2. HAFTA

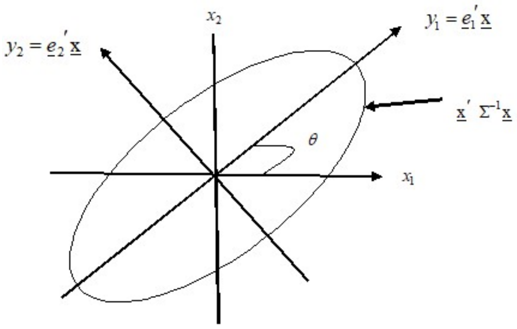
Çok Değişkenli Normallik Varsayımı Durumunda Temel Bileşenler

Çok değişkenli normallik varsayımı altında da temel bileşenler elde edilebilir. $\underline{X} \sim N_p(\underline{\mu}, \Sigma)$ olsun. Bu durumda $\underline{\mu}$ merkezli $(\underline{x}-\underline{\mu})' \Sigma^{-1}(\underline{x}-\underline{\mu}) = c^2$ sabit yoğunluk elipsleri eksenleri $\pm c\sqrt{\lambda_i}\,\underline{e}_i$ dir, burada $(\lambda_i, \underline{e}_i)$ ' ler $\mathbf{\Sigma}$ nın özdeğer ve birim özvektör çiftleridir. Elipsoidin i inci ekseni yer alan bir nokta, eksenleri $x_1, x_2, \ldots, x_p$ ve orjini $\underline{\mu}$ olan koordinat sisteminde $\underline{e}_i' = (e_{1i}, e_{2i}, \ldots, e_{pi})$ ' ye orantılı koordinatlara sahip olacaktır. $\underline{\mu} = \underline{0}$ alınırsa,

$$
\begin{aligned}
c^2 &= \underline{x}' \Sigma^{-1} \underline{x} \\
&= \frac{1}{\lambda_1}(\underline{e}_1' \underline{x})^2 + \frac{1}{\lambda_2}(\underline{e}_2' \underline{x})^2 + \ldots + \frac{1}{\lambda_p}(\underline{e}_p' \underline{x})^2
\end{aligned}
$$

biçiminde yazılır, burada $\underline{e}_1' \underline{x}$, $\underline{e}_2' \underline{x}$, ... , $\underline{e}_p' \underline{x}$ ' ler $\underline{x}$ in temel bileşenleri gibi tanımlanabilir. $y_1 = \underline{e}_1' \underline{x}$, $y_2 = \underline{e}_2' \underline{x}$, ... , $y_p = \underline{e}_p' \underline{x}$ alınırsa $c^2 = \frac{1}{\lambda_1}(y_1)^2 + \frac{1}{\lambda_2}(y_2)^2 + \ldots + \frac{1}{\lambda_p}(y_p)^2$ olur ve bu denklem $\underline{e}_1, \underline{e}_2, \ldots, \underline{e}_p$ ' nin yönleri boyunca $y_1, y_2, \ldots, y_p$ eksenli koordinat sisteminde bir elipsoiddir. Eğer λ_1 en büyük özdeğer ise büyük eksen $\underline{e}_1$ boyunca uzanır ve geriye kalan küçük eksenler $\underline{e}_2, \ldots, \underline{e}_p$ ile tanımlanan yönler boyunca uzanırlar. $\underline{\mu} = \underline{0}$ ve $\rho_{X_1, X_2} = 0.75$ olan iki değişkenli normal rasgele vektör için sabit yoğunluk elipsi ve temel bileşenler aşağıdaki şekilde gösterilmiştir. Temel bileşenler sabit yoğunluk elipsinin eksenleri ile çakışana kadar orijinal koordinat eksenlerinin bir θ açısıyla döndürülmesiyle elde

edilir.



Standartlaştırılmış Değişkenlerden Temel Bileşenlerin Elde Edilmesi

$\underline{X}' = (X_1, X_2, ..., X_p)$ rasgele vektörünün bileşenlerinin ölçü birimleri farklı ise, temel bileşenlerin ölçü biriminden etkisini arındırmak için değişkenlerin standartlaştırılması gerekir. $\underline{X}' = (X_1, X_2, ..., X_p)$ rasgele vektörünün bileşenlerinin standartlaştırılmış vektörü $\underline{Z}' = (Z_1, Z_2, ..., Z_p)$ dir. Burada $Z_i = \dfrac{(X_i - \mu_i)}{\sqrt{\sigma_{ii}}}$; $i = 1, ..., p$ dir. Matris gösterimiyle $\underline{Z} = (V^{1/2})^{-1}(\underline{X} - \underline{\mu})$ dir. Burada $V^{1/2}$ diagonal elemanları X_i rasgele değişkenlerinin standart sapmalarından oluşan pxp tipinde bir matrisdir. Ayrıca

$$E(\underline{Z}) = \underline{0}$$

ve

$$\begin{aligned} Cov(\underline{Z}) &= (V^{1/2})^{-1} \ \Sigma \ (V^{1/2}) \\ &= \boldsymbol{\rho} \\ &= Corr(\underline{X}) \end{aligned}$$

dir. Buradan $\underline{X}$ rasgele vektörünün korelasyon matrisi, $\underline{Z}$ rasgele vektörünün varyans-kovaryans matrisine eşit olduğundan, temel bileşenler korelasyon matrisi $\boldsymbol{\rho}$ dan elde edildiğinde, standarlaştırılmış değişkenlerden temel bileşenler elde edilmiş olur. Ancak $\boldsymbol{\Sigma}$ dan elde edilen $(\lambda_i, \underline{e}_i)$ özdeğer ve birim özvektör çiftleri, $\boldsymbol{\rho}$ dan elde edilenlerle aynı değildir.

Sonuç:

$Cov(\underline{Z}) = \boldsymbol{\rho}$ olan $\underline{Z}' = (Z_1, Z_2, ..., Z_p)$ standartlaştırılmış rasgele değişkenler için i inci temel bileşen

$$\begin{aligned} Y_i &= \underline{e}_i' \underline{Z} \\ &= \underline{e}_i'(V^{1/2})^{-1}(\underline{X} - \underline{\mu}) \quad ; \qquad i = 1, 2, ..., p \end{aligned}$$

dir. Bununla birlikte

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{p} Var(Y_i) &= \sum_{i=1}^{p} Var(Z_i) \\ &= p \end{aligned}$$

ve

$$\rho_{Y_i,Z_k} = e_{ki}\sqrt{\lambda_i} \quad ; \quad i,k = 1,2,...,p$$

dir. Bu durumda;

$(\lambda_1, \underline{e}_1), (\lambda_2, \underline{e}_2), ..., (\lambda_p, \underline{e}_p)$'ler $\boldsymbol{\rho}$ nun özdeğer ve özvektör çiftleridir ve $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq ... \geq \lambda_p \geq 0$ dır. Buradan k ıncı temel bileşenin varyansının toplam varyansa oranı

$$\frac{\lambda_k}{p}; \quad k = 1,2,...,p$$

dir. Burada λ_k lar $\boldsymbol{\rho}$ özdeğerleridir.

Örnek 2: (Kovaryans ve Korelasyon matrislerinden elde edilen temel bileşenler) :

$\underline{X}' = (X_1, X_2)$ rasgele vektörüne ilişkin varyans-kovaryans ve korelasyon matrisleri

$$\Sigma = \begin{bmatrix} 1 & 4 \\ 4 & 100 \end{bmatrix} \text{ ve } \rho = \begin{bmatrix} 1 & 0.4 \\ 0.4 & 1 \end{bmatrix}$$

olarak verilsin. Her iki matris için temel bileşen ve temel bileşenlerin açıklama oranlarını elde ederek karşılaştırınız.

Çözüm 2:

- Σ matrisi için

$$\det\begin{bmatrix} 1-\lambda & 4 \\ 4 & 100-\lambda \end{bmatrix} = 0$$

eşitliğinden özdeğerler büyükten küçüğe sırasıyla $\lambda_1 = 100.16$ ve $\lambda_2 = 0.84$ bulunur. Bu özdeğerlere karşılık gelen birim özvektörler ise sırasıyla

$$\underline{e}'_1 = [0.040 \ \ 0.999]$$
$$\underline{e}'_2 = [0.999 \ \ -0.040]$$

elde edilir. Buradan temel bileşenler:

$$Y_1 = 0.040X_1 + 0.999X_2$$
$$Y_2 = 0.999X_1 - 0.040X_2$$

elde edilir.

$$Y_1 \text{'in toplam değişimi açıklama oranı : } \frac{\lambda_1}{\lambda_1+\lambda_2} = \frac{100.16}{100.16+0.84} = 0.9917$$

$$Y_2 \text{'in toplam değişimi açıklama oranı : } \frac{\lambda_2}{\lambda_1+\lambda_2} = \frac{0.84}{100.16+0.84} = 0.0013$$

- ρ matrisi için
- $$\det\begin{bmatrix} 1-\lambda & 0.4 \\ 0.4 & 1-\lambda \end{bmatrix} = 0$$

eşitliğinden özdeğerler büyükten küçüğe sırasıyla $\lambda_1^* = 1.4$ ve $\lambda_2^* = 0.6$ bulunur. Bu özdeğerlere karşılık gelen birim özvektörler ise sırasıyla

$$\left(\underline{e}^*_1\right)' = [0.7071 \;\; 0.7071]$$

$$\left(\underline{e}^*_2\right)' = [0.7071 \;\; -0.7071]$$

elde edilir. $Z_1 = \dfrac{X_1-\mu_1}{\sqrt{1}}$ ve $Z_2 = \dfrac{X_2-\mu_2}{\sqrt{100}}$ olmak üzere temel bileşenler:

$$Y_1^* = 0.7071 Z_1 + 0.7071 Z_2$$

$$Y_2^* = 0.7071 Z_1 - 0.7071 Z_2$$

elde edilir.

$$Y_1^* \text{'in toplam değişimi açıklama oranı : } \frac{\lambda_1}{\lambda_1+\lambda_2} = \frac{1.4}{1.4+0.6} = 0.70$$

$$Y_2^* \text{'in toplam değişimi açıklama oranı : } \frac{\lambda_1}{\lambda_1+\lambda_2} = \frac{0.6}{1.4+0.6} = 0.30$$

Sonuç 1 : $\sum$ ve ρ matrislerinden elde edilen temel bileşenler farklıdır.

Sonuç 2 : Açıklama oranlarına bakılacak olursa $\sum$ matrisinden elde edilen 1. Temel bileşenin açıklama oranı, ρ matrislerinden elde edilen 1. Temel bileşenin açıklama oranından yüksektir.

Standartlaştırma yapılmazsa X_2 değişkeni oldukça etkili olur :

$$Y_1 = \underline{e}'_1 \underline{X} = 0.040 X_1 + 0.999 X_2$$

Değişkenlerin ölçü birimleri birbirinden çok farklı olduğunda standartlaştırma yapılmalıdır.

Örnek 3 : $\underline{X}' = (X_1, X_2, X_3)$ rasgele vektörünün varyans- kovaryans matrisi aşağıda verilmiştir:

$$\sum = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 4 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

a) Temel bileşenleri elde ediniz.
b) Temel bileşenlerin varyanslarını bulunuz.
c) Temel bileşenler arasındaki kovaryansları bulunuz.
d) Temel bileşenlerin toplam değişimi açıklama oranlarını hesaplayınız.
e) Temel bileşenler ile rasgele değişkenler arasındaki korelasyon matrisini elde ediniz.

Çözüm 3 :

a) Temel bileşenleri elde ediniz.

Temel bileşenlerin bulunabilmesi için öncelikle $\sum$ varyans- kovaryans matrisinin özdeğer ve özvektörleri elde edilmelidir.

Özdeğerler için : $\det(\sum - \lambda I) = 0$ olacak şekildeki $\lambda \in \mathbb{R}$ değerlerini bulmalıyız.

$$\det\begin{bmatrix} 2-\lambda & 0 & 1 \\ 0 & 4-\lambda & 0 \\ 1 & 0 & 1-\lambda \end{bmatrix} = 0$$

$$\left(4-\lambda\right)\begin{vmatrix} 2-\lambda & 1 \\ 1 & 1-\lambda \end{vmatrix} = \left(4-\lambda\right)\left(1-\left(2-\lambda\right)\left(1-\lambda\right)\right) = 0$$

$\lambda_1 = 4$, $\lambda_2 = 2.6182$ ve $\lambda_3 = 0.382$ bulunur. (Özdeğerler büyükten küçüğe sıralanır : $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3$)

Bu özdeğere karşılık gelen özvektörler : $\sum \underline{x} = \lambda \underline{x}$ eşitliğinden elde edilir.

Özdeğerler ve birim özvektörler aşağıdaki tabloda verilmiştir:

$\lambda_1 = 4$	$\lambda_2 = 2.6182$	$\lambda_3 = 0.382$
$\underline{e}'_1 = [0\ 1\ 0]$	$\underline{e}'_2 = [-0.8507\ \ 0 - 0.5257]$	$\underline{e}'_3 = [0.5257\ 0 - 0.8507]$

Buradan temel bileşenler:

$$Y_1 = \underline{e}'_1\underline{X} = [0\ 1\ 0]\begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{bmatrix} = X_2$$

$$Y_2 = \underline{e}'_2\underline{X} = [-0.8507\ \ 0 - 0.5257]\begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{bmatrix} = -0.8507X_1 - 0.5257X_3$$

$$Y_3 = \underline{e}'_3\underline{X} = [0.5257\ 0 - 0.8507]\begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{bmatrix} = 0.5257X_1 - 0.8507X_3$$

elde edilir. Varyans-kovaryans matrisine bakıldığında, X_2 rasgele değişkeni diğer rasgele değişkenlerle ilişkisiz olduğundan, temel değişkenlerden birinin X_2 olacağı açıktır.

b) Temel bileşenlerin varyanslarını bulunuz.

$$Var\left(Y_1\right) = Var\left(X_2\right) = 4 = \lambda_1$$

$$Var\left(Y_2\right) = Var\left(\underline{e}'_2\underline{X}\right) = \underline{e}'_2 \sum \underline{e}_2 = 2.6182 = \lambda_2$$

$$Var\left(Y_3\right) = Var\left(\underline{e}'_3\underline{X}\right) = \underline{e}'_3 \sum \underline{e}_3 = 0.382 = \lambda_3$$

Ayrıca

$$\sum_{i=1}^{3} Var\left(Y_i\right) = \sum_{i=1}^{3} Var\left(X_i\right) = 7$$ 'dır.

c) Temel bileşenler arasındaki kovaryansları bulunuz.

$$Cov\left(Y_i, Y_k\right) = Cov\left(\underline{e}'_i\ \underline{X}, \underline{e}'_k\ \underline{X}\right) = \underline{e}'_i \sum \underline{e}_k = 0\ ,\ i \neq k$$

$$Cov\left(Y_1, Y_2\right) = Cov\left(\underline{e}'_1\underline{X}, \underline{e}'_2\underline{X}\right) = \underline{e}'_1 \sum \underline{e}_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 4 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -0.8507 \\ 0 \\ -0.5257 \end{bmatrix} = 0$$

$$Cov\left(Y_1,Y_3\right)=Cov\left(\underline{e}'_1\underline{X},\underline{e}'_3\underline{X}\right)=\underline{e}'_1\Sigma\underline{e}_3=\begin{bmatrix}0 & 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2 & 0 & 1\\0 & 4 & 0\\1 & 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0.5257\\0\\-0.8507\end{bmatrix}=0$$

$$Cov\left(Y_2,Y_3\right)=Cov\left(\underline{e}'_2\underline{X},\underline{e}'_3\underline{X}\right)=\underline{e}'_2\Sigma\underline{e}_3=\begin{bmatrix}-0.8507 & 0 & -0.5257\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2 & 0 & 1\\0 & 4 & 0\\1 & 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0.5257\\0\\-0.8507\end{bmatrix}=0$$

d) Temel bileşenlerin toplam değişimi açıklama oranlarını hesaplayınız.

- 1. Temel bileşenin toplam varyansa katkısı

$$\frac{Var\left(Y_1\right)}{\sum_{i=1}^{3}Var\left(Y_i\right)}=\frac{\lambda_1}{\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3}=\frac{4}{7}=0.5714$$

- 2. Temel bileşenin toplam varyansa katkısı

$$\frac{Var\left(Y_2\right)}{\sum_{i=1}^{3}Var\left(Y_i\right)}=\frac{\lambda_2}{\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3}=\frac{2.6182}{7}=0.3740$$

- 3. Temel bileşenin toplam varyansa katkısı

$$\frac{Var\left(Y_3\right)}{\sum_{i=1}^{3}Var\left(Y_i\right)}=\frac{\lambda_3}{\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3}=\frac{0.382}{7}=0.0546$$

Burada ilk iki temel bileşenin toplam varyansa katkısı $0.5714+0.3740=0.9454$ (oldukça yüksek) olduğundan Y_1 ve Y_2 bileşenleri çok az bilgi kaybı ile değişkenlerin yani X_1, X_2, X_3 'ün yerini alır.

e) Temel bileşenler ile rasgele değişkenler arasındaki korelasyon matrisini elde ediniz.

$$\rho_{Y_i,X_k}=\frac{e_{ki}\sqrt{\lambda_i}}{\sqrt{\sigma_{kk}}}\ ,\ i,k=1,2,\ldots,p$$

Örneğin : $\underline{e}'_1 = [e_{11}\ \ e_{21}\ \ e_{31}] = [0\ 1\ 0]$ kullanılarak Y_1 temel bileşeninin orjinal rasgele değişkenler ile arasındaki korelasyonlar :

$$\rho_{Y_1,X_1} = \frac{e_{11}\sqrt{\lambda_1}}{\sqrt{\sigma_{11}}} = \frac{0\sqrt{4}}{\sqrt{2}} = 0$$
$$\rho_{Y_1,X_2} = \frac{e_{21}\sqrt{\lambda_1}}{\sqrt{\sigma_{22}}} = \frac{1\sqrt{4}}{\sqrt{4}} = 1$$
$$\rho_{Y_1,X_3} = \frac{e_{31}\sqrt{\lambda_1}}{\sqrt{\sigma_{33}}} = \frac{0\sqrt{4}}{\sqrt{1}} = 0$$

$$\rho_{Y_2,X_1} = \frac{e_{12}\sqrt{\lambda_2}}{\sqrt{\sigma_{11}}} = \frac{-0.8507\sqrt{2.6182}}{\sqrt{2}} = -0.97334$$
$$\rho_{Y_2,X_2} = \frac{e_{22}\sqrt{\lambda_2}}{\sqrt{\sigma_{22}}} = \frac{0\sqrt{2.6182}}{\sqrt{4}} = 0$$
$$\rho_{Y_2,X_3} = \frac{e_{32}\sqrt{\lambda_2}}{\sqrt{\sigma_{33}}} = \frac{-0.5257\sqrt{2.6182}}{\sqrt{1}} = -0.85063$$

$$\rho_{Y_3,X_1} = \frac{e_{13}\sqrt{\lambda_3}}{\sqrt{\sigma_{11}}} = \frac{0.5257\sqrt{0.382}}{\sqrt{2}} = 0.22975$$
$$\rho_{Y_3,X_2} = \frac{e_{23}\sqrt{\lambda_3}}{\sqrt{\sigma_{22}}} = \frac{0\sqrt{0.382}}{\sqrt{4}} = 0$$
$$\rho_{Y_3,X_3} = \frac{e_{33}\sqrt{\lambda_3}}{\sqrt{\sigma_{33}}} = \frac{-0.8507\sqrt{0.382}}{\sqrt{1}} = -0.52578$$

Tüm korelasyonlar hesaplanınca aşağıdaki tablo elde edilir:

ρ_{Y_i,X_k}	X_1	X_2	X_3
Y_1	0	1	0
Y_2	-0.97334	0	-0.85063
Y_3	0.22975	0	-0.52578