BÖLÜM 6

EN KÜÇÜK KARELER GEOMETRİSİ

GİRİŞ

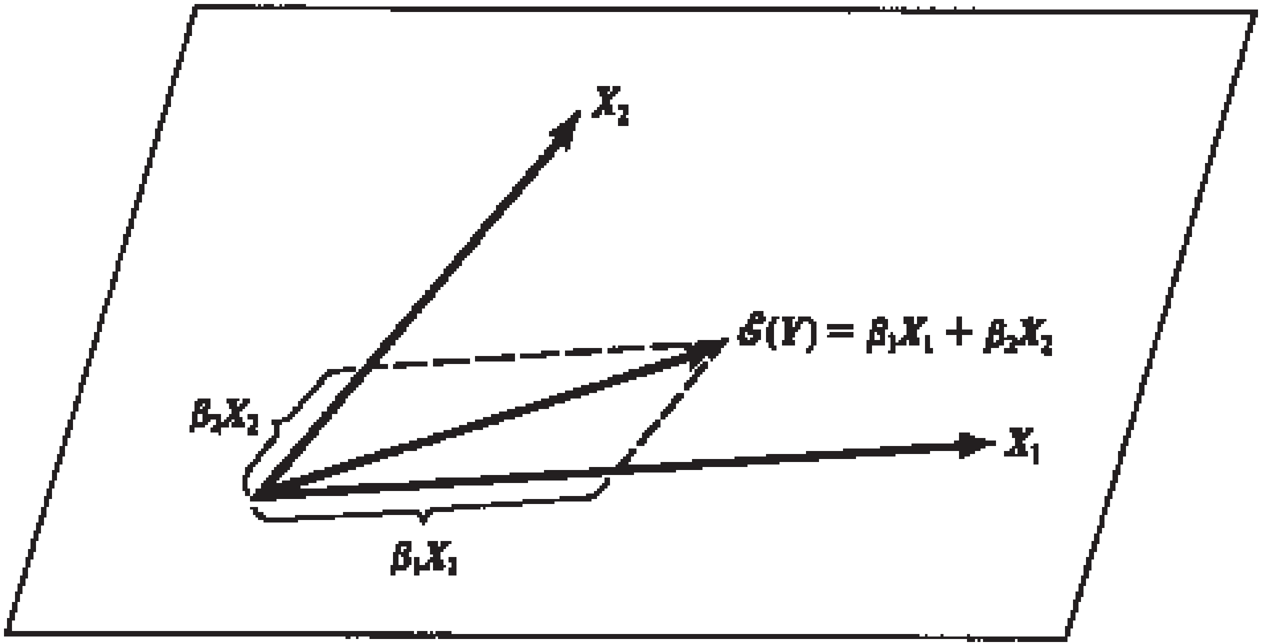
- Sıradan en küçük karelere ilişkin bütün kavramlar, geometrinin birkaç prensibinin uygulanmasıyla görselleştirilebilirler.

- Birçok insan en küçük kareler kavramının anlaşılmasında geometrik yorumları karmaşık cebirsel denklemlerden daha faydalı bulur.

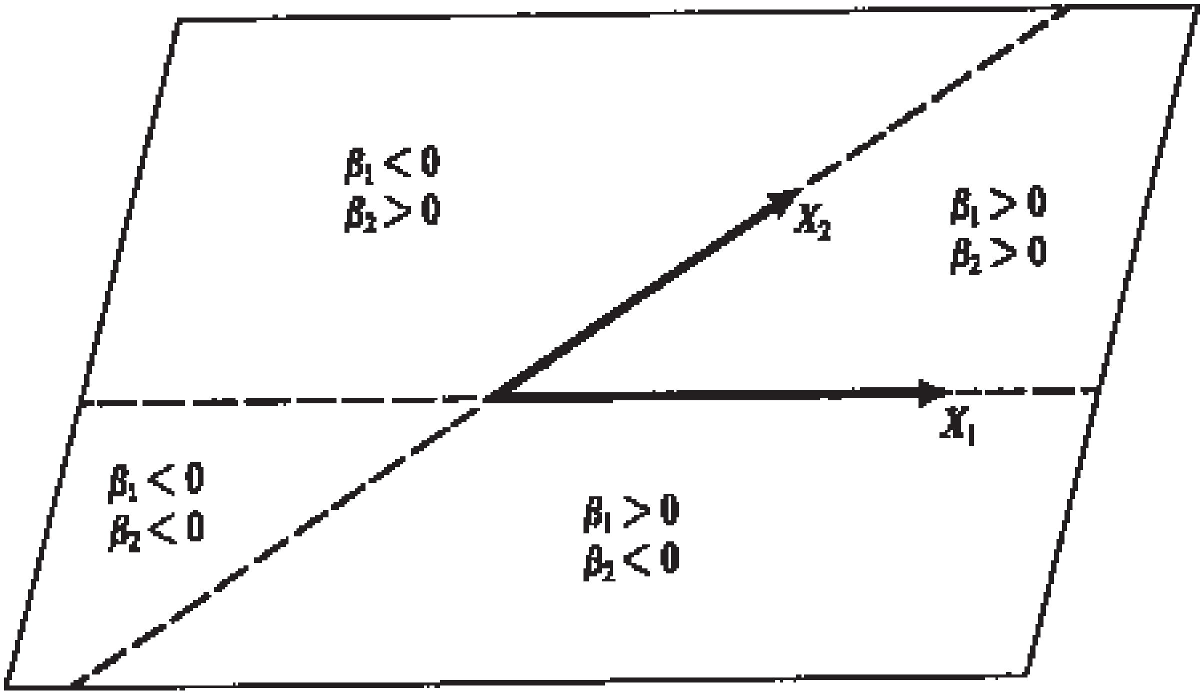
- Kısmi regresyon katsayıları, kareler toplamları, serbestlik dereceleri ve sıradan en küçük karelere ilişkin birçok özellik ve problem vektör geometrisinde doğrudan bir görsel karşılığa sahiptir.

DOĞRUSAL MODEL VE ÇÖZÜMÜ

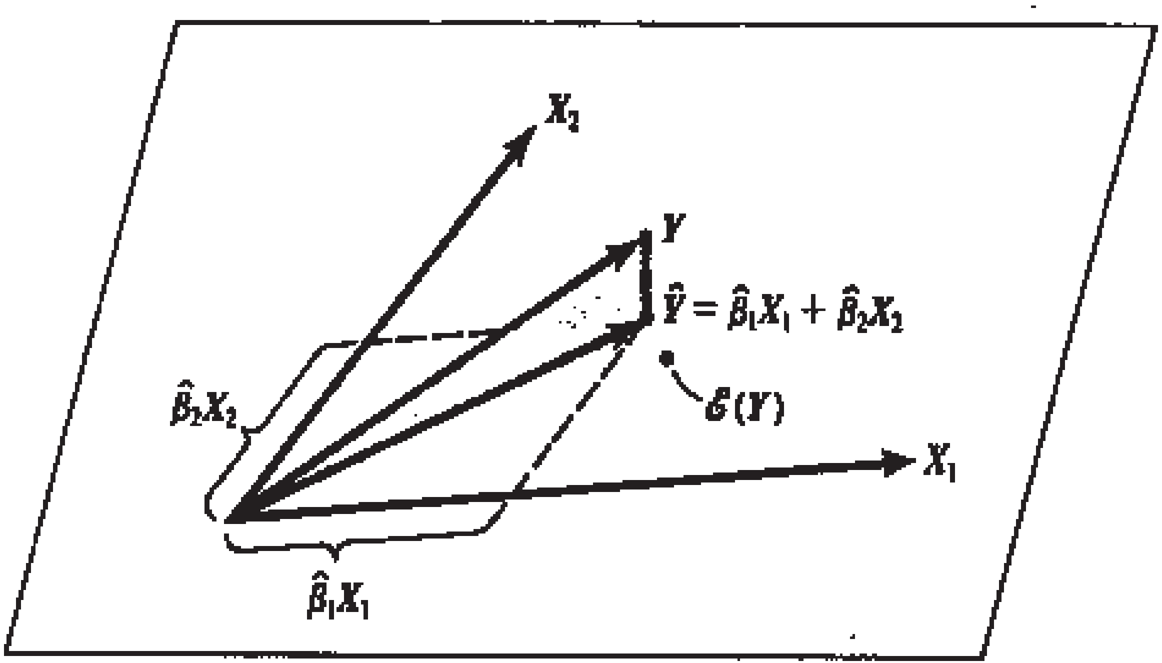
En küçük karelerin geometrik yorumunda, $\boldsymbol{X}$ matrisi p' kolon vektörünün birleşimi olarak gösterilmektedir. Bu bölümde yer alan $\boldsymbol{X}$'in kolon vertörlerinin doğrusal olarak bağımsız ($\boldsymbol{X}$'te yer alabilecek olan herhangi bir doğrusal bağımlılık ortadan kaldırılmıştır) oldukları varsayılmaktadır. $\boldsymbol{X}$'in her kolonu, n-boyutlu uzayda bir vektör olarak çizilebilir (bk. Kısım 2.4). Yani, her kolon vektöründe yer alan n tane öğe, n-boyutlu uzayda çizilecek vektörün uç noktalarını belirlemek için gerekli olan koordinatları sağlar. p' vektörü çizildikeri n-boyutlu uzayın p'-boyutlu bir alt uzayını tanımlarlar ($p' < n$). Bu p'-boyutlu alt uzay, $\boldsymbol{X}$ matrisine ait p' vektörlerinin *doğrusal* fonksiyonları ile elde edilebilen noktalar kümesinden oluşur. Bu alt uzaya **$\boldsymbol{X}$-uzayı** denir. ($\boldsymbol{X}$'in vektörleri doğrusal olarak bağımsız olmadığı durumda $\boldsymbol{X}$-uzayının boyutu $\boldsymbol{X}$'in rankı ile belirlenir.)



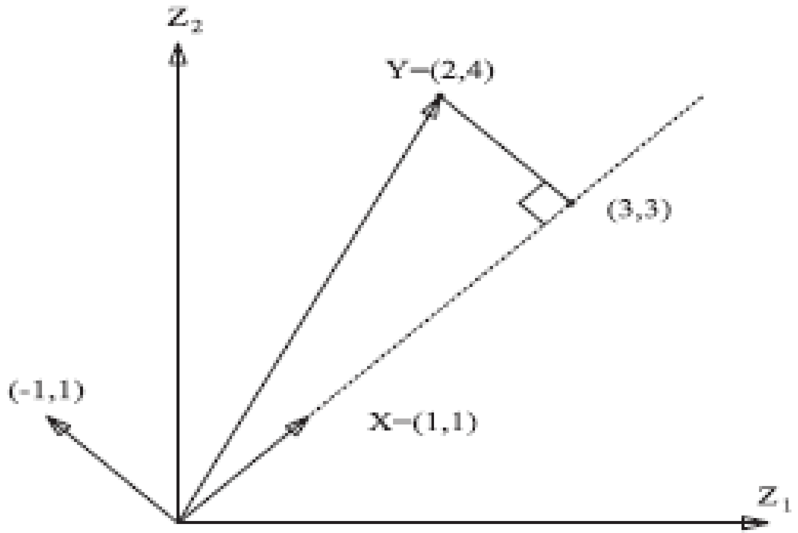
ŞEKİL 6.1. $\mathcal{E}(\boldsymbol{Y})$ *nin* $\boldsymbol{X}_1$ *ve* $\boldsymbol{X}_2$ *nin doğrusal fonksiyonu olarak geometriksel yorumu. Düzlem iki bağımsız vektör tarafından tanımlanan uzayı temsil etmektedir.* $\mathcal{E}(\boldsymbol{Y})$ *vektörü* $\beta_1 \boldsymbol{X}_1$ *ve* $\beta_2 \boldsymbol{X}_2$ *toplamı olarak gösterilir.*



ŞEKİL 6.2. *$\mathcal{E}(\boldsymbol{Y})$ gösterilen bölgeye düştüğünde β_1 ve β_2 nin aldığı işaretlere göre iki boyutlu X-uzayının bölünmesi.*



ŞEKİL 6.3. *$\boldsymbol{Y}$ ve $\widehat{\boldsymbol{Y}}$ in X-uzayı ile geometrik ilişkisi. $\boldsymbol{Y}$, $\boldsymbol{X}_1$ ve $\boldsymbol{X}_2$ tarafından tanımlanan uzayda değildir. $\boldsymbol{Y}$ nin düzleme dik izdüşümü düzlemde olan $\widehat{\boldsymbol{Y}}$ vektörünü tanımlar. Tahmin edilen regresyon katsayısı toplandığında $\widehat{\boldsymbol{Y}}$ i veren $\boldsymbol{X}_1$ ve $\boldsymbol{X}_2$ oranıdır. $\widehat{\boldsymbol{Y}}$ i $\boldsymbol{Y}$ ye bağlayan kısa vektör, artıklar $\boldsymbol{e}$ vektörüdür.*



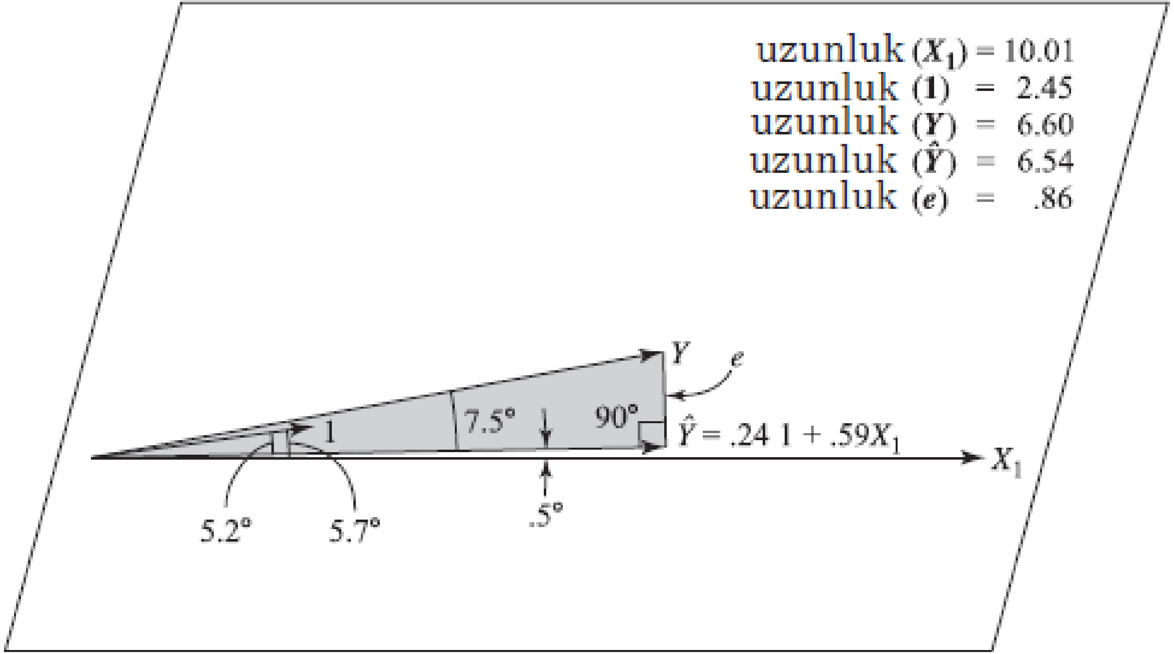
ŞEKİL 6.4. *Örnek 6.2. deki regresyonun geometrik yorumu*

KARELER TOPLAMLARI VE SERBESTLİK DERECELERİ

İki-boyutlu uzaydaki Pisagor teoremine göre dik üçgenin hipotenüs uzunluğu, üçgenin kenarlarının karelerinin toplamının kareköküdür. Kısım 2.4'te bu durum n-boyuta genişletilmiştir. Yani herhangi bir vektörün uzunluğu *bütün* elemanlarının karelerinin toplamının kareköküdür. Böylece, $\boldsymbol{Y}'\boldsymbol{Y}$, yanıt değişkeninin düzeltilmemiş kareler toplamı, $\boldsymbol{Y}$ vektörünün uzunluğunun karesidir.

$\boldsymbol{Y}$, $\widehat{\boldsymbol{Y}}$ ve $\boldsymbol{e}$ vektörleri $\boldsymbol{Y}$'nin hipotenüs olduğu bir dik açı oluştururlar (Şekil 6.3). Üçgenin bir kenarı olan $\widehat{\boldsymbol{Y}}$, X-uzayında yer alır ve diğer kenarı $\boldsymbol{e}$ ise X-uzayına diktir. Pisagor teoremine göre $\boldsymbol{Y}$'nin uzunluğu $\widehat{\boldsymbol{Y}}$ ve $\boldsymbol{e}$ cinsinden açıklanabilir:

$$\text{uzunluk}\,(\boldsymbol{Y}) = \sqrt{[\text{uzunluk}(\widehat{\boldsymbol{Y}})]^2 + [\text{uzunluk}\,(\boldsymbol{e})]^2}.$$



ŞEKİL 6.5. *Vücut ağırlığı kilogramları (X_1) üzerine dinlenirkenki kalp artış hızı (Y) nin regresyonunun geometrik yorumu. Şekildeki düzlem* $\mathbf{1}$ *ve* $\boldsymbol{X}_1$ *tarafından tanımlanan* X*-uzayıdır. Veri, Örnek 1.4'ten* $\frac{1}{20}$ *ile ölçeklendirilen* $\boldsymbol{X}_1$ *ve* $\boldsymbol{Y}$ *dir. Vektörler arasındaki açılar derece cinsinden gösterilmektedir.* $\boldsymbol{Y}$ *7.5 derece açıyla düzlemden çıkmıştır.* $\boldsymbol{Y}$ *nin düzleme dik izdüşümü* $\mathbf{1}$ *ile 5.2 derece ve* $\boldsymbol{X}_1$ *ile 5 derece açı yapan* $\widehat{\boldsymbol{Y}}$ *i tanımlar.*

YENİDEN PARAMETRELEME

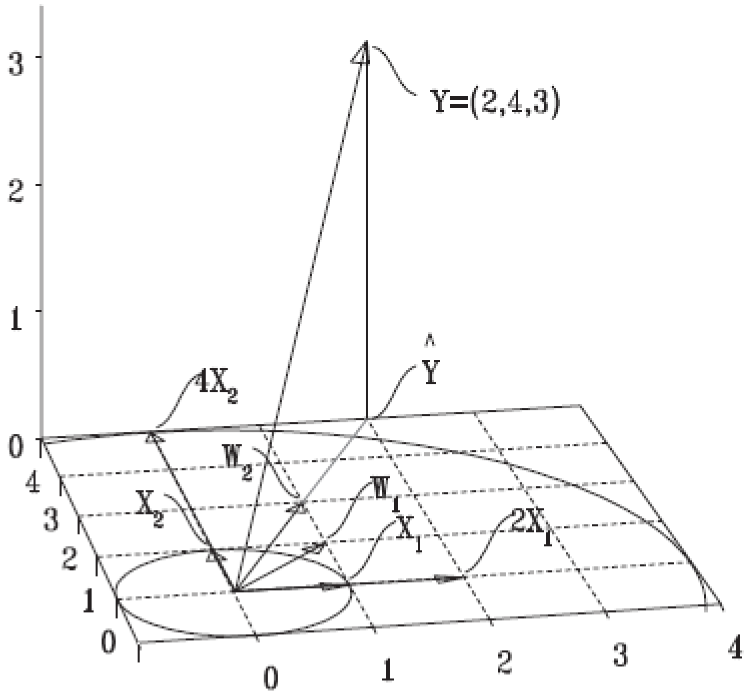
$$\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{X\beta} + \boldsymbol{\epsilon}. \tag{6.5}$$

modelini düşünün. C matrisi $p' \times p'$ tekil olmayan bir matris olsun. O halde denklem 6.5'te yer alan model

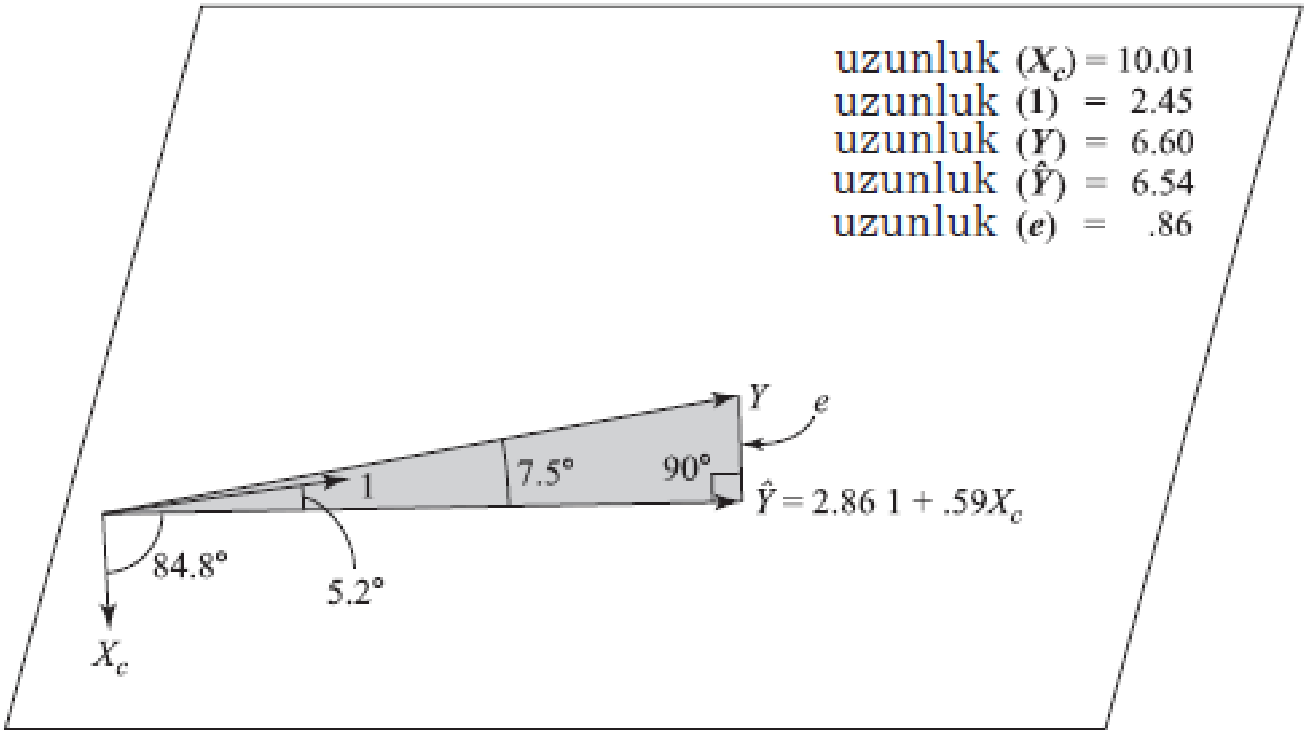
$$\begin{aligned} \boldsymbol{Y} &= \boldsymbol{XCC}^{-1}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon} \\ &= \boldsymbol{W\alpha} + \boldsymbol{\epsilon}, \end{aligned} \tag{6.6}$$

şeklinde tekrar yazabiliriz.

Burada $\boldsymbol{W} = \boldsymbol{XC}$ ve $\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{\beta}$ dir. Burada, Denklem 6.6'daki model Denklem 6.5'teki modelin *yeniden parametrelendirmesidir*. $\boldsymbol{C}$ tekil olmadığı için W-uzayı ve $\boldsymbol{W}$'nun p' kolonu tarafından kapsanan p'-boyutlu alt uzayı, X-uzayı ile aynıdır. $\widehat{\boldsymbol{Y}}$'in X-uzayında $\boldsymbol{Y}$'ye en yakın nokta olduğu ve $\widehat{\boldsymbol{Y}} = \boldsymbol{PY} = \boldsymbol{P}_X\boldsymbol{Y}$ olduğu unutulmamalıdır. X alt simgesi X'e bağlı izdüşüm matrisini tanımlamaktadır ve $\boldsymbol{P}_X = \boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}'$. W-uzayı, X-uzayı ile aynı olduğu için $\widehat{\boldsymbol{Y}} = \boldsymbol{P}_W\boldsymbol{Y}$ve $\boldsymbol{P}_W = \boldsymbol{W}(\boldsymbol{W}'\boldsymbol{W})^{-1}\boldsymbol{W}' = \boldsymbol{P}_X$ dir (bk. Örnek 6.9).



ŞEKİL 6.6. *$\boldsymbol{Y}$ nin $\boldsymbol{X}_1$ ve $\boldsymbol{X}_2$ tarafından kapsanan iki-boyutlu uzaya izdüşümü. $\widehat{\boldsymbol{Y}}$ $2\boldsymbol{X}_1$ ve $4\boldsymbol{X}_2$ nin toplamına eşittir. Grafiğin tabanındaki herhangi diğer iki vektör, örneğin $\boldsymbol{W}_1$ ve $\boldsymbol{W}_2$, $\boldsymbol{X}_1$ ve $\boldsymbol{X}_2$nin doğrusal kombinasyonu olacaktır ve aynı uzayı tanımlayacaktır. Yhat ayrıca $\boldsymbol{W}_1$ ve $\boldsymbol{W}_2$ nin doğrusal fonksiyonu olarak elde edilir. $\widehat{\boldsymbol{Y}} = 0\boldsymbol{W}_1 + 2\boldsymbol{W}_2$.*



ŞEKİL 6.7. *Merkezleştirilmiş değişken (X_c) kullanarak vücut ağırlığı kilogramı üzerine dinlenirkenki kalp atış hızı regresyonun geometrik yorumu. Şekildeki düzlem* **1** *ve* $\boldsymbol{X}_1$ *tarafından tanımlanmaktadır.*

SIRALI REGRESYON

Denklem 6.4'te $\boldsymbol{Y}$ için toplam *düzeltilmemiş* kareler toplamının parçalanması verilmişti. Genelde bizim de ilgilendiğimiz toplam *düzeltilmiş* kareler toplamının parçalanmasıdır. Düzeltilmiş kareler toplamının parçalanması ortalamaya atanan kareler toplamının, ya da düzeltme faktörünün, hem $\boldsymbol{Y}'\boldsymbol{Y}$'den ve hem de SS(Model)'den çıkarılmasıyla elde edilir.

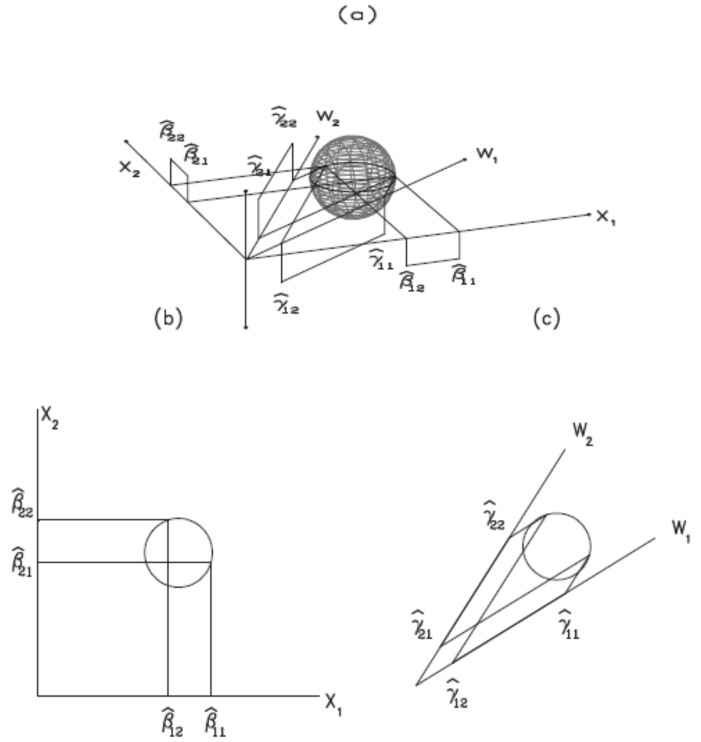
$$\begin{aligned} \boldsymbol{Y}'\boldsymbol{Y} - \mathrm{SS}(\mu) &= [\mathrm{SS}(\mathrm{Model}) - \mathrm{SS}(\mu)] + \boldsymbol{e}'\boldsymbol{e} \\ &= \mathrm{SS}(\mathrm{Regr}) + \boldsymbol{e}'\boldsymbol{e}. \end{aligned} \tag{6.7}$$

DOĞRUSAL BAĞLANTI PROBLEMİ

- Herhangi bir bağımsız değişkenin kısmi regresyon katsayısı ve kısmi kareler toplamı genelde modeldeki diğer değişkenlere bağımlıdır.

- Bölüm 5'teki bir durum çalışmasında gösterildiği gibi regresyon katsayılarındaki ve kareler toplamlarındaki değişimin diğer değişkenler modele eklendikçe ya da modelden çıkarıldıkça büyük olabilmektedir.

- Regresyon sonuçlarının modeldeki her değişkenin diğer değişkenlere olan bu bağımlılığı, ortak (mutual) ortogonal olmayan bağımsız değişkenlerden çıkarılabilir.



ŞEKİL 6.8. *Doğrusallığın kısmi regresyon katsayılarının kararlılığı üzerine etkisinin örneklenmesi. Düzlemin merkezinde bulunan karalanmış küredeki noktalar [panel (a)] üç-boyutlu $\boldsymbol{Y}$ vektöründeki populasyonun %95 ini temsil eder. $\mathcal{E}(\boldsymbol{Y})$, kürenin ve bütün $\boldsymbol{Y}$ lerin ya ortagonal $\boldsymbol{X}_1$ ve $\boldsymbol{X}_2$ vektörleri ya da ortagonal olmayan (birşekilde doğrusal) $\boldsymbol{W}_1$ ve $\boldsymbol{W}_2$ vektörleri tarafından kapsanan iki-boyutlu düzleme izdüşümlerinin çemberinin merkezindedir. Çemberin zıt taraflarında bulunan noktalar iki bağımsız $\boldsymbol{Y}$ nin izdüşümü olan $\widehat{Y}_1$ ve $\widehat{Y}_2$ i temsil eder. Her $\widehat{\boldsymbol{Y}}$ i iki vektör kümesine bağlayan paralelkenarlar ortagonal vektör çifti [panel (b)] ve ortagonal olmayan vektör çifti [panel (c)] için kısmi regresyon katsayılarının göreceli büyüklüklerini gösterir.*