile EÜ Fen Bilimleri Enstitüsü Eğitim ve Öğretim Yönergesi'nin ilgili hükümleri uyarınca tarafımızdan değerlendirilerek savunmaya değer bulunmuş ve 15.01.2016 tarihinde yapılan tez savunma sınavında aday oybirliği / oyçokluğu ile başarılı bulunmuştur.

Jüri Üyeleri:		**İmza**
Jüri Başkanı	**: .....**	**.....**
Raportör Üye	**: .....**	**.....**
Üye	**: .....**	**.....**

EGE ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

ETİK KURALLARA UYGUNLUK BEYANI

EÜ Lisansüstü Eğitim ve Öğretim Yönetmeliğinin ilgili hükümleri uyarınca Yüksek Lisans Tezi olarak sunduğum "Yanıt Yüzey Metodolojisine Bayesçi Lineer Regresyon Yaklaşımları" başlıklı bu tezin kendi çalışmam olduğunu, sunduğum tüm sonuç, doküman, bilgi ve belgeleri bizzat ve bu tez çalışması kapsamında elde ettiğimi, bu tez çalışmasıyla elde edilmeyen bütün bilgi ve yorumlara atıf yaptığımı ve bunları kaynaklar listesinde usulüne uygun olarak verdiğimi, tez çalışması ve yazımı sırasında patent ve telif haklarını ihlal edici bir davranışımın olmadığını, bu tezin herhangi bir bölümünü bu üniversite veya diğer bir üniversitede başka bir tez çalışması içinde sunmadığımı, bu tezin planlanmasından yazımına kadar bütün safhalarda bilimsel etik kurallarına uygun olarak davrandığımı ve aksinin ortaya çıkması durumunda her türlü yasal sonucu kabul edeceğimi beyan ederim.

15.01.2016

Elif KOZAN

ÖZET

YANIT YÜZEY METODOLOJİSİNE BAYESÇİ LİNEER REGRESYON YAKLAŞIMLARI

KOZAN, Elif

Yüksek Lisans Tezi, İstatistik Anabilim Dalı
Tez Danışmanı: Prof. Dr. Onur KÖKSOY
Ocak 2016, 66 sayfa

Bu tez kapsamında, süreç-dışı kalite geliştirme yaklaşımlarında önemli bir yaklaşım olan Yanıt Yüzey Metodolojisi ve önsel dağılım bilgisinin kullanılarak tahmin işleminin daha etkin yapıldığı Bayesçi Lineer Regresyon yaklaşımları birlikte ele alınarak farklı tahmin ediciler için sonuçlar karşılaştırılmıştır. Bu aşamada, yanıt yüzeylerde Bayesçi regresyon tahmin edicisi olarak daha önceden kullanılmamış olan bir tahmin edicinin sonuçları incelenmiştir. Uygulama bölümünde WINBUGS paket programından yararlanılmıştır.

Yanıt yüzey modellerinde, klasik regresyon uygulaması yerine, Bayesçi regresyon yaklaşımının uygulanmasının temel sebeplerinden biri, yanıt fonksiyonu ile ilgili belirsizliği önsel olasılık dağılımları aracılığı ile açıklayarak daha gerçekçi bir model elde etme çabasıdır.

Bayesçi yaklaşımda bilinmeyen parametre rasgele değişken olarak alındığından, bu yaklaşım günlük hayat problemlerine daha iyi cevap verebilmektedir. Ayrıca, literatürde yer alan çalışmalar sonucunda, önsel dağılım bilgisi ile tahmin işleminin daha güçlü ve gerçeğe yakın olduğu görülebilmektedir. Yanıt yüzey metodolojisinde Bayesçi regresyon sayesinde klasik regresyon yolu ile elde edilen sonuçlardan daha gerçekçi alternatif sonuçlar elde edilebildiği görülmektedir.

Anahtar sözcükler: Yanıt yüzey metodolojisi, Bayesçi regresyon, WINBUGS, MAP tahmin edicisi

ABSTRACT

BAYESIAN LINEAR REGRESSION APPROACH IN RESPONSE SURFACE METHODOLOGY

KOZAN, Elif

MSc in Statistics
Supervisor: Prof. Dr. Onur KÖKSOY
January 2016, 66 pages

In this study, Response Surface Methodology, an essential approach off-line quality improvement, and Bayesian Linear Regression, an approach which uses the prior information to make a more efficient inference, are considered together. Results for different estimators compared. In this context, results for an estimator are examined which seems to be not used before as an estimator for Bayesian regression with response surfaces in the literatüre.

In response surface models, one of the main reasons for using the Bayesian Regression rather than Classic Regression, is to achieve a better model by explaining the uncertainty of the response function with prior distributions.

Bayesian approach can give better answers to daily life problems since it takes the unknown parameter as a random variable. Also, the studies in the literature shows that the estimation becomes more powerful and realistic while using the prior distribution information. By using Bayesian regression, in response surface moethodology, it seems that more realistic results can be obtained by comparison with the results derived using classic regression.

Keywords: Response surface methodology, Bayesian regression, WINBUGS, MAP estimator

TEŞEKKÜR

Tez çalışmamın gerçekleşmesinde büyük katkıları olan danışman hocam Onur KÖKSOY'a, desteklerini hep hissettiğim aileme, eşim Agâh Kozan ve doğacak biricik oğluma teşekkürü bir borç bilirim.

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET vii
ABSTRACT ix
TEŞEKKÜR xi
ŞEKİLLER DİZİNİ xiv
ÇİZELGELER DİZİNİ xv
1. GİRİŞ 1
2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR 3
2.1 Yanıt Yüzey Metodolojisi 5
2.2 Bayesçi Yaklaşım 11
2.2.1 Bayesçi yaklaşımda parametre tahmini 21
2.2.2. Bayesçi Doğrusal regresyon 28
3. YANIT YÜZEY METODOLOJİSİNE BAYESÇİ LİNEER REGRESYON YAKLAŞIMININ FARKLI TAHMİN EDİCİLER İLE UYGULANMASI 37
4. SONUÇ VE TARTIŞMA 60
KAYNAKLAR DİZİNİ 62
ÖZGEÇMİŞ 66
EKLER .....

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil Sayfa

2.1. Yanıt yüzeyi grafiği. 5
2.2. Eş yükseklik eğrisi grafiği.....6
2.3. En dik artış a) Eş yükseklik eğrisi grafiği b) Yanıt yüzey grafiği.....7
2.4. İkinci dereceden modelde maksimum değer a) Eş yükseklik eğrisi grafiği b) Yanıt yüzey grafiği.....8
2.5. İkinci dereceden modelde minimum değer a) Eş yükseklik eğrisi grafiği b) Yanıt yüzey grafiği.....8
2.6. İkinci dereceden modelde "eyer noktası" a) Eş yükseklik eğrisi grafiği b) Yanıt yüzey grafiği.....8
2.7. k=2 ve $\alpha = 2$ durumunda merkezsel bileşik tasarım.....10
2.8. k=3 ve $\alpha = 3$ durumunda merkezsel bileşik tasarım.....10
2.9. MAP tahmini için Bayesçi kayıp fonksiyonu 23
2.10. Ortalama mutlak hata zarar fonksiyonu ve tahmininin gösterimi.....26
2.11. En küçük hata kareler ortalaması kayıp fonksiyonu ve tahminin gösterimi 27
2.12. MAP, MAVE ve MMSE tahminleri gösterimi 28
3.1. Eş yükseklik eğrisi 40
3.2. Yanıt yüzey grafiği.....41

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge Sayfa

2.1. Eksen/yıldız bileşik tasarımı 10
2.2. Merkezsel bileşik tasarım α değerleri 11
3.1. Merkezsel bileşik tasarım deneme noktaları 37
3.2. Bayesçi regresyonda en küçük kareler tahmin edicilerinin yanıt yüzeye uygulanması 48
3.3. Bayesçi regresyonda MAP tahmin edicilerinin yanıt yüzeye uygulanması ... 52
3.4. Bayesçi regresyonun WINBUGS kullanılarak yanıt yüzeye uygulanması 59

1. GİRİŞ

Toplumda bireyler bir ürün veya bir sürecin kusursuz olmasını isterler ve en iyiyi hedeflerler. İşte hep en iyinin hedeflendiği dünyamızda en iyiyi nasıl elde ederiz konusu çok eskilere dayanır. En iyinin, en kalitelinin elde edilmesi konusunda yapılan pek çok teknik ve çalışma vardır. Yanıt yüzey metodolojisi de bu tekniklerden biridir.

Yanıt yüzey metodolojisi ilk olarak Box ve Wilson (1951) tarafından, yanıtların minimum ya da maksimum yapılması için tasarım değişkenlerinin optimum koşullarının bulunması hususunda tanıtılmıştır. Ancak, o yıllarda çok fazla ilgi görmemiştir. Yanıt yüzey metodolojisi sonraki yıllarda, Taguchi'nin konuya dikkat çekmesi sayesinde popüler hale gelmiştir.

Yanıt yüzey metodolojisi, deney tasarımı, modelleme ve optimizasyon aşamalarından oluşmaktadır. İstenilen deney tasarımını elde etmek için, eleme denemeleri kullanılarak ilgilenilen kalite karakteristiği üzerinde etkili olan bağımsız değişkenler belirlenir ve bağımsız değişkenler ile yanıt arasındaki ilişkiyi tespit etmek amacıyla modelleme yapılır. Uygun bir model elde edildikten sonra, bağımsız değişkenlerin hangi değerlerinde, hedef değere ulaşıldığını belirlemek amacı ile optimizasyon teknikleri kullanılır.

Bu tez çalışmasında, yanıt yüzeylere, Bayesçi regresyon yaklaşımı uygulanması amaçlanmıştır. Bu amaç doğrultusunda, tezin ikinci bölümünde, yanıt yüzey metodolojisi ve Bayesçi yaklaşım ile ilgili yapılan önceki çalışmalar verilmektedir. Üçüncü bölümde ise yanıt yüzey modellerinde Bayesçi lineer regresyonun uygulanmasına yer verilmiştir. Bu bölümde, çeşitli önsel dağılımlar için Bayesçi regresyon tahmin edicilerinin yanıt yüzeylere uygulanışı ele alınmıştır. Bayesçi regresyon tahmin edicileri olarak En Küçük Kareler tahmin edicisi, MAP (Maksimum A Posteriori) tahmin edicisi ve WINBUGS paket programı aracılığıyla elde edilen tahmin edici kullanılmıştır. Literatürde, genellikle en küçük kareler tahmin edicisinin kullanıldığı görülmüş ve MAP tahmin edicisinin yanıt yüzeylere Bayesçi regresyon ile uygulanmasına rastlanmamıştır. Buradan hareketle, bu tahmin edicinin bu yaklaşım ile nasıl

sonuçlar vereceği araştırılmak istenmiştir. Bu tahmin ediciler, çeşitli önsel bilgiler kullanılarak bir uygulama problemi üzerinde incelenmiş ve bunlara ilişkin sonsal bilgiler elde edilmiştir. Elde edilen bu sonsal bilgilere, yanıt yüzey metodolojisi uygulanmış ve sonuçları karşılaştırılmıştır.

2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR

Yanıt yüzey metodolojisi ilk olarak Box ve Wilson (1951) tarafından tanımlanmış ve geliştirilmiştir. Box (1954) ve Youle (1955) yanıt yüzey metodolojisinin sanayide kullanımı üzerine çalışmalar yapmışlardır. Myers ve Carter (1973) tarafından ikili yanıt yüzeyi modeli tanıtılmıştır. Daha sonraki yıllarda Mead ve Pike (1975) yanıt yüzey metodolojisini ziraat ile ilgili çalışmalarda da kullanılmıştır. Taguchi, istatistiksel deney tasarımı ile kalite mühendisliğine dayalı dayanıklı tasarım yöntemini tanıtmıştır. Dayanıklı tasarım yaklaşımı, ürün ve süreç gelişimine önemli katkılar sağlamıştır. Taguchi nin off-line kalite geliştirme yöntemleri 1980-1982 yıllarında AT&T, Ford gibi firmalarda uygulanmıştır. Taguchi (1986) dayanıklı parametre tasarımı metodu ve sinyal-gürültü oranı ile kalite karakteristiklerinin ortalama ve varyansının birlikte incelenebileceğine dikkatleri çekmiştir.

Taguchinin dayanıklı parametre tasarımı metodu çok fazla ilgi görmüştür ancak istatistiksel yönden bazı eksiklikleri görülmüştür. Box (1985), Taguchi yönteminin eksikliğini ana hatlarıyla ortaya koymuş ve eleştirilerde bulunmuştur. Bu eleştiriler doğrultusunda, Taguchi felsefinin beğenilen yönleri ile yanıt yüzey yöntemi birleştirilerek, Vining ve Myers (1990) tarafından, Japon mühendis G. Taguchi'nin analizlerine alternatif olarak, süreç dışı (off-line) kalite geliştirme yaklaşımı olan yanıt yüzey metodolojisi önerilmiş ve literatürde geniş bir yere sahip olmuştur. Taguchi'nin tasarım ve analizleri istatistiksel eksikleri dolayısı ile çokça eleştirilmiş olmasına rağmen Taguchi felsefesi pek çok kişi tarafından benimsenmiştir. Yanıt yüzey metodolojosi de Taguchi felsefesini benimsemiş olan alternatif yöntemlerin başında gelir.

Myers, Khuri ve Vining (1992), Vining ve Myers (1990) tarafından önerilen yöntemde gürültü değişkenlerine değinilmediğini ifade etmiş ve gürültü değişkenlerini de yanıt yüzey modellerine adapte ederek ikili yanıt yüzeyi yaklaşımını tekrar ele almışlardır. Lin ve Tu (1995), Vining ve Myers (1990) tarafından önerilen en küçük en iyi problemindeki standart sapma yanıtına ilişkin kısıt değerinin, gerçekte bilinmemesi ve dolayısıyla mümkün olduğunca küçültülmeye çalışılamayacağı gerekçesiyle gerçekçi bulmamışlardır. Hata kareler

ortalamasına dayanan yeni bir optimizasyon problemi önermişler ve ikili yanıt problemini tek yanıtlı probleme indirgemişlerdir. Köksoy ve Doganaksoy (2003) tarafından alternatif bir yaklaşım önerilmiş, süreç ortalama ve standart sapması amaçları çok amaçlı bir probleme dönüştürülerek kısıttan kurtarılmıştır.

Bu tez çalışmasında incelenecek bir diğer konu olan Bayesçi yaklaşım, günümüzde Bayes teoremi olarak bilinen teoremin özel bir hali olarak Bayes (1763) tarafından önerilmiştir. Laplace (1774) Bayes' den bağımsız olarak Bayes teoreminin genel formunu bulmuştur. İlerleyen yıllarda Laplace'in çalışmaları Keynes (1921), Finetti (1937), Ramsey (1926) ve Savage (1951) tarafından oldukça ilgi çekici bulunmuş, subjektif ve objektif olarak iki kısımda incelenmiştir. Jeffreys (1939) " Theory of Probability" kitabı ile Bayesçi yaklaşımın gelişmesine önemli katkılar sağlamıştır. Metropolis et al. (1953) Metropolis – Hasting algoritmasını tanıtmıştırlar. Bilgisayar teknolojisinin ilerlemesi ile ilerleyen yıllarda bu algoritma Bayesçi yaklaşımdaki hesaplama zorluklarının giderilmesine katkı sağlamıştır. Jaynes (1957) objektif önsel dağılımların oluşurulmasında "Maksimum Entropy" yöntemini tanıtmıştur. Hasting (1970) İstatistikte Monte Carlo yöntemini tanıtmıştır ve bilgisayar teknolojisinin gelişmesi ile Monte Carlo Markov Zinciri (MCMC) sayesinde Bayesçi yaklaşımdaki hesaplama zorlukları büyük ölçüde aşılmıştır. Lindley (1972) Bayes yöntemlerini iki faktörlü deney tasarımına ve çoklu regresyona uygulamıştır. Goldstein (1975) bazı Parametrik olmayan problemlere Bayesçi yaklaşım ile çözüm bulmaya çalışmıştır. Goldstein (1976) regresyon problemlerine Bayesçi yaklaşım uygulamıştır. Bernardo (1979) objektif analiz için "Reference Analysis" ı tanıtmıştır. Lindley (1980) "Introduction to Probability and Statistics from a Bayesian Viewpoint" kitabı ile Bayes yaklaşımını geniş kitlelere duyurmuştur. Chaloner (1984) Doğrusal modeller için optimal Bayesçi deney tasarımını çalışmıştır. Pereira ve Stern (2001) Model seçiminde, tam Bayesçi önemlilik testinin nasıl kullanılacağından bahsetmiştir. Kumar, Nair, Keane ve Shahpar (2007) tarafından Bayesçi Monte Carlo simülasyonuna dayanan dayanaklı tasarım için bir strateji önerilmiştir. Jeong, Kim ve Lin (2009) ağırlıklandırılmış hata kareler ortalamasındaki parametrenin seçimi için sistematik bir yöntem geliştirmişlerdir.

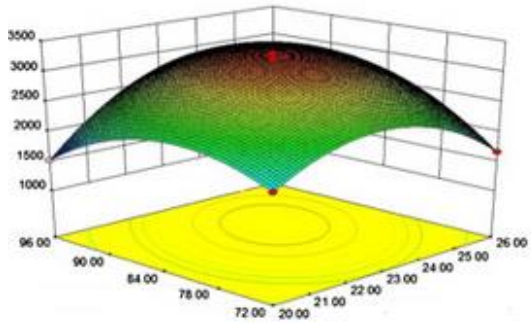
Bayesçi yaklaşım uzun yıllarca çalışılmış olmasına rağmen, matematiksel işlemlerin zorluğu sebebiyle klasik yaklaşımın gerisinde kalmıştır. Hesaplama zorlukları dolayısı ile 20. Yüzyılın başlarında kullanımı oldukça zor olan Bayesçi yaklaşım bilgisayar teknolojisinin gelişimi ile daha kullanışlı hale gelmiştir. Yüksek hızdaki bilgisayarların gelişmesi, gerekli hesaplamaların kısa sürelerde yapılmasını sağlamış ve Bayesçi yaklaşımın faydalarının geniş uygulama alanlarına taşınmasına öncülük etmiştir. Ayrıca Monte Carlo Markov Zinciri gibi tekniklerin gelişmesi Bayesçi yaklaşımın uygulanabilirliğini oldukça arttırmıştır.

2.1 Yanıt Yüzey Metodolojisi

Yanıt yüzey metodolojisi, bir veya birden çok bağımlı ve bağımsız değişken için optimum yanıt yüzeyi elde etmeye dayalıdır.

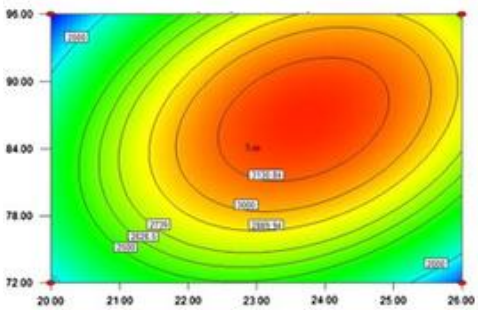
Örneğin; (X_1) ve (X_2) gibi iki bağımsız değişken olması durumunda izlenen bir süreç yanıt değişkeni $Y = f(X_1, X_2) + \varepsilon$ şeklinde tanımlansın.

Sürece ilişkin bir yanıt yüzey grafiği Şekil 2.1'den gözlenebilmektedir (Myers et al., 2008).



Şekil 2.1. Yanıt yüzeyi grafiği.

Şekil 2.1'in bir başka gösterimi " Eş yükselti eğrileri" yardımıyla Şekil 2.2 olarak verilmektedir.



Şekil 2.2. Eş yükseklik eğrisi grafiği.

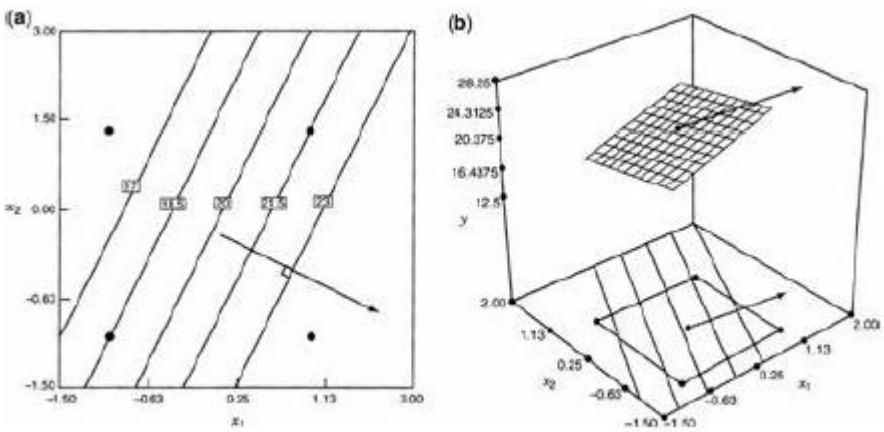
Çoğunlukla, yanıt değişkeni ile bağımsız değişkenler arasındaki ilişkinin formu kesin olarak bilinmez. Gerçek fonksiyonel ilişkiye uygun bir tahmin modeli bulunur. Eğer yanıt değişkeni, bağımsız değişkenlerin doğrusal bir fonksiyonu olarak modellenebiliyorsa "Birinci Dereceden Model" tercih edilir:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \cdots + \beta_k X_k + \boldsymbol{\varepsilon}$$

Eğer değişkenler arasında eğrisel bir yapı var ise birinci dereceden modeller yetersiz kalmaktadır. Bu durumda ikinci dereceden ya da daha yüksek dereceden modeller kullanılır (Myerset al., 2008):

$$Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^{k} \beta_i X_i + \sum_{i=1}^{k} \beta_{ii} {X_i}^2 + \sum_{i<j} \sum_{i=1}^{k} \beta_{ij} X_i X_j + \boldsymbol{\varepsilon}$$

Modelde yer alacak değişkenlerin belirlenmesinden sonra optimum bölgeye ulaşabilmek için hangi yöne doğru hareket edileceği belirlenir. Bu aşamada, genelde sadece ana etkilerin yer aldığı birinci dereceden model ile pilot deneme yapılır. Birinci dereceden bir modelin maksimum olduğu nokta "En Dik Artış Yöntemi" ile minimum olduğu nokta ise "En Dik Azalış" yöntemi aracılığı ile matematiksel olarak hesaplanabilmektedir. En dik artış yöntemi için eş yükseklik eğrisi ve yanıt yüzey grafiği Şekil 2.3'deki gibidir.



Şekil 2.3. En dik artış a) Eş yükseklik eğrisi grafiği b) Yanıt yüzey grafiği

Modeldeki katsayılar ve onların işaretleri en dik artış/azalış yolunun belirlenmesini sağlar (Myers et al., 2008).

$\hat{Y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \cdots + b_kx_k$ birinci dereceden tahmin modelini göstermektedir. Lagrange çarpanları yöntemi kullanılarak,

$$L = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \cdots + b_kx_k - \lambda\left(\sum_{i=1}^{k} {X_i}^2 - \rho^2\right)$$

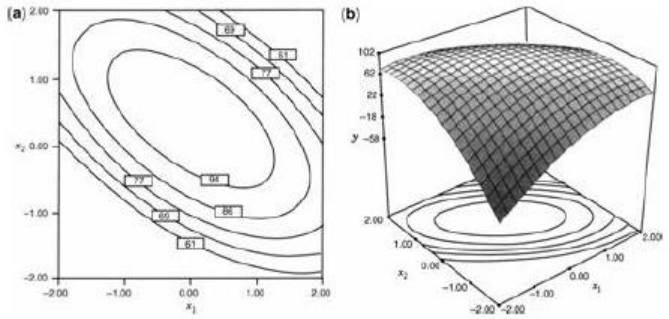
denklemi elde edilir. Burada $x_j$lere göre kısmı türev işlemi yapılır ve elde edilen sonuç 0 ' a eşitlenilerek en dik artış yolu $x_j = \frac{b_j}{2\lambda}$, (j=1,2…,k) şeklinde hesaplanır.

Birinci dereceden bir modelde eğriselliğin varlığı saptanmış ise model yetersiz olacaktır ve bu model için maksimum ya da minimum nokta bulunması için en dik artış/azalış yönteminin uygulanması uygun olmamaktadır. Bu durumda ikinci dereceden model incelenecektir. İkinci dereceden modelde;

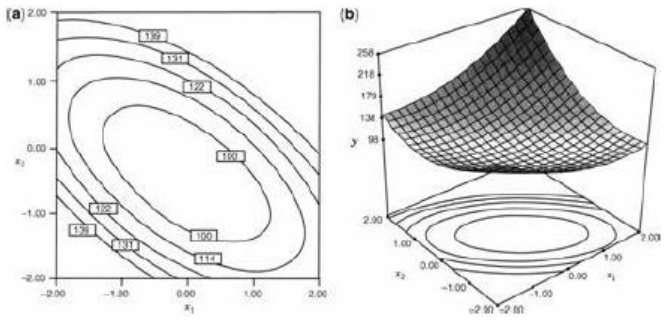
$$Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^{k} \beta_i X_i + \sum_{i=1}^{k} \beta_{ii} {X_i}^2 + \sum_{i<j} \sum_{i=1}^{k} \beta_{ij} X_i X_j + \boldsymbol{\varepsilon}$$

yanıt değişkeninin optimum değeri aldığı nokta problemin cinsine göre maksimum, minimum veya “eyer noktası” isimleri ile adlandırılmaktadır. Optimal

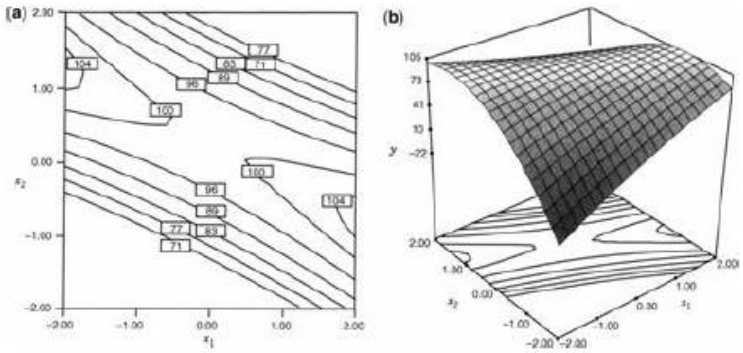
değeri gösteren yanıt yüzey şekilleri örnek teşkil etmesi açısından Şekil 2.4, 2.5 ve 2.6'da verilmektedir.



Şekil 2.4. İkinci dereceden modelde maksimum değer a) Eş yükseklik eğrisi grafiği b) Yanıt yüzey grafiği.



Şekil 2.5. İkinci dereceden modelde minimum değer a) Eş yükseklik eğrisi grafiği b) Yanıt yüzey grafiği



Şekil 2.6. İkinci dereceden modelde "eyer noktası" a) Eş yükseklik eğrisi grafiği b) Yanıt yüzey grafiği

Ayrıca, durağan noktaları matrisler aracılığı ile de tespit etmek mümkündür. İkinci derece modelimizi matris formda ifade edersek, tahmin modeli,

$$\hat{y} = b_0 + \mathbf{x}'\mathbf{b} + \mathbf{x}'\widehat{\mathbf{B}}\mathbf{x}$$

şeklinde yazılır. Burada,

$$\mathbf{x}' = [x_1, x_2, \dots, x_k]\,,\ \mathbf{b}' = [b_1, b_2, \dots, b_k]$$

$$\widehat{\mathbf{B}} = \begin{bmatrix} b_{11} & \cdots & b_{1k/2} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{k1} & \cdots & b_{kk} \end{bmatrix}$$

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{b} + 2\widehat{\mathbf{B}}\mathbf{x}$$

$$\mathbf{x}_{Durağan} = -\frac{1}{2}\widehat{\mathbf{B}}^{-\mathbf{1}}\mathbf{b}$$

olur ve elde edilen durağan noktalar modelde yerine konulursa yanıt değişkenin değeri aşağıdaki şekilde tahmin edilir:

$$\hat{Y}_{Durağan} = b_0 + \frac{1}{2}\mathbf{x}'_{Durağan}\mathbf{b}$$

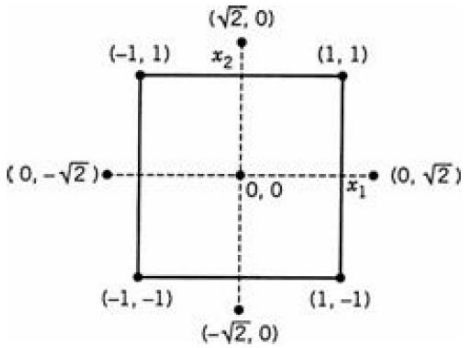
İkinci dereceden bir modelde durağan noktanın yeri ve yapısı hakkında karar vermek için "kanonik analiz ve ridge analizi" kullanılabilir. Durağan noktanın yapısını $\widehat{\boldsymbol{B}}$ matrisi yardımı ile elde edilen özdeğerlerin işareti belirler (Myers , 1971).

İkinci derece yanıt yüzeyi modellerini destekleyen tasarımlardan en çok tercih edileni "Merkezsel Bileşik Tasarımdır." Merkezsel bileşik tasarımlar, 2^k sayıda iki düzeyli faktöriyel denemenin, 2k sayıda eksen noktası/yıldız nokta ile n_c sayıda merkez noktanın kombinasyonundan oluşur. Eksen/yıldız noktalarının tasarım yerleşimi Çizelge 2.1'de verilmiştir:

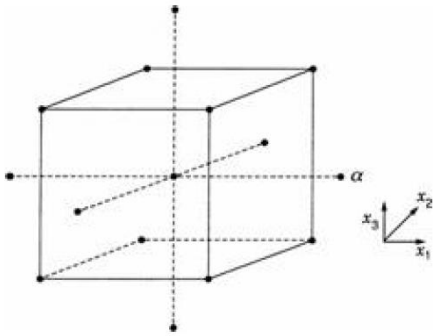
Çizelge 2.1. Eksen/yıldız bileşik tasarımı

X_1	X_2		X_k
-α	0	…	0
α	0	…	0
0	- α	…	0
0	α	…	0
⋮	⋮	…	⋮
0	0	…	- α
0	0	…	α

Şekil 2.7 ve Şekil 2.8'de farklı k ve α durumlarında merkezsel bileşik tasarımları gösterilmektedir:



Şekil 2.7. k=2 ve $\alpha = \sqrt{2}$ durumunda merkezsel bileşik tasarım



Şekil 2.8. k=3 ve $\alpha = \sqrt{3}$ durumunda merkezsel bileşik tasarım

Merkezsel bileşik tasarımlarda en çok tercih edilen α değerleri aşağıdaki Çizelge 2.2 de özetlenmiştir (Myers et al., 2008).

Çizelge 2.2. Merkezsel bileşik tasarım α değerleri

k	**F=2^k**	**N**	$\boldsymbol{\alpha}$
2	4	8+ n_c	1,414
3	8	14+ n_c	1,682
4	16	24+ n_c	2
5	32	42+ n_c	2,378
5 (1/2 kes.)	16	26+ n_c	2
6	64	76+ n_c	2,828
6 (1/2 kes.)	32	$44 + n_c$	2,378
7	128	142+ n_c	3,364
7 (1/2 kes.)	64	78+ n_c	2,828

2.2 Bayesçi Yaklaşım

21.yüzyılın başlarında Bayesçi istatistik oldukça popüler hale gelmiştir. Klasik istatistik teorisi ve Bayesçi yaklaşım arasındaki temel fark, Bayesçi yaklaşımda parametrenin rasgele değişken olarak tanımlanması ve bu rasgele değişken için önsel bir dağılımın var olmasıdır. Bayesçi yaklaşımda ilgilendiğimiz parametre için sonsal bir dağılım elde edilmektedir ve istatistiksel çıkarsama bu sonsal dağılım üzerinden yapılmaktadır. Sonsal dağılım ise, önsel dağılım ve olabilirlik fonksiyonu kullanılarak, sonsal dağılım $f(\theta|y)$, önsel dağılım $f(\theta)$ ve olabilirlik fonksiyonu $f(y|\theta)$olmak üzere,

$$f(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}) = \frac{f(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})f(\boldsymbol{\theta})}{f(\boldsymbol{y})} \propto f(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})f(\boldsymbol{\theta})$$

şeklinde yazılmaktadır. Burada, $f(y)$ normalleştirme sabiti olarak düşünüldüğünde sonsal dağılım yaklaşık olarak "**Olabilirlik** $\times$ **Önsel**" şeklinde yorumlanır (Hoff, 2009).

Klasik yaklaşım ve Bayesçi yaklaşım, pek çok konu ve kavramın ele alınışında birbirine alternatif olmuştur. Bayesçi yaklaşımın gelişme sürecine bakıldığında, kendi disiplini olan alternatif bir yaklaşım olarak karşımıza çıkmaktadır. Dolayısıyla pek çok istatistiksel kavram bu yaklaşımda farklı yorumlanmaktadır. Bayesçi istatistikte, belirsizlik olasılıklarla ifade edilmektedir. Klasik yaklaşım belirsizliklerde deterministik davranır. Varsayımlar doğrultusunda söz konusu belirsizliği, orada iddia edilen ilişkiyi, sıklıklarına göre değerlendirerek, kabul eder ya da reddeder. Bayesçi yaklaşımı benimseyenler, belirsizlikle ifade edilen bir teoriyi tamamen kabul etmenin veya reddetmenin bilgi oluşturma sürecine pek bir katkı sağlamayacağı, aksine yanılsamalara yol açacağı şeklinde eleştiriler getirebilirler.

Bayesçi istatistikte "kesinlik (precision)" olarak bir değerlendirme ölçütü kullanılır. Kesinlik varyans ile ters orantılıdır:

$$kesinlik = \frac{1}{varyans}$$

Bayesçi istatistikte, kullanılan farklı önsel dağılımlar ile farklı sonsal dağılımlar elde edilir. Önsel dağılımlar "belirli (proper)" ve "belirsiz (improper)" önsel dağılımlar olarak incelenmektedir. Tanım aralığındaki integrali ya da toplamı 1'eşit olan önsel dağılımlara belirli önsel dağılımlar; sonlu olmayan dağılımlara belirsiz önsel dağılımlar denir. Ayrıca önsel dağılımlar "Bilgi içeren (informative)" ve "Bilgi içermeyen (noninformative)" önsel dağılımlar olarak ayrılmaktadır. Paremetreler hakkında önbilginin az olması ve verilerden elde edilen bilgi dışında bilgiye ihtiyaç duyulmadığı taktirde, kullanılan önsel dağılım, bilgi içermeyen önsel dağılım olarak bilinmektedir. Bilgi içermeyen önsel dağılımlara; Uniform dağılım, "g-önseli" ve Jeffreys' önsel dağılımları örnek gösterilebilir (Ekici, 2005).

Jeffrey's önsel dağılımı, $f(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{\theta})$ olabilirlik fonksiyonuna ilişkin Fisher bilgi matrisinin determinantının karekökü olarak elde edilir. Jeffreys önseline bir örnek olarak Binom oranı alınmış ve aşağıdaki şekilde gösterilmiştir:

$x|p \sim B(n,p)$ dolayısı ile $f(x|p) \propto p^x(1-p)^{n-x}$

$$logf(x|p) \propto xlogp + (n-x)\log(1-p)$$

$$\frac{d^2}{dp^2} logf(x|p) = -xp^{-2} - (n-x)(1-p)^{-2}$$

Beklenen değeri alınsın;

$$-E_{X|p}[\frac{\partial^2 logf(x|p)}{\partial p^2}] = E(x)p^{-2} + \big(n - E(x)\big)(1-p)^{-2}$$
$$= npp^{-2}(n-np)(1-p)^{-2}$$
$$= \frac{n}{p(1-p)}$$

Bu durumda,

$$f(p) \propto [\frac{n}{p(1-p)}]^{1/2}$$

$$\propto p^{-1/2}(1-p)^{-\frac{1}{2}}$$

Bu fonksiyonun,

$$p^{-1/2}(1-p)^{-\frac{1}{2}} = p^{\frac{1}{2}-1}(1-p)^{-\frac{1}{2}}$$

dolayısı ile **p** için Jeffrey'nin önsel dağılımı Beta $(\frac{1}{2},\frac{1}{2})$ dir.

Bilgi içeren önsel dağılımlar ise, parametreler hakkında ön bilgiye sahip olunması durumunda ön bilgilerin formüle edilmesi ile elde edilmektedir. Önbilgi, konu ile ilgili uzman görüşlerine ya da aynı konu hakkındaki geçmiş deneyimlere dayanarak elde edilir. Bilinmeyen θ parametresi hakkındaki ön bilginin belirli olduğu varsayıldığında bu ön bilgiler bazı bilinen dağılımlar ile gösterilebilmektedir. Bu dağılımlar uygun matematiksel özelliklere sahip ön dağılımlar ailesinin üyeleridir. Bu tür ailelere "eşlenik (conjugate)" aileler denilmektedir. Sonsal dağılım ile önsel dağılımın olasılık fonksiyonları aynı

aileden ise sonsal ve önsel dağılım “eşlenik (conjugate)”tir. Ve önsel dağılım, olabilirlik fonksiyonu için “eşlenik” tir denir (Colosimo and Castillo, 2007).

Önsel dağılım, A ailesinin bir üyesi, Olabilirlik fonksiyonu dağılımı yani örnek alınan veri, B ailesinin bir üyesi ve sonsal dağılım da A ailesi ise, A nın B için eşlenik önsel dağılımlar ailesi olduğu söylenebilmektedir.

Aşağıda verilen tabloda bazı önsel ve olabilirlik dağılımları için kullanılan dağılımlar, sonsal dağılımın hangi dağılım olarak elde edildiği özetlenmiştir.

ÖNSEL DAĞILIM	OLABİLİRLİK FONKSİYONU	SONSAL DAĞILIM
Beta	Binom	Beta
Beta	Negatif Binom	Beta
Normal	Normal	Normal
Gamma	Poisson	Gamma
Gamma	Üstel	Gamma
Gamma	Normal	Gamma

Bu sonsal dağılımlardan birkaçının nasıl elde edildiği aşağıda detaylı olarak verilmiştir.

Yukarıdaki tablodan da görüldüğü üzere, olabilirlik fonksiyonu dağılımı Binom, önsel dağılım Beta olarak alındığında sonsal dağılım Beta dağılımı olduğunu gösterelim. Olabilirlik fonksiyonunun dağılımı Binom olduğunda,

$$P(x|\theta) = \binom{N}{x}\theta^{x}(1-\theta)^{N-x} = \frac{N!}{(N-x)!\,x!}\theta^{x}(1-\theta)^{N-x}$$

$$= \frac{\Gamma(N+1)}{\Gamma(N-x+1)\Gamma(x+1)}\theta^{x}(1-\theta)^{N-x}$$

Önsel dağılım Beta olduğuna göre,

$$p(\theta) = \frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)}\theta^{a-1}(1-\theta)^{b-1}$$

olacaktır. Buna göre, sonsal dağılım,

$$P(\theta|x) = \frac{P(x|\theta) * p(\theta)}{p(x)} = \frac{P(x,\theta)}{p(x)}$$

kullanılarak elde edilecektir. O halde,

$$P(x,\theta) = \underbrace{\frac{\Gamma(N+1)}{\Gamma(N-x+1)\Gamma(x+1)}\frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)}}_{constant=\gamma}\theta^{x+a-1}(1-\theta)^{N+b-x-1}$$

olur. Burada, kesirli ifade, γ olarak yazılırsa,

$$P(x,\theta) = \gamma\, \theta^{x+a-1}(1-\theta)^{N+b-x-1}$$

olacaktır. Diğer yandan,

$$p(x) = \int_0^1 P(x,\theta)\, d\theta = \int_0^1 P(x|\theta) * p(\theta) d\theta$$

$$= \int_0^1 \binom{N}{x}\theta^x(1-\theta)^{N-x}\, \frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)}\theta^{a-1}(1-\theta)^{b-1}d\theta$$

$$= \underbrace{\frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)}\frac{\Gamma(N+1)}{\Gamma(N-x+1)\Gamma(x+1)}}_{\gamma\ idi}\underbrace{\int_0^1 \theta^{x+a-1}(1-\theta)^{N+b-x-1}d\theta}_{Beta\ dağılımına\ benzetilir\ ise}$$

şeklinde yazılır. Bu eşitlikte Beta fonksiyonu kullanılarak,

$$p(x) = \underbrace{\frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)}\frac{\Gamma(N+1)}{\Gamma(N-x+1)\Gamma(x+1)}}_{\gamma\ idi}\underbrace{\frac{\Gamma(x+a)\Gamma(N+b-x)}{\Gamma(a+b+N)}\int_0^1 \frac{\Gamma(a+b+N)}{\Gamma(x+a)\Gamma(N+b-x)}\theta^{x+a-1}(1-\theta)^{N+b-x-1}d\theta}_{Beta\ dağılımına\ benzetilir\ ise}$$

$$= \underbrace{\frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)}\frac{\Gamma(N+1)}{\Gamma(N-x+1)\Gamma(x+1)}}_{\gamma\ idi}\frac{\Gamma(x+a)\Gamma(N+b-x)}{\Gamma(a+b+N)}\ .1$$

$$= \gamma\frac{\Gamma(x+a)\Gamma(N+b-x)}{\Gamma(a+b+N)}$$

elde edilir. Sonuç olarak sonsal dağılım,

$$P(\theta|x) = \frac{P(x,\theta)}{p(x)} = \frac{\gamma\, \theta^{x+a-1}(1-\theta)^{N+b-x-1}}{\gamma \dfrac{\Gamma(x+a)\Gamma(N+b-x)}{\Gamma(a+b+N)}}$$

$$= \frac{\Gamma(a+b+N)}{\Gamma(x+a)\Gamma(N+b-x)}\ \theta^{x+a-1}(1-\theta)^{N+b-x-1}$$

olarak bulunur. Bu dağılımın $Beta\ (x+a, N+b-x)$ olduğu açıktır. Bu ispattan da görüldüğü üzere, sonsal dağılım ile önsel dağılımın olasılık fonksiyonları aynı aileden gelmektedir. Sonsal ve önsel dağılım "eşlenik (conjugate)" tir. Bu sebeple, Beta önsel dağılımı, binom olabilirlik dağılımı için "eşlenik"tir denir.

Olabilirlik fonksiyonu dağılımı Poisson, önsel dağılım Gamma olarak alındığında sonsal dağılım Gamma dağılımı olarak elde edilmektedir.

$$X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n|\theta \sim poisson(\theta)$$

Olabilirlik fonksiyonunun dağılımı Poisson olduğunda,

$$P(X = x|\theta) = \frac{\theta^x e^{-\theta}}{x!}, \quad x = \{0,1,2,\dots\}$$

ve önsel dağılım ise Gamma olduğunda,

$$\theta \sim gamma(a,b)$$

şeklinde yazılabilir. Bu durumda, olabilirlik fonksiyonu için

$$P(X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n|\theta) = \prod_{i=1}^{n} p(x_i|\theta) = \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{x_i!}\theta^{x_i} e^{-\theta}$$

$$= c(x_1, \dots, x_n)\ \theta^{\sum x_i} e^{-n\theta}$$

yazılabilir. O halde, sonsal dağılım,

$$P(\theta|x_1,\dots,x_n)=\frac{p(\theta)*\ P(X_1=x_1,\dots,X_n=x_n|\theta)}{p(x_1,\dots,x_n)}$$

$$=\frac{b^a}{\Gamma(a)}\theta^{a-1}e^{b\theta}\ c(x_1,\dots,x_n)\ \theta^{\sum x_i}e^{-n\theta}$$

$$=c(a,b,x_1,\dots,x_n)\ \theta^{a+\sum x_i-1}e^{-\theta(b+n)}$$

şeklinde elde edilir. Sonuç olarak, sonsal dağılımın da $(a+\sum x_i\,,b+n)$ parametreli Gamma dağılımına uyduğu görülmektedir. Sonsal dağılım ile önsel dağılımın olasılık fonksiyonlarının aynı aileden olduğu görülmektedir. Sonsal ve önsel dağılım "eşlenik" tir. Gamma önsel dağılımı, Poisson olabilirlik dağılımı için "eşlenik"tir.

Olabilirlik fonksiyonu dağılımı ve önsel dağılım Normal dağılım olarak alındığında sonsal dağılım Normal dağılım olarak elde edilmektedir. σ^2 bilindiğinde, olabilirlik fonksiyonu için,

$$\{y_1,\dots,y_n|\theta,\sigma^2\}\sim iid\ normal\ (\theta,\sigma^2)$$

ve önsel dağılım için,

$$\theta\sim iid\ normal\ (\mu_0,{\tau_0}^2)$$

yazılır. Bu durumda sonsal dağılım,

$$P\left(\theta\middle|y_1,\dots,y_{n,}\sigma^2\right)\propto p(\theta|\sigma^2)*p(y_1,\dots,y_{n,}|\theta,\sigma^2)$$

$$\propto e^{\frac{-1}{2{\tau_0}^2}(\theta-\mu_0)^2}*e^{\frac{-1}{2\sigma^2}\sum(y_i-\theta)^2}$$

$$=e^{\frac{-1}{2}\left(\frac{\theta^2-2\theta\mu_0+{\mu_0}^2}{{\tau_0}^2}+\frac{\sum {y_i}^2+2\theta\sum y_i+n\theta^2}{\sigma^2}\right)}$$

$$=e^{\frac{-1}{2}\left(\theta^2\left(\frac{n}{\sigma^2}+\frac{1}{{\tau_0}^2}\right)-2\theta\left(\frac{\mu_0}{{\tau_0}^2}+\frac{\sum y_i}{\sigma^2}\right)+\frac{\mu_0}{{\tau_0}^2}+\frac{\sum {y_i}^2}{\sigma^2}\right)}$$

şeklinde yazılır. Burada parantez içindeki ifadeler sırasıyla,

$$a = \frac{n}{\sigma^2} + \frac{1}{{\tau_0}^2}$$

$$b = \frac{\mu_0}{{\tau_0}^2} + \frac{\sum y_i}{\sigma^2}$$

$$c = \frac{\mu_0}{{\tau_0}^2} + \frac{\sum {y_i}^2}{\sigma^2}$$

olarak alındığında,

$$P\left(\theta \middle| y_1, \dots, y_{n,} \sigma^2\right) \propto e^{\frac{-1}{2}(a\theta^2 - 2b\theta + c)}$$
$$= e^{\left(\frac{-1}{2} a\left(\theta^2 - \frac{2b\theta}{a} + \frac{b^2}{a^2}\right) + \frac{1}{2}\frac{b^2}{a}\right)}$$
$$\propto e^{\left\{\frac{-1}{2} a\left(\theta - \frac{b}{a}\right)^2\right\}}$$

elde edilir. Bu ifade düzenlendiğinde,

$$P\left(\theta \middle| y_1, \dots, y_{n,} \sigma^2\right) = e^{\left\{\frac{-1}{2}\left(\frac{\theta - \frac{b}{a}}{1/\sqrt{a}}\right)^2\right\}}$$

olarak yazılabilir. Buna göre, sonsal dağılımın parametreleri,

$$\mu_n = \frac{b}{a} = \frac{\frac{\mu_0}{{\tau_0}^2} + \frac{\sum y_i}{\sigma^2}}{\frac{n}{\sigma^2} + \frac{1}{{\tau_0}^2}} = \frac{\frac{1}{{\tau_0}^2}\mu_0 + \frac{n}{\sigma^2}\bar{y}}{\frac{n}{\sigma^2} + \frac{1}{{\tau_0}^2}}$$

$${\tau_n}^2 = \frac{1}{a} = \frac{1}{\frac{n}{\sigma^2} + \frac{1}{{\tau_0}^2}}$$

şeklinde bulunur. Önsel dağılım için kesinlik ifadesi $\widetilde{\tau_0}^2 = \frac{1}{\tau_0{}^2}$ ve örneklem kesinliği $\widetilde{\sigma^2} = \frac{1}{\sigma^2}$ şeklindedir Bulunan varyans parametresi kesinlik olarak ifade edilirse, sonsal kesinlik,

$$\widetilde{\tau_n}^2 = \frac{1}{\tau_n{}^2} = \widetilde{\tau_0}^2 + n\widetilde{\sigma^2}$$

şeklindedir. Benzer şekilde, yukarıda bulunan sonsal dağılımın ortalaması kesinlik bilgisi kullanılarak ifade edildiğinde,

$$\mu_n = \frac{\widetilde{\tau_0}^2}{\widetilde{\tau_0}^2 + n\widetilde{\sigma^2}}\mu_0 + \frac{n\widetilde{\sigma^2}}{\widetilde{\tau_0}^2 + n\widetilde{\sigma^2}}\bar{y}$$

olur. κ_0 önsel örneklem hacmi olmak üzere, $\tau_0{}^2 = \sigma^2/\kappa_0$ olarak alındığında, bu ifade,

$$\mu_n = \frac{\kappa_0}{\kappa_0 + n}\mu_0 + \frac{n}{\kappa_0 + n}\bar{y}$$

şeklinde elde edilir. $\kappa_n = \kappa_0 + n$ olmak üzere,

$$\mu_n = \frac{\kappa_0\mu_0 + n\bar{y}}{\kappa_n}$$

olur. Benzer şekilde,

$$\tau_n{}^2 = \frac{1}{\frac{n}{\sigma^2} + \frac{1}{\tau_0{}^2}}$$

$$= \frac{1}{\frac{n}{\sigma^2} + \frac{\kappa_0}{\sigma^2}}$$

$$= \frac{\sigma^2}{\kappa_0 + n}$$

$$= \frac{\sigma^2}{\kappa_n}$$

olur. Sonuç olarak, sonsal dağılımın,

$$\{\theta|y_1, \dots, y_n, \sigma^2) \sim normal(\mu_{n,} {\tau_n}^2)$$

olduğu görülmektedir. Burada, sonsal dağılım ile önsel dağılımın olasılık fonksiyonları aynı aileden gelmektedir. Sonsal ve önsel dağılım "eşlenik"tir (Hoff, 2009).

Karmaşık önsel dağılımlar söz konusu olduğunda sonsal dağılımların elde edilmesi, integrallerin çözülmesi gittikçe zorlaşır. Ancak Markov Zinciri Monte Carlo (MCMC) Yöntemleri ile pek çok zorluğun üstesinden gelinebilmektedir. MCMC yöntemi ile her bir simülasyon değerinin bir önceki değere bağlı olduğu zincir değeri üretilmektedir ve bu zincir yeterince uzun çalıştırıldığında ilgilenilen son dağılımın istenilen hali bulunmaktadır. Yöntemde kullanılan Markov Zinciri simülasyon ile belirlenen herhangi bir θ^t serisinde, yalnızca kendinden bir önceki değere θ^{t-1} bağımlı olduğu diğerlerinden bağımsız olduğu bir süreçtir. En çok kullanılan Markov Zinciri Monte Carlo Yöntemleri Metropolis Hasting algoritması ve Gibbs örnekleme algoritmasıdır. Bu yöntemlerde ilgili dağılımdan örnekler çekilir ve beklenen değeri yaklaşık olarak bulmak için örneklem ortalamaları alınır. MCMC yöntemlerinde örneklemler, uzun bir zaman için düzenlenmiş Markov Zincirleri kullanılarak çekilir. Markov zincirlerini oluşturmak için birçok yol vardır. Gibbs örnekleme algoritması da dahil olmak üzere bu yöntemlerin her biri Metropolis-Hastings'in geliştirdiği genel algoritmanın özel biçimleridir. Örneğin X veriyi gösterirken $\boldsymbol{\theta}$ parametre vektörü, θ_1 ve θ_2 gibi iki bileşenden oluşuyor ise $P(\theta_1 \mid \theta_2, \mathbf{X})$ ve $P(\theta_2 \mid \theta_1, \mathbf{X})$ koşullu dağılımların bilindiği varsayıldığı durumda, bulunması gereken $P(\theta_1 \mid X)$ ve $P(\theta_2 \mid X)$ olasılıklarıdır. Bunun için bir başlangıç değeri seçilerek (θ_1^0, θ_2^0) Gibbs örnekleme süreci yürütülür (Ekici, 2005).

1. $\theta_1^1 \sim P(\theta_1 | \theta_2^0, Y)$
2. $\theta_2^1 \sim P(\theta_2 | \theta_1^1, Y)$

3. $\theta_1^2 \sim P(\theta_1 | \theta_2^1, Y)$
4. $\theta_2^2 \sim P(\theta_2 | \theta_1^2, Y)$
5. $\theta_1^3 \sim P(\theta_1 | \theta_2^2 Y)$
6. $\theta_2^3 \sim P(\theta_2 | \theta_1^3, Y)$

.

.

.

şeklinde Gibbs örneklemesine dayalı simülasyon süreci gerçekleşir. Bayesçi istatistikte yaygın olarak kullanılan WINBUGS (Windows Bayesian İnference Using Gibbs Sampling) programı da Gibbs örnekleme algoritmasından yararlanmaktadır. İstenilen değere kaç iterasyon sonra yakınsanacağı WINBUGS programında iz çizimleri aracılığı ile tespit edilebilir. Yazılım, MCMC kullanarak karmaşık istatistiksel modellerin Bayesçi analizini gerçekleştirmek üzere oluşturulmuştur (Ntzoufras, 2009).

2.2.1 Bayesçi yaklaşımda parametre tahmini

Bayesçi yaklaşımda ilgilenilen parametrenin nokta tahmini genellikle sonsal dağılımın ortalamasıdır (posterior mean). Sonsal dağılımın ortalaması, En küçük hata kareler ortalaması (MMSE) tahmin yöntemi ile elde edilir. Ancak bunun dışında da kullanılan tahmin edici yöntemleri de mevcuttur. Aşağıda, En küçük hata kareler ortalaması (MMSE), Maksimum sonsal (MAP), En çok olabilirlik (MLE) ve En küçük mutlak hata (MAVE) tahmin edicileri anlatılmaktadır (Vaseghi, 2000).

Bayesçi parametre tahmini, Bayesçi risk fonksiyonunun minimizasyonuna dayanmaktadır. Bayesçi risk, $C(\hat{\theta}, \theta)$ kayıp fonksiyonu olmak üzere,

$$R(\hat{\theta}) = E[C(\hat{\theta}, \theta)]$$

şeklinde tanımlanır. Buna göre,

$$E\left[C\left(\hat{\theta},\theta\right)\right] = \int_{\theta}\int_{Y} C\left(\hat{\theta},\theta\right) f(y,\theta)\, dy\, d\theta$$

$$= \int_{\theta}\int_{Y} C\left(\hat{\theta},\theta\right) f(\theta|y)\, f(y)\, dy\, d\theta$$

olur. Burada, $f(y)$ bir normalleştirme sabitidir ve risk minimizasyonuna etkisi yoktur. O halde, koşullu risk fonksiyonu,

$$R\left(\hat{\theta}|y\right) = \int_{\theta} C\left(\hat{\theta},\theta\right) f(\theta|y)\, d\theta$$

şeklinde yazılır. Buna göre riskin minimizasyonu ile Bayesçi tahmin edici,

$$\hat{\theta}_{Bayesçi} = argminR\left(\hat{\theta}|y\right) = argmin[\int_{\theta} C\left(\hat{\theta},\theta\right) f(\theta|y)\, d\theta]$$

$$= argmin[\int_{\theta} C\left(\hat{\theta},\theta\right) f(y|\theta)\, f(\theta)\, d\theta]$$

$$= argzero\frac{\partial R\left(\hat{\theta}|y\right)}{\partial\hat{\theta}} = argzero[\frac{\partial}{\partial\hat{\theta}}\int_{\theta} C\left(\widehat{\theta},\theta\right) f(y|\theta)\, f(\theta)\, d\theta]$$

şeklinde elde edilmektedir.

2.2.1.1 Maksimum sonsal tahmin edici (MAP)

Maksimum sonsal tahmin edici yönteminde kayıp fonksiyonunun Uniform dağılım olduğu varsayılmaktadır. Bu yöntem sonsal dağılımın maksimizasyonuna dayanır. $\delta\left(\hat{\theta},\theta\right)$ Kronecker delta fonksiyonu olarak alındığında :

$$C\left(\hat{\theta},\theta\right) = 1 - \delta\left(\hat{\theta},\theta\right)$$

Koşullu risk fonksiyonu,

$$R(\hat{\theta}|y)_{MAP} = \int_{\theta} (1 - \delta(\hat{\theta}, \theta)) f(\theta|y) d\theta$$

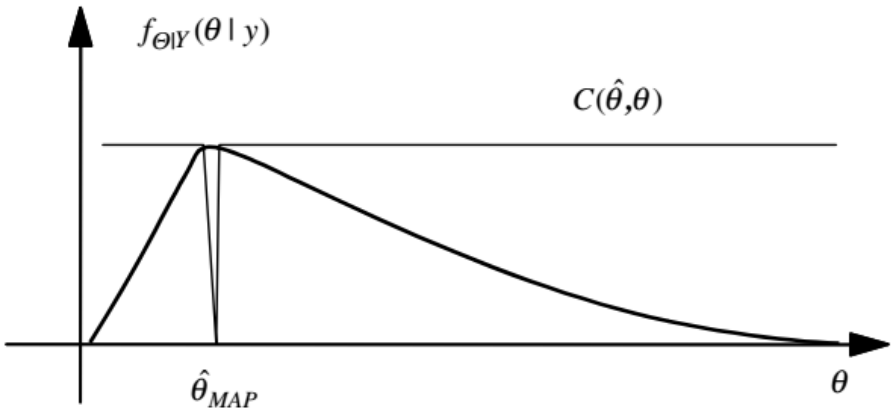
$$= 1 - f(\hat{\theta}|y)$$

şeklindedir. Buradan Bayesçi MAP tahmin edicisi,

$$\hat{\theta}_{MAP} = argmax f(\theta|y)$$

$$= argmax[f(y|\theta)\, f(\theta)]$$

şeklinde elde edilir. Bayesçi MAP tahmin edicisi sonsal dağılımın **mod**unu vermektedir. Bu durum, Şekil 2.9'dan da görülmektedir:



Şekil 2.9. MAP tahmini için Bayesçi kayıp fonksiyonu

MAP yönteminin regresyonda uygulanmasına örnek olarak parametre vektörünün Bayesçi tahmin edicisini elde edelim. Burada, Genel doğrusal model ve varsayımları aşağıda verilmektedir.

$$y = X\beta + e$$

$$e \sim N(0,1)$$

$$\beta \sim Normal(\mu_{\beta}, \Sigma_{\beta\beta})$$

Sonsal dağılım fonksiyonu,

$$f(\beta|y) = \frac{1}{f(y)} f(y|\beta) f(\beta)$$

şeklinde yazıldığında olabilirlik fonksiyonu,

$$f(y|\beta) = f(e = y - X\beta)$$

$$f(y|\beta) = \frac{1}{(2\pi\sigma_e{}^2)^{N/2}} e^{(\frac{-1}{2\sigma_e{}^2}(y-X\beta)^T(y-X\beta))}$$

önsel dağılım;

$$f(\beta) = \frac{1}{(2\pi)^{P/2}\left|\Sigma_{\beta\beta}\right|^{1/2}} e^{\frac{-1}{2}((\beta-\mu_\beta)^T\Sigma_{\beta\beta}{}^{-1}(\beta-\mu_\beta))}$$

olarak ifade edilir.

$$f(\beta|y) = \frac{1}{f(y)} \frac{1}{(2\pi)^{P/2}\left|\Sigma_{\beta\beta}\right|^{1/2}} \frac{1}{(2\pi\sigma_e{}^2)^{N/2}} e^{\frac{-1}{2\sigma_e{}^2}(y-X\beta)^T(y-X\beta)-(\frac{1}{2}((\beta-\mu_\beta)^T\Sigma_{\beta\beta}{}^{-1}(\beta-\mu_\beta))}$$

denklemin doğal logaritması alındığında,

$$\ln f(\beta|y) \propto -\frac{N}{2}\ln(2\pi\sigma_e{}^2) - \frac{P}{2}\ln(2\pi) + \frac{1}{2}\Sigma_{\beta\beta} - \frac{1}{2\sigma_e{}^2}(y - X\beta)^T(y - X\beta) - (\frac{1}{2}((\beta - \mu_\beta)^T\Sigma_{\beta\beta}{}^{-1}(\beta - \mu_\beta)$$

elde edilir. Elde edilen denklemin bilinmeyen parametreye göre türevi alındığında,

$$\frac{\partial \ln f(\beta|y)}{\partial\beta} = -\frac{1}{2\sigma_e{}^2}\left[2\left(\frac{\partial(y-X\beta)}{\partial\beta}\right)^T(y - X\beta)\right] - \frac{1}{2}[2\left(\frac{\partial(\beta-\mu_\beta)}{\partial\beta}\right)^T\Sigma_{\beta\beta}{}^{-1}(\beta - \mu_\beta)]$$

$$\frac{\partial \ln f(\beta|y)}{\partial\beta} = -\frac{1}{\sigma_e{}^2}(-X)^T(y - X\beta) - \Sigma_{\beta\beta}{}^{-1}(\beta - \mu_\beta)]=0$$

Bayesçi MAP tahmin edicisi:

$$\hat{\beta} = (X^T X + {\sigma_e}^2 {\Sigma_{\beta\beta}}^{-1})^{-1}(X^T y + {\sigma_e}^2 {\Sigma_{\beta\beta}}^{-1}\mu_\beta)$$

elde edilir.

2.2.1.2 En çok olabilirlik tahmin edicisi (MLE)

En çok olabilirlik tahmin edicisinde kayıp fonksiyon ve önsel dağılım Uniform dağılım varsayılmaktadır.

$$R(\hat{\theta}|y)_{ML} = \int_\theta [1 - \delta(\hat{\theta}, \theta)] f(y|\theta) f(\theta) d\theta$$

$$= const. [1 - f(y|\hat{\theta})]$$

$$\hat{\theta}_{ML} = argmax f(y|\hat{\theta})$$

$$\hat{\theta}_{ML} = argmax\ log f(y|\hat{\theta})$$

2.2.1.3 En küçük mutlak hata bayes tahmin edicisi (MAVE)

Bu yöntem, Mutlak kaybın beklenen değerinin minimizasyonuna dayanır.

$$R(\hat{\theta}|y)_{MAVE} = E((|\hat{\theta} - \theta|)|y) = \int_\theta (|\hat{\theta} - \theta|) f(\theta|y) d\theta$$

$$R(\hat{\theta}|y)_{MAVE} = \int_{-\infty}^{\hat{\theta}} (\hat{\theta} - \theta) f(\theta|y) d\theta + \int_{\hat{\theta}}^{\infty} (\theta - \hat{\theta}) f(\theta|y) d\theta$$

$$-\infty < \theta < \hat{\theta}\ \ ve\ \ \hat{\theta} < \theta < +\infty$$

$$= \int_{-\infty}^{\hat{\theta}} \hat{\theta} f(\theta|y) - \theta f(\theta|y)\, d\theta + \int_{\hat{\theta}}^{\infty} \theta f(\theta|y) - \hat{\theta} f(\theta|y)\, d\theta$$

şeklinde yazılır. Bu fonksiyonun minimize edildiğinde,

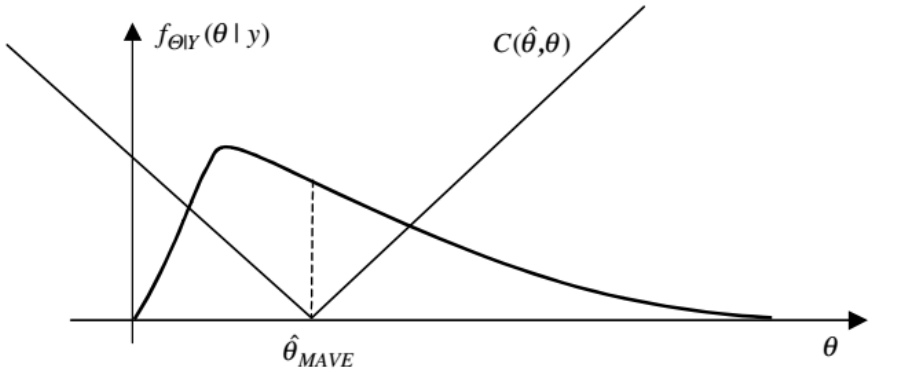
$$\frac{\partial R(\hat{\theta}|y)_{MAVE}}{\partial \hat{\theta}} = \int_{-\infty}^{\hat{\theta}} f(\theta|y)d\theta - \int_{\hat{\theta}}^{\infty} f(\theta|y)d\theta$$

$$\int_{-\infty}^{\hat{\theta}} f(\theta|y)d\theta - \int_{\hat{\theta}}^{\infty} f(\theta|y)d\theta = 0$$

olur. Bu durumda, Bayesçi MAVE tahmin edicisi,

$$\int_{-\infty}^{\widehat{\theta_{MAVE}}} f(\theta|y)d\theta = \int_{\hat{\theta}_{MAVE}}^{\infty} f(\theta|y)d\theta$$

olarak elde edilir. Eşitlikten de görüldüğü gibi MAVE tahmin edicisi sonsal dağılımın **medyanını** vermektedir (Vaseghi, 2000). Bu durum, Şekil 2.10'dan da görülmektedir:



Şekil 2.10. Ortalama mutlak hata zarar fonksiyonu ve tahmininin gösterimi

2.2.1.4 En küçük hata kareler ortalaması bayes tahmin edicisi (MMSE)

MMSE tahmin edicisi, hata kareler ortalaması kayıp fonksiyonunu minimize edecek parametre vektörünün bulunmasını ilgilendirmektedir. Koşullu risk fonksiyonu,

$$R(\hat{\theta}|y)_{MMSE} = E\left(\left(\hat{\theta}-\theta\right)^2\middle|y\right) = \int_{\theta} (\hat{\theta}-\theta)^2 f(\theta|y)d\theta$$

$$= \int_{\theta} (\hat{\theta}^2 - 2\hat{\theta}\theta + \theta^2) f(\theta|y)d\theta$$

şeklinde yazılır. Bu fonksiyonun minimize edildiğinde,

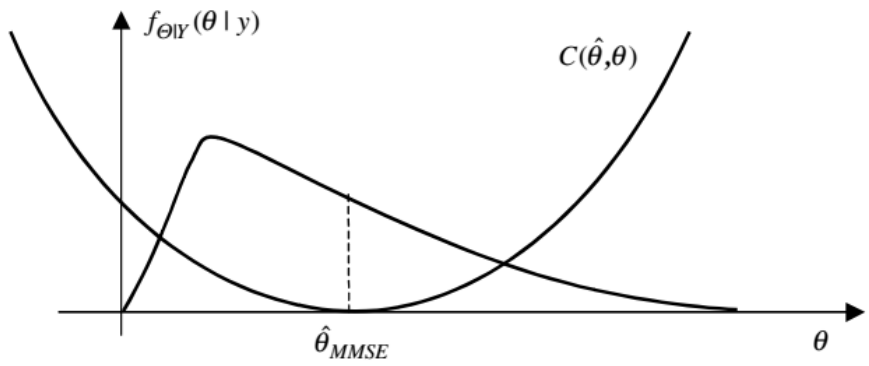
$$\frac{\partial R(\hat{\theta}|y)_{MMSE}}{\partial \hat{\theta}} = 2\hat{\theta}\int_{\theta} f(\theta|y)d\theta - 2\int_{\theta} \theta\, f(\theta|y)d\theta$$

$$2\hat{\theta}.1 - 2\int_{\theta} \theta\, f(\theta|y)d\theta = 0$$

MMSE tahmin edicisi,

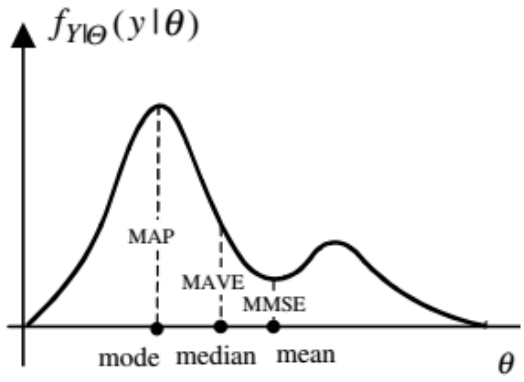
$$\hat{\theta}_{MMSE} = \int_{\theta} \theta\, f(\theta|y)d\theta$$

şeklinde elde edilir. Bu yöntem ile yapılmış olan tahminin, sonsal dağılımın beklenen değeri olduğu görülmektedir. Bu durum, Şekil 2.11'den de görülmektedir:



Şekil 2.11. En küçük hata kareler ortalaması kayıp fonksiyonu ve tahminin gösterimi

Elde etmiş olduğumuz tahmin edicilerin özet grafiği Şekil 2.12'de gösterilmiştir.



Şekil 2.12. MAP, MAVE ve MMSE tahminleri gösterimi

2.2.2. Bayesçi Doğrusal regresyon

Doğrusal regresyon, Y rasgele değişkeninin, $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_p)$ değişken kümesi ile doğrusal ilişkisinin açıklanmasını sağlamaktadır ve

$$Y_i = \boldsymbol{\beta}^{\mathbf{T}}\mathbf{x_i} + \varepsilon_i$$

şeklinde ifade edilir. Burada ε_i hata terimi ve $\boldsymbol{\beta}$ ise regresyon katsayılarını göstermektedir. Hata terimleri için birbirinden bağımsız oldukları ve $(0, \sigma^2)$ parametreli Normal dağılıma uydukları varsayımı yapılmaktadır. Regresyon modeli temel olarak $p(y|\mathbf{x})$ şeklindeki koşullu bir dağılım için belirli bir şekil öne sürmektedir. $p(y|\mathbf{x})'$in tahminlenmesi, belirli $\boldsymbol{x_1}, \dots, \boldsymbol{x_n}$'lerin koşulu altında toplanan $y_1, \dots, y_n$'ler kullanılarak yapılmaktadır. Buna göre klasik doğrusal regresyon modeli aşağıdaki şekilde ifade edilmektedir:

$$\int y\, p(y|\mathbf{x})dy = E[Y|\mathbf{x}] = \beta_1 x_1 + \cdots + \beta_p x_p = \boldsymbol{\beta}^{\mathbf{T}}\mathbf{x}$$

$y_1, \dots, y_n$'lerin, $\boldsymbol{x_1}, \dots, \boldsymbol{x_n}$, $\boldsymbol{\beta}$ ve σ^2 ile koşullandırıldığında ortak olasılık yoğunluk fonksiyonu,

$$p(y_1,\dots,y_n|\boldsymbol{x_1},\dots,\boldsymbol{x_n},\boldsymbol{\beta},\sigma^2)=\prod_{i=1}^{n}p(\,y_i|\boldsymbol{x_i},\boldsymbol{\beta},\sigma^2)$$

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

olacaktır. Bu koşullu ortak olasılık yoğunluk fonksiyonunun bir başka ifadesi çok değişkenli normal dağılım fonksiyonunu kullanmaktır. Buna göre,

$$\{\mathbf{y}|\mathbf{X},\boldsymbol{\beta},\sigma^2\}\sim\text{MultivariateNormal}(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta},\sigma^2\mathbf{I})$$

şeklinde yazılabilir. Burada, $(y_1,\dots,y_n)^T$ n boyutlu sütun vektörü ve $\mathbf{X}$, nxp boyutlu bir matris olup i. satır değeri x_i değerini göstermektedir. $\mathbf{I}$, pxp boyutlu bir birim matristir. O halde,

$$\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x_1}\\ \boldsymbol{x_2}\\ \cdot\\ \cdot\\ \cdot\\ \boldsymbol{x_n}\end{bmatrix}.\begin{bmatrix}\beta_1\\ \beta_2\\ \cdot\\ \cdot\\ \cdot\\ \beta_p\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\beta_1x_{1,1}+ & \cdots & +\beta_px_{1,p}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ \beta_1x_{n,1} & \cdots & \beta_px_{n,p}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}E[\boldsymbol{Y}_1|\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{x_1}]\\ \cdot\\ \cdot\\ \cdot\\ \cdot\\ E[\boldsymbol{Y}_n|\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{x_n}]\end{bmatrix}$$

olur. Yukarıdaki koşullu olasılık yoğunluk fonksiyonunda, $\sum_{i=1}^{n}(y_i-\beta^Tx_i)^2$ teriminin hata kareler toplamı olduğu açıktır ve bu terimin minimize edilmesi ile regresyon katsayıları tahminlenmektedir:

$SSR(\boldsymbol{\beta})=\sum_{i=1}^{n}(y_i-\boldsymbol{\beta}^{\mathbf{T}}\mathbf{x_i})^2$,

<u>Hata kareler toplamı</u>, aynı zamanda,

$$\begin{aligned}SSR(\boldsymbol{\beta})&=(\mathbf{y}-\mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^T(\mathbf{y}-\mathbf{X}\boldsymbol{\beta})\\&=\mathbf{y}^{\mathbf{T}}\mathbf{y}-2\boldsymbol{\beta}^{\mathbf{T}}\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{y}+\boldsymbol{\beta}^{\mathbf{T}}\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}\end{aligned}$$

şeklinde matrislerle gösterilebilir. Burada, bilinmeyen parametreye göre türevi alındığında,

$$\frac{d}{d\boldsymbol{\beta}}\, SSR(\boldsymbol{\beta}) = \frac{d}{d\boldsymbol{\beta}}\, (\mathbf{y}^{\mathbf{T}}\mathbf{y} - 2\boldsymbol{\beta}^{\mathbf{T}}\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{y} + \boldsymbol{\beta}^{\mathbf{T}}\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X}\boldsymbol{\beta})$$

$$= -\mathbf{2}\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{y} + 2\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$$

olacaktır ve bu durumda $\frac{d}{d\,\beta}\, SSR(\boldsymbol{\beta}) = -\mathbf{2}\boldsymbol{X^T y} + 2\boldsymbol{X^T X\beta} = 0$ için

$$\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{y}$$

şeklinde elde edilecektir. Sonuç olarak, klasik regresyon tahmin edicisi,

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{klasik} = (\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X})^{-\mathbf{1}}\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{y}$$

olarak elde edilir ve bu tahmin edici, Bayesçi regresyon tahmininde de önemli bir rol oynamaktadır.

Bayesçi regresyon, β ve σ^2 ile ilgili bilgi verici önsel dağılım ve bilgi verici olmayan önsel dağılım olarak iki başlıkta incelenebilir:

i. **Bilgi verici önsel dağılım varlığında regresyon modeli için Bayesçi tahmin**

Bilinmeyen β parametresi ile ilgili sonsal dağılımın elde edilmesi için olabilirlik fonksiyonu ve bilgi verici önsel dağılım, normal dağılım olarak alındığını varsayalım. Olabilirlik fonksiyonu,

$$\{\boldsymbol{y}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\beta}, \sigma^2\} \propto e^{\{-\frac{1}{2\sigma^2}SSR(\boldsymbol{\beta})\}}$$

$$= e^{\{-\frac{1}{2\sigma^2}[\mathbf{y}^{\mathbf{T}}\mathbf{y} - 2\boldsymbol{\beta}^{\mathbf{T}}\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\boldsymbol{y} + \boldsymbol{\beta}^{\mathbf{T}}\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}]\}}$$

olarak yazıldığında ve $\boldsymbol{\beta}$ parametresi için önsel dağılım, $\boldsymbol{\beta} \sim multivariate\ normal\ (\boldsymbol{\beta_0}, \boldsymbol{\Sigma_0})$ olarak alındığında,

$$p(\beta) \propto e^{-\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{\beta_0}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{\Sigma_0}^{-\mathbf{1}}\boldsymbol{\beta_0} - 2\boldsymbol{\beta}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{\Sigma_0}^{-\mathbf{1}}\boldsymbol{\beta_0} + \boldsymbol{\beta}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{\Sigma_0}^{-\mathbf{1}}\boldsymbol{\beta}\right)}$$

şeklinde gösterilir. Bu durumda, sonsal dağılım,

$$p(\boldsymbol{\beta}|\mathbf{y},\mathbf{X},\sigma^2) \propto p(\mathbf{y}|\boldsymbol{\beta},\mathbf{X},\sigma^2)p(\boldsymbol{\beta})$$
$$\propto e^{\{-\frac{1}{2}\left(-\frac{2\boldsymbol{\beta}^{\mathbf{T}}\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{y}}{\sigma^2}+\frac{\boldsymbol{\beta}^{\mathbf{T}}\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}}{\sigma^2}\right)-\frac{1}{2}(-2\boldsymbol{\beta}^{T}\boldsymbol{\Sigma_0}^{-1}\boldsymbol{\beta_0}+\boldsymbol{\beta}^{T}\boldsymbol{\Sigma_0}^{-1}\boldsymbol{\beta})\}}$$
$$= e^{\{\boldsymbol{\beta}^{\mathbf{T}}\left(\boldsymbol{\Sigma_0}^{-1}\boldsymbol{\beta_0}+\frac{\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{y}}{\sigma^2}\right)-\frac{1}{2}\boldsymbol{\beta}^{T}(\boldsymbol{\Sigma_0}^{-1}+\frac{\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X}}{\sigma^2})\boldsymbol{\beta}\}}$$

olacaktır (Hoff, 2009). Buradaki sonsal dağılımın, varyansı,

$$\mathrm{Var}(\boldsymbol{\beta}|\mathbf{y},\mathbf{X},\sigma^2) = (\boldsymbol{\Sigma_0}^{-1} + \frac{\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X}}{\sigma^2})^{-1}$$

ve beklenen değeri,

$$E(\boldsymbol{\beta}|\mathbf{y},\mathbf{X},\sigma^2) = (\boldsymbol{\Sigma_0}^{-1} + \frac{\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X}}{\sigma^2})^{-1}(\boldsymbol{\Sigma_0}^{-1}\boldsymbol{\beta_0} + \mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{y}/\sigma^2)$$

olan çok değişkenli normal dağılım olduğu görülmektedir. Elde edilen bu sonucu özetlersek,

$$(\boldsymbol{\beta}|\mathbf{y},\mathbf{X},\sigma^2) \sim multivariate\ normal((\boldsymbol{\Sigma_0}^{-1} + \frac{\boldsymbol{X}^{T}\boldsymbol{X}}{\sigma^2})^{-1}(\boldsymbol{\Sigma_0}^{-1}\boldsymbol{\beta_0} + \boldsymbol{X}^{T}\boldsymbol{y}/\sigma^2), (\boldsymbol{\Sigma_0}^{-1} + \frac{\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X}}{\sigma^2})^{-1})$$

sonucuna ulaşılır.

Diğer yandan, σ^2 bilinmediği durumda, bu parametrenin önsel dağılımı Ters-Gamma (inverse-gamma) olarak alındığında, kesinlik (precision) $\gamma = \frac{1}{\sigma^2}$'in dağılımı,

$$\gamma \sim gamma(V_0/2, V_0{\sigma_0}^2/2)$$

olacaktır ve önsel dağılım,

$$p(\gamma) = \frac{(V_0{\sigma_0}^2/2)^{V_0/2}}{\Gamma(\frac{V_0}{2})} \gamma^{\frac{V_0}{2}-1} e^{-\gamma.(\frac{V_0{\sigma_0}^2}{2})}$$

ve olabilirlik fonksiyonu,

$$p(y|\beta, X, \gamma) = \frac{\gamma^{n/2}}{2\pi} e^{\frac{((y^T y - 2\beta^T X^T y + \beta^T X^T X\beta).-\gamma)}{2}}$$

olmak üzere, sonsal dağılım,

$$p(\gamma|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\beta}) \propto p(\mathbf{y}|\boldsymbol{\beta}, \mathbf{X}, \gamma)\, p(\gamma)$$

şeklinde elde edilir. Buna göre,

$$p(\gamma|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\beta}) = \frac{\gamma^{n/2}}{2\pi} e^{\frac{((\mathbf{y^T y - 2\beta^T X^T y + \beta^T X^T X\beta}).-\gamma)}{2}} \frac{(V_0{\sigma_0}^2/2)^{V_0/2}}{\Gamma(\frac{V_0}{2})} \gamma^{\frac{V_0}{2}-1} e^{-\gamma.(\frac{V_0{\sigma_0}^2}{2})}$$

$$\propto \gamma^{\frac{V_0+n}{2}-1} e^{(-\gamma.\frac{[(V_0{\sigma_0}^2 + SSR(\boldsymbol{\beta})]}{2})}$$

olarak bulunacaktır. Kesinlik için elde edilen bu sonsal dağılımın, parametreleri,

$$\left[\frac{V_0 + n}{2}\right]$$

ve

$$\frac{[(V_0{\sigma_0}^2 + SSR(\boldsymbol{\beta})]}{2}$$

olan Gamma dağılımı olduğu görülmektedir. Dolayısıyla, σ^2, Ters-Gamma dağılmaktadır:

$$\{\sigma^2|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\beta}\} \sim Ters - Gamma(\left[\frac{V_0+n}{2}\right], \frac{[(V_0{\sigma_0}^2 + SSR(\boldsymbol{\beta})]}{2})$$

ii. Bilgi verici olmayan/zayıf önsel dağılım varlığında regresyon modeli için Bayesçi tahmin

Bazı durumlarda, analizlerin önsel bilginin yokluğunda yapılması gerekebilir. Böyle bir durumda, klasik regresyon yaklaşımı kullanılabileceği gibi alternatif olarak çeşitli kriterler kullanılarak önsel dağılımın oluşturulması mümkündür. Bu şekilde oluşturulan önsel dağılımların, bilgi verici önsel dağılımlarla karşılaştırıldığında daha objektif oldukları söylenebilir. Kullanım kolaylığı dolayısıyla bilgi verici olmayan önsel dağılım olarak g-önsel'inin (g-prior) sıklıkla kullanıldığı görülmektedir. g-önselinde $\beta_0 = 0$, $\Sigma_0 = g\sigma^2(\boldsymbol{X^T X})^{-1}$ olarak alınmaktadır (Zellner,1986). Buna göre, bilgi verici olmayan önsel dağılım varlığında β parametresi için sonsal dağılımın varyansı,

$$
\begin{aligned}
Var(\boldsymbol{\beta}|\mathbf{y},\mathbf{X},\sigma^2) &= \left((g\sigma^2(\mathbf{X^T X})^{-1})^{-1} + \frac{\mathbf{X^T X}}{\sigma^2}\right)^{-1} \\
&= \left(\frac{\mathbf{X^T X}}{\sigma^2}\left(\frac{1}{g}+1\right)\right)^{-1} \\
&= \frac{g}{g+1}(\mathbf{X^T X})^{-1}\sigma^2
\end{aligned}
$$

beklenen değeri ise,

$$
\begin{aligned}
E(\boldsymbol{\beta}|\mathbf{y},\mathbf{X},\sigma^2) &= \left((g\sigma^2(\mathbf{X^T X})^{-1})^{-1} + \frac{\mathbf{X^T X}}{\sigma^2}\right)^{-1}\left(\frac{\mathbf{X^T y}}{\sigma^2}\right) \\
&= \left(\frac{\mathbf{X^T X}}{g\sigma^2} + \frac{\mathbf{X^T X}}{\sigma^2}\right)^{-1}\left(\frac{\mathbf{X^T y}}{\sigma^2}\right) \\
&= \left(\frac{\mathbf{X^T X}}{\sigma^2}\left(\frac{1}{g}+1\right)\right)^{-1}\left(\frac{\mathbf{X^T y}}{\sigma^2}\right) = (\boldsymbol{X^T X})^{-1}\sigma^2\left(\frac{g}{g+1}\right)\left(\frac{\boldsymbol{X^T y}}{\sigma^2}\right) \\
&= \frac{g}{g+1}(\boldsymbol{X^T X})^{-1}\boldsymbol{X^T y} = \frac{g}{g+1}\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{klasik}
\end{aligned}
$$

şeklinde elde edilmektedir.

Öte yandan, σ^2 bilinmediği durumda, bu parametrenin sonsal dağılımı,

$$p(\sigma^2|\mathbf{y},\mathbf{X}) \propto p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\sigma^2)p(\sigma^2)$$

kullanılarak elde edilebilir. Burada,

$$p(y,X,\sigma^2) \propto p(y|X,\sigma^2)$$

yaklaşımı kullanılarak,

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\sigma^2) = \int p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\sigma^2,\boldsymbol{\beta})p(\boldsymbol{\beta}|\mathbf{X},\sigma^2)\, d\beta$$

elde edilir. Ayrıca,

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\sigma^2,\boldsymbol{\beta}) = (2\pi\sigma^2)^{-n/2}e^{[-\frac{1}{2\sigma^2}(\mathbf{y}-\mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^{\mathbf{T}}(\mathbf{y}-\mathbf{X}\boldsymbol{\beta})]}$$

ve

$$p(\boldsymbol{\beta}|\mathbf{X},\sigma^2) = |2\pi g\sigma^2((\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X})^{-\mathbf{1}}|^{-1}e^{[-\frac{1}{2g\sigma^2}(\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\beta}_{\mathbf{0}})^{\mathbf{T}}(\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\beta}_{\mathbf{0}})]}$$

olmak üzere olabilirlik fonksiyonu,

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\sigma^2) = \int (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}}e^{\left[-\frac{1}{2\sigma^2}(\mathbf{y}-\mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^{\mathbf{T}}(\mathbf{y}-\mathbf{X}\boldsymbol{\beta})\right]} \times |2\pi g\sigma^2(\boldsymbol{X}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{X})^{-\mathbf{1}}|^{-1}$$

$$\times\, e^{[-\frac{1}{2g\sigma^2}(\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\beta}_{\mathbf{0}})^{\boldsymbol{T}}(\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\beta}_{\mathbf{0}})]}d\beta$$

$$= (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}}|2\pi g\sigma^2(\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X})^{-1}|^{-1}\int e^{\left(-\frac{1}{2\sigma^2}\left((\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta})^{\boldsymbol{T}}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta})+\left(\frac{\beta^T\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}}{g}\right)\right)\right)}d\beta$$

elde edilir.Burada,

$$V = \frac{g}{g+1}\sigma^2(\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X})^{-1}$$

ve

$$m = \frac{g}{g+1}(\mathbf{X^T X})^{-1}\mathbf{X^T y}$$

değişken dönüşümü yapılırsa,

$$p(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{X},\sigma^2)$$
$$= (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}}|2\pi g\sigma^2(\boldsymbol{X^T X})^{-1}|^{-1}\int e^{\left(-\frac{1}{2\sigma^2}\left[\mathbf{y^T y}-\frac{1}{2}(\beta-m)^T V^{-1}(\beta-m)+\frac{1}{2}m^T V^{-1}m\right]\right)}\,d\beta$$
$$= \int[(2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}}\,e^{\left(-\frac{1}{2\sigma^2}y^T y\right)}]$$

$$\times\,[(1+g)^{-\frac{p}{2}}e^{\frac{1}{2}m^T V^{-1}m}][|2\pi\mathbf{V}|^{-1/2}e^{[-\mathbf{1/2(\beta-m)^T V^{-1}(\beta-m)}]}]d\beta$$

$$= [(2\pi\sigma^2)^{-n/2}\,e^{(-\frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2\sigma^2}}\mathbf{y^T y})}]\,[(1+g)^{-\frac{p}{2}}e^{\frac{1}{2}\mathbf{m^T V^{-1} m}}]$$

olur. Burada,

$$\boldsymbol{SSR_g} = \boldsymbol{y^T y} - \boldsymbol{m^T V^{-1} m} = y^T(I - \frac{g}{g+1}X(\boldsymbol{X^T X})^{-1}\boldsymbol{X^T y}$$

olmak üzere,

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\sigma^2) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}}(1+g)^{-p/2}\sigma^{2(-\frac{n}{2})}e^{-1/2\sigma^2 SSR_g}$$

olabilirlik fonksiyonu elde edilir. Kesinlik, $\gamma = \frac{1}{\sigma^2}$ olduğuna göre,

$$\gamma \sim gamma(\frac{V_0}{2}, V_0{\sigma_0}^2/2)$$

şeklindedir. O halde, önsel dağılımı,

$$p(\gamma) = \frac{(V_0{\sigma_0}^2/2)^{V_0/2}}{\Gamma(\frac{V_0}{2})}\gamma^{\frac{V_0}{2}-1}e^{-\gamma.(\frac{V_0{\sigma_0}^2}{2})}$$

olarak yazılır. Sonuç olarak yukarıda elde edilen olabilirlik fonksiyonu ve gamma önsel dağılımı ile $p(\gamma|\mathbf{y},\mathbf{X})$'in sonsal dağılımı aşağıdaki şekilde elde edilmektedir:

$$p(\gamma|\mathbf{y},\mathbf{X}) \propto p(\gamma)p(y|\mathbf{X},\boldsymbol{\gamma})$$

$$\propto [\gamma^{\frac{V_0}{2}-1}e^{-\gamma.}\frac{V_0{\sigma^2}_0}{2})]\ [\gamma^{\frac{n}{2}}e^{-\gamma.}\frac{SSR_g}{2})]$$

$$= \gamma^{\frac{V_0+n}{2}-1}e^{[-\gamma\frac{V_0{\sigma^2}_0+SSR_g)}{2}]}.$$

Buradan hareketle, σ^2 parametresinin sonsal dağılımı,

$$\{\sigma^2|\mathbf{y},\mathbf{X}\}\sim Ters-gamma(\left[\frac{V_0+n}{2}\right],\frac{[V_0{\sigma^2}_0+SSR_g]}{2})$$

olarak edilir.

3. YANIT YÜZEY METODOLOJİSİNE BAYESÇİ LİNEER REGRESYON YAKLAŞIMININ FARKLI TAHMİN EDİCİLER İLE UYGULANMASI

Bu bölümde, çeşitli önsel dağılımlar için Bayesçi regresyon tahmin edicilerinin yanıt yüzeylerine uygulanışı ele alınmıştır. Bayesçi regresyon tahmin edicileri olarak En Küçük Kareler tahmin edicisi, MAP tahmin edicisi ve WINBUGS paket programı aracılığıyla elde edilen tahmin edici kullanılmıştır. Bu tahmin ediciler, çeşitli önsel bilgiler kullanılarak bir uygulama problemi üzerinde incelenmiş ve bunlara ilişkin sonsal bilgiler elde edilmiştir. Elde edilen bu sonsal bilgilere, yanıt yüzey metodolojisi uygulanmış ve sonuçları karşılaştırılmıştır.

Uygulama: Bir deney düzeneğinde, kristal büyümesini maksimum seviyeye çıkarmak için gerekli süreç koşulları araştırılmak istensin. Kristal büyüme miktarını (gr) etkileyen üç değişken seçilmiş ve bunlar X_1, X_2, X_3 şeklinde gösterilmiş olsun (Montgomery (2001, s.502).

X_1, X_2, X_3 'e bağlı olarak değişen kristal büyüme miktarına ait deneme noktaları Çizelge 3.1'de verilmektedir. Bu deneyde merkezsel bileşik tasarım kullanılmış olup tasarım 20 denemeden oluşmaktadır. Bu deneyin sonucunda, kristal büyümesini maksimuma ulaştıran optimal tasarım noktasının belirlenmesi amaçlanmaktadır.

Çizelge 3.1. Merkezsel bileşik tasarım deneme noktaları

	x_1	x_2	x_3	y		x_1	x_2	x_3	y
1	-1	-1	-1	66	11	0	-1,682	0	68
2	-1	-1	1	70	12	0	1,682	0	63
3	-1	1	-1	78	13	0	0	-1,682	65
4	-1	1	1	60	14	0	0	1,682	82
5	1	-1	-1	80	15	0	0	0	113
6	1	-1	1	70	16	0	0	0	100
7	1	1	-1	100	17	0	0	0	118
8	1	1	1	75	18	0	0	0	88
9	-1,682	0	0	100	19	0	0	0	100
10	1,682	0	0	80	20	0	0	0	85

Modele karar vermek için öncelikle birinci derece modelin yeterli olup olmadığı kontrol edilsin:

y = 83,1 + 1,27 x1 + 1,36 x2 - 1,49 x3				
Predictor	**Coef**	**SE Coef**	**T**	**P**
Constant	83,050	4,125	20,13	0,000
x1	1,271	4,992	0,25	0,802
x2	1,361	4,992	0,27	0,789
x3	-1,494	4,992	-0,30	0,769
S = 18,4477 R-Sq = 1,4% R-Sq(adj) = 0,0%				
Analysis of Variance				
Source	**DF**	**SS**	**MS**	**F**	**P**
Regression	3	77,9	26,0	0,08	0,972
Residual Error	16	5445,1	340,3		
Lack of Fit	11	4585,8	416,9	2,43	0,169
Pure Error	5	859,3	171,9		
Total	19	5522,9			

Yukarıdaki sonuçlara göre, X_1, X_2, X_3 değişkenleri önemsiz bulunmuştur. Ancak modelde uyum eksikliği bulunmamaktadır. Uyum eksikliği olmamasına rağmen bağımsız değişkenlerin tümünün önemsiz bulunması nedeniyle kurulan bu modelin anlamsız olduğu söylenebilir. Bir başka deyişle, kristal büyümesi yanıt değişkeni için kurulan birinci dereceden model yetersizdir. Bu nedenle, ikinci dereceden modelin incelenmesi uygun olacaktır.

Estimated Regression Coefficients for y				
Term	Coef	SE Coef	T	P
Constant	100,666	5,564	18,093	0,000
x1	2,138	6,209	0,344	0,738
x2	2,289	6,209	0,369	0,720
x3	-2,513	6,209	-0,405	0,694
x1*x1	-10,660	10,165	-1,049	0,319
x2*x2	-35,160	10,165	-3,459	0,006
x3*x3	-27,160	10,165	-2,672	0,023
x1*x2	8,134	13,645	0,596	0,564
x1*x3	-7,426	13,645	-0,544	0,598
x2*x3	-13,085	13,645	-0,959	0,360
S = 13,6418 PRESS = 8855,68				
R-Sq = 66,30% R-Sq(pred) = 0,00% R-Sq(adj) = 35,98%				

Analysis of Variance for y						
Source	**DF**	**Seq SS**	**Adj SS**	**Adj MS**	**F**	**P**
Regression	9	3661,97	3661,97	406,89	2,19	0,119
Linear	3	77,85	77,85	25,95	0,14	0,934
Square	3	3291,74	3291,74	1097,25	5,90	0,014
Interaction	3	292,37	292,38	97,46	0,52	0,676
Residual Error	10	1860,98	1860,98	186,10		
Lack-of-Fit	5	1001,65	1001,65	200,33	1,17	0,435
Pure Error	5	859,33	859,33	171,87		
Total	19	5522,95				

Estimated Regression Coefficients for y using data in uncoded units	
Term	**Coef**
Constant	100,666
x1	1,27103
x2	1,36108
x3	-1,49404
x1*x1	-3,76791
x2*x2	-12,4278
x3*x3	-9,60010
x1*x2	2,87500
x1*x3	-2,62500
x2*x3	-4,62500

İkinci dereceden modelin incelenmesi sonucunda, çok fazla önemsiz bağımsız değişken bulunduğu gözlemlenmiştir. Değişkenlerden X_1, modelden çıkarılarak yeniden model oluşturulduğunda sonuçların daha olumlu olduğu gözlemlenmiştir.

Estimated Regression Coefficients for y				
Term	Coef	SE Coef	T	P
Constant	97,582	4,361	22,377	0,000
x2	2,289	5,733	0,399	0,695
x3	-2,513	5,733	-0,438	0,667
x2*x2	-34,100	9,339	-3,651	0,002
x3*x3	-26,100	9,339	-2,795	0,014
S = 12,5965	PRESS = 4736,35			
R-Sq = 56,91%	R-Sq(pred) = 14,24%	R-Sq(adj) = 45,41%		

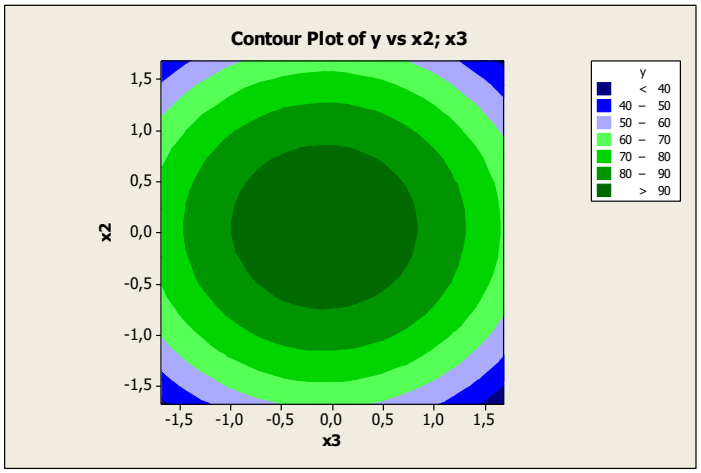
Analysis of Variance for y						
Source	DF	Seq SS	Adj SS	Adj MS	F	P
Regression	4	3142,86	3142,86	785,71	4,95	0,010
Linear	2	55,79	55,79	27,89	0,18	0,840
Square	2	3087,07	3087,07	1543,53	9,73	0,002
Residual Error	15	2380,09	2380,09	158,67		

Lack-of-Fit	4	697,59	697,59	174,40	1,14	0,388
Pure Error	11	1682,50	1682,50	152,95		
Total	19	5522,95				

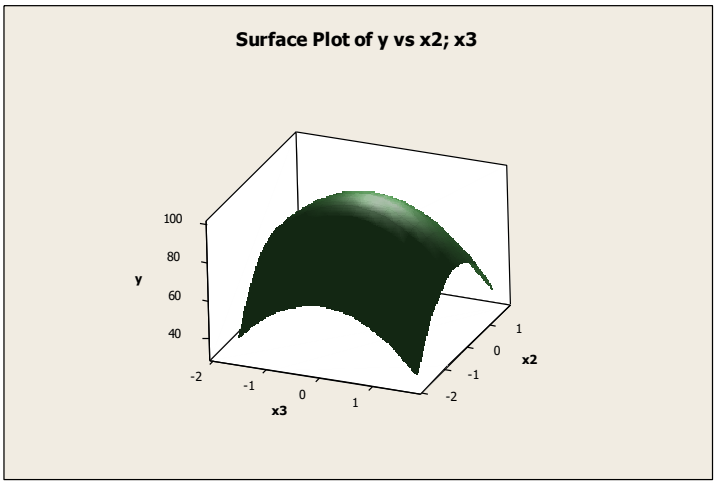
Estimated Regression Coefficients for y using data in uncoded units	
Term	**Coef**
Constant	97,5816
x2	1,36108
x3	-1,49404
x2*x2	-12,0533
x3*x3	-9,22555

Bu sonuçlara göre, son oluşturulan modelin anlamlı olduğu ve uyum eksikliği bulunmadığı görülmektedir.

Uygun model oluşturulduktan sonra yanıt değişkeninin diğer değişkenler ile ilişkisini gösteren "Eş Yükseklik Eğrileri" ve "Yanıt Yüzey Grafikleri" sırasıyla Şekil 3.1 ve Şekil 3.2'deki gibi verilmiştir. Eş yükseklik eğrileri ve yanıt yüzeyi grafiklerine bakıldığında kristal büyüme miktarının maksimum olması için X_2 ve X_3 değişkenlerinin hangi bölgede değerler aldığı görülmektedir.



Şekil 3.1. Eş yükseklik eğrisi



Şekil 3.2. Yanıt yüzey grafiği

Uygulanan yanıt yüzey metodolojisinin son aşamasında optimum yanıtı veren X_2 ve X_3 değişkenlerinin değerleri,

$$X_{Durağan} = \begin{bmatrix} X_2 \\ X_3 \end{bmatrix} = -\frac{1}{2}\widehat{\mathbf{B}}^{-1}\mathbf{b}$$

ve

$$\widehat{\mathbf{B}} = \begin{bmatrix} -12{,}05 & 0 \\ 0 & -9{,}23 \end{bmatrix}, \widehat{\mathbf{B}}^{-1} = \begin{bmatrix} -0{,}08296 & 0 \\ 00 & -10{,}839 \end{bmatrix}, \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1{,}36108 \\ -1{,}49404 \end{bmatrix}$$

olmak üzere,

$$\mathbf{X}_{Durağan} = \begin{bmatrix} 0{,}05646 \\ -0{,}08097 \end{bmatrix}$$

şeklinde elde edilir. Y yanıt değişkeni için durağan nokta ise,

$$\hat{Y}_{Durağan} = b_0 + \frac{1}{2}\mathbf{X}'_{\text{Durağan}}\mathbf{b}$$

olmak üzere,

$\hat{Y}_{Durağan} = 97{,}68$ gr

şeklinde kristal büyümesi tahminine ulaşılır. Durağan noktanın niteliğinin belirlenmesi için $\hat{B}$ matrisinin özdeğerleri incelendiğinde,

$$(\widehat{\mathbf{B}} - \lambda \boldsymbol{I})\boldsymbol{X} = 0$$

$$\begin{bmatrix} -12{,}05 & 0 \\ 0 & -9{,}23 \end{bmatrix} - \lambda \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = 0$$

olmak üzere, $\lambda_1 = -12{,}05$, $\lambda_2 = -9.23$ olarak bulunur. Her iki özdeğer de negatif olduğundan $\hat{Y}_{Durağan}$ noktasının maksimum olduğu saptanmış olur.

Yukarıda, klasik yanıt yüzey metodolojisi ile çözülmüş olan uygulama problemi Bayesçi yaklaşım kullanılarak ele alındığında önsel bilginin de dahil edilmesi ile maksimum yanıt için daha hassas sonuçların ortaya çıkması beklenmektedir. Burada kullanılan Bayesçi yaklaşımda, parametrelere ilişkin önsel bilgiler için Gilmour ve Mead'de (2003) kullanılmış olan önsel dağılım bilgisinden yararlanılmıştır. Sonsal dağılım bilgisi, öncelikle, teorik olarak en küçük kareler tahmin edicilerinden ve MAP tahmin edicilerinden elde edilmiş olup sonrasında da örnekleme yöntemini kullanan WINBUGS programından MCMC yöntemi ile elde edilmiştir ve farklı tahmin edicilerin farklı önsel bilgiler için almış olduğu sonsal değerler karşılaştırılacaktır.

Yanıt yüzey metodolojisinin Bayesçi yaklaşım ile ele alınmasına ilk olarak en küçük kareler regresyon tahmin edicisi ile başlansın. Modelin, bilinmeyen β parametresi için önsel dağılımı,

$$\boldsymbol{\beta} \sim Normal(\boldsymbol{\beta}_{\text{ö}\boldsymbol{nsel}}, \boldsymbol{\Sigma}_{\text{ö}\boldsymbol{nsel}})$$

olsun. Bayesçi regresyonda, regresyon katsayıları için önsel bilginin dahil edildiği sonsal dağılımın beklenen değer ve varyans-kovaryans matrisinin en küçük kareler tahmin edicileri sırasıyla,

$$\boldsymbol{\beta}^* = \boldsymbol{\Sigma}^*(\boldsymbol{\Sigma}_{\text{ö}\boldsymbol{nsel}}{}^{-1}\boldsymbol{\beta}_{\text{ö}\boldsymbol{nsel}} + (\frac{\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X}}{\sigma^2})\boldsymbol{\beta}_{Klasik})$$

ve

$$\boldsymbol{\Sigma}^{*} = (\boldsymbol{\Sigma}_{\text{ö}\boldsymbol{nsel}}{}^{-\mathbf{1}} + \mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X}/\sigma^{2})^{-1}$$

şeklindedir.

$$\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 20 & 0 & 0 & 13{,}65825 & 13{,}65825 \\ 0 & 13{,}65825 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 13{,}65825 & 0 & 0 \\ 13{,}65825 & 0 & 0 & 24{,}00789 & 8 \\ 13{,}65825 & 0 & 0 & 8 & 24{,}00789 \end{bmatrix}$$

olmak üzere, önsel bilgi,

$$\boldsymbol{\beta}_{\text{ö}\boldsymbol{nsel}} = [100, 0, 0 - 6, -6]$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\text{ö}\boldsymbol{nsel}} = \begin{bmatrix} 10 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 10 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 10 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 10 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 10 \end{bmatrix}$$

olarak alındığında,

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\text{ö}\boldsymbol{nsel}}{}^{-1} = \begin{bmatrix} 0{,}1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0{,}1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0{,}1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0{,}1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0{,}1 \end{bmatrix}$$

ve $\sigma^{2} = 1$ (Gilmour ve Mead , 2003) için,

$$\frac{\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X}}{\sigma^{2}} = \begin{bmatrix} 20 & 0 & 0 & 13{,}658250 & 13{,}65825 \\ 0 & 13{,}65825 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 13{,}65825 & 0 & 0 \\ 13{,}65825 & 0 & 0 & 24{,}00789 & 8 \\ 13{,}65825 & 0 & 0 & 8 & 24{,}00789 \end{bmatrix}$$

ve

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\text{ö}\boldsymbol{nsel}}{}^{-1} + \frac{\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X}}{\sigma^2} = \begin{bmatrix} 20{,}1 & 0 & 0 & 13{,}65825 & 13{,}65825 \\ 0 & 13{,}75825 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 13{,}75825 & 0 & 0 \\ 13{,}65825 & 0 & 0 & 24{,}10789 & 8 \\ 13{,}65825 & 0 & 0 & 8 & 24{,}10789 \end{bmatrix}$$

olur. Buradan hareketle, sonsal dağılımın varyans-kovaryans matrisi,

$$\boldsymbol{\Sigma}^* = \begin{bmatrix} 0{,}11793 & 0 & 0 & -0{,}05016 & -0{,}05016 \\ 0 & 0{,}07268 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0{,}07268 & 0 & 0 \\ -0{,}05016 & 0 & 0 & 0{,}06795 & 0{,}00587 \\ -0{,}05016 & 0 & 0 & 0{,}00587 & 0{,}06795 \end{bmatrix}$$

şeklinde elde edilir. Bunun yanında,

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\text{ö}\boldsymbol{nsel}}{}^{-1}\boldsymbol{\beta}_{\text{ö}\boldsymbol{nsel}} = \begin{bmatrix} 10 \\ 0 \\ 0 \\ -0{,}6 \\ -0{,}6 \end{bmatrix}$$

ve

$$\left(\frac{X^T X}{\sigma^2}\right) * \boldsymbol{\beta}_{\mathbf{Klasik}} = \begin{bmatrix} 1661 \\ 18{,}59 \\ -20{,}406 \\ 969{,}615 \\ 1014{,}88 \end{bmatrix}$$

olmak üzere,

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\text{ö}\boldsymbol{nsel}}{}^{-1}\boldsymbol{\beta}_{\text{ö}\boldsymbol{nsel}} + \left(\frac{\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X}}{\sigma^2}\right) * \boldsymbol{\beta}_{Klasik} = \begin{bmatrix} 1671 \\ 18{,}59 \\ -20{,}406 \\ 969{,}015 \\ 1014{,}281 \end{bmatrix}$$

olur. Sonuç olarak, sonsal dağılımın beklenen değeri,

$$\boldsymbol{\beta}^* = \boldsymbol{\Sigma}^* \left(\boldsymbol{\Sigma}_{\text{ö}\boldsymbol{nsel}}{}^{-1} \boldsymbol{\beta}_{\text{ö}\boldsymbol{nsel}} + \left(\frac{\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X}}{\sigma^2} \right) \boldsymbol{\beta}_{Klasik} \right) = \begin{bmatrix} 97{,}56355 \\ 1{,}35119 \\ -1{,}48318 \\ -12{,}02238 \\ -9{,}21221 \end{bmatrix}$$

olarak elde edilir. Bu sonuçlardan hareketle, optimum yanıtı veren x_2 ve x_3 değişkenlerinin değerleri,

$$\mathbf{X}_{Durağan} = -\frac{1}{2} \widehat{\mathbf{B}}^{-\mathbf{1}} \mathbf{b}$$

ve

$$\widehat{\mathbf{B}} = \begin{bmatrix} -12{,}02 & 0 \\ 0 & -9{,}21 \end{bmatrix}, \widehat{\mathbf{B}}^{-\mathbf{1}} = \begin{bmatrix} -0{,}08318 & 0 \\ 00 & -0{,}10855 \end{bmatrix}, \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1{,}35119 \\ -1{,}48318 \end{bmatrix}$$

olmak üzere,

$$\boldsymbol{X}_{\boldsymbol{Durağan}} = \begin{bmatrix} 0{,}05619 \\ -0{,}08050 \end{bmatrix}$$

şeklinde elde edilir. Y yanıt değişkeni için durağan nokta ise,

$$\hat{Y}_{Durağan} = b_0 + \frac{1}{2} \boldsymbol{X}_{\boldsymbol{Durağan}}{}' \boldsymbol{b}$$

olmak üzere,

$$\hat{Y}_{Durağan} = 97{,}66$$

şeklinde elde edilir.

Diğer taraftan, σ^2'nin klasik regresyon tahmin edicisi 158,7'dir. σ^2'nin bu yeni değeri kullanılarak Bayesçi yaklaşımda en küçük kareler regresyon tahmin edicisi bulunup yanıt yüzey metodolojisi uygulansın.

$\sigma^2 = 158{,}7$ için,

$$\frac{\mathbf{X^T X}}{\sigma^2} = \begin{bmatrix} 0{,}1 & 0 & 0 & 0{,}1 & 0{,}1 \\ 0 & 0{,}1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0{,}1 & 0 & 0 \\ 0{,}1 & 0 & 0 & 0{,}2 & 0{,}1 \\ 0{,}1 & 0 & 0 & 0{,}1 & 0{,}2 \end{bmatrix}$$

ve

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\text{ö}\boldsymbol{nsel}}{}^{-1} + \frac{\boldsymbol{X^T X}}{\sigma^2} = \begin{bmatrix} 0{,}2 & 0 & 0 & 0{,}1 & 0{,}1 \\ 0 & 0{,}2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0{,}2 & 0 & 0 \\ 0{,}1 & 0 & 0 & 0{,}3 & 0{,}1 \\ 0{,}1 & 0 & 0 & 0{,}1 & 0{,}3 \end{bmatrix}$$

olur. Buradan hareketle, sonsal dağılımın varyans-kovaryans matrisi,

$$\boldsymbol{\Sigma}^* = \begin{bmatrix} 5{,}65191 & 0 & 0 & -1{,}61243 & -1{,}61243 \\ 0 & 5{,}37409 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 5{,}37409 & 0 & 0 \\ -1{,}61243 & 0 & 0 & 4{,}60613 & -0{,}37181 \\ -1{,}61243 & 0 & 0 & -0{,}37181 & 4{,}60613 \end{bmatrix}$$

şeklinde elde edilir. Bunun yanında,

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\text{ö}\boldsymbol{nsel}}{}^{-1}\boldsymbol{\beta}_{\text{ö}\boldsymbol{nsel}} = \begin{bmatrix} 10 \\ 0 \\ 0 \\ -0{,}6 \\ -0{,}6 \end{bmatrix}$$

ve

$$\left(\frac{\mathbf{X^T X}}{\sigma^2}\right) * \boldsymbol{\beta}_{Klasik} = \begin{bmatrix} 10{,}46808 \\ 0{,}11716 \\ -0{,}12860 \\ 6{,}11078 \\ 6{,}39606 \end{bmatrix}$$

olmak üzere,

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\ddot{o}\boldsymbol{nsel}}{}^{-1}\boldsymbol{\beta}_{\ddot{o}\boldsymbol{nsel}} + \left(\frac{\mathbf{X^T X}}{\sigma^2}\right) * \boldsymbol{\beta}_{Klasik} = \begin{bmatrix} 20{,}46808 \\ 0{,}11716 \\ -0{,}12860 \\ 5{,}51078 \\ 5{,}79606 \end{bmatrix}$$

şeklinde yazılır. Sonuç olarak, sonsal dağılımın beklenen değeri,

$$\beta^* = \boldsymbol{\Sigma}^* \left(\boldsymbol{\Sigma}_{\ddot{o}\boldsymbol{nsel}}{}^{-1}\boldsymbol{\beta}_{\ddot{o}\boldsymbol{nsel}} + \left(\frac{\mathbf{X^T X}}{\sigma^2}\right)\boldsymbol{\beta}_{Klasik}\right) = \begin{bmatrix} 97{,}45230 \\ 0{,}62962 \\ -0{,}69113 \\ -9{,}77494 \\ -8{,}35484 \end{bmatrix}$$

olarak elde edilir. Bu sonuçlardan hareketle, optimum yanıtı veren X_2 ve X_3 değişkenlerinin değerleri,

$$\boldsymbol{X}_{Durağan} = -\frac{1}{2}\widehat{\mathbf{B}}^{-\mathbf{1}}\mathbf{b}$$

ve

$$\widehat{\mathbf{B}} = \begin{bmatrix} -9{,}77 & 0 \\ 0 & -8{,}35 \end{bmatrix},\ \widehat{\mathbf{B}}^{-\mathbf{1}} = \begin{bmatrix} -0{,}10230 & 0 \\ 00 & -0{,}11969 \end{bmatrix},\ \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 0{,}62962 \\ -0{,}69113 \end{bmatrix}$$

olmak üzere,

$$\mathbf{X}_{Durağan} = \begin{bmatrix} 0{,}03221 \\ -0{,}04136 \end{bmatrix}$$

şeklinde elde edilir. Y yanıt değişkeni için durağan nokta ise,

$$\hat{Y}_{Durağan} = b_0 + \frac{1}{2}\mathbf{X}'_{Durağan}\mathbf{b} = 97{,}48$$

şeklinde elde edilir.

Önsel bilgilerin farklı olduğu diğer durumlar için sonsal dağılımların beklenen değer ve varyansları ile optimum yanıt değerleri Çizelge 3.2'de özetlenmiştir.

Çizelge 3.2. Bayesçi regresyonda en küçük kareler tahmin edicilerinin yanıt yüzeye uygulanması

	$\sigma^2 = 1$								$\sigma^2 = 158{,}7$							
	$\beta_{\text{ön}sel}$=[100,0,0,-6,-6] $\Sigma_{\text{ön}sel}$ diagonal 10	**Yanıt**	**$\beta_{\text{ön}sel}$=[100,0,0,-6,-6] $\Sigma_{\text{ön}sel}$** diagonal 1	**Yanıt**	**$\beta_{\text{ön}sel}$=[110,0,0,-6,-6] $\Sigma_{\text{ön}sel}$**diagonal 10	**Yanıt**	**$\beta_{\text{ön}sel}$=[110,0,0,-6,-6] $\Sigma_{\text{ön}sel}$** diagonal 1	**Yanıt**	**$\beta_{\text{ön}sel}$=[100,0,0,-6,-6] $\Sigma_{\text{ön}sel}$**diagonal 10	**Yanıt**	**$\beta_{\text{ön}sel}$=[100,0,0,-6,-6] $\Sigma_{\text{ön}sel}$**diagonal 1	**Yanıt**	**$\beta_{\text{ön}sel}$=[110,0,0,-6,-6] $\Sigma_{\text{ön}sel}$** diagonal 10	**Yanıt**	**$\beta_{\text{ön}sel}$=[110,0,0,-6,-6] $\Sigma_{\text{ön}sel}$** diagonal 1	**Yanıt**
$\widehat{\beta_0}$	97,56355 ***** (0,11793) **	**97,66**	97,43503 (0,10313)	**97,52**	97,68147 (0,11793)	**97,78**	98,46630 (0,10313)	**98,55**	97,45230 (5,65191)	**97,48**	99,15630 (0,8979)	**99,16**	103,10422 (5,65191)	**103,1**	108,13526 (0,89790)	**108,14**
$\widehat{\beta_2}$	1,35119 (0,07268)		1,26823 (0,06822)		1,35119 (0,07268)		1,26823 (0,06822)		0,62962 (5,37409)		0,10787 (0,92074)		0,62962 (5,37409)		0,10787 (0,92074)	
$\widehat{\beta_3}$	-1,48318 (0,07268)		-1,39212 (0,06822)		-1,48318 (0,07268)		-1,39212 (0,06822)		-0,69113 (5,37409)		-0,1184 (0,92074)		-0,69113 (5,37409)		-0,11841 (0,92074)	
$\widehat{\beta_{22}}$	-12,02238 (0,06795)		-11,76895 (0,06220)		-12,07255 (0,06795)		-12,19568 (0,06220)		-9,77494 (4,60613)		-7,02114 (0,87486)		-11,38737 (4,60613)		-7,66429 (0,87486)	
$\widehat{\beta_{33}}$	-9,21221 (0,06795)		-9,10748 (0,06220)		-9,26237 (0,06795)		-9,53421 (0,06220)		-8,35484 (4,60613)		-6,76201 (0,87486)		-9,96727 (4,60613)		-7,405158 (0,87486)	

* : Beklenen değer

** :Varyans

$$\hat{Y}_{klasik} = 97{,}58 + 1{,}36X_2 - 1{,}49X_3 - 12{,}06{X_2}^2 - 9{,}23{X_3}^2$$

Yanıt yüzey metodolojisinin Bayesçi yaklaşım ile ele alınmasında en küçük kareler regresyon tahmin edicisi ile elde edilen sonuçlardan sonra ikinci olarak aynı yaklaşım MAP tahmin edicileri ile ele alınsın ve modelin, bilinmeyen β parametresi için önsel dağılımı,

$$\beta \sim Normal(\boldsymbol{\beta}_{\text{önsel}}, \boldsymbol{\Sigma}_{\text{önsel}})$$

olsun. Bayesçi regresyonda, regresyon katsayıları için önsel bilginin dahil edildiği sonsal dağılımın beklenen değer ve varyans-kovaryans matrisinin MAP tahmin edicileri sırasıyla,

$$\boldsymbol{\beta_{MAP}}^{*} = (\boldsymbol{\Sigma}_{\text{önsel}}{}^{-1}\sigma^2 + \mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X})^{-1}\boldsymbol{X^T X}\boldsymbol{\beta}_{klasik} + (\boldsymbol{\Sigma}_{\text{önsel}}{}^{-1}\sigma^2 + \boldsymbol{X^T X})^{-1}\sigma^2\boldsymbol{\Sigma}_{\text{önsel}}{}^{-1}\boldsymbol{\beta}_{\text{önsel}}$$

ve

$$\boldsymbol{\Sigma}_{MAP}{}^{*} = \left(\boldsymbol{\Sigma}_{\text{önsel}}{}^{-1}\sigma^2 + \boldsymbol{X^T X}\right)^{-1}\boldsymbol{X^T}\sigma^2((\boldsymbol{\Sigma}_{\text{önsel}}{}^{-1}\sigma^2 + \boldsymbol{X^T X})^{-1}\boldsymbol{X^T})^T$$

şeklindedir. Önsel bilgi,

$$\boldsymbol{\beta}_{\text{önsel}} = [110, 0, 0 - 6, -6]$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\text{önsel}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

olarak alındığında, $\sigma^2 = 158{,}7$ için,

$$(\boldsymbol{\Sigma}_{\text{önsel}}{}^{-1}\sigma^2 + \mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X})^{-1} = \begin{bmatrix} 0{,}00568 & 0 & 0 & -0{,}00041 & -0{,}00041 \\ 0 & 0{,}00583 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0{,}00583 & 0 & 0 \\ -0{,}00041 & 0 & 0 & 0{,}00553 & -0{,}00021 \\ -0{,}00041 & 0 & 0 & -0{,}00021 & 0{,}00553 \end{bmatrix}$$

olur. Buradan hareketle, sonsal dağılımın varyans-kovaryans matrisi,

$$\boldsymbol{\Sigma}_{MAP}{}^{*} = \begin{bmatrix} 0{,}08364 & 0 & 0 & 0{,}04764 & 0{,}04764 \\ 0 & 0{,}07324 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0{,}07324 & 0 & 0 \\ -0{,}04764 & 0 & 0 & 0{,}10452 & 0{,}02099 \\ -0{,}04764 & 0 & 0 & 0{,}02099 & 0{,}10452 \end{bmatrix}$$

şeklinde elde edilir. Bunun yanında,

$$(\boldsymbol{\Sigma}_{\text{önsel}}{}^{-1}\sigma^2 + \mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}_{Klasik} = \begin{bmatrix} 8{,}62520 \\ 0{,}10830 \\ -0{,}11888 \\ 4{,}47207 \\ 4{,}73221 \end{bmatrix}$$

ve

$$(\boldsymbol{\Sigma}_{\text{önsel}}{}^{-1}\sigma^2 + \mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X})^{-1}\sigma^2\boldsymbol{\Sigma}_{\text{önsel}}{}^{-1}\boldsymbol{\beta}_{\text{önsel}} = \begin{bmatrix} 99{,}50378 \\ 0 \\ 0 \\ -12{,}14185 \\ -12{,}14185 \end{bmatrix}$$

olmak üzere, sonsal dağılımın beklenen değeri,

$$\boldsymbol{\beta}_{MAP}{}^{*} = \begin{bmatrix} 108{,}12898 \\ 0{,}10830 \\ -0{,}11888 \\ -7{,}66978 \\ -7{,}40964 \end{bmatrix}$$

olarak elde edilir. Bu sonuçlardan hareketle, optimum yanıtı veren X_2ve X_3 değişkenlerinin değerleri,

$$\mathbf{X}_{Durağan} = -\frac{1}{2}\widehat{\mathbf{B}}^{-\mathbf{1}}\mathbf{b}$$

ve

$$\widehat{\mathbf{B}} = \begin{bmatrix} -7{,}67 & 0 \\ 0 & -7{,}41 \end{bmatrix}, \widehat{\mathbf{B}}^{-\mathbf{1}} = \begin{bmatrix} -0{,}13038 & 0 \\ 00 & -0{,}13496 \end{bmatrix}, \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 0{,}10830 \\ -0{,}11888 \end{bmatrix}$$

olmak üzere,

$$\mathbf{X}_{Durağan} = \begin{bmatrix} 0{,}00706 \\ -0{,}00802 \end{bmatrix}$$

şeklinde bulunur. Y yanıt değişkeni için durağan nokta ise,

$$\hat{Y}_{Durağan} = b_0 + \frac{1}{2}\mathbf{X}'_{Durağan}\mathbf{b} = 108{,}13$$

şeklinde elde edilir.

Önsel bilgilerin farklı durumları için sonsal dağılımların beklenen değer ve varyansları ile optimum yanıt değerleri Çizelge 3.3'de verilmiştir.

Çizelge 3.3. Bayesçi regresyonda MAP tahmin edicilerinin yanıt yüzeye uygulanması

	$\sigma^2 = 1$								$\sigma^2 = 158{,}7$							
	$\beta_{\text{önsel}}$=[100,0,0,-6,-6] $\Sigma_{\text{önsel}}$diagonal 10	**Yanıt**	**$\beta_{\text{önsel}}$=[100,0,0,-6,-6]** $\Sigma_{\text{önsel}}$ diagonal 1	**Yanıt**	**$\beta_{\text{önsel}}$=[110,0,0,-6,-6]** $\Sigma_{\text{önsel}}$ diagonal 10	**Yanıt**	**$\beta_{\text{önsel}}$=[110,0,0,-6,-6]** $\Sigma_{\text{önsel}}$ diagonal 1	**Yanıt**	**$\beta_{\text{önsel}}$=[100,0,0,-6,-6]** $\Sigma_{\text{önsel}}$ diagonal 10	**Yanıt**	**$\beta_{\text{önsel}}$=[100,0,0,-6,-6]** $\Sigma_{\text{önsel}}$ diagonal 1	**Yanıt**	**$\beta_{\text{önsel}}$=[110,0,0,-6,-6]** $\Sigma_{\text{önsel}}$ diagonal 10	**Yanıt**	**$\beta_{\text{önsel}}$=[110,0,0,-6,-6]** $\Sigma_{\text{önsel}}$ diagonal 1	**Yanıt**
$\widehat{\beta_0}$	97,56355 * (0,11603) **	**97,66**	97,43503 (0,08885)	**97,52**	97,68147 (0,11603)	**97,78**	98,46630 (0,08885)	**98,55**	97,45039 (1,93864)	**97,48**	99,15356 (0,08364)	**99,16**	103,09406 (1,93864)	**103,13**	108,12898 (0,08364)	**108,14**
$\widehat{\beta_2}$	1,351189 (0,07216)		1,268228 (0,06357)		1,35119 (0,07216)		1,26823 (0,06357)		0,63106 (2,48679)		0,10830 (0,07324)		0,6310626 (2,48679)		0,1082965 (0,07324)	
$\widehat{\beta_3}$	-1,48318 (0,07216)		-1,39212 (0,06357)		-1,48318 (0,07216)		-1,39212 (0,06357)		-0,69271 (2,48679)		-0,11888 (0,07324)		-0,69271 (2,48679)		-0,11888 (0,07324)	
$\widehat{\beta_{22}}$	-12,0224 (0,06724)		-11,769 (0,05650)		-12,07255 (0,06724)		-12,19568 (0,05650)		-9,78021 (2,21004)		-7,02460 (0,10452)		-11,39255 (2,21004)		-7,66978 (0,10452)	
$\widehat{\beta_{33}}$	-9,21221 (0,06724)		-9,10748 (0,05650)		-9,26237 (0,06724)		-9,53421 (0,05650)		-8,35711 (2,21004)		-6,76446 (0,10452)		-9,96945 (2,21004)		-7,40964 (0,10452)	

* : Beklenen değer

** :Varyans

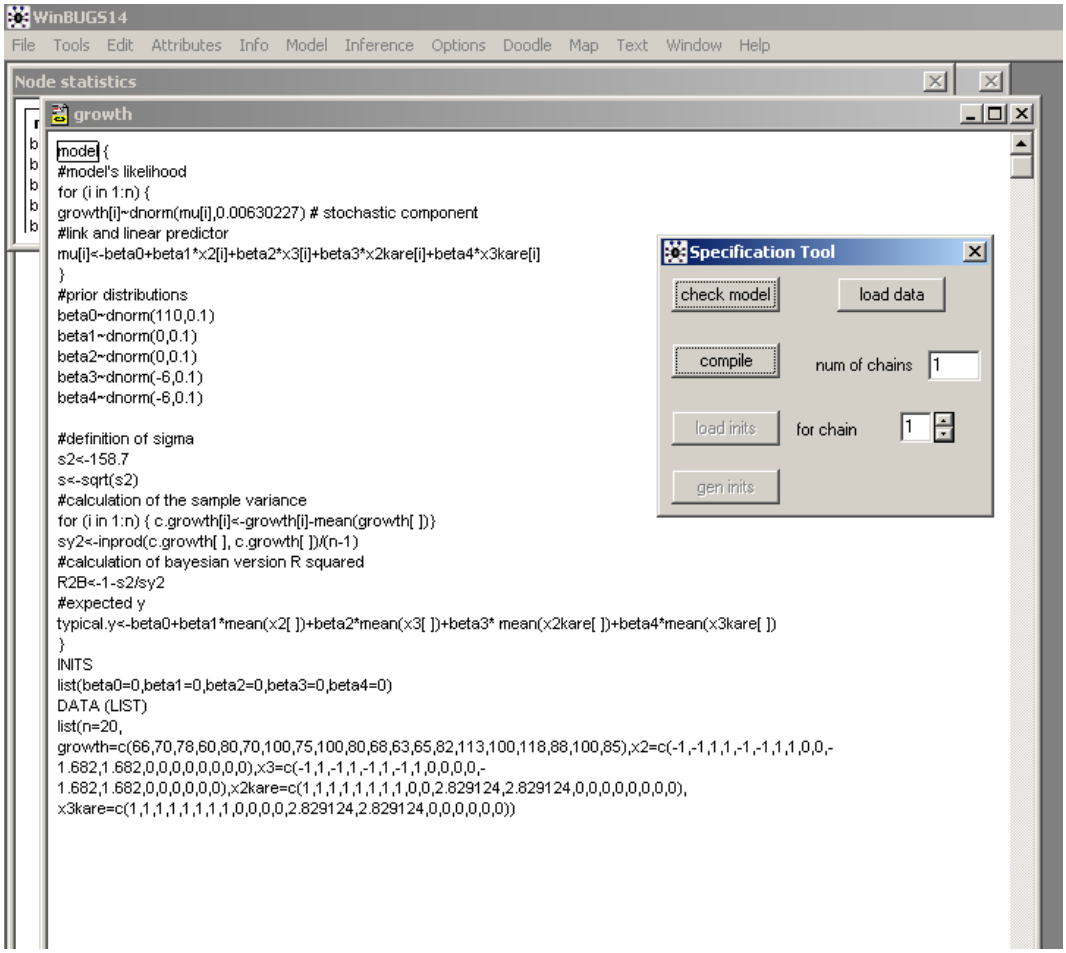
$$\hat{Y}_{klasik} = 97{,}58 + 1{,}36X_2 - 1{,}49X_3 - 12{,}06{X_2}^2 - 9{,}23{X_3}^2$$

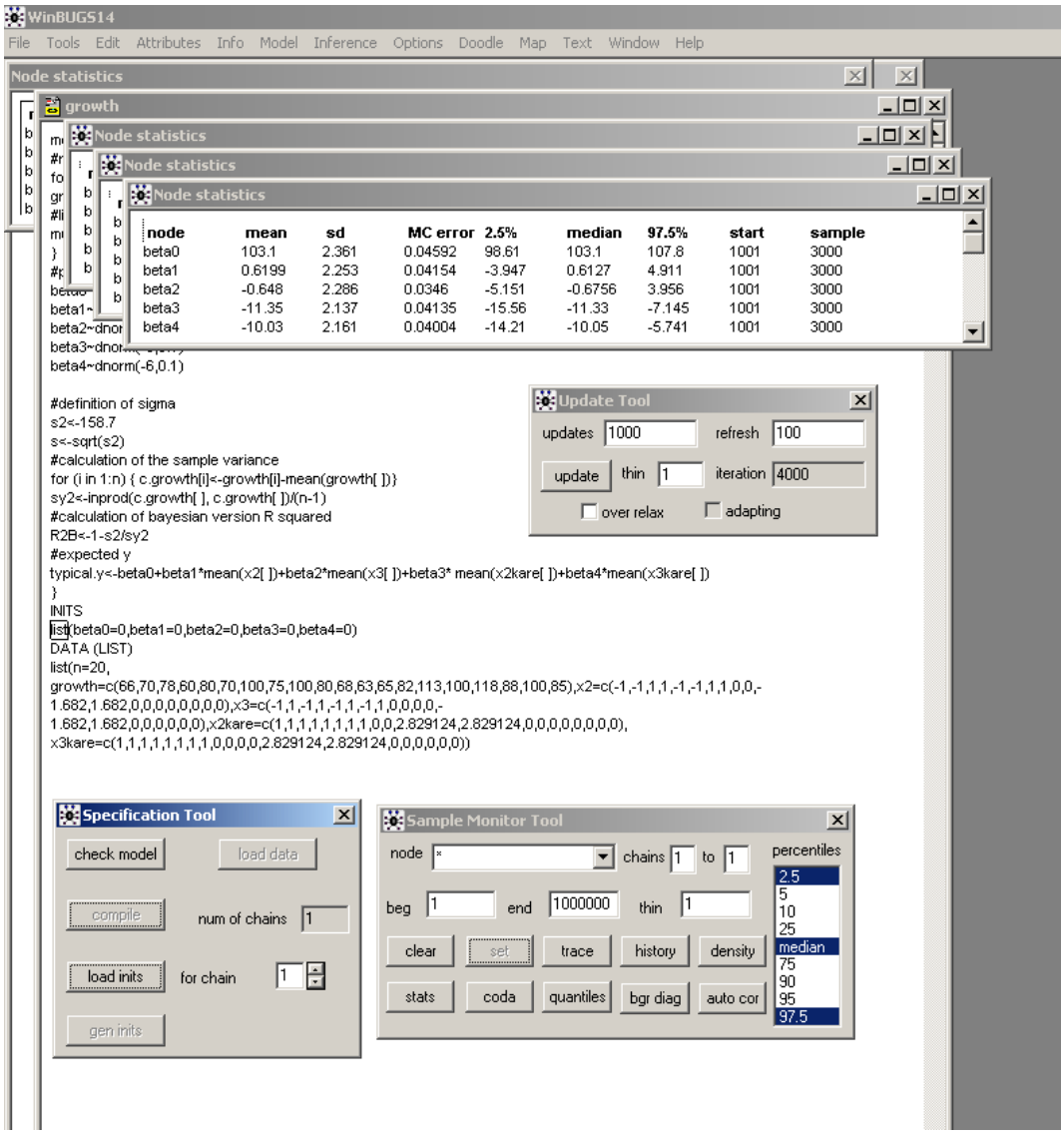
Son olarak, yanıt yüzey metodolojisinin Bayesçi yaklaşım ile ele alınmasında WINBUGS aracılığıyla MCMC kullanılarak elde edilen tahmin ediciler incelensin. Önsel bilgi,

$$\boldsymbol{\beta}_{önsel} = [110, 0, 0 - 6, -6]\ ;$$

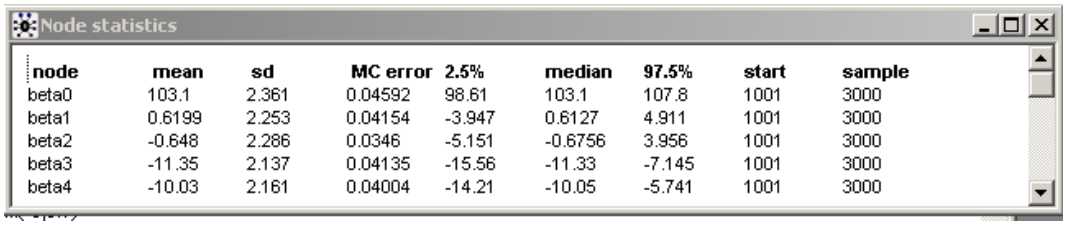
$$\boldsymbol{\Sigma}_{önsel} = \begin{bmatrix} 10 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 10 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 10 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 10 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 10 \end{bmatrix}$$

olarak alındığında, $\sigma^2 = 158{,}7$ için, WINBUGS paket programına ait ekran görüntüleri aşağıdaki şekildedir:





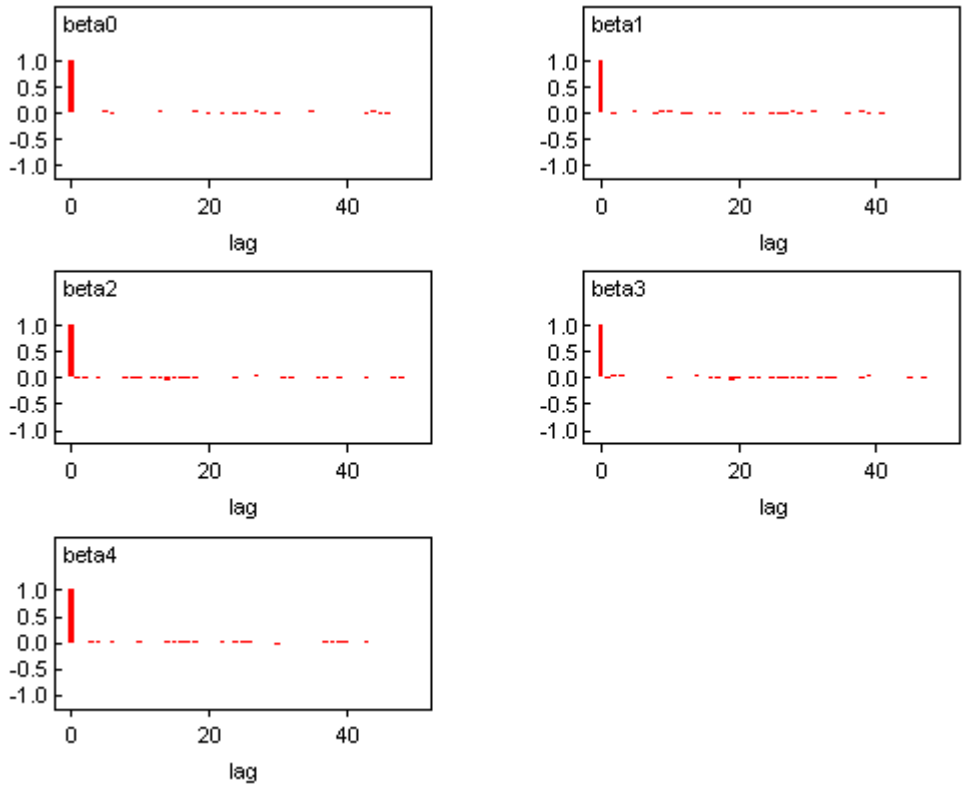
WINBUGS'ın sonsal dağılıma ilişkin özet istatistikleri verdiği aşağıdaki tabloda öncelikle MC (Monte Carlo) hatasına bakılmaktadır. MC hatası Markov Zinciri algoritması ile yapılan tahminin standart hatasını gösterir. Bu değer mümkün olduğunca küçük olmalıdır ve genellikle 0,05'ten küçük olması beklenmektedir. Bu sebeple 0,05 ten küçük olarak elde edilene kadar iterasyona devam edilir. (Ekici, 2005)



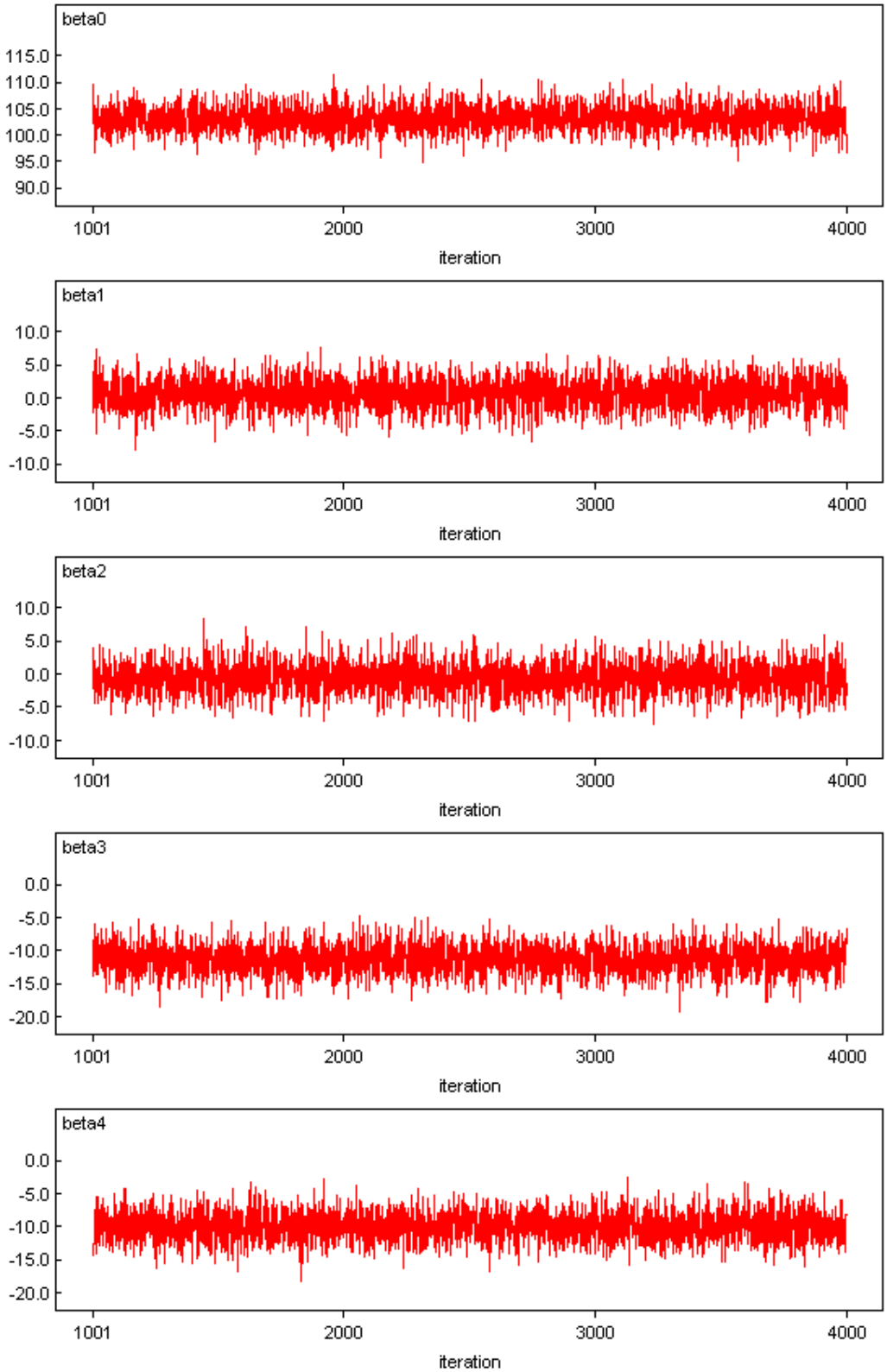
Node statistics

node	mean	sd	MC error	2.5%	median	97.5%	start	sample
beta0	103.1	2.361	0.04592	98.61	103.1	107.8	1001	3000
beta1	0.6199	2.253	0.04154	-3.947	0.6127	4.911	1001	3000
beta2	-0.648	2.286	0.0346	-5.151	-0.6756	3.956	1001	3000
beta3	-11.35	2.137	0.04135	-15.56	-11.33	-7.145	1001	3000
beta4	-10.03	2.161	0.04004	-14.21	-10.05	-5.741	1001	3000

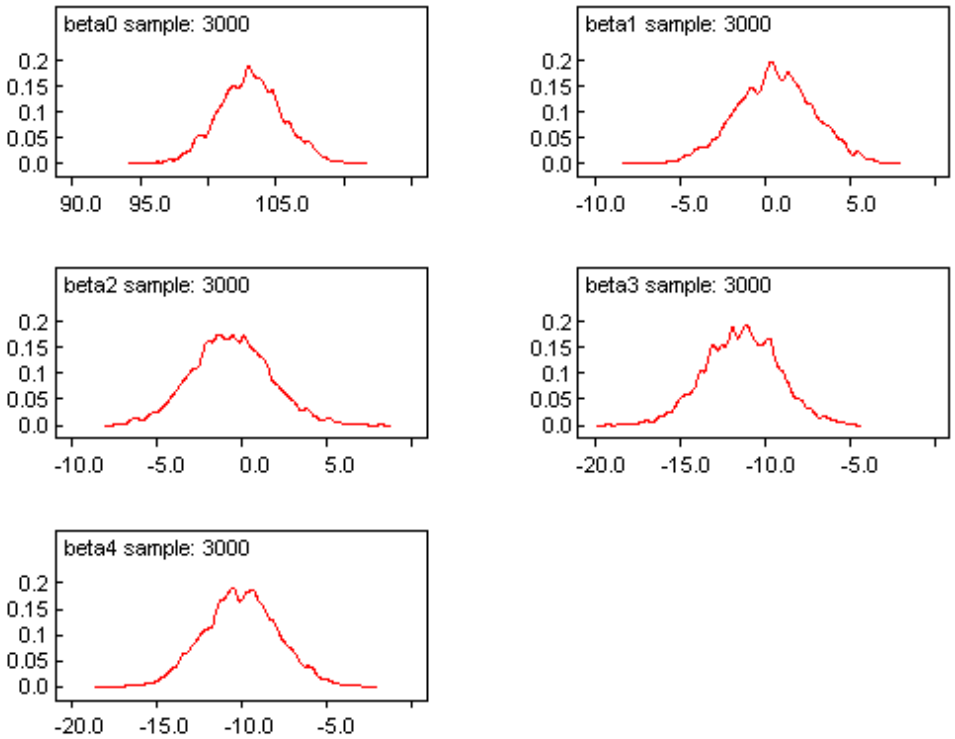
Otokorelasyon simülasyonda gerçekleşen değerlerin bağımsızlığını ölçmek için bir yoldur. Yüksek bir otokorelasyon parametrenin son dağılımını daha yavaş aradığını göstermektedir. Buna göre aşağıdaki grafiklerden modelin parametreleri için otokorelasyonun söz konusu olmadığı görülmektedir.



İz çizimi çıktısı, zincirin gerçekleşen değerlerinin bir iz çizimini vermektedir. Bu grafik aracılığı ile simülasyonun istenilen değere yakınsayıp yakınsamadığına ilişkin bilgi edinilmektedir. Bu çizimde Markov Zincirinin son dağılımı ne kadar hızlı aradığı gösterilmektedir.



Aşağıda verilen Kernel yoğunluk çizimi, modelin parametrelerinin yoğunluk grafiklerini göstermektedir. Bu grafiklere göre parametrelerin sonsal dağılımlarının normal dağılıma yakın olduğu görülmektedir.



WINBUGS aracılığı ile elde edilen Bayesçi regresyon katsayılarından hareketle, optimum yanıtı veren X_2 ve X_3 değişkenlerinin değerleri,

$$\mathbf{X}_{Durağan} = -\frac{1}{2}\widehat{\mathbf{B}}^{-1}\mathbf{b}$$

ve

$$\widehat{\mathbf{B}} = \begin{bmatrix} -11{,}35 & 0 \\ 0 & -10{,}03 \end{bmatrix}, \widehat{\mathbf{B}}^{-1} = \begin{bmatrix} -0{,}08811 & 0 \\ 0 & -0{,}09970 \end{bmatrix}, \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 0{,}61990 \\ -0{,}64800 \end{bmatrix}$$

olmak üzere,

$$\mathbf{X}_{Durağan} = \begin{bmatrix} 0{,}02731 \\ -0{,}03230 \end{bmatrix}$$

şeklinde bulunur. Y yanıt değişkeni için durağan nokta ise,.

$$\hat{Y}_{Durağan} = b_0 + \frac{1}{2}\mathbf{X}'_{\mathbf{Durağan}}\mathbf{b} = 103{,}12$$

şeklinde bulunmuştur.

WINBUGS programı kullanılarak, önsel bilgilerin farklı durumları için sonsal dağılımların beklenen değer ve varyansları ile optimum yanıt değerleri Çizelge 3.4'de verilmiştir.

Çizelge 3.4. Bayesçi regresyonun WINBUGS kullanılarak yanıt yüzeye uygulanması

	$\sigma^2 = 1$								$\sigma^2 = 158{,}7$							
	$\beta_{önsel}$=[100,0,0,-6,-6] $\Sigma_{önsel}$ diagonal 10	**Yanıt**	**$\beta_{önsel}$=[100,0,0,-6,-6] $\Sigma_{önsel}$**diagonal 1	**Yanıt**	**$\beta_{önsel}$=[110,0,0,-6,-6] $\Sigma_{önsel}$**diagonal 10	**Yanıt**	**$\beta_{önsel}$=[110,0,0,-6,-6] $\Sigma_{önsel}$**diagonal 1	**Yanıt**	**$\beta_{önsel}$=[100,0,0,-6,-6] $\Sigma_{önsel}$**diagonal 10	**Yanıt**	**$\beta_{önsel}$=[100,0,0,-6,-6] $\Sigma_{önsel}$**diagonal 1	**Yanıt**	**$\beta_{önsel}$=[110,0,0,-6,-6] $\Sigma_{önsel}$** diagonal 10	**Yanıt**	**$\beta_{önsel}$=[110,0,0,-6,-6] $\Sigma_{önsel}$** diagonal 1	**Yanıt**
$\widehat{\beta_0}$	97,560 * (0,11608) **	**97,66**	97,43000 (0,10131)	**97,52**	97,680 (0,11608)	**97,78**	98,46000 (0,09973)	**98,54**	97,480 (5,574321)	**97,50**	99,14000 (0,89908)	**99,14**	103,100 (5,574321)	**103,12**	108,10000 (0,89908)	**108,1**
$\widehat{\beta_2}$	1,352 (0,06734)		1,26900 (0,06320)		1,352 (0,06734)		1,26900 (0,06275)		0,620 (5,080516)		0,11210 (0,85322)		0,620 (5,080516)		0,11210 (0,85322)	
$\widehat{\beta_3}$	-1,476 (0,06980)		-1,38500 (0,06548)		-1,476 (0,06980)		-1,38800 (0,06528)		-0,648 (5,225796)		-0,09279 (0,88398)		-0,648 (5,225796)		-0,09279 (0,88398)	
$\widehat{\beta_{22}}$	-12,020 (0,06760)		-11,77000 (0,06185)		12,070 (0,06760		-12,19000 (0,06215)		-9,742 (4,566769)		-7,01300 (0,87012)		-11,350 (4,56769)		-7,65600 (0,87012)	
$\widehat{\beta_{33}}$	-9,218 (0,07371)		-9,11300 (0,06744)		-9,268 (0,07371)		-9,54000 (0,06812)		-8,420 (4,669921)		-6,78500 (0,94731)		-10,030 (4,669921)		-7,42800 (0,94731)	

* : Beklenen değer

** :Varyans

$$\hat{Y}_{klasik} = 97{,}58 + 1{,}36X_2 - 1{,}49X_3 - 12{,}06{X_2}^2 - 9{,}23{X_3}^2$$

4. SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu tez çalışmasında, yanıt yüzey metodolojisine Bayesçi lineer regresyon yaklaşımı uygulanması ele alınmış ve örnek bir uygulama problemi kullanılarak bu yaklaşım incelenmiştir. Uygulama probleminde, **çeşitli** önsel dağılımlar ve **iki farklı varyans** varsayımı kullanılarak Bayesçi regresyon tahmin edicileri elde edilmiştir. Bu aşamada, Bayesçi regresyon tahmin edicileri olarak En Küçük Kareler tahmin edicisi, MAP tahmin edicisi ve WINBUGS MCMC tahmin edicisi ele alınmış ve bu tahmin edicilere ilişkin sonsal bilgiler ortaya konmuştur. Elde edilen bu sonsal bilgilere, yanıt yüzey metodolojisi uygulanmış ve ortaya çıkan sonuçların klasik yanıt yüzey metodolojisi kullanılarak elde edilen sonuçlarla karşılaştırılması yapılmıştır. Burada, ele alınan Bayesçi regresyondaki MAP tahmin edicisinin, yanıt yüzeylere uygulanmasına literatürde rastlanmamıştır. Yapılan çalışmalarda, genellikle en küçük kareler tahmin edicisinin kullanıldığı görülmüş ve buradan hareketle MAP tahmin edicisinin nasıl sonuçlar vereceği araştırılmıştır. Her bir durum için elde edilen özet sonuçlar Çizelge 4.1'de verilmiştir.

Çizelge 4.1. Özet sonuçlar

Yanıt (Klasik Yanıt Yüzey)				Bayesçi Regresyon ile Yanıt Yüzey		
	Önsel Beklenen Değer	Önsel Varyans	Varyans	Yanıt (EKK)	Yanıt (MAP)	Yanıt (WINBUGS)
97,68	$\boldsymbol{\beta}_{önsel} = [\mathbf{100, 0, 0 - 6, -6}]$	$\boldsymbol{\Sigma}_{önsel}\ diagonal\ 1$	$\sigma^2 = 158{,}7$	99,16	99,16	99,14
	$\boldsymbol{\beta}_{önsel} = [\mathbf{100, 0, 0 - 6, -6}]$	$\boldsymbol{\Sigma}_{önsel} diagonal\ 10$	$\sigma^2 = 158{,}7$	97,48	97,48	97,5
	$\boldsymbol{\beta}_{önsel} = [\mathbf{110, 0, 0 - 6, -6}]$	$\boldsymbol{\Sigma}_{önsel}\ diagonal\ 1$	$\sigma^2 = 158{,}7$	108,14	108,14	108,1
	$\boldsymbol{\beta}_{önsel} = [\mathbf{110, 0, 0 - 6, -6}]$	$\boldsymbol{\Sigma}_{önsel}\ diagonal\ 10$	$\sigma^2 = 158{,}7$	103,10	103,13	103,12
	$\boldsymbol{\beta}_{önsel} = [\mathbf{100, 0, 0 - 6, -6}]$	$\boldsymbol{\Sigma}_{önsel}\ diagonal\ 1$	$\sigma^2 = 1$	97,52	97,52	97,52
	$\boldsymbol{\beta}_{önsel} = [\mathbf{100, 0, 0 - 6, -6}]$	$\boldsymbol{\Sigma}_{önsel}\ diagonal\ 10$	$\sigma^2 = 1$	97,66	97,66	97,66
	$\boldsymbol{\beta}_{önsel} = [\mathbf{110, 0, 0 - 6, -6}]$	$\boldsymbol{\Sigma}_{önsel}\ diagonal\ 1$	$\sigma^2 = 1$	98,55	98,55	98,54
	$\boldsymbol{\beta}_{önsel} = [\mathbf{110, 0, 0 - 6, -6}]$	$\boldsymbol{\Sigma}_{önsel}\ diagonal\ 10$	$\sigma^2 = 1$	97,78	97,78	97,78

Karşılaştırma sonuçlarına bakıldığında, önsel varyansın ($\boldsymbol{\Sigma}_{\text{önsel}\ diagonal}$) daha küçük olduğu durumlarda, her bir tahmin edici ile elde edilen yanıtların klasik yanıtlara göre genellikle daha büyük olarak ortaya çıktığı görülmüştür. Diğer yandan, önsel beklenen değer ($\boldsymbol{\beta}_{\text{önsel}}$) daha büyük seçildiğinde, her bir tahmin edici için elde edilen yanıtların klasik yanıtlara nazaran büyük olduğu gözlemlenmiştir. Bir başka deyişle, önsel bilginin iyi bir şekilde seçilmesinin önemli olduğu ve doğru seçilmiş bir önsel bilgi kullanılarak çözülmeye çalışılan bir minimum / maksimum yanıt probleminde, klasik yanıt yüzeye göre daha farklı sonuçlara ulaşılabileceği düşünülmektedir.

Yanıt yüzey metodolojisine Bayesçi regresyondaki MAP tahmin edicisinin kullanılmasıyla ortaya atılan yeni yaklaşım bize bu tahmin edici sayesinde literatürde kullanılan diğer tahmin ediciler kadar iyi sonuçlara ulaşılabildiğini göstermiştir. Bunun yanında, bu tez çalışmasında denenmiş olan yeni yaklaşımın çoklu yanıt yüzeyi problemleri gibi diğer konulara uygulanması ve farklı bakış açılarını ortaya çıkarması beklenmektedir.

KAYNAKLAR DİZİNİ

Bayes, T., 1763, “An Essay towards solving a Problem in the Doctrine of Chances. By the late Rev. Mr. Bayes, F. R. S. communicated by Mr. Price, in a letter to John Canton, A. M. F. R. S.", Philosophical Transactions, Giving Some Account of the Present Undertakings, Studies and Labours of the Ingenious in Many Considerable Parts of the World, 53:370–418pp.

Bernardo, J. M., 1979, Reference posterior distributions for Bayesian inference, J. Roy. Statist. Soc. B, 41:113–147pp.

Box, G. E. P., 1954, The exploration and exploitation of response surfaces: Some general considerations and examples, Biometrics, 10:16-60pp.

Box, G. E. P., 1985, Discussion of ‘Off-Line Quality Control, Parameter Design, and the Taguchi Method’ by R.N. Kackar, Journal of Quality Technology, 17:189-190pp.

Box, G.E.P. and Wilson, K.B., 1951, On the experimental attainment of optimum conditions, Journal of the Royal Statistical Society, 13(B):1-45pp.

Box, G. E. P. and Youle, P. V., 1955, The exploration and exploitation of response surfaces: An example of the link between the fitted surface and the basic mechanism of the system, Biometrics, 11:287-323pp.

Chaloner, K., 1984, Optimal Bayesian experimental design for linear models, The Annals of Statistics, 12(1):283-300pp.

Colosimo, B.M and Castillo, E., 2007, Bayesian Process Monitoring, Control and Optimization, Taylor & Francis Group, Newyork, 336p.

Ekici, O., 2005, Bayesyen Regresyon ve WINBUGS ile Bir Uygulama, Yüksek Lisans Tezi, İstanbul Üniversitesi Sosyal Bilimler Enstitüsü, 97s (yayınlanmamış).

Finetti, B., 1937, La Pr´evision: Ses Lois Logiques, Ses Sources Subjectives, Annales de l’Institut Henri Poincar´e, 7:1–68pp.

Goldstein, M., 1976, Approximate Bayes solutions to some nonparametric problems, The Annals of Statistics, 3(2):512-517pp.

Goldstein, M., 1976, Bayesian analysis of regression problems, Biometrika, 63(1):51-58pp.

KAYNAKLAR DİZİNİ (devam)

Gilmour, S. G. and Mead, R., 2003 A Bayesian design criterion for locating the optimum point on a response surface, Statistics & Probability Letters, 64(3):235-242pp.

Hasting, W.K., 1970, Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications, Biometrika, 57(1): 97-109pp.

Hoff, P.D., 2009, A First Course in Bayesian Statistical Methods, Springer, Newyork, 270p.

Jaynes, E. T., 1957, Information theory of statistical mechanics, The Physical Review, 106(4):620-630pp.

Jeffreys, H., 1939, Theory of Probability, The Clarendon Press, Oxford, 470p.

Jeong, I. J., Kim, K.J., and Lin, D.K.J., 2009, Bayesian analysis for weighted mean-squared error in dual response surface optimization, Quality and Reliability Engineering International, 26(5):417-430pp.

Keynes, J. M., 1921, A Treatise on Probability, St Martin's, London, 539p.

Kumar, A., Nair, P.B., Keane, A. J. and Shahpar, S., 2008**,** Robust design using Bayesian Monte Carlo, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 73(11):1497-1517pp.

Köksoy, O. and Doganaksoy, N., 2003, Joint optimization of mean and standart deviation in response surface experimentation, Journal of Quality Technology, 35(3):239-252pp.

Laplace, P. S., 1774, Memoir on the probability of causes of events, Mémoires de Mathématique et de Physique, Tome Sixième, English translation by S. M. Stigler 1986. Statist. Sci., 1(19):364–378pp.

Lin, D.K.J. and Tu, W., 1995, Dual Response Surface, Journal of Quality Technology, 27(1):34-39pp.

Lindley, D.V., 1980, Introduction to Probability and Statistics from a Bayesian Viewpoint, Cambridge University Press, Cambridge, 272p.

KAYNAKLAR DİZİNİ (devam)

Lindley, D.V. and Smith A.F.M., 1972 Bayes estimates for the linear model, Wiley for the Royal Statistical Society, 34(1):1-41pp.

Med, R. and Pike D.J., 1975, A review of response surface methodology from a biometric view point, Biometrics, 31:803-851pp.

Metropolis, N., Rosenbluth, A.W., Rosenbluth, M.N., Teller, A.H. and Teller, E., 1953, Equations of state calculations by fast computing machines, Journal of Chemical Physic, 21(6):1087–1092pp.

Montgomery, D.C., 2001, Design and Analysis of Experiments (5th edition), John Willey & Sons, New York, 656p.

Myers R.H., 1971, Response Surface Methodology, Allyn and Bacon, Inc., Boston, 246p.

Myers R.H and Carter W.H., 1973, Response surface techniques for dual response surface systems, Technometrics, 15:301-317pp.

Myers, R. H., Khuri, A. I., and Vining, G. G., 1992, Response surface alternatives to the Taguchi robust parameter design approach, The American Statistician, 46:131-139pp.

Myers, R.H, Montgomery D.C., and, Cook C.M.A., 2008, Response Surface Methodology Process and Product Optimization Using Design Experiment (3th edition), Wiley, 704p.

Pereira, C., and Stern, J., 2001, On the Bayesianity of Pereira–Stern tests, Sociedad de Estad´ıstica e Investigaci´on Operativa Test, 10(2):291-299pp.

Ramsey, F. P., 1926, “Truth and Probability.” In Ramsey 1978, 58-100pp.

Savage, L. J., 1951, The theory of statistical decision, Journal of the American Statistical Association, 46:55–67pp.

Taguchi, G., 1986, Introduction to Quality Engineering: Designing Quality into Products and Processes, Asian Productivity Organization, available in the USA from American Supplier Institute, Dearborn MI, 191p

KAYNAKLAR DİZİNİ (devam)

Thompson, D., 1982, Response surface experimentation, Journal of Food Processing and Preservation, 6:155-188pp.

Vining, G.G. and Myers R.H., 1990, Combining Taguchi and response surface philosophies: A dual response approach, Journal of Quality Technology, 22(1):38-45pp.

Vaseghi, S., 2000, Advanced Digital Signal Processing and Noise Reduction, Second Edition, John Wiley & Sons, 544p.

Ntzoufras, I., 2009, Bayesian Modeling Using WINBUGS, John Wiley & Sons, 520p.

Zellner, A., 1986, On Assessing Prior Distributions and Bayesian Regression Analysis with g Prior Distributions. In Goel, P.; Zellner, A. Bayesian Inference and Decision Techniques: Essays in Honor of Bruno de Finetti, Studies in Bayesian Econometrics Elsevier, 6:233–243pp.

ÖZGEÇMİŞ

1986 yılında İzmir'de doğan Elif KOZAN, ilk, orta ve lise öğrenimini İzmir'de tamamlamıştır. 2004 yılında Ege Üniversitesi Fen Fakültesi İstatistik Bölümü'ne girmeye hak kazanmış ve 2009 yılında lisans öğrenimini bitirmiştir. Ocak 2014'da Ege Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü İstatistik Anabilim Dalı'nda Yüksek Lisans öğrenimine başlamış ve Ocak 2014'den bu yana Ege Üniversitesi Fen Fakültesi İstatistik Bölümü'nde araştırma görevlisi olarak görev yapmaktadır.

EKLER

Ek 1 Uygulama örneği WINBUGS kodları

Ek 1

Uygulama Örneği ve WINBUGS Kodları

```
model{
#model's likelihood
for (i in 1:n) {
growth[i]~dnorm(mu[i],1) # stochastic component
#link and linear predictor
mu[i]<-beta0+beta1*x2[i]+beta2*x3[i]+beta3*x2kare[i]+beta4*x3kare[i]
}
#prior distributions

beta0~dnorm(100,0.1)
beta1~ dnorm (0,0.1)
beta2~ dnorm (0,0.1)
beta3~ dnorm (-6,0.1)
beta4~ dnorm (-6,0.1)

#definition of sigma
s2<-1
s<-sqrt(s2)
#calculation of the sample variance
for (i in 1:n) { c.growth[i]<-growth[i]-mean(growth[ ])}
sy2<-inprod(c.growth[ ], c.growth[ ])/(n-1)
#calculation of bayesian version R squared
R2B<-1-s2/sy2
#expected y
typical.y<-beta0+beta1*mean(x2[ ])+beta2*mean(x3[ ])+beta3* mean(x2kare[ ])+beta4*mean(x3kare[ ])
}
INITS

list(beta0=0,beta1=0,beta2=0,beta3=0,beta4=0)
DATA (LIST)
list(n=20,
        growth=c(66,70,78,60,80,70,100,75,100,80,68,63,65,82,113,100,118,88,100,85),x2=c(-1,-1,1,1,-1,-
1,1,1,0,0,-1.682,1.682,0,0,0,0,0,0,0,0),x3=c(-1,1,-1,1,-1,1,-1,1,0,0,0,0,-
1.682,1.682,0,0,0,0,0,0),x2kare=c(1,1,1,1,1,1,1,1,0,0,2.829124,2.829124,0,0,0,0,0,0,0,0),
x3kare=c(1,1,1,1,1,1,1,1,0,0,0,0,2.829124,2.829124,0,0,0,0,0,0))
```

```
model{
#model's likelihood
for (i in 1:n) {
growth[i]~dnorm(mu[i],1) # stochastic component
#link and linear predictor
mu[i]<-beta0+beta1*x2[i]+beta2*x3[i]+beta3*x2kare[i]+beta4*x3kare[i]
}
#prior distributions

beta0~dnorm(100,1)
beta1~ dnorm (0,1)
beta2~ dnorm (0,1)
beta3~ dnorm (-6,1)
beta4~ dnorm (-6,1)

#definition of sigma
s2<-1
s<-sqrt(s2)
#calculation of the sample variance
for (i in 1:n) { c.growth[i]<-growth[i]-mean(growth[ ])}
sy2<-inprod(c.growth[ ], c.growth[ ])/(n-1)
```

```
#calculation of bayesian version R squared
R2B<-1-s2/sy2
#expected y
typical.y<-beta0+beta1*mean(x2[ ])+beta2*mean(x3[ ])+beta3* mean(x2kare[ ])+beta4*mean(x3kare[ ])
}
INITS

list(beta0=0,beta1=0,beta2=0,beta3=0,beta4=0)
DATA (LIST)
list(n=20,
        growth=c(66,70,78,60,80,70,100,75,100,80,68,63,65,82,113,100,118,88,100,85),x2=c(-1,-1,1,1,-1,-
1,1,1,0,0,-1.682,1.682,0,0,0,0,0,0,0,0),x3=c(-1,1,-1,1,-1,1,-1,1,0,0,0,0,-
1.682,1.682,0,0,0,0,0,0),x2kare=c(1,1,1,1,1,1,1,1,0,0,2.829124,2.829124,0,0,0,0,0,0,0,0),
x3kare=c(1,1,1,1,1,1,1,1,0,0,0,0,2.829124,2.829124,0,0,0,0,0,0))
```

```
model{
#model's likelihood
for (i in 1:n) {
growth[i]~dnorm(mu[i],1) # stochastic component
#link and linear predictor
mu[i]<-beta0+beta1*x2[i]+beta2*x3[i]+beta3*x2kare[i]+beta4*x3kare[i]
}
#prior distributions

beta0~dnorm(110,0.1)
beta1~dnorm(0,0.1)
beta2~dnorm(0,0.1)
beta3~dnorm(-6,0.1)
beta4~dnorm(-6,0.1)

#definition of sigma
s2<-1
s<-sqrt(s2)
#calculation of the sample variance
for (i in 1:n) { c.growth[i]<-growth[i]-mean(growth[ ])}
sy2<-inprod(c.growth[ ], c.growth[ ])/(n-1)
#calculation of bayesian version R squared
R2B<-1-s2/sy2
#expected y
typical.y<-beta0+beta1*mean(x2[ ])+beta2*mean(x3[ ])+beta3* mean(x2kare[ ])+beta4*mean(x3kare[ ])
}
INITS

list(beta0=0,beta1=0,beta2=0,beta3=0,beta4=0)
DATA (LIST)
list(n=20,
        growth=c(66,70,78,60,80,70,100,75,100,80,68,63,65,82,113,100,118,88,100,85),x2=c(-1,-1,1,1,-1,-
1,1,1,0,0,-1.682,1.682,0,0,0,0,0,0,0,0),x3=c(-1,1,-1,1,-1,1,-1,1,0,0,0,0,-
1.682,1.682,0,0,0,0,0,0),x2kare=c(1,1,1,1,1,1,1,1,0,0,2.829124,2.829124,0,0,0,0,0,0,0,0),
x3kare=c(1,1,1,1,1,1,1,1,0,0,0,0,2.829124,2.829124,0,0,0,0,0,0))
```

```
model{
#model's likelihood
for (i in 1:n) {
growth[i]~dnorm(mu[i],1) # stochastic component
#link and linear predictor
mu[i]<-beta0+beta1*x2[i]+beta2*x3[i]+beta3*x2kare[i]+beta4*x3kare[i]
}
#prior distributions

beta0~dnorm(110,1)
beta1~ dnorm (0,1)
```

```
beta2~ dnorm (0,1)
beta3~ dnorm (-6,1)
beta4~ dnorm (-6,1)

#definition of sigma
s2<-1
s<-sqrt(s2)
#calculation of the sample variance
for (i in 1:n) { c.growth[i]<-growth[i]-mean(growth[ ])}
sy2<-inprod(c.growth[ ], c.growth[ ])/(n-1)
#calculation of bayesian version R squared
R2B<-1-s2/sy2
#expected y
typical.y<-beta0+beta1*mean(x2[ ])+beta2*mean(x3[ ])+beta3* mean(x2kare[ ])+beta4*mean(x3kare[ ])
}
INITS

list(beta0=0,beta1=0,beta2=0,beta3=0,beta4=0)
DATA (LIST)
list(n=20,
        growth=c(66,70,78,60,80,70,100,75,100,80,68,63,65,82,113,100,118,88,100,85),x2=c(-1,-1,1,1,-1,-
1,1,1,0,0,-1.682,1.682,0,0,0,0,0,0,0,0),x3=c(-1,1,-1,1,-1,1,-1,1,0,0,0,0,-
1.682,1.682,0,0,0,0,0,0),x2kare=c(1,1,1,1,1,1,1,1,0,0,2.829124,2.829124,0,0,0,0,0,0,0,0),
x3kare=c(1,1,1,1,1,1,1,1,0,0,0,0,2.829124,2.829124,0,0,0,0,0,0))
```

```
model{
#model's likelihood
for (i in 1:n) {
growth[i]~dnorm(mu[i],0,0063) # stochastic component
#link and linear predictor
mu[i]<-beta0+beta1*x2[i]+beta2*x3[i]+beta3*x2kare[i]+beta4*x3kare[i]
}
#prior distributions

beta0~dnorm(100,0.1)
beta1~ dnorm (0,0.1)
beta2~ dnorm f(0,0.1)
beta3~ dnorm (-6,0.1)
beta4~dnorm (-6,0.1)

#definition of sigma
s2<-158.7
s<-sqrt(s2)
#calculation of the sample variance
for (i in 1:n) { c.growth[i]<-growth[i]-mean(growth[ ])}
sy2<-inprod(c.growth[ ], c.growth[ ])/(n-1)
#calculation of bayesian version R squared
R2B<-1-s2/sy2
#expected y
typical.y<-beta0+beta1*mean(x2[ ])+beta2*mean(x3[ ])+beta3* mean(x2kare[ ])+beta4*mean(x3kare[ ])
}
INITS

list(beta0=0,beta1=0,beta2=0,beta3=0,beta4=0)
DATA (LIST)
list(n=20,
        growth=c(66,70,78,60,80,70,100,75,100,80,68,63,65,82,113,100,118,88,100,85),x2=c(-1,-1,1,1,-1,-
1,1,1,0,0,-1.682,1.682,0,0,0,0,0,0,0,0),x3=c(-1,1,-1,1,-1,1,-1,1,0,0,0,0,-
1.682,1.682,0,0,0,0,0,0),x2kare=c(1,1,1,1,1,1,1,1,0,0,2.829124,2.829124,0,0,0,0,0,0,0,0),
x3kare=c(1,1,1,1,1,1,1,1,0,0,0,0,2.829124,2.829124,0,0,0,0,0,0))
```

```
model{
#model's likelihood
for (i in 1:n) {
growth[i]~dnorm(mu[i],0.0063) # stochastic component
#link and linear predictor
mu[i]<-beta0+beta1*x2[i]+beta2*x3[i]+beta3*x2kare[i]+beta4*x3kare[i]
}
#prior distributions

beta0~dnorm(100,1)
beta1~ dnorm (0,1)
beta2~ dnorm (0,1)
beta3~ dnorm (-6,1)
beta4~ dnorm (-6,1)

#definition of sigma
s2<-158.7
s<-sqrt(s2)
#calculation of the sample variance
for (i in 1:n) { c.growth[i]<-growth[i]-mean(growth[ ])}
sy2<-inprod(c.growth[ ], c.growth[ ])/(n-1)
#calculation of bayesian version R squared
R2B<-1-s2/sy2
#expected y
typical.y<-beta0+beta1*mean(x2[ ])+beta2*mean(x3[ ])+beta3* mean(x2kare[ ])+beta4*mean(x3kare[ ])
}
INITS

list(beta0=0,beta1=0,beta2=0,beta3=0,beta4=0)
DATA (LIST)
list(n=20,
        growth=c(66,70,78,60,80,70,100,75,100,80,68,63,65,82,113,100,118,88,100,85),x2=c(-1,-1,1,1,-1,-
1,1,1,0,0,-1.682,1.682,0,0,0,0,0,0,0,0),x3=c(-1,1,-1,1,-1,1,-1,1,0,0,0,0,-
1.682,1.682,0,0,0,0,0,0),x2kare=c(1,1,1,1,1,1,1,1,0,0,2.829124,2.829124,0,0,0,0,0,0,0,0),
x3kare=c(1,1,1,1,1,1,1,1,0,0,0,0,2.829124,2.829124,0,0,0,0,0,0))
```

```
model{
#model's likelihood
for (i in 1:n) {
growth[i]~dnorm(mu[i],0.0063) # stochastic component
#link and linear predictor
mu[i]<-beta0+beta1*x2[i]+beta2*x3[i]+beta3*x2kare[i]+beta4*x3kare[i]
}
#prior distributions

beta0~dnorm(110,0.1)
beta1~ dnorm (0,0.1)
beta2~ dnorm (0,0.1)
beta3~ dnorm (-6,0.1)
beta4~ dnorm -6,0.1)

#definition of sigma
s2<-158.7
s<-sqrt(s2)
#calculation of the sample variance
for (i in 1:n) { c.growth[i]<-growth[i]-mean(growth[ ])}
sy2<-inprod(c.growth[ ], c.growth[ ])/(n-1)
#calculation of bayesian version R squared
R2B<-1-s2/sy2
#expected y
typical.y<-beta0+beta1*mean(x2[ ])+beta2*mean(x3[ ])+beta3* mean(x2kare[ ])+beta4*mean(x3kare[ ])
}
INITS

list(beta0=0,beta1=0,beta2=0,beta3=0,beta4=0)
DATA (LIST)
list(n=20,
        growth=c(66,70,78,60,80,70,100,75,100,80,68,63,65,82,113,100,118,88,100,85),x2=c(-1,-1,1,1,-1,-
1,1,1,0,0,-1.682,1.682,0,0,0,0,0,0,0,0),x3=c(-1,1,-1,1,-1,1,-1,1,0,0,0,0,-
```

1.682,1.682,0,0,0,0,0,0),x2kare=c(1,1,1,1,1,1,1,1,0,0,2.829124,2.829124,0,0,0,0,0,0,0,0),

x3kare=c(1,1,1,1,1,1,1,1,0,0,0,0,2.829124,2.829124,0,0,0,0,0,0))

```
model{
#model's likelihood
for (i in 1:n) {
growth[i]~dnorm(mu[i],0.0063) # stochastic component
#link and linear predictor
mu[i]<-beta0+beta1*x2[i]+beta2*x3[i]+beta3*x2kare[i]+beta4*x3kare[i]
}
#prior distributions

beta0~dnorm(110,1)
beta1~ dnorm (0,1)
beta2~dnorm (0,1)
beta3~ dnorm (-6,1)
beta4~ dnorm (-6,1)

#definition of sigma
s2<-158.7
s<-sqrt(s2)
#calculation of the sample variance
for (i in 1:n) { c.growth[i]<-growth[i]-mean(growth[ ])}
sy2<-inprod(c.growth[ ], c.growth[ ])/(n-1)
#calculation of bayesian version R squared
R2B<-1-s2/sy2
#expected y
typical.y<-beta0+beta1*mean(x2[ ])+beta2*mean(x3[ ])+beta3* mean(x2kare[ ])+beta4*mean(x3kare[ ])
}
INITS

list(beta0=0,beta1=0,beta2=0,beta3=0,beta4=0)
DATA (LIST)
list(n=20,
        growth=c(66,70,78,60,80,70,100,75,100,80,68,63,65,82,113,100,118,88,100,85),x2=c(-1,-1,1,1,-1,-
1,1,1,0,0,-1.682,1.682,0,0,0,0,0,0,0,0),x3=c(-1,1,-1,1,-1,1,-1,1,0,0,0,0,-
1.682,1.682,0,0,0,0,0,0),x2kare=c(1,1,1,1,1,1,1,1,0,0,2.829124,2.829124,0,0,0,0,0,0,0,0),
x3kare=c(1,1,1,1,1,1,1,1,0,0,0,0,2.829124,2.829124,0,0,0,0,0,0))
```