UNIVERSITAS INDONESIA

PENAKSIRAN PARAMETER *UNIVARIATE PARTIAL LEAST SQUARES REGRESSION* MENGGUNAKAN ALGORITMA NIPALS (*Nonlinier Iterative Partial Least Squares*)

SKRIPSI

PARAMITA AYU PAWESTRI
0706261820

FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
PROGRAM STUDI MATEMATIKA
DEPOK
JUNI 2012

UNIVERSITAS INDONESIA

PENAKSIRAN PARAMETER *UNIVARIATE PARTIAL LEAST SQUARES REGRESSION* MENGGUNAKAN ALGORITMA NIPALS (*Nonlinier Iterative Partial Least Squares*)

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Sains

PARAMITA AYU PAWESTRI
0706261820

FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
PROGRAM STUDI MATEMATKA
DEPOK
JUNI 2012

HALAMAN PERNYATAAN ORISINALITAS

Skripsi ini adalah hasil karya saya sendiri,

dan semua sumber baik yang dikutip maupun dirujuk

telah saya nyatakan dengan benar.

Nama	**: Paramita Ayu Pawestri**
NPM	**: 0706261820**
Tanda Tangan	**:**
Tanggal	**: 22 Juni 2012**

HALAMAN PENGESAHAN

Skripsi ini diajukan oleh	:	
Nama	:	Paramita Ayu Pawestri
NPM	:	0706261820
Program Studi	:	Matematika S1 Reguler
Judul Skripsi	:	Penaksiran Parameter *Univariate Partial Least Squares Regression* Menggunakan Algoritma NIPALS (*Nonlinier Iterative Partial Least Squares*)

Telah berhasil dipertahankan di hadapan Dewan Penguji dan diterima sebagai bagian persyaratan yang diperlukan untuk memperoleh gelar Sarjana Sains pada Program Studi Matematika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Indonesia

DEWAN PENGUJI

Pembimbing 1	:	Fevi Novkaniza M.Si	(……………………………)
Pembimbing 2	:	Dra. Ida Fithriani M.Si	(……………………………)
Penguji 1	:	Dra. Titin Siswantining DEA	(……………………………)
Penguji 2	:	Sarini S.Si., M.Stats	(……………………………)
Penguji 3	:	Dra. Saskya Mary Soemartojo M.Si	(……………………………)

Ditetapkan di : Depok

Tanggal : 22 Juni 2012

KATA PENGANTAR

Puji syukur penulis panjatkan kehadirat Allah SWT atas segala rahmat, curahan kasih sayang, dan petujuk selama penelitian dan penyusunan skripsi ini. Shalawat dan salam penulis sampaikan kepada junjung kita, Rasulullah SAW, sang penyelamat dan pemberi petunjuk bagi kemaslahatan seluruh umat. Penulis ingin mengucapkan terima kasih kepada orang-orang yang telah banyak berjasa selama penulisan skripsi ini, di antaranya:

1. Orang tua tercinta, Pak Sunaryo dan Ibu Kaswati dan adik-adikku, Wuri, Anggun, Abdillah dan Salman yang tak hentinya memberikan doa dan kasih sayang kepada penulis untuk menyelasaikan Tugas Akhir ini. "*You are my everything*"
2. Ibu Fevi Novkaniza M.Si dan Ibu Dra. Ida Fithriani M.Si selaku pembimbing Tugas Akhir yang telah membimbing dan mengarahkan penulis.
3. Ibu Dra. Ida Fithriani M.Si selaku dosen wali.
4. Segenap staf pengajar, Karyawan Tata Usaha dan Perpustakaan Departemen Matematika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Indonesia.
5. Teman-temanku angkatan 2007, Adi, Arif, Afni, Bapet, Iki, Sisca, Putri yang selalu memberi semangat kepada penulis.
6. Temanku angkatan 2007 , Fauzan dan Ayat yang telah membantu penulis dalam membuat program.
7. Teman-temanku angkatan 2007 lainnya, Anggun, adit,Amanda, Andi, Anjar, Bowo , Danar, Farah, Gamar, Hanif, Mamah, Isna, Misda, Nedi, Nora, Putu, Shafa, Shafira, Siska, Siti, Stefi, Toto, Widi, Dhita, Wiwie, Widya, Winda, Aniz, Yoz dan bang Zul yang telah menemani penulis selama empat tahun di matematika UI.
8. Adik-adik angkatan 2008 terutama Lutfah dan Cindy, 2009, 2010 dan 2011.
9. Laskar pondok Rambutan yaitu NASA (Nana, Adis, Sela, Aul), Dwie bio 07, Desy bio 07, Novitha, Tika, Della, Dhea, Lita, Nita, Niken, Puput, Jenny dan Eliana yang telah meramaikan kosan kita tercinta.

10. Kak Jul yang telah memberi semangat, nasehat dan bantuan kepada penulis.
11. Adik-adik RISE, Anoy, Badriyah, Nurani, Kessy, Kak Lucky dan yang lainnya.
12. Sepupuku, mas Yogi yang telah mendoakan penulis.
13. Semua pihak lain yang telah membantu penulis baik secara langsung maupun tidak yang tidak dapat penulis sebutkan satu persatu.

Pada akhirnya, penulis meminta maaf yang sebesar-besarnya atas segala kesalahan, baik sengaja ataupun tidak yang telah dilakukan. Semoga skripsi yang telah dibuat ini dapat bermanfaat bagi setiap orang yang membacanya.

Depok, 22 Juni 2012

Penulis

HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI TUGAS AKHIR UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS

Sebagai sivitas akademik Universitas Indonesia, saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama	:	Paramita Ayu Pawestri
NPM	:	0706261820
Program Studi	:	S1 Reguler
Departemen	:	Matematika
Fakultas	:	Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Jenis Karya	:	Skripsi

demi pengembangan ilmu pengetahuan, menyetujui untuk memberikan kepada Universitas Indonesia **Hak Bebas Royalti Noneksklusif (*Non-exclusive Royalty-Free Right*)** atas karya ilmiah saya yang berjudul:

Penaksiran Parameter *Univariate Partial Least Squares Regression* Menggunakan Algoritma NIPALS (*Nonlinier Iterative Partial Least Squares*)

beserta perangkat yang ada (jika diperlukan). Dengan Hak Bebas Royalti Noneksklusif ini Universitas Indonesia berhak menyimpan, mengalihmedia/formatkan, mengelola dalam bentuk pangkalan data (*database*), merawat, dan memublikasikan tugas akhir saya tanpa meminta izin dari saya selama tetap mencantumkan nama saya sebagai penulis atau pencipta dan sebagai pemilik Hak Cipta.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya.

Dibuat di : Depok
Pada tanggal : 22 Juni 2012

Yang menyatakan

(Paramita Ayu Pawestri)

ABSTRAK

Nama : Paramita Ayu Pawestri
Program Studi : Matematika S1 Reguler
Judul : Penaksiran Parameter *Univariate Partial Least Squares Regression* Menggunakan Algoritma NIPALS (*Nonlinier Iterative Partial Least Squares*)

Partial Least Squares Regression adalah salah satu teknik regresi yang memerhatikan pola hubungan antara variabel respon dan variabel prediktor. Teknik tersebut dapat digunakan saat terdapat korelasi tinggi antara variabel prediktor, banyaknya variabel prediktor yang melebihi jumlah observasi dan efek *random* pada variabel prediktor. PLSR dengan menggunakan algoritma NIPALS, membentuk komponen yang merupakan kombinasi linier berbobot dari variabel prediktor yang digunakan untuk memprediksi variabel respon dengan metode *Ordinary Least Squares,* dimana komponen yang terbentuk ortogonal atau tidak saling berkorelasi dan banyaknya komponen yang terbentuk akan lebih sedikit dari banyaknya variabel prediktor.

Kata kunci :
Komponen, *Ordinary Least Squares*, *Partial Least Squares Regression*, penaksiran parameter
xii+154 halaman : 1 gambar; 6 tabel
Daftar Referensi : 18 (1988--2010)

ABSTRACT

Name : Paramita Ayu Pawestri
Program Study : Mathematics S1 Regular
Title : Parameter Estimation of Univariate Partial Least Squares Regression Using NIPALS Algorithm (Nonlinier Partial Least Squares)

Partial Least Squares Regression is one of technique that takes into account the pattern of relationship between response variable and predictor variables. The technique can be used when there is high correlation between predictors variables, the number of predictors variables exceed the number of observation and random effects on predictor variables. PLS using NIPALS algorithm, which is component forming a weigthed linear combination of predictor variables use to predict response variable by the method of Ordinary Least Squares, in which the component are formed orthogonal or not correlated each other and the number will be fewer than the number of predictor variables.

Keywords :
Component, Ordinary Least Squares, Partial Least Squares, parameter estimation.
xii+154 pages : 1 pictures; 6 tables
Bibliography : 18 (1988--2010)

DAFTAR ISI

DAFTAR GAMBAR

DAFTAR TABEL

DAFTAR LAMPIRAN

BAB 1
PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Analisis regresi adalah salah satu cabang dari statistika yang menganalisis hubungan antara satu atau lebih variabel respon dengan satu atau lebih variabel prediktor. Tujuan dari dilakukannya analisis regresi adalah untuk memperoleh model regresi terbaik yang menggambarkan pola hubungan antara variabel respon dengan variabel prediktor. Model regresi linier yang melibatkan lebih dari satu variabel prediktor dan satu variabel respon disebut dengan model regresi linier berganda univariat.

Dalam suatu model regresi, seringkali diasumsikan variabel-variabel prediktor yang mempengaruhi variabel respon merupakan efek *fixed*, dimana level dari variabel-variabel prediktornya ditentukan dengan tujuan tertentu oleh peneliti. Akan tetapi, sering terjadi dalam berbagai situasi, variabel prediktor merupakan efek *random* dimana level dari variabel-variabel prediktornya dipilih secara *random* dari populasi level yang ada. Dengan demikian, nilai variabel-variabel prediktor yang diperoleh, tidak dapat dikontrol oleh peneliti.

Untuk mengetahui bagaimana pola hubungan antara variabel respon dengan variabel-variabel prediktor, baik dalam kasus variabel prediktor merupakan efek *fixed* ataupun *random*, perlu dilakukan penaksiran terhadap parameter model regresi. Salah satu cara untuk menaksir parameter regresi adalah dengan menggunakan metode *Ordinary Least Squares* (OLS), tetapi dalam mendapatkan solusi *least squares* harus dipenuhi syarat-syarat yaitu, matriks variabel prediktor merupakan matriks *full rank*, antar variabel prediktor tidak berkorelasi atau tidak terjadi multikolinieritas dan jumlah observasi lebih besar dibandingkan dengan jumlah variabel prediktor.

Namun, seringkali syarat tersebut tidak terpenuhi yaitu jika jumlah variabel prediktor jauh lebih banyak dari jumlah observasi, solusi *least square* yang diperoleh tidak unik atau tidak tunggal sehingga persamaan regresi yang didapatkan tidak dapat menjelaskan dengan baik bagaimana pola yang terbentuk antara variabel respon dan variabel-variabel prediktor.

Selain itu, jika terjadi variabel prediktor yang berkorelasi tinggi dengan variabel prediktor lain, dengan kata lain terjadi multikolinearitas, maka taksiran yang diperoleh menjadi kurang baik atau tidak stabil. Ketidakstabilan ini dapat diamati berdasarkan nilai standar error dari taksiran parameter. Jika nilai standar errornya semakin besar, maka akan menyebabkan pengujian parsial untuk parameter regresi menjadi tidak signifikan. Salah satu cara untuk mengatasi masalah multikolinearitas adalah dengan melakukan eliminasi variabel. Eliminasi variabel adalah menghilangkan salah satu variabel prediktor yang berkorelasi tinggi dengan variabel prediktor lainnya, tetapi cara ini mempunyai kelemahan karena ada kemungkinan variabel prediktor yang dieliminasi signifikan dalam menjelaskan variabel respon, sehingga tidak ada jaminan bahwa tanpa menggunakan variabel prediktor yang telah dieliminasi akan lebih baik dari model yang menggunakan keseluruhan variabel prediktor (Montgomery *et al*., 2001).

Karena terdapat kelemahan pada teknik eliminasi variabel, sering digunakan suatu teknik regresi regresi lain yang disebut PCR (*Principal Component Regression*). PCR dapat mengatasi masalah multikolinieritas tanpa menghilangkan satupun variabel prediktor, dan masalah dimana jumlah variabel prediktor lebih banyak dari jumlah observasi. PCR mengasumsikan variabel-variabel prediktor merupakan efek *random*. Selain itu, PCR membentuk variabel baru yang disebut variabel laten atau komponen dimana komponen tersebut digunakan sebagai prediktor baru untuk memprediksi variabel respon. Akan tetapi, komponen PCR yang terbentuk hanya menjelaskan variasi dari variabel-variabel prediktor sehingga tidak ada jaminan bahwa komponen tersebut baik dan relevan dalam memprediksi variabel respon. Untuk itu dibutuhkan metode lain, salah satunya adalah *Partial Least Squares Regression* (PLSR) yang mana selain dapat mengatasi masalah multikolinieritas, jumlah variabel prediktor yang jauh lebih banyak dibandingkan jumlah observasi atau efek *random* pada variabel prediktor, tetapi juga baik dan relevan dalam memprediksi variabel respon.

Partial Least Squares Regression adalah suatu model regresi yang dikembangkan oleh Herman Wold pada tahun 1960 dan saat ini PLSR sering digunakan dalam bidang *chemometrics* yaitu salah satu bidang terapan statistika yang menganalisis data yang berhubungan dengan ilmu kimia, bidang *marketing* dan bidang lainnya.

Ide dasar dari PLSR adalah mendekomposisikan matriks variabel prediktor menjadi matriks komponen yang ortogonal dan matriks *loading*. Matriks komponen dipilih sedemikian rupa sehingga komponen yang terbentuk dapat menjelaskan variasi pada variabel prediktor dan variabel respon melalui fungsi kovariansi sampel antara setiap variabel prediktor dengan variabel respon. Hal tersebut dibutuhkan agar komponen yang terbentuk tidak hanya baik dalam menerangkan variasi dari variabel-variabel prediktor, tetapi juga baik dan relevan dalam memprediksi variabel respon. Dalam *Partial Least Squares Regression*, komponen- komponen tersebut akan berperan sama seperti variabel prediktor.

Untuk mendapatkan komponen dalam PLSR, terdapat dua algoritma yang dapat digunakan, yaitu algoritma NIPALS (*Nonlinear Iterative Partial Least Squares*) dan SIMPLS (*Simple Partial Least Squares*). Dalam skripsi ini akan dibahas penaksiran parameter PLSR univariat menggunakan algoritma NIPALS.

1.2 Perumusan Masalah

1. Bagaimana cara pembentukan komponen pada PLSR serta penentuan banyaknya komponen yang digunakan dalam PLSR?
2. Bagaimana mencari taksiran parameter pada *univariate partial least squares regression* ?

1.3 Tujuan Penulisan

1. Menjelaskan cara pembentukan komponen penentuan banyaknya komponen yang digunakan dalam PLSR.
2. Mencari taksiran parameter pada *univariate partial least squares regression*.

BAB 2
LANDASAN TEORI

Dalam bab ini akan dijelaskan mengenai matriks, variabel *random* univariat, variabel *random* bivariat, *mean* vektor, matriks variansi kovariansi beserta model regresi linier berganda univariat dan multivariat serta taksiran parameter regresi.

2.1 Matriks

Dalam subbab berikut akan dijelaskan mengenai definisi dasar dan notasi dari matriks, transpos dan *trace* matriks, *rank* matriks, invers matriks, *norm* dalam ruang *Euclidean* berdimensi-*n* serta keortogonalan. Untuk menjelaskan isi dari subbab ini, digunakan beberapa definisi dan teorema dari Anton.H, 2000 dan Rencher, 1998.

2.1.1 Definisi Dasar dan Notasi

Definisi 2.1.1

Matriks adalah angka-angka atau variabel-variabel yang disusun persegi atau *rectangular* yang dinyatakan dalam huruf besar bercetak tebal yang dapat ditulis seperti berikut :

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1p} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{np} \end{bmatrix} = (a_{ij}) \qquad (2.1.1)$$

Subscript pertama menyatakan baris dan *subscript* kedua menyatakan kolom. Jika sebuah matriks seperti yang tertera pada persamaan (2.1.1), maka dapat dikatakan **A** adalah matriks yang berukuran *n* x *p*, dimana terdapat *n* baris dan *p* kolom. Apabila *n* = *p*, maka matriks **A** disebut matriks bujur sangkar.

Jika **a** adalah matriks berukuran *n* x 1, maka **a** disebut vektor kolom, $\mathbf{a} = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}$

Jika **a** adalah matriks berukuran 1 x *p*, maka **a** disebut vektor baris,

$$\mathbf{a} = \begin{bmatrix} a_1 & \cdots & a_p \end{bmatrix}$$

Misalkan **A** adalah matriks yang didefinisikan sebagai bentuk kuadrat yaitu

$$\mathbf{x}^T \mathbf{A}\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 & \cdots & x_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \sum_{i,j=1}^{n} a_{ij} x_i x_j$$

Jika diberikan bentuk kuadrat tersebut dan $a_{ij} = a_{ji}$ sehingga **A** menjadi matriks simetris, maka **A** disebut matriks definit positif. Matriks simetris **A** disebut matriks definit positif jika memenuhi $\mathbf{x}^T \mathbf{A}\mathbf{x} > 0$ untuk semua $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$. Salah satu sifat dari matriks definit positif yaitu jika **A** adalah matriks definit positif, maka elemen diagonal a_{ii} bernilai positif.

Bukti:

Misal $\mathbf{x}_i$ = (0,…,0,1,0,…,0) dimana 1 berada pada posisi ke-*i*, maka berdasarkan definisi dari definit positif diperoleh

$$\mathbf{x}^T \mathbf{A}\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1(i-1)} & a_{1i} & a_{1(i+1)} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{(i-1)1} & \cdots & a_{(i-1)(i-1)} & a_{(i-1)i} & a_{(i-1)(i+1)} & \cdots & a_{(i-1)n} \\ a_{i1} & \cdots & a_{i(i-1)} & a_{ii} & a_{i(i+1)} & \cdots & a_{in} \\ a_{(i+1)1} & \cdots & a_{(i+1)(i-1)} & a_{(i+1)i} & a_{(i+1)(i+1)} & \cdots & a_{(i+1)n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{n(i-1)} & a_{ni} & a_{n(i+1)} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$= a_{ii} > 0$$

untuk semua *i*.

Terbukti

Jika **A** adalah matriks yang entri-entrinya berisi nol, maka **A** disebut dengan matriks nol dan jika **a** adalah vektor yang berisi angka nol, maka **a** disebut vektor nol.

2.1.2 Transpos dan *Trace* Matriks

Pada matriks yang berukuran n x p, salah satu karakteristik atau sifat dari matriks adalah pertukaran antara baris dan kolom. Selain itu, jika matriks berukuran n x n atau bujur sangkar, karakteristik yang dimiliki dari matriks bujur sangkar selain pertukaran baris dan kolom adalah *trace*. Untuk lebih memahami karakteristik dari matriks tersebut, diberikan beberapa definisi dan lemma dari Anton.H, 2000 sebagai berikut :

Definisi 2.1.2.a

Jika **A** adalah sebarang matriks m x n, maka **transpos A**, dinyatakan dengan $\mathbf{A}^T$, didefinisikan sebagai matriks n x m yang didapatkan dengan mempertukarkan baris dan kolom dari **A** yaitu kolom pertama dari $\mathbf{A}^T$ merupakan baris pertama dari **A**, kolom kedua dari $\mathbf{A}^T$ adalah baris kedua dari **A**, dan seterusnya.

Definisi 2.1.2.b

Jika **A** adalah matriks bujur sangkar berukuran n x n, maka ***trace*** **A**, dinyatakan dengan $tr(\mathbf{A})$, didefinisikan sebagai jumlah anggota-anggota pada diagonal utama **A**. *Trace* **A** tidak terdefinisi jika **A** bukan matriks bujur sangkar.

Beberapa sifat dari *trace* diantaranya adalah sebagai berikut :

1. $tr(\mathbf{A} + \mathbf{B}) = tr(\mathbf{A}) + tr(\mathbf{B})$
2. $tr(k\mathbf{A}) = k\, tr(\mathbf{A})$
3. Jika $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1^T \\ \vdots \\ \mathbf{a}_n^T \end{bmatrix}$, maka $tr(\mathbf{A}\mathbf{A}^T) = \sum_{i=1}^{n} \mathbf{a}_i^T \mathbf{a}_i$
4. $tr(\mathbf{A}^T) = tr(\mathbf{A})$
5. $tr(\mathbf{I}_n) = n$

dimana k adalah sembarang skalar, $\mathbf{I}_n$ adalah matriks identitas berukuran n x n, sedangkan **A** dan **B** adalah matriks berukuran n x n.

Misalkan **A**=$\{a_{ij}\}$ adalah matriks berukuran *m* x *n* dan **B**= $\{b_{ij}\}$ adalah matriks berukuran *n* x *m*, maka *tr*(**AB**)= $\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}b_{ji}$ dimana **AB**=$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}b_{ji}$. Berdasarkan sifat dari *trace*, *tr*(**AB**) dapat ditulis sebagai :

$$tr(\mathbf{AB}) = tr(\mathbf{B}^T\mathbf{A}^T)$$

Lemma 2.1.2

Untuk sembarang matriks **A** berukuran *m* x *n* dan matriks **B** berukuran *n* x *m*, maka ***tr***(**AB**) **=** ***tr***(**BA**)

Bukti :

$$tr(\mathbf{AB}) = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}b_{ji} = \sum_{j=1}^{n}\sum_{i=1}^{m} a_{ij}b_{ji} = \sum_{j=1}^{n}\sum_{i=1}^{m} b_{ji}a_{ij} = tr(\mathbf{BA})$$

Terbukti

Misalkan **B** berukuran *n* x *q* dan **C** berukuran *q* x *n*, maka berdasarkan lemma tersebut,

$$tr(\mathbf{ABC}) = tr(\mathbf{CAB}) = tr(\mathbf{BCA})$$

2.1.3 *Rank* Matriks

Sebelum membahas mengenai *rank* matriks, akan didefinisikan terlebih dahulu mengenai ruang vektor. Berikut ini akan dilampirkan beberapa definisi dari Anton.H, 2000 yang berkaitan dengan ruang vektor dan subruang.

Definisi 2.1.3.a

Anggap **V** adalah sebarang himpunan tak kosong dari objek dimana dua operasi didefinisikan, yaitu penjumlahan dan perkalian dengan skalar.

Penjumlahan adalah suatu aturan yang menghubungkan setiap pasangan objek **u** dan **v** dalam **V** dengan suatu objek **u + v**, sedangkan perkalian dengan skalar adalah suatu aturan yang menghubungkan setiap skalar *k* dengan setiap objek **u** dalam **V** dengan objek *k***u**. Jika aksioma berikut terpenuhi oleh semua objek **u**,**v**,

w dalam **V** dan semua skalar *k* dan *l*, maka **V** disebut **ruang vektor**, objek dalam **V** disebut **vektor**.

1. Jika **u** dan **v** objek-objek dalam **V**, maka **u + v** berada dalam **V**.
2. **u + v = v + u**
3. **u** + (**v** + **w**) = (**u** + **v**) + **w**
4. Ada suatu vektor nol **0** dalam **V** sedemikian sehingga **u** + **0** = **0** + **u** untuk semua **u** dalam **V**
5. Untuk setiap **u** dalam **V**, ada suatu vektor **-u** dalam **V** yang disebut negatif dari **u**, sedemikian sehingga **u** + (**-u**) = (**-u**) + **u** = **0**
6. Jika *k* dan *l* adalah sebarang skalar dan **u** adalah sebarang vektor dalam **V**, maka *k***u** ada dalam **V**.
7. *k*(**u** + **v**) = *k*(**v** + **u**)
8. (*k* + *l*)**u** = *k***u** + *l***u**
9. *k*(*l***u**) = (*kl*)**u**

Misalkan terdapat sebarang himpunan tak kosong lainnya, misal **W** dimana **W** tersebut merupakan subset dari **V**, maka **W** disebut subruang dari **V**. Untuk lebih jelasnya, dapat dilihat pada definisi berikut :

Definisi 2.1.3.b

Himpunan bagian **W** dari ruang vektor **V** disebut subruang vektor dari **V** jika **W** merupakan ruang vektor terhadap penjumlahan dan perkalian skalar yang didefinisikan pada **V**.

Selain kemungkinan terdapatnya subruang dari suatu ruang vektor, antara vektor satu dengan vektor-vektor lainnya kemungkinan terdapat hubungan yang disebut kombinasi linier. Berikut ini akan diberikan definisi mengenai kombinasi linier vektor-vektor.

Definisi 2.1.3.c

Suatu vektor **w** disebut kombinasi linier dari vektor-vektor $\mathbf{v}_1,...,\mathbf{v}_r$ jika dapat dinyatakan ke dalam bentuk $\mathbf{w} = k_1\mathbf{v}_1 + ... + k_r\mathbf{v}_r$ dengan $k_1,...,k_r$ adalah skalar.

Definisi 2.1.3.d

Jika **S** = $\{\mathbf{v}_1,...,\mathbf{v}_r\}$adalah suatu himpunan vektor dalam suatu ruang vektor **V**, maka subruang **W** dari **V** yang mengandung semua kombinasi linier dari vektor-vektor dalam **S** disebut ruang terentang oleh $\mathbf{v}_1,...,\mathbf{v}_r$ dan vektor-vektor $\mathbf{v}_1,...,\mathbf{v}_r$ adalah rentang **W** atau dapat ditulis sebagai

W = *span*(**S**) atau **W** = *span*$\{\mathbf{v}_1,...,\mathbf{v}_r\}$

Misalkan terdapat vektor **w** dalam **W**, maka subruang **W** dari **V** yang mengandung semua kombinasi linier dari vektor-vektor dalam **S** disebut ruang terentang oleh $\mathbf{v}_1,...,\mathbf{v}_r$ dan dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{w} = k_1\mathbf{v}_1 + ... + k_r\mathbf{v}_r$$

Berdasarkan definisi 2.1.3.c dan d secara umum, mungkin ada lebih dari satu cara untuk menyatakan suatu vektor dalam **V** sebagai suatu kombinasi linier dari vektor-vektor dalam suatu himpunan rentang. Definisi berikut ini akan dijelaskan mengenai syarat-syarat, dimana suatu vektor dalam **V** dapat dinyatakan suatu kombinasi linier dari vektor-vektor rentang dalam tepat satu cara.

Definisi 2.1.3.e

Jika **S** = $\{\mathbf{v}_1,...,\mathbf{v}_r\}$ adalah himpunan vektor-vektor tak kosong, maka persamaan vektor

$$k_1\mathbf{v}_1 + ... + k_r\mathbf{v}_r = 0$$

memiliki paling tidak satu penyelesaian, yaitu :

$$k_1 = 0,...,k_r = 0$$

Jika ini adalah satu-satunya penyelesaian, maka **S** disebut himpunan yang bebas linier.

Kemudian, berdasarkan definisi 2.1.3.d dan e, terdapat suatu definisi yang menjelaskan hubungan antara bebas linier dan merentang dimana dapat ditulis sebagai definisi berikut :

Definisi 2.1.3.f

Jika ruang vektor **V** dan **S** = $\{\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_r\}$ adalah himpunan vektor-vektor dalam **V**, maka **S** disebut basis untuk **V** jika dua syarat berikut dipenuhi :

1. **S** bebas linier
2. **S** merentang **V**

Selanjutnya, akan didefinisikan mengenai dimensi dan hubungannya terhadap basis.

Definisi 2.1.3.g

Suatu ruang vektor tak nol **V** disebut berdimensi hingga jika berisi suatu himpunan vektor berhingga $\{\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_r\}$ yang membentuk suatu basis. Jika tidak ada himpunan yang seperti itu, maka **V** disebut berdimensi tak hingga.

Definisi 2.1.3.h

Dimensi suatu vektor berdimensi hingga **V**, yang dinyatakan dengan dim(**V**), didefinisikan sebagai jumlah vektor dalam suatu basis untuk **V**.

Berdasarkan definisi-definisi yang telah disebutkan di atas dari definisi 2.1.3.a-g mengenai ruang vektor dan kemungkinan-kemungkinan yang dimiliki, maka pada bagian ini akan dijelaskan mengenai ruang-ruang vektor yang berkaitan dengan matriks yaitu *rank* dan *full rank*.

Definisi 2.1.3.i

Misalkan untuk matriks yang berukuran *m* x *n*,

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

Vektor-vektor

$$\mathbf{r}_1 = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \end{bmatrix}$$
$$\vdots$$
$$\mathbf{r}_m = \begin{bmatrix} a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

dalam $\mathbb{R}^n$ yang dibentuk dari baris-baris **A** disebut vektor-vektor baris dari **A** dan vektor-vektor

$$\mathbf{c}_1 = \begin{bmatrix} a_{11} \\ \vdots \\ a_{m1} \end{bmatrix}, \ldots, \mathbf{c}_n = \begin{bmatrix} a_{1n} \\ \vdots \\ a_{mn} \end{bmatrix}$$

dalam $\mathbb{R}^m$ yang dibentuk dari kolom-kolom **A** disebut vektor-vektor kolom dari **A**.

Definisi 2.1.3.j

Jika matriks **A** berukuran *m* x *n*, maka subruang dari $\mathbb{R}^n$ yang direntang oleh vektor-vektor baris dari **A** disebut ruang baris dari **A**, dan subruang dari $\mathbb{R}^m$ yang direntang oleh vektor-kolom disebut ruang kolom dari **A**.

Apabila ruang baris dan ruang kolom dihubungkan dengan definisi dimensi, maka diperoleh suatu teorema berikut :

Teorema 2.1.3.a

Jika **A** adalah sebarang matriks, maka ruang baris dan ruang kolom mempunyai dimensi yang sama.

Definisi 2.1.3.k

Dimensi dari ruang baris dan ruang kolom dari suatu matriks **A** disebut *rank* dari **A**.

Jika **A** adalah suatu matriks *m* x *n*, maka vektor-vektor baris terletak pada

$\mathbb{R}^n$ dan vektor-vektor kolom terletak pada $\mathbb{R}^m$. Hal ini mengimplikasikan bahwa ruang baris dari **A** paling tinggi berdimensi *n* dan ruang kolom dari **A** paling tinggi berdimensi *m*. Berdasarkan teorema 2.1.3.a, dimana ruang baris dan ruang kolom **A** mempunyai dimensi yang sama, maka jika $m \neq n$, *rank* paling tinggi adalah nilai yang lebih kecil dari *m* dan *n*. Hal ini dapat dinyatakan dengan

$$r(\mathbf{A}) \leq min(m, n)$$

dimana *min*(*m*, *n*) menyatakan angka yang lebih kecil antara *m* dan *n*.

Dengan demikian, *rank* **A** memiliki nilai tertinggi yang dapat dinyatakan dalam definisi berikut :

Definisi 2.1.3.*l*

Matriks **A** berukuran *m* x *n* dikatakan *full rank* jika $r(\mathbf{A}) = min(m, n)$.

2.1.4 Invers Matriks

Definisi 2.1.4.a

Jika **A** adalah suatu matriks bujur sangkar dan jika sebuah matriks **B** yang berukuran sama bisa didapatkan sedemikian sehingga **AB** = **BA** = **I**, maka **A** disebut bisa dibalik dan **B** disebut invers dari **A**.

Apabila invers matriks dihubungkan dengan *rank* matriks, maka definisi invers matriks berdasarkan Rencher, 1998 dapat ditulis sebagai :

Definisi 2.1.4.b

Misalkan **A** adalah matriks bujur sangkar yang *full rank*, **A** dikatakan *nonsingular* apabila **A** memiliki $\mathbf{A}^{-1}$ yang unik atau tunggal sedemikian sehingga $\mathbf{AA}^{-1} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{I}$.

Jika $\mathbf{A}^T = \mathbf{A}^{-1}$ sedemikian sehingga berlaku $\mathbf{AA}^T = \mathbf{A}^T\mathbf{A} =$ **I**, maka **A** disebut *matriks ortogonal*.

Jika **A** adalah matriks bujur sangkar tetapi tidak *full rank*, maka **A** tidak memiliki invers dan **A** dikatakan *singular*.

Matriks **A** dikatakan singular adalah jika semua elemen pada salah satu baris atau kolom adalah nol atau jika semua kofaktor dari elemen suatu baris atau kolom adalah nol.

Sifat-sifat dari invers matriks :

1. Jika **A** dan **B** nonsingular, maka $(\mathbf{AB})^{-1} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1}$
2. Jika **A** nonsingular, **AB = AC** maka **B = C**

2.1.5 *Norm* dalam Ruang Berdimensi-*n Euclidean*

Misalkan terdapat suatu ruang vektor yang berdimensi *n* misalkan $\mathbb{R}^n$ dan terdapat suatu vektor **u** = $(u_1,...,u_n)$, **v** = $(v_1,...,v_n)$ dan **w** = $(w_1,...,w_n)$ yang merupakan vektor-vektor dalam $\mathbb{R}^n$ dimana ruang vektor tersebut memenuhi 10 aksioma yaitu :

1. Jika **u** dan **v** berada dalam $\mathbb{R}^n$, maka **u** + **v** berada dalam $\mathbb{R}^n$
2. **u + v = v + u**
3. **u** + (**v** + **w**) = (**u** + **v**) + **w**
4. Ada suatu vektor nol **0** dalam $\mathbb{R}^n$ sedemikian sehingga **u + 0 = 0 + u** untuk semua **u** dalam $\mathbb{R}^n$
5. Untuk setiap **u** dalam $\mathbb{R}^n$, ada suatu vektor **–u** dalam $\mathbb{R}^n$ yang disebut negatif dari **u**, sedemikian sehingga **u** + (–**u**) = (–**u**) + **u** = **0**
6. Jika *k* dan *l* adalah sebarang skalar dan **u** adalah sebarang vektor dalam $\mathbb{R}^n$, maka *k***u** ada dalam $\mathbb{R}^n$
7. *k*(**u** + **v**) = *k*(**v** + **u**)
8. (*k* + *l*)**u** = *k***u** + *l***u**
9. *k*(*l***u**) = (*kl*)**u**
10. 1**u = u**

maka ***hasil kali dalam Euclidean*** **u.v** didefinisikan sebagai

$< \mathbf{u}, \mathbf{v} >= u_1 v_1 + ... + u_n v_n$.

Hasil kali dalam *Euclidan* tersebut memiliki 4 sifat aritmetika yang terangkum dalam teorema yang bersumber dari Anton.H, 2000 sebagai berikut :

Teorema 2.1.5

Jika **u**,**v**, dan **w** adalah vektor-vektor dalam $\mathbb{R}^n$ dan *k* adalah sebarang skalar, maka

a) <**u**,**v**> = <**v**,**u**> **(aksioma kesimetrisan)**

b) **<u + v,w> = <u,w> + <v,w>** **(aksioma penjumlahan)**

c) **<*k*u,v> = *k* <u,v>** **(aksioma kehomogenan)**

d) <**v**,**v**> ≥ 0 **(aksioma kepositifan)**

<**v**,**v**> = 0, jika dan hanya jika **v = 0**.

Karena $\mathbb{R}^n$ adalah suatu ruang vektor yang memenuhi 10 aksioma dan definisi hasil kali dalam, maka $\mathbb{R}^n$ disebut ruang berdimensi-*n Euclidean.*

Misalkan terdapat suatu vektor **u** = ($u_1,...,u_n$) dalam $\mathbb{R}^n$, norm *Euclidean* dapat didefinisikan sebagai

$$\| \mathbf{u} \| = < \mathbf{u}, \mathbf{u} >^{\frac{1}{2}} = \sqrt{u_1^2 + ... + u_n^2} \qquad (2.1.2)$$

2.1.6 Keortogonalan

Definisi 2.1.6.a

Dua vektor **u** dan **v** dalam suatu ruang hasil kali dalam disebut ortogonal jika < **u**,**v** > = 0.

Himpunan vektor $\{ v_1,...,v_n \}$ dalam $\mathbb{R}^n$ disebut himpunan ortogonal jika semua pasangan dalam himpunan vektor tersebut adalah ortogonal yaitu jika

$< \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j >= 0$ ketika $i \neq j$ untuk i, j = 1, 2,…, n

Dalam definisi tersebut menghasilkan suatu teorema berikut :

Teorema 2.1.6

Jika **S** = { $\mathbf{v}_1,...,\mathbf{v}_n$ } adalah suatu himpunan vektor-vektor tak nol yang ortogonal dalam suatu ruang hasil kali dalam, maka **S** bebas secara linier.

Bukti :

Misalkan $c_1, c_2 ..., c_n$ adalah skalar , anggap $c_1\mathbf{v}_1 + c_2\mathbf{v}_2 + ... + c_n\mathbf{v}_n = \mathbf{0}$

Untuk menunjukkan **S** bebas linier, berdasarkan definisi 2.1.3.e akan dibuktikan $c_1 = c_2 = ...c_n = 0$.

Kemudian untuk setiap $\mathbf{v}_i$ dalam **S** akan didapatkan

$< c_1\mathbf{v}_1 + c_2\mathbf{v}_2 + ... + c_n\mathbf{v}_n, \mathbf{v}_i > = < \mathbf{0}, \mathbf{v}_i > = 0$

atau secara ekuivalen,

$c_1 < \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_i > + c_2 < \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_i > + ... + c_n < \mathbf{v}_n, \mathbf{v}_i > = 0$

Karena { $\mathbf{v}_1,...,\mathbf{v}_n$ } adalah himpunan ortogonal, maka $< \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j > = 0$ jika $j \neq i$, sehingga persamaan dapat diringkas menjadi $c_i < \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_i > = 0$

Dengan hipotesa $\mathbf{v}_i \neq \mathbf{0}$, maka berdasarkan aksioma kepositifan akan diperoleh $< \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_i > \neq 0$. Oleh karena itu yang harus memiliki nilai 0 adalah c_i. Hal ini juga berlaku untuk semua $i = 1,\dots,n$ sehingga disimpulkan bahwa { $\mathbf{v}_1,...,\mathbf{v}_n$ } adalah bebas linier.

Terbukti

2.1.7 Diferensiasi pada Vektor dan Matriks

Misalkan terdapat vektor **y** berukuran *n* x 1, dimana **y** = **Ax** dengan **A** matriks bujur sangkar berukuran *n* x *n* dan vektor **x** berukuran *n* x 1.

$$\mathbf{y} = \mathbf{Ax}$$

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11}x_1 + \ldots + a_{1n}x_n \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + \ldots + a_{nn}x_n \end{bmatrix},$$

maka diferensiasi pada matriks dapat ditulis sebagai

$$\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial y_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \frac{\partial y_n}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial y_n}{\partial x_n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \mathbf{A} \qquad (2.1.3)$$

dan misalkan $\mathbf{y} = \mathbf{x}^T\mathbf{Ax}$, dimana **A** adalah matriks simetris, maka

$$\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{x}^T\mathbf{Ax}}{\partial \mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{x}^T\mathbf{Ax}}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial \mathbf{x}^T\mathbf{Ax}}{\partial x_n} \end{bmatrix} = 2\mathbf{Ax} \qquad (2.1.4)$$

Contoh :

Misalkan **A** adalah matriks ukuran 3 x 3

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}, \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix},$$

maka $\mathbf{x}^T\mathbf{Ax} = x_1^2a_{11} + 2x_1x_2a_{12} + 2x_1x_3a_{13} + x_2^2a_{22} + 2x_2x_3a_{23} + x_3^2a_{33}$

$$\frac{\partial \mathbf{x}^T\mathbf{Ax}}{\partial \mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{x}^T\mathbf{Ax}}{\partial x_1} \\ \frac{\partial \mathbf{x}^T\mathbf{Ax}}{\partial x_2} \\ \frac{\partial \mathbf{x}^T\mathbf{Ax}}{\partial x_3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2x_1a_{11} + 2x_2a_{12} + 2x_3a_{13} \\ 2x_1a_{12} + 2x_2a_{22} + 2x_3a_{23} \\ 2x_1a_{13} + 2x_2a_{23} + 2x_3a_{33} \end{bmatrix} = 2\mathbf{Ax}$$

Dalam subbab berikut akan dijelaskan mengenai variabel acak univariat, bivariat dan multivariat beserta matriks variansi kovariansi serta matriks korelasi.

2.2. Variabel *Random* Univariat

Misalkan X adalah suatu variabel *random* dari suatu distribusi tertentu dengan mean μ_x dan variansi σ_x^2. Pada umumnya, nilai dari parameter μ_x dan σ_x^2 tidak diketahui sehingga untuk mengatasi masalah tersebut, dapat dilakukan suatu percobaan *random* yang dilakukan sebanyak *n* kali dan di bawah kondisi yang sama. Misalkan variabel *random* X_i menjadi fungsi dari hasil ke-*i*, *i* =1,…,*n* dan dapat dinyatakan sebagai $X_1, X_2, ..., X_n$, maka $X_1, X_2, ..., X_n$ merupakan observasi-observasi dari sampel *random* dari suatu distribusi yang ditetapkan. Misalkan didefinisikan suatu statistik yaitu

$$\overline{X} = \frac{\sum_{i=1}^{n} X_i}{n} \tag{2.2.1}$$

yang disebut dengan *mean* dari sampel *random* atau *mean* sampel dan statistik

$$S^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} (X_i - \overline{X})^2}{n-1} \tag{2.2.2}$$

yang disebut variansi dari sampel *random* atau variansi sampel. Jika hasil percobaannya adalah $X_1 = x_1, ..., X_n = x_n$, maka $\overline{x} = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i}{n}$ dan $s^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \overline{x})^2}{n-1}$ adalah suatu nilai dari statistik $\overline{X}$ dan S^2 yang diketahui, dengan harapan nilai tersebut dapat memberikan informasi mengenai parameter μ_x dan σ_x^2 yang tidak diketahui.

2.3 Variabel *Random* Bivariat

Misalkan X adalah suatu variabel *random* dengan *mean* μ_x dan variansi σ_x^2, sedangkan Y adalah suatu variabel *random* dengan *mean* μ_y dan variansi σ_Y^2, maka

$$\operatorname{cov}(X, Y) = \sigma_{XY} = E(XY) - \mu_X \mu_Y$$

dikatakan kovariansi antara X dan Y dimana kovariansi tersebut mengukur hubungan antara kedua variabel *random* X dan Y.

Misalkan X dan Y merupakan variabel *random* yang saling bebas, maka

$$\mathrm{E}(XY) = \mathrm{E}(X)\mathrm{E}(Y)$$

Berdasarkan sifat saling bebas dari dua variabel *random* X dan Y, dapat dibuktikan $\sigma_{XY} = 0$

Bukti :

Dengan menggunakan sifat saling bebas, maka

$$\begin{aligned} \operatorname{cov}(X,Y) = \sigma_{XY} &= E(XY) - \mu_X \mu_Y \\ &= E(X)E(Y) - \mu_X \mu_Y \\ &= \mu_X \mu_Y - \mu_X \mu_Y \\ &= 0 \end{aligned}$$

Terbukti

Kemudian, misalkan dilakukan percobaan *random* yang dilakukan berulang kali sebanyak *n* untuk variabel *random* X dan Y, dan misalkan variabel *random* X_i dan Y_i menjadi fungsi dari hasil ke-*i*, *i* = 1,…,*n* dan dapat dinyatakan dengan $X_1, X_2, ..., X_n$ dan $Y_1, Y_2, ..., Y_n$, maka $X_1, X_2, ..., X_n$ dan $Y_1, Y_2, ..., Y_n$ merupakan observasi-observasi dari suatu sampel *random*. Jika nilai percobaannya $X_i = x_i$ dan $Y_i = y_i$, maka kovariansi antara variabel X_i dengan Y_i dimana *i* = 1,…,*n* didefinisikan sebagai

$$s_{xy} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})(y_i - \overline{y})}{n-1} = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - n\overline{x}\,\overline{y}}{n-1} \tag{2.3.1}$$

2.4 Vektor Mean dan Matriks Variansi Kovariansi

Pada subbab sebelumnya, telah dijelaskan mengenai variabel *random* bivariat dan kovariansinya. Berikut ini akan dijelaskan mengenai kovariansi dimana variabel *random* yang dimiliki lebih dari dua (multivariat).

Misalkan terdapat *k* variabel *random* yaitu $X_1, X_2, ..., X_k$ dan dilakukan percobaan *random* yang dilakukan berulang kali sebanyak *n*. Misalkan variabel-variabel *random* $X_{i1}, X_{i2}, ..., X_{ik}$, merupakan fungsi dari hasil ke-*i*, *i* = 1,…,*n* dan misalkan nilai-nilai untuk $X_{i1}=x_{i1}, X_{i2}=x_{i2},\dots,X_{ik}=x_{ik}$, maka dalam bentuk matriks dapat ditulis sebagai berikut :

$$\mathbf{X}=\begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1k} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nk} \end{bmatrix}$$

dimana **X** adalah matriks yang entri-entrinya berisi nilai-nilai dari variabel-variabel *random* $X_{i1}, X_{i2},\dots,X_{ik}$, i = 1,…,n. Jika ditulis dalam bentuk kolom dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{X}=\begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_k \end{bmatrix}$$

dan dalam bentuk baris dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{X}=\begin{bmatrix} \mathbf{x}_1^T \\ \mathbf{x}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{x}_n^T \end{bmatrix}$$

Misalkan $\mathbf{j}=\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}$ adalah vektor **1** berukuran n x 1, maka

$$\mathbf{jj}^T=\mathbf{J}=\begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

berukuran n x n. Vektor *mean* sampel dapat dituliskan sebagai $\overline{\mathbf{x}}=\begin{bmatrix} \overline{x}_1 \\ \vdots \\ \overline{x}_k \end{bmatrix}$, dimana

$$\overline{\mathbf{x}}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_{il}=\frac{1}{n}\mathbf{X}^T\mathbf{j} \qquad (2.4.1)$$

Selain didefinisikan vektor *mean* sampel, matriks variansi kovariansi dapat dituliskan sebagai

$$S = s_{lq} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1k} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{k1} & s_{k2} & \cdots & s_{kk} \end{bmatrix} \tag{2.4.2}$$

dimana

$$s_{ll} = s_l^{\,2} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_{il} - \bar{x}_l)^2}{n-1} \tag{2.4.3}$$

adalah elemen atau entri dari diagonal matriks variansi kovariansi yang menyatakan variansi sampel dari variabel *random* ke-l, $l = 1,\ldots,k$ dan

$$s_{lq} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_{il} - \bar{x}_l)(x_{iq} - \bar{x}_q)}{n-1} \tag{2.4.4}$$

menyatakan kovariansi antara variabel *random* ke-l dan variabel *random* ke-q dimana l, $q = 1,\ldots,k$ dan $l \neq q$.

Matriks variansi kovariansi pada persamaan (2.4.2) dapat juga dinyatakan sebagai (lihat lampiran 2).

$$S = \frac{1}{n-1}\left(\sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i^T - n\bar{\mathbf{x}}\,\bar{\mathbf{x}}^T \right) \tag{2.4.5}$$

Selain dari bentuk S pada persamaan (2.4.5), S dapat juga ditulis sebagai :

$$S = \frac{\tilde{\mathbf{X}}^T \tilde{\mathbf{X}}}{n-1} \tag{2.4.6}$$

dimana

$$\tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{X} - \mathbf{j}\bar{\mathbf{x}}^T = \begin{bmatrix} x_{11} - \bar{x}_1 & \cdots & x_{1k} - \bar{x}_k \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n1} - \bar{x}_1 & \cdots & x_{nk} - \bar{x}_k \end{bmatrix}$$

dan $\tilde{\mathbf{X}}$ disebut matriks *mean centered* dari **X**.

Bukti :

Berdasarkan persamaan (2.4.5) dan salah satu bagian sisi kanan dari S yaitu $\sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i^T$ yang dapat ditulis sebagai $\sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i^T = \mathbf{x}_1 \mathbf{x}_1^T + \ldots + \mathbf{x}_n \mathbf{x}_n^T = \mathbf{X}^T \mathbf{X}$, maka persamaan (2.4.5) dapat dituliskan sebagai :

$$S = \frac{1}{n-1}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X} - \frac{1}{n}\mathbf{X}^T\mathbf{j}\mathbf{j}^T\mathbf{X} \right)$$

$$S = \frac{1}{n-1}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X} - \mathbf{X}^T(\frac{1}{n}\mathbf{J})\mathbf{X} \right)$$

$$S = \frac{1}{n-1}\mathbf{X}^T\left(\mathbf{I} - \frac{1}{n}\mathbf{J} \right)\mathbf{X}$$

Bagian dari S yaitu $\left(\mathbf{I} - \frac{1}{n}\mathbf{J} \right)$ dapat ditulis menjadi

$$\left(\mathbf{I} - \frac{1}{n}\mathbf{J} \right)^T\left(\mathbf{I} - \frac{1}{n}\mathbf{J} \right) = \left(\mathbf{I} - \frac{1}{n}\mathbf{J} \right)$$

(bukti dapat dilihat pada lampiran 3)

Dengan demikian S dapat dinotasikan sebagai

$$S = \frac{1}{n-1}\mathbf{X}^T\left(\mathbf{I} - \frac{1}{n}\mathbf{J} \right)^T\left(\mathbf{I} - \frac{1}{n}\mathbf{J} \right)\mathbf{X}$$

Berdasarkan sifat perkalian matriks, bagian dari S yaitu $\left(\mathbf{I} - \frac{1}{n}\mathbf{J} \right)\mathbf{X}$ dapat diuraikan menjadi

$$\begin{aligned} \left(\mathbf{I} - \frac{1}{n}\mathbf{J} \right)\mathbf{X} &= \mathbf{X} - \frac{1}{n}\mathbf{J}\mathbf{X} \\ &= \mathbf{X} - \frac{1}{n}\mathbf{j}\mathbf{j}^T\mathbf{X} = \mathbf{X} - \mathbf{j}\bar{\mathbf{x}}^T \\ &= \tilde{\mathbf{X}} \end{aligned}$$

Berdasarkan sifat transpos dan perkalian matriks, juga diperoleh

$$\mathbf{X}^T\left(\mathbf{I} - \frac{1}{n}\mathbf{J} \right)^T = \left(\left(\mathbf{I} - \frac{1}{n}\mathbf{J} \right)\mathbf{X} \right)^T = \tilde{\mathbf{X}}^T$$

Jadi, dari persamaan (2.4.5), dapat ditunjukkan bahwa bentuk lain dari matriks S adalah

$$S = \frac{\tilde{\mathbf{X}}^T\tilde{\mathbf{X}}}{n-1} \qquad (2.4.7)$$

2.5 Matriks Korelasi

Pada subbab sebelumnya telah dijelaskan mengenai kovariansi antara X dan Y

yaitu σ_{XY}. Dengan melakukan pembagian σ_{XY} dengan σ_X dan σ_Y, maka akan diperoleh *korelasi populasi* yang dapat ditulis sebagai

$$\rho_{XY} = \frac{\sigma_{XY}}{\sigma_X \sigma_Y} = \frac{E(X-\mu_X)(Y-\mu_Y)}{\sqrt{E(X-\mu_X)^2}\sqrt{E(Y-\mu_Y)^2}} \tag{2.5.1}$$

dan korelasi sampel dapat ditulis sebagai

$$r_{xy} = \frac{s_{xy}}{s_x s_y} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y})^2}} \tag{2.5.2}$$

Misalkan **X** adalah matriks yang entri-entrinya berisi nilai-nilai dari variabel-variabel *random* $X_{i1}, X_{i2}, ..., X_{ik}$, dimana $X_{i1}, X_{i2}, ..., X_{ik}$ merupakan fungsi dari hasil ke-*i*, *i* = 1,…,*n* dan dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1k} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nk} \end{bmatrix},$$

maka korelasi sampel antara variabel *random* ke-*l* dan variabel *random* ke-*q* dimana *l*, *q* = 1,…,*k* diberikan sebagai

$$r_{lq} = \frac{s_{lq}}{s_l s_q} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_{il}-\bar{x}_l)(x_{iq}-\bar{x}_q)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_{il}-\bar{x}_l)^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_{iq}-\bar{x}_q)^2}}$$

Matriks korelasi didefinisikan sebagai

$$\mathbf{R} = (r_{lq}) = \begin{bmatrix} 1 & r_{12} & \cdots & r_{1k} \\ r_{21} & 1 & \cdots & r_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ r_{k1} & r_{k2} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \tag{2.5.3}$$

Karena **R** simetris, maka $r_{lq} = r_{ql}$.

2.6 Pengukuran Keseluruhan Variabilitas

Berdasarkan penjelasan sebelumnya, matriks variansi kovariansi terdiri dari variansi *k* variabel dan kovariansi antara semua pasangan variabel, dengan demikian dapat menjelaskan keseluruhan variasi pada data. Namun, terkadang diperlukan suatu teknik penghitungan yang lebih sederhana untuk mengukur keseluruhan variasi tersebut. Berdasarkan Rencher, 1998, salah satu pengukuran yang dapat mengukur keseluruhan variabilitas dapat dinyatakan sebagai tr(S) yang dikenal sebagai *variansi sampel total* dan dapat ditulis sebagai

$$s_{11} + ... + s_{kk} = tr(S) \qquad (2.6.1)$$

Salah satu alasan untuk mengukur keseluruhan variabilitas hanya menggunakan *trace* S adalah karena variabel yang digunakan dalam membentuk suatu matriks variansi kovariansi adalah variabel *random* dimana sifat dari variabel *random* adalah saling bebas terhadap variabel satu dengan variabel yang lain. Telah dijelaskan sebelumnya pada subbab 2.3 mengenai variabel *random* bivariat, konsekuensi dari variabel-variabel yang saling bebas adalah kovariansi antara dua variabel bernilai nol, sehingga keseluruhan variabilitas dari suatu variabel melalui matriks variansi kovariansi dapat ditentukan cukup dengan menggunakan *trace* S.

Pada subbab sebelumnya telah dijelaskan mengenai variabel *random* univariat, bivariat dan multivariat serta hubungan antara variabel satu dengan variabel lain melalui matriks variansi kovariansi dan korelasi. Selain melalui matriks variansi kovariansi dan korelasi, salah satu teknik yang digunakan untuk menganalisis hubungan antara variabel satu dengan variabel lainnya adalah melalui analisa regresi baik regresi linier berganda univariat maupun multivariat. Berikut ini akan dijelaskan mengenai regresi linier berganda univariat.

2.7 Regresi Linier Berganda Univariat

Dalam subbab berikut akan dijelaskan mengenai model dan taksiran parameter regresi beserta koefisien determinasi.

2.7.1 Model Regresi Linier Berganda Univariat

Misalkan terdapat variabel respon Y dan variabel prediktor $X_1, X_2, ..., X_k$

dengan n observasi, maka model regresi untuk observasi ke-i, $i = 1,\ldots,n$ dapat ditulis sebagai

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \ldots + \beta_k x_{ik} + \varepsilon_i \tag{2.7.1}$$
$$= \beta_0 + \sum_{l=1}^{k} \beta_l x_{il} + \varepsilon_i$$

dimana $i = 1,\ldots,n$ dan $\varepsilon_i \sim NIID(0,\sigma^2)$

Dengan asumsi :

1. E(ε_i) = 0, untuk semua $i = 1,\ldots,n$
2. Var(ε_i) = σ^2, untuk semua $i = 1,\ldots,n$
3. Cov($\varepsilon_i, \varepsilon_j$) = 0, untuk semua $i \neq j$.

Dalam notasi matriks dinyatakan dengan :

1. $\mathrm{E}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \mathbf{0}$
2. $\mathrm{E}(\boldsymbol{\varepsilon\varepsilon}^T) = \sigma^2\mathbf{I}$, **I** adalah matriks identitas
3. $\boldsymbol{\varepsilon}$ berdistribusi normal dengan *mean* **0** dan variansi $\sigma^2\mathbf{I}$

Dalam notasi matriks, persamaan (2.7.1) dapat ditulis sebagai :

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon} \tag{2.7.2}$$

atau
$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1k} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nk} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_k \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix} \tag{2.7.3}$$

dimana ,

y adalah vektor observasi dari variabel respon yang berukuran n x 1,

X adalah matriks observasi dari k variabel prediktor berukuran n x (k + 1),

β adalah vektor parameter regresi berukuran (k + 1) x 1,

ε adalah vektor *error* berukuran n x 1.

Berikut ini akan dijelaskan tentang taksiran parameter pada model regresi linier berganda univariat dengan metode *Least Squares*.

2.7.2 Taksiran Parameter Regresi dengan Metode *Least Squares*

Metode *Ordinary Least Squares* adalah salah satu metode yang digunakan untuk mengestimasi parameter dalam model regresi seperti pada persamaan (2.7.2). Untuk menaksir parameter $\beta_0, \beta_1, ..., \beta_k$, OLS meminimumkan jumlah kuadrat error (SSE) yaitu :

$$\begin{aligned} S = S(\beta_0, \beta_1, ..., \beta_k) &= \sum_{i=0}^{n} \varepsilon_i^2 \\ &= \sum_{i=0}^{n} (y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + ... + \beta_k x_{ik}))^2 \end{aligned} \tag{2.7.4}$$

dimana persamaan (2.7.4) disebut fungsi *least squares*.

Untuk mencari $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ yaitu penaksir parameter regresi $\boldsymbol{\beta}$ yang meminimumkan persamaan (2.7.4), maka persamaan (2.7.4) dapat diturunkan secara parsial, dengan kata lain penaksir *Ordinary Least Squares* harus memenuhi kondisi yaitu :

$$\frac{\partial S}{\partial \boldsymbol{\beta}}\Big|_{\hat{\boldsymbol{\beta}}} = \frac{\partial (\sum_{i=0}^{n} \varepsilon_i^2)}{\partial \boldsymbol{\beta}}\Big|_{\hat{\boldsymbol{\beta}}} = 0 \tag{2.7.5}$$

sedemikian rupa sehingga fungsi *least squares* pada persamaan (2.7.4) yang memenuhi persamaan (2.7.5) dapat diuraikan menjadi,

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial \beta_0}\Big|_{\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, ..., \hat{\beta}_k} &= -2\sum_{i=0}^{n} (y_i - (\hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^{n} \hat{\beta}_l x_{il})) = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial \beta_l}\Big|_{\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, ..., \hat{\beta}_k} &= -2\sum_{i=0}^{n} (y_i - (\hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^{n} \hat{\beta}_l x_{il}))x_{il} = 0 \end{aligned} \tag{2.7.6}$$

Dengan menguraikan persamaan (2.7.6) akan didapat persamaan berikut ini :

$$\begin{aligned} & n\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 \sum_{i=1}^{n} x_{i1} + \hat{\beta}_2 \sum_{i=1}^{n} x_{i2} + ... + \hat{\beta}_k \sum_{i=1}^{n} x_{ik} = \sum_{i=1}^{n} y_i \\ & \hat{\beta}_0 \sum_{i=1}^{n} x_{i1} + \hat{\beta}_1 \sum_{i=1}^{n} x^2{}_{i1} + \hat{\beta}_2 \sum_{i=1}^{n} x_{i1}x_{i2} + ... + \hat{\beta}_k \sum_{i=1}^{n} x_{i1}x_{ik} = \sum_{i=1}^{n} x_{i1}y_i \\ & \vdots \\ & \hat{\beta}_0 \sum_{i=1}^{n} x_{ik} + \hat{\beta}_1 \sum_{i=1}^{n} x_{ik}x_{i1} + \hat{\beta}_2 \sum_{i=1}^{n} x_{ik}x_{i2} + ... + \hat{\beta}_k \sum_{i=1}^{n} x^2{}_{ik} = \sum_{i=1}^{n} x_{ik}y_i \end{aligned} \tag{2.7.7}$$

Dari penguraian persamaan (2.7.7), terlihat bahwa terdapat sistem persamaan normal yang mengandung parameter regresi yang tidak diketahui. Solusi untuk sistem persamaan normal tersebut dinamakan penaksir *least squares* $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, ..., \hat{\beta}_k$. Selain dari persamaan (2.7.4), penaksir *least squares* $\hat{\boldsymbol{\beta}}$, dapat ditulis sebagai vektor yaitu :

$$S(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=0}^{n} \varepsilon_i^2$$

$$S(\boldsymbol{\beta}) = \boldsymbol{\varepsilon}^T \boldsymbol{\varepsilon}$$

$$S(\boldsymbol{\beta}) = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^T (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) \tag{2.7.8}$$

Dengan menggunakan sifat matriks, maka persamaan (2.7.8) dapat dinyatakan sebagai :

$$S(\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{y}^T\mathbf{y} - \boldsymbol{\beta}^T\mathbf{X}^T\mathbf{y} - \mathbf{y}^T\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\beta}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} \tag{2.7.9}$$

Karena $\boldsymbol{\beta}^T\mathbf{X}^T\mathbf{y}$ adalah matriks berukuran 1 x 1(skalar) dan transpos $\left(\boldsymbol{\beta}^T\mathbf{X}^T\mathbf{y}\right)^T$ = $\mathbf{y}^T\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$ juga berukuran 1 x 1 (skalar), maka persamaan (2.7.9) dapat ditulis sebagai

$$S(\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{y}^T\mathbf{y} - 2\boldsymbol{\beta}^T\mathbf{X}^T\mathbf{y} + \boldsymbol{\beta}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} \tag{2.7.10}$$

Kemudian dengan menurunkan persamaan (2.7.10) terhadap $\boldsymbol{\beta}$, maka penaksir *Least Squares* memenuhi kondisi sedemikian rupa sehingga (bukti dapat dilihat pada lampiran 1)

$$\frac{\partial S}{\partial \boldsymbol{\beta}}\Big|_{\hat{\boldsymbol{\beta}}} = -2\hat{\boldsymbol{\beta}}^T\mathbf{X}^T\mathbf{y} + 2\mathbf{X}^T\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} = 0 \tag{2.7.11}$$

Jadi, penaksir *least squares* untuk $\boldsymbol{\beta}$ adalah

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y} \tag{2.7.12}$$

Solusi ini dapat dipenuhi jika :

1. **X** nya *full rank,*
2. tidak ada X_l yang merupakan kombinasi linier dari X lainnya atau *uncorrelated*,
3. jumlah observasi harus melebihi jumlah variabel prediktor.

Sifat-sifat dari penaksir *least squares*.

1. *Unbiased*

   Jika E($\hat{\boldsymbol{\beta}}$) = $\boldsymbol{\beta}$, maka $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ adalah penaksir yang *unbiased* untuk $\boldsymbol{\beta}$.

Bukti :

$$
\begin{aligned}
E(\hat{\boldsymbol{\beta}}) &= E[(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y}] = E[(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{\varepsilon})] \\
&= E[(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}+(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\boldsymbol{\varepsilon}] \\
&= (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{X}E(\boldsymbol{\beta})+(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T E(\boldsymbol{\varepsilon}) \\
&= \mathbf{I}\boldsymbol{\beta}+(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T E(\boldsymbol{\varepsilon}) \\
&= \boldsymbol{\beta}
\end{aligned}
$$

Karena E($\boldsymbol{\varepsilon}$) = **0** dan $(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{X}=\mathbf{I}$, maka terbukti $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ adalah penaksir yang *unbiased* untuk $\boldsymbol{\beta}$.

2. Variansi minimum

Anggap E(ε_i) = 0 dan Var(ε_i) = σ^2, untuk semua i = 1,...,n dengan demikian, maka matriks variansi kovariansi untuk $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ yang berukuran (k + 1) x (k + 1) dinyatakan oleh

$$
\begin{aligned}
\operatorname{var}\begin{pmatrix}\hat{\beta}_0\\ \vdots\\ \hat{\beta}_k\end{pmatrix} &= \begin{pmatrix}\operatorname{var}\left(\hat{\beta}_0,\hat{\beta}_0\right) & \cdots & \operatorname{cov}\left(\hat{\beta}_0,\hat{\beta}_k\right)\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ \operatorname{cov}\left(\hat{\beta}_k,\hat{\beta}_0\right) & \cdots & \operatorname{var}\left(\hat{\beta}_k,\hat{\beta}_k\right)\end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} E\left[\left(\hat{\beta}_0-E\left(\hat{\beta}_0\right)\right)^2\right] & \cdots & E\left[\left(\hat{\beta}_0-E\left(\hat{\beta}_0\right)\right)\left(\hat{\beta}_k-E\left(\hat{\beta}_k\right)\right)\right]\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ E\left[\left(\hat{\beta}_k-E\left(\hat{\beta}_k\right)\right)\left(\hat{\beta}_0-E\left(\hat{\beta}_0\right)\right)\right] & \cdots & E\left[\left(\hat{\beta}_0-E\left(\hat{\beta}_0\right)\right)^2\right]\end{pmatrix} \\
&= E\left\{\begin{bmatrix}\hat{\beta}_0-E\left(\hat{\beta}_0\right)\\ \vdots\\ \hat{\beta}_k-E\left(\hat{\beta}_k\right)\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\hat{\beta}_0-E\left(\hat{\beta}_0\right) & \cdots & \hat{\beta}_k-E\left(\hat{\beta}_k\right)\end{bmatrix}\right\} \\
&= E\left\{\left[\hat{\boldsymbol{\beta}}-E\left(\hat{\boldsymbol{\beta}}\right)\right]\left[\hat{\boldsymbol{\beta}}-E\left(\hat{\boldsymbol{\beta}}\right)\right]^T\right\} \\
&= \sigma^2\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}
\end{aligned}
$$

Bukti :

Karena telah terbukti $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ adalah penaksir yang *unbiased* untuk $\boldsymbol{\beta}$, maka

$$
\begin{aligned}
\operatorname{var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}) &= E\left\{\left[\hat{\boldsymbol{\beta}}-E(\hat{\boldsymbol{\beta}})\right]\left[\hat{\boldsymbol{\beta}}-E(\hat{\boldsymbol{\beta}})\right]^T\right\} \\
&= E\left\{\left[\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta}\right]\left[\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta}\right]^T\right\}
\end{aligned}
$$

Dari persamaan (2.7.12), dengan mensubtitusikan $\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}$ diperoleh

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{\beta}} &= (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y} \\ &= (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\left(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}\right) \\ &= \boldsymbol{\beta} + (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\boldsymbol{\varepsilon}\end{aligned}$$

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta} = (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\boldsymbol{\varepsilon}$$

sehingga diperoleh

$$\begin{aligned}\operatorname{var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}) &= E\left\{\left[\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\boldsymbol{\varepsilon}\right]\left[\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\boldsymbol{\varepsilon}\right]^T\right\} \\ &= E\left\{\left[\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}^T\mathbf{X}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\right]\right\} \\ &= \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T E(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}^T)\mathbf{X}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1} \\ &= \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\sigma^2\mathbf{I}\,\mathbf{X}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1} \\ &= \sigma^2\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{X}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1} \\ &= \sigma^2\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{X}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1} \\ &= \sigma^2\mathbf{I}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1} \\ &= \sigma^2\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\end{aligned}$$

Jika $\mathbf{C} = \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}$, maka variansi dari $\hat{\beta}_l$ adalah $C_{ll}\sigma^2$ dan kovariansi antara $\hat{\beta}_l, \hat{\beta}_q$ adalah $C_{lq}\sigma^2$.

Terbukti

Berdasarkan teorema **Gauss-Markov**, jika model regresi pada persamaan (2.7.2) memenuhi asumsi-asumsi yaitu :

1. E(ε_i) = 0, untuk semua i = 1,…,n

2. Var(ε_i) = σ^2, untuk semua i =1,...,n

3. Cov(ε_i , ε_j) = 0, untuk semua $i \neq j$.

maka taksiran yang didapat dengan menggunakan metode *least squares* yaitu $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X'X})^{-1}\mathbf{X'y}$ merupakan taksiran yang BLUE (*Best Linear Unbiased*

Estimator) dengan variansi yang minimum diantara semua penaksir *unbiased* linier.

Bukti :

Misal $\hat{\boldsymbol{\beta}}^*$ merupakan penaksir lain dari $\boldsymbol{\beta}$ yang *unbiased*. Karena $\hat{\boldsymbol{\beta}}^*$ penaksir linier, maka dapat dimisalkan bentuknya sebagai :

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}^* = \left[\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T + \mathbf{U}\right]\mathbf{y}$$

untuk suatu matriks **U** yang merupakan fungsi dari **X** dan berukuran sama seperti $\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T$ yaitu (k + 1) x n, sehingga nilai estimasi untuk $\hat{\boldsymbol{\beta}}^*$ dapat ditulis sebagai

$$\begin{aligned}
E(\hat{\boldsymbol{\beta}}^*) &= E\left\{\left[\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T + \mathbf{U}\right]\mathbf{y}\right\} \\
&= E\left\{\left[\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T + \mathbf{U}\right][\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}]\right\} \\
&= \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{X}\,E(\boldsymbol{\beta}) + \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T E(\boldsymbol{\varepsilon}) + \mathbf{UX}E(\boldsymbol{\beta}) + \mathbf{U}E(\boldsymbol{\varepsilon}) \\
&= \mathbf{I}\boldsymbol{\beta} + 0 + \mathbf{UX}\boldsymbol{\beta} + 0 \\
&= \left(\mathbf{I} + \mathbf{UX}\right)\boldsymbol{\beta}
\end{aligned}$$

Agar $\hat{\boldsymbol{\beta}}^*$ merupakan penaksir lain dari $\boldsymbol{\beta}$ yang *unbiased*, maka **UX = 0** sehingga matriks variansi kovariansi untuk $\hat{\boldsymbol{\beta}}^*$ dapat ditulis sebagai

$$\begin{aligned}
\operatorname{var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}^*) &= E\left\{\left[\hat{\boldsymbol{\beta}}^* - E(\hat{\boldsymbol{\beta}}^*)\right]\left[\hat{\boldsymbol{\beta}}^* - E(\hat{\boldsymbol{\beta}}^*)\right]^T\right\} \\
&= E\left\{\left[\hat{\boldsymbol{\beta}}^* - \boldsymbol{\beta}\right]\left[\hat{\boldsymbol{\beta}}^* - \hat{\boldsymbol{\beta}}\right]^T\right\}
\end{aligned}$$

dari $\hat{\boldsymbol{\beta}}^* = \left[\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T + \mathbf{U}\right]\mathbf{y}$ dan dengan mensubtitusikan $\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}$, maka

$$\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{\beta}}^* &= \left[\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T + \mathbf{U}\right]\mathbf{y} \\
&= \left[\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T + \mathbf{U}\right][\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}] \\
&= \boldsymbol{\beta} + \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{UX}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{U}\boldsymbol{\varepsilon}
\end{aligned}$$

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}^* - \hat{\boldsymbol{\beta}} = \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{UX}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{U}\boldsymbol{\varepsilon}$$

karena **UX = 0**, maka

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}^* - \boldsymbol{\beta} = \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{U}\boldsymbol{\varepsilon}$$

sehingga diperoleh

$$\begin{aligned}
\text{var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}^*) &= E\left\{\left[\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{U}\boldsymbol{\varepsilon}\right]\left[\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{U}\boldsymbol{\varepsilon}\right]^T\right\} \\
&= E\left\{\left[\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}^T\mathbf{X}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1} + \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}^T\mathbf{U}^T + \mathbf{U}\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}^T\mathbf{X}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1} + \mathbf{U}\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}^T\mathbf{U}^T\right]\right\} \\
&= \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T E(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}^T)\mathbf{X}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T + \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T E(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}^T)\mathbf{U}^T + \mathbf{U}E(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}^T)\mathbf{X}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1} + \mathbf{U}(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}^T)\mathbf{U}^T \\
&= \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\sigma^2\mathbf{I}\,\mathbf{X}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1} + \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\sigma^2\mathbf{I}\mathbf{U}^T + \mathbf{U}\sigma^2\mathbf{I}\mathbf{X}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1} + \mathbf{U}\sigma^2\mathbf{I}\mathbf{U}^T \\
&= \sigma^2\left[\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{X}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1} + \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{U}^T + \mathbf{U}\mathbf{X}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1} + \mathbf{U}\mathbf{U}^T\right] \\
&= \sigma^2\left[\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1} + \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{U}^T + \mathbf{U}\mathbf{X}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T + \mathbf{U}\mathbf{U}^T\right]
\end{aligned}$$

karena $\mathbf{UX} = (\mathbf{UX})^T = \mathbf{0}$, maka

$$\text{var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}^*) = \sigma^2\left[\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1} + \mathbf{U}\mathbf{U}^T\right]$$

Matriks $\mathbf{U}\mathbf{U}^T$ merupakan matriks definit positif, karena semua unsur diagonalnya berbentuk kuadrat. Jadi, terbukti bahwa variansi dari setiap unsur dari $\hat{\boldsymbol{\beta}}^*$ selalu lebih besar atau sama dengan variansi dari $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ atau dengan kata lain $\hat{\boldsymbol{\beta}} = \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y}$ merupakan taksiran yang BLUE (*Best Linear Unbiased Estimator*) dengan variansi yang minimum diantara semua penaksir *unbiased* linier.

Terbukti.

Dalam subbab berikut akan dijelaskan mengenai model regresi dalam bentuk *mean centered.*

2.7.3 Model Regresi Dalam Bentuk *Mean Centered*

Selain dalam bentuk model pada persamaan (2.7.2), model regresi dapat ditulis dalam bentuk *mean centered* dari **X** yaitu

$$y_i = \alpha + \beta_1(x_{i1} - \overline{x}_1) + \beta_2(x_{i2} - \overline{x}_2) + \ldots + \beta_k(x_{ik} - \overline{x}_k) + \varepsilon_i \qquad (2.7.13)$$

$i = 1,\ldots,n$ dimana

$$\alpha = \beta_0 + \beta_1\overline{x}_1 + \beta_2\overline{x}_2 + \ldots + \beta_k\overline{x}_k$$

dan $\bar{x}_l = \sum_{i=1}^{n} \frac{x_{il}}{n}$, $l = 1,\ldots,k$. Dalam bentuk matriks, dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{y} = \left(\mathbf{j}, \tilde{\mathbf{X}}\right)\begin{pmatrix} \alpha \\ \boldsymbol{\beta}_1 \end{pmatrix} + \boldsymbol{\varepsilon} \qquad (2.7.14)$$

dimana **j** adalah vektor **1** berukuran n x 1 dan

$$\tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{X} - \mathbf{j}\bar{\mathbf{x}}^T = \begin{bmatrix} x_{11} - \bar{x}_1 & \cdots & x_{1k} - \bar{x}_k \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n1} - \bar{x}_1 & \cdots & x_{nk} - \bar{x}_k \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\beta}_1 = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_k \end{pmatrix}$$

Similar dengan persamaan (2.7.12), penaksir *least squares* untuk $\begin{pmatrix} \alpha \\ \boldsymbol{\beta}_1 \end{pmatrix}$ adalah

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \boldsymbol{\beta}_1 \end{pmatrix} = \left[\left(\mathbf{j}, \tilde{\mathbf{X}}\right)^T \left(\mathbf{j}, \tilde{\mathbf{X}}\right)\right]^{-1} \left(\mathbf{j}, \tilde{\mathbf{X}}\right)^T \mathbf{y}$$

$\left(\mathbf{j}, \tilde{\mathbf{X}}\right)^T \left(\mathbf{j}, \tilde{\mathbf{X}}\right)$ menjadi

$$\left(\mathbf{j}, \tilde{\mathbf{X}}\right)^T \left(\mathbf{j}, \tilde{\mathbf{X}}\right) = \begin{pmatrix} \mathbf{j}^T \\ \tilde{\mathbf{X}}^T \end{pmatrix}\left(\mathbf{j}, \tilde{\mathbf{X}}\right) = \begin{pmatrix} \mathbf{j}^T\mathbf{j} & \mathbf{j}^T\tilde{\mathbf{X}} \\ \tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{j} & \tilde{\mathbf{X}}^T\tilde{\mathbf{X}} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} n & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{X}}^T\tilde{\mathbf{X}} \end{pmatrix}$$

$\left(\mathbf{j}, \tilde{\mathbf{X}}\right)^T \mathbf{y}$ menjadi

$$\begin{pmatrix} \mathbf{j}^T \\ \tilde{\mathbf{X}}^T \end{pmatrix}\mathbf{y} = \begin{pmatrix} n\bar{y} \\ \tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{y} \end{pmatrix}$$

Penaksir *least squares* menjadi

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \boldsymbol{\beta}_1 \end{pmatrix} = \left[\left(\mathbf{j}, \tilde{\mathbf{X}}\right)^T \left(\mathbf{j}, \tilde{\mathbf{X}}\right)\right]^{-1} \left(\mathbf{j}, \tilde{\mathbf{X}}\right)^T \mathbf{y}$$

$$= \begin{pmatrix} n & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{X}}^T\tilde{\mathbf{X}} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} n\bar{y} \\ \tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{y} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{n} & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & \left(\tilde{\mathbf{X}}^T\tilde{\mathbf{X}}\right)^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n\bar{y} \\ \tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{y} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \bar{y} \\ \left(\tilde{\mathbf{X}}^T\tilde{\mathbf{X}}\right)^{-1}\tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{y} \end{pmatrix}$$

sehingga persamaan (2.7.13) menjadi

$$y_i = \bar{y} + \beta_1(x_{i1} - \bar{x}_1) + \beta_2(x_{i2} - \bar{x}_2) + \ldots + \beta_k(x_{ik} - \bar{x}_k) + \varepsilon_i$$

dan dalam bentuk matriks *mean centered* dapat ditulis dalam bentuk

$$\tilde{\mathbf{y}} = \tilde{\mathbf{X}}\boldsymbol{\beta}_1 + \boldsymbol{\varepsilon} \qquad (2.7.15)$$

$$\begin{bmatrix} y_1 - \bar{y} \\ \vdots \\ y_n - \bar{y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{11} - \bar{x}_1 & \cdots & x_{1k} - \bar{x}_k \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n1} - \bar{x}_1 & \cdots & x_{nk} - \bar{x}_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_k \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}$$

dimana,

$\tilde{\mathbf{y}}$ adalah vektor *random mean centered* dari observasi variabel respon Y yang berukuran *n* x 1,

$\tilde{\mathbf{X}}$ adalah matriks *mean centered* dari *k* variabel prediktor yang berukuran *n* x *k*,

$\boldsymbol{\beta}_1$ adalah vektor parameter regresi yang berukuran *k* x 1,

$\boldsymbol{\varepsilon}$ adalah vektor *error* yang berukuran *n* x 1.

Dalam subbab berikut akan dijelaskan mengenai koefisien determinasi dan analisis variansi.

2.7.4 Koefisien Determinasi

Dalam regresi linier, pendekatan analisis variansi digunakan untuk pengujian signifikansi dan koefisien determinasi. Analisis variansi digunakan berdasarkan pada partisi dari total variabilitas variabel respon(Montgomery *et al.*, 2001). Partisi tersebut dapat ditulis sebagai

$$y_i - \bar{y} = (\hat{y}_i - \bar{y}) + (y_i - \hat{y}_i) \qquad (2.7.16)$$

Kemudian dengan mengkuadratkan kedua sisi pada persamaan (2.7.16) dan menjumlahkan keseluruhan dari *n* observasi akan menghasilkan persamaan sebagai berikut :

$$\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2 = \sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i - \bar{y})^2 + \sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2 + 2\sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i - \bar{y})(y_i - \hat{y}_i) \qquad (2.7.17)$$

Pada suku ketiga sisi kanan dapat dijabarkan sebagai

$$2\sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i-\bar{y})(y_i-\hat{y}_i)=2\sum_{i=1}^{n}\hat{y}_i(y_i-\hat{y}_i)-2\sum_{i=1}^{n}\bar{y}(y_i-\hat{y}_i)$$
$$=2n\bar{y}(y_i-\hat{y}_i)-2n\bar{y}(y_i-\hat{y}_i)$$
$$=0$$

Sehingga persamaan (2.7.17) dapat ditulis sebagai

$$\sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y})^2=\sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i-\bar{y})^2+\sum_{i=1}^{n}(y_i-\hat{y}_i)^2 \qquad (2.7.18)$$

Sisi kiri pada persamaan (2.7.18) adalah *jumlah kudrat total terkoreksi* atau biasa disebut SS_T yang mengukur total variabilitas di dalam observasi. Suku pertama pada sisi kanan adalah *jumlah kuadrat regresi atau model* yang biasa disebut SS_R dan suku kedua adalah *jumlah kudrat error* atau yang biasa disebut SS_{Res}, dengan kata lain persamaan (2.7.18) dapat ditulis sebagai

$$SS_T=SS_R+SS_{\mathrm{Res}} \qquad (2.7.19)$$

Koefisien determinasi atau R^2 adalah proporsi variasi y yang dijelaskan oleh prediktor X. Dengan kata lain R^2 mengukur kontribusi prediktor X untuk prediksi nilai dari respon y. Ukuran tersebut dapat ditulis sebagai

$$R^2=\frac{SS_R}{SS_T}=1-\frac{SS_{Res}}{SS_T} \qquad (2.7.20)$$

dimana $0\le R^2\le 1$.

SS_T merupakan suatu ukuran variabilitas pada variabel respon y tanpa memperhatikan efek dari variabel prediktor X sedangkan SS_{Res} merupakan suatu ukuran variabiliitas pada variabel respon y dengan memperhatikan prediktor X dengan

$$SS_T=\sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y})^2=(y_1-\bar{y})(y_1-\bar{y})+\ldots+(y_n-\bar{y})(y_n-\bar{y})$$
$$=(\mathbf{y}-\bar{\mathbf{y}})^T(\mathbf{y}-\bar{\mathbf{y}})$$

dan

$$SS_{res}=\sum_{i=1}^{n}(y_i-\hat{y}_i)^2=(y_1-\hat{y}_1)(y_1-\hat{y}_1)+\ldots+(y_n-\hat{y}_n)(y_n-\hat{y}_n)$$
$$=(\mathbf{y}-\hat{\mathbf{y}})^T(\mathbf{y}-\hat{\mathbf{y}})$$

Berikut ini akan dijelaskan mengenai model regresi linier multivariat dan taksiran parameter.

2.8 Regresi Linier Berganda Multivariat

Pada subbab ini akan dijelaskan mengenai model regresi linier berganda multivariat dan penaksiran parameter regresi dengan metode *Least Squares*.

2.8.1 Model Regresi Linier Berganda Multivariat

Misalkan terdapat variabel respon $Y_1,...,Y_p$ dan variabel prediktor $X_1,...,X_k$ dengan n observasi, maka model regresi dapat ditulis sebagai berikut :

$$\mathbf{Y=XB+\Xi} \tag{2.8.1}$$

$$\begin{bmatrix} y_{11} & y_{12} & \cdots & y_{1p} \\ y_{21} & y_{22} & \cdots & y_{2p} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ y_{n1} & y_{n2} & \cdots & y_{np} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & \cdots & x_{1k} \\ 1 & x_{21} & \cdots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & \cdots & x_{nk} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_{01} & \beta_{02} & \cdots & \beta_{0p} \\ \beta_{11} & \beta_{12} & \cdots & \beta_{1p} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \beta_{k1} & \beta_{k2} & \cdots & \beta_{kp} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \cdots & \varepsilon_{1p} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \cdots & \varepsilon_{2p} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \varepsilon_{n1} & \varepsilon_{n2} & \cdots & \varepsilon_{np} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{y}_1 & \mathbf{y}_2 & \cdots & \mathbf{y}_p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\beta}_1 & \boldsymbol{\beta}_2 & \cdots & \boldsymbol{\beta}_p \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}_1 & \boldsymbol{\varepsilon}_2 & \cdots & \boldsymbol{\varepsilon}_p \end{bmatrix}$$

Y adalah matriks dari p variabel respon berukuran n x p,

X adalah matriks dari k variabel prediktor berukuran n x (k + 1),

B adalah matriks parameter regresi berukuran (k + 1) x p,

Ξ adalah matriks *error* berukuran n x p.

Dengan asumsi :

1. E(**Ξ**) = **0** atau E(**Y**) = **XB** untuk semua i = 1,…,n,
2. Cov (y_i) = Σ atau cov(ε_i) = Σ untuk semua i =1,…,n dimana y_i adalah baris ke-i dari **Y**
3. Cov (y_i, y_j) = **0** atau cov($\varepsilon_i, \varepsilon_j$) = **0** untuk semua $i \neq j$.

Pada subbab berikut ini, akan dijelaskan mengenai taksiran parameter untuk regresi multivariat.

2.8.2 Taksiran Parameter Untuk Multivariat dengan metode *Least Squares*

Pada metode OLS untuk regresi linier berganda univariat pada subbab 2.7.2, *least squres* meminimumkan SSE yaitu $S(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=0}^{n} \varepsilon_i^2 = \boldsymbol{\varepsilon}^T \boldsymbol{\varepsilon}$. Similar dengan regresi linier berganda univariat, maka untuk menaksir **B** pada regresi linier berganda multivariat, *least squares* meminimumkan SSE yaitu ,

$$\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{p} \varepsilon_{ij}^{\ 2} = \sum_{j=1}^{p} \boldsymbol{\varepsilon}_j^T \boldsymbol{\varepsilon}_j$$

Berdasarkan sifat *trace* matriks, $\sum_{j=1}^{p} \boldsymbol{\varepsilon}_j^T \boldsymbol{\varepsilon}_j = tr(\boldsymbol{\Xi}^T \boldsymbol{\Xi})$, maka penaksir *least squares* untuk **B** yaitu :

$$S(\mathbf{B}) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{p} \varepsilon_{ij}^2$$

$$S(\mathbf{B}) = tr(\boldsymbol{\Xi}^T \boldsymbol{\Xi})$$

$$S(\mathbf{B}) = tr(\mathbf{Y} - \mathbf{XB})^T (\mathbf{Y} - \mathbf{XB}) \qquad (2.8.2)$$

Dengan menggunakan sifat perkalian matriks, maka persamaan (2.8.2) dapat dinyatakan sebagai :

$$S(\mathbf{B}) = tr(\mathbf{Y}^T \mathbf{Y} - \mathbf{B}^T \mathbf{X}^T \mathbf{Y} - \mathbf{Y}^T \mathbf{XB} + \mathbf{B}^T \mathbf{X}^T \mathbf{XB}) \qquad (2.8.3)$$

Karena $\mathbf{B}^T \mathbf{X}^T \mathbf{Y}$ adalah matriks berukuran *p* x *p* dan transpos $\left(\mathbf{B}^T \mathbf{X}^T \mathbf{Y}\right)^T = \mathbf{Y}^T \mathbf{XB}$ juga berukuran *p* x *p*, maka persamaan (2.8.3) dapat ditulis sebagai :

$$S(\mathbf{B}) = tr(\mathbf{Y}^T \mathbf{Y} - 2\mathbf{B}^T \mathbf{X}^T \mathbf{Y} + \mathbf{B}^T \mathbf{X}^T \mathbf{XB}) \qquad (2.8.4)$$

Kemudian dengan menurunkan persamaan (2.8.4) terhadap **B** (dapat dilihat pada lampiran 1), maka penaksir *Least Squares* memenuhi kondisi sebagai berikut :

$$\frac{\partial S}{\partial \mathbf{B}} |_{\hat{\mathbf{B}}} = -2\hat{\mathbf{B}}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y} + 2\mathbf{X}^T \mathbf{X}\hat{\mathbf{B}} = 0 \qquad (2.8.5)$$

Jadi, penaksir *least squares* untuk **B** adalah

$$\hat{\mathbf{B}} = \left(\mathbf{X}^T \mathbf{X}\right)^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{Y} \qquad (2.8.6)$$

Sifat-sifat penaksir *least squares* pada multivariat

1. Jika E(**Y**) = **XB**, maka $\hat{\mathbf{B}}$ adalah penaksir yang *unbiased* untuk **B**

   Bukti:

$$
\begin{aligned}
E(\hat{\mathbf{B}}) &= E\left[\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{Y}\right] \\
&= E\left[\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\left(\mathbf{XB}+\mathbf{\Xi}\right)\right] \\
&= \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T E(\mathbf{B}) + \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T E\left(\mathbf{\Xi}\right) \\
&= \mathbf{IB} \\
&= \mathbf{B}
\end{aligned}
$$

   Karena E($\mathbf{\Xi}$) = **0** dan $\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{X} = \mathbf{I}$, maka terbukti $\hat{\mathbf{B}}$ adalah penaksir yang *unbiased* untuk **B**.

   Terbukti

2. Dengan asumsi Cov (y_i) = $\sum$ dan Cov (y_i, y_j) = **0**, maka matriks variansi kovariansi untuk $\hat{\mathbf{B}}$ dinyatakan oleh

$$\mathrm{cov}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_j) = \sigma_{jj}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1} \tag{2.8.7}$$

$$\mathrm{cov}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_j, \hat{\boldsymbol{\beta}}_k) = \sigma_{jk}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1} \tag{2.8.8}$$

   dimana *j*, *k* = 1,…,*p* , σ_{jj} dan σ_{jk} merupakan elemen dari $\sum$.

Bukti :

Persamaan (2.8.7) mengikuti persamaan (2.8.8). Untuk membuktikan persamaan (2.8.8), dapat dinyatakan $\mathrm{cov}(\mathbf{y}_j, \mathbf{y}_k) = \sigma_{jk}\mathbf{I}$ atau $\mathrm{cov}(\boldsymbol{\varepsilon}_j, \boldsymbol{\varepsilon}_k) = \sigma_{jk}\mathbf{I}$ dimana hal tersebut secara langsung berasal dari dua asumsi yaitu Cov (y_i) = $\mathbf{\Xi}$ dan Cov (y_i, y_j) = **0** .

misalkan *i*=1, *j*=2, maka

$$\mathrm{cov}(\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2) = \mathrm{cov}\left[\begin{pmatrix} y_{11} \\ \vdots \\ y_{n1} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} y_{12} \\ \vdots \\ y_{n2} \end{pmatrix}\right]$$

$$= \begin{bmatrix} \mathrm{cov}(y_{11}, y_{12}) & \cdots & \mathrm{cov}(y_{11}, y_{n2}) \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \mathrm{cov}(y_{n1}, y_{12}) & \cdots & \mathrm{cov}(y_{n1}, y_{n2}) \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \sigma_{12} & \cdots & 0 \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & \cdots & \sigma_{12} \end{bmatrix} = \sigma_{12}\mathbf{I}$$

Kemudian,

$$\mathrm{cov}\left[\begin{pmatrix} \hat{\beta}_{1j} \\ \vdots \\ \hat{\beta}_{nj} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \hat{\beta}_{1k} \\ \vdots \\ \hat{\beta}_{nk} \end{pmatrix}\right] = \begin{pmatrix} \mathrm{cov}\left(\hat{\beta}_{1j}, \hat{\beta}_{1k}\right) & \cdots & \mathrm{cov}\left(\hat{\beta}_{1j}, \hat{\beta}_{nk}\right) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathrm{cov}\left(\hat{\beta}_{nj}, \hat{\beta}_{1k}\right) & \cdots & \mathrm{cov}\left(\hat{\beta}_{nj}, \hat{\beta}_{nk}\right) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} E\left[\left(\hat{\beta}_{1j} - E\left(\hat{\beta}_{1j}\right)\right)\left(\hat{\beta}_{1k} - E\left(\hat{\beta}_{1k}\right)\right)\right] & \cdots & E\left[\left(\hat{\beta}_{1j} - E\left(\hat{\beta}_{1j}\right)\right)\left(\hat{\beta}_{nk} - E\left(\hat{\beta}_{nk}\right)\right)\right] \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ E\left[\left(\hat{\beta}_{nj} - E\left(\hat{\beta}_{nj}\right)\right)\left(\hat{\beta}_{1k} - E\left(\hat{\beta}_{1k}\right)\right)\right] & \cdots & E\left[\left(\hat{\beta}_{nj} - E\left(\hat{\beta}_{nj}\right)\right)\left(\hat{\beta}_{nk} - E\left(\hat{\beta}_{nk}\right)\right)\right] \end{pmatrix}$$

$$= E\left\{\begin{bmatrix} \hat{\beta}_{1j} - E\left(\hat{\beta}_{1j}\right) \\ \vdots \\ \hat{\beta}_{nj} - E\left(\hat{\beta}_{nj}\right) \end{bmatrix}\left[\hat{\beta}_{1k} - E\left(\hat{\beta}_{1k}\right) \quad \cdots \quad \hat{\beta}_{nk} - E\left(\hat{\beta}_{nk}\right)\right]\right\}$$

$$= E\left\{\left[\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(j)} - E\left(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(j)}\right)\right]\left[\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(k)} - E\left(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(k)}\right)\right]^T\right\}$$

$$= \sigma_{jk}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}$$

Bukti :

Karena telah terbukti $\hat{\mathbf{B}}$ adalah penaksir yang *unbiased* untuk **B**, maka

$$\mathrm{cov}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_j, \hat{\boldsymbol{\beta}}_k) = E\left\{\left[\hat{\boldsymbol{\beta}}_j - E(\hat{\boldsymbol{\beta}}_j)\right]\left[\hat{\boldsymbol{\beta}}_k - E(\hat{\boldsymbol{\beta}}_k)\right]^T\right\}$$

$$= E\left\{\left[\hat{\boldsymbol{\beta}}_j - \boldsymbol{\beta}_j\right]\left[\hat{\boldsymbol{\beta}}_k - \boldsymbol{\beta}_k\right]^T\right\}$$

Dari persamaan (2.8.6), dengan mensubtitusikan $\mathbf{Y} = \mathbf{XB} + \boldsymbol{\Xi}$ diperoleh

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_j = \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y}_j \qquad \hat{\boldsymbol{\beta}}_k = \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y}_k$$

$$= \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\left(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}_j + \boldsymbol{\varepsilon}_j\right) \qquad = \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\left(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}_k + \boldsymbol{\varepsilon}_k\right)$$

$$= \boldsymbol{\beta}_j + \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\boldsymbol{\varepsilon}_j \qquad = \boldsymbol{\beta}_k + \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\boldsymbol{\varepsilon}_k$$

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_j - \boldsymbol{\beta}_j = \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\boldsymbol{\varepsilon}_j \qquad \hat{\boldsymbol{\beta}}_j - \boldsymbol{\beta}_j = \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\boldsymbol{\varepsilon}_j$$

sehingga diperoleh

$$\begin{aligned}
\operatorname{cov}\left(\hat{\boldsymbol{\beta}}_j, \hat{\boldsymbol{\beta}}_k\right) &= E\left\{\left[\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\boldsymbol{\varepsilon}_j\right]\left[\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\boldsymbol{\varepsilon}_k\right]^T\right\} \\
&= E\left\{\left[\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\boldsymbol{\varepsilon}_j\boldsymbol{\varepsilon}_k{}^T\mathbf{X}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\right]\right\} \\
&= \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T E(\boldsymbol{\varepsilon}_j\boldsymbol{\varepsilon}_k{}^T)\mathbf{X}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1} \\
&= \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\sigma_{jk}\mathbf{I}\,\mathbf{X}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1} \\
&= \sigma_{jk}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{X}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1} \\
&= \sigma_{jk}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{X}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1} \\
&= \sigma_{jk}\mathbf{I}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1} \\
&= \sigma_{jk}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}
\end{aligned}$$

Terbukti

Berdasarkan teorema **Gauss-Markov**, jika model regresi pada persamaan (2.8.2) memenuhi asumsi-asumsi untuk model regresi linier berganda multivariate yang telah dijelaskan sebelumnya, maka taksiran yang didapat dengan menggunakan metode *least squares* merupakan taksiran yang BLUE (*Best Linear Unbiased Estimator*) dengan variansi yang minimum.

BAB 3
UNIVARIATE PARTIAL LEAST SQUARES REGRESSION

Dalam subbab berikut akan dijelaskan mengenai bentuk model regresi univariat PLSR, metode pembentukan dan seleksi komponen menggunakan algoritma NIPALS, pembuktian keortogonalan pada komponen dan bobot serta taksiran parameter univariat PLSR.

3.1 Bentuk Model Regresi Univariat PLSR

Misalkan terdapat variabel respon Y dan variabel prediktor $X_1, X_2, ..., X_k$ dengan n observasi dan diasumsikan terdapat variabel prediktor yang saling berkorelasi atau terjadi multikolinieritas. Misalkan didefinisikan $\bar{y}, \bar{x}_1, ..., \bar{x}_k$ dimana $\bar{y}, \bar{x}_1, ..., \bar{x}_k$ adalah *mean* sampel. Sebagai langkah awal untuk menjalankan algoritma NIPALS, selanjutnya digunakan model regresi bentuk *mean centered* seperti yang tertulis pada persamaan (2.7.15) yaitu :

$$\tilde{\mathbf{y}} = \tilde{\mathbf{X}}\boldsymbol{\beta}_1 + \boldsymbol{\varepsilon} \tag{3.1.1}$$

dimana,

$\tilde{\mathbf{y}}$ adalah vektor *random mean centered* dari observasi variabel respon Y yang berukuran n x 1,

$\tilde{\mathbf{X}}$ adalah matriks *mean centered* dari k variabel prediktor yang berukuran n x k,

$\boldsymbol{\beta}_1$ adalah vektor parameter regresi yang berukuran k x 1,

$\boldsymbol{\varepsilon}$ adalah vektor *error* yang berukuran n x 1.

Karena terjadi multikolinieritas, maka metode OLS tidak dapat digunakan untuk menaksir parameter $\boldsymbol{\beta}_1$. Dalam PLSR, sebelum melakukan penaksiran parameter $\boldsymbol{\beta}_1$ pada persamaan (3.1.1), terlebih dahulu dibentuk komponen yang digunakan sebagai prediktor baru untuk menaksir parameter yang kemudian digunakan untuk memprediksi Y melalui algoritma NIPALS.

Dalam subbab berikut akan dijelaskan mengenai pembentukan komponen dengan algoritma NIPALS.

3.2 Pembentukan Komponen dengan Algoritma NIPALS

Dalam PLSR, salah satu metode yang dapat digunakan dalam pembentukan komponen adalah algoritma NIPALS (*Nonlinier Iterative Partial Least Squares*). Ide dasar dari algoritma NIPALS adalah mendekomposisikan matriks $\tilde{\mathbf{X}}$ menjadi matriks ortogonal **T** dan matriks *loading* **P**. Dekomposisi $\tilde{\mathbf{X}}$ menjadi matriks ortogonal **T** dan *loading* **P** dalam notasi matriks dapat ditulis sebagai berikut :

$$\tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{T}\mathbf{P}^T + \mathbf{E} \qquad \text{dimana } \mathbf{T}^T\mathbf{T} = \mathbf{I} \tag{3.2.1}$$

$$\begin{bmatrix} x_{11}-\bar{x}_1 & x_{12}-\bar{x}_2 & \dots & x_{1k}-\bar{x}_k \\ x_{21}-\bar{x}_1 & x_{22}-\bar{x}_2 & \dots & x_{2k}-\bar{x}_k \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ x_{n1}-\bar{x}_1 & x_{n2}-\bar{x}_2 & \dots & x_{nk}-\bar{x}_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_{11} & t_{12} & \dots & t_{1m} \\ t_{21} & t_{22} & \dots & t_{2m} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ t_{n1} & t_{n2} & \dots & t_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_{11} & p_{21} & \dots & p_{k1} \\ p_{12} & p_{22} & \dots & p_{k2} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ p_{1m} & p_{2m} & \dots & p_{km} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} e_{11} & e_{12} & \dots & e_{1m} \\ e_{21} & e_{22} & \dots & e_{2m} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ e_{n1} & e_{n2} & \dots & e_{nm} \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{x}}_1 & \tilde{\mathbf{x}}_2 & \dots & \tilde{\mathbf{x}}_k \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \mathbf{t}_1 & \mathbf{t}_2 & \cdots & \mathbf{t}_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{p}_1^T \\ \mathbf{p}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{p}_m^T \end{bmatrix} + \mathbf{E} \\ &= \mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T + \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T + \dots + \mathbf{t}_m\mathbf{p}_m^T + \mathbf{E} \\ &= \sum_{j=1}^{m} \mathbf{t}_j\mathbf{p}_j^T + \mathbf{E} \end{aligned}$$

Berdasarkan uraian tersebut, dekomposisi $\tilde{\mathbf{X}}$ menjadi matriks ortogonal **T** dan loading **P** dalam notasi matriks dapat juga ditulis sebagai:

$$\tilde{\mathbf{X}} = \sum_{j=1}^{m} \mathbf{t}_j\mathbf{p}_j^T + \mathbf{E}$$

dimana,

I adalah matriks identitas berukuran *m* x *m*,

P adalah matriks *loading* berukuran *k* x *m*,

T adalah matriks komponen berukuran *n* x *m*,

E adalah matriks *error* berukuran *n* x *k*.

Matriks *error* **E** menyatakan seberapa besar $\tilde{\mathbf{X}}$ yang tidak terdekomposisi menjadi matriks komponen **T** dan *loading* **P**.

Komponen-komponen yang terbentuk digunakan sebagai prediktor baru untuk menaksir parameter yang kemudian digunakan untuk memprediksi variabel respon Y. Dengan menggunakan bentuk *mean centered*, maka model regresi dapat dinyatakan sebagai :

$$\tilde{\mathbf{y}} = \mathbf{Tc} + \mathbf{F}$$

$$\begin{bmatrix} \tilde{y}_1 \\ \tilde{y}_2 \\ \vdots \\ \tilde{y}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_{11} & t_{12} & \dots & t_{1m} \\ t_{21} & t_{22} & \dots & t_{2m} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ t_{n1} & t_{n2} & \dots & t_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_m \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \mathbf{t}_1 & \mathbf{t}_2 & \cdots & \mathbf{t}_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_m \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix}$$

$$= \mathbf{t}_1 c_1 + \mathbf{t}_2 c_2 + \ldots + \mathbf{t}_m c_m + \mathbf{F}$$

$$= \sum_{j=1}^{m} \mathbf{t}_j c_j + \mathbf{F}$$

Berdasarkan uraian tersebut, $\tilde{\mathbf{y}}$ dapat juga dinyatakan sebagai :

$$\tilde{\mathbf{y}} = \sum_{j=1}^{m} \mathbf{t}_j c_j + \mathbf{F} \qquad (3.2.2)$$

dimana,

c adalah vektor parameter regresi berukuran m x 1,

F adalah vektor *error* berukuran n x 1.

Vektor *error* **F** menyatakan seberapa besar $\tilde{\mathbf{y}}$ yang tidak dijelaskan oleh matriks komponen **T**.

Dalam PLSR, vektor komponen yang dibentuk merupakan kombinasi linier berbobot dari variabel-variabel prediktor, sehingga dalam notasi matriks dapat dinyatakan sebagai :

$$\mathbf{T} = \tilde{\mathbf{X}}\mathbf{W} \text{ dengan } \mathbf{W}^T\mathbf{W} = \mathbf{I} \qquad (3.2.3)$$

dimana **W** adalah matriks berukuran k x m, yaitu :

$$\mathbf{W} = \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} & \dots & w_{1m} \\ w_{21} & w_{22} & \dots & w_{2m} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ w_{k1} & w_{k2} & \dots & w_{km} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{w}_1 & \mathbf{w}_2 & \dots & \mathbf{w}_m \end{bmatrix}$$

Bobot yang dipilih pada pembentukan komponen PLSR pada persamaan (3.2.3) adalah bobot yang dapat menjelaskan variasi pada $\tilde{\mathbf{X}}$ sekaligus variasi pada

$\tilde{\mathbf{y}}$ yaitu melalui fungsi kovariansi antara setiap variabel prediktor dengan variabel respon. Hal tersebut dibutuhkan agar komponen yang terbentuk tidak hanya baik dalam menerangkan variasi dari $\tilde{\mathbf{X}}$ tetapi juga relevan dan baik dalam memprediksi $\tilde{\mathbf{y}}$.

Untuk dapat menerangkan variasi dari $\tilde{\mathbf{X}}$ dan memprediksi $\tilde{\mathbf{y}}$ dengan baik, dibutuhkan pembentukan matriks komponen dengan algoritma NIPALS. Karena algoritma ini bersifat iteratif, maka akan dibentuk terlebih dahulu vektor komponen pertama yang dapat menunjukan seberapa baik vektor komponen pertama tersebut dalam menerangkan variasi dari $\tilde{\mathbf{X}}$ dan memprediksi $\tilde{\mathbf{y}}$. Kemudian jika diperlukan, maka algoritma ini akan beriterasi untuk membentuk vektor komponen berikutnya. Untuk lebih jelasnya, pada subbab berikut ini akan dijelaskan tentang cara pembentukan vektor komponen pertama $\mathbf{t}_1$ dan vektor *loading* pertama $\mathbf{p}_1$.

3.2.1 Pembentukan Vektor Komponen dan *Loading* Pertama

Sebagai langkah awal dalam menggunakan algoritma NIPALS, notasi $\mathbf{X}_1$ untuk matriks *mean centered* $\tilde{\mathbf{X}}$ dan $\mathbf{y}_1$ untuk vektor *mean centered* $\tilde{\mathbf{y}}$ atau dapat ditulis sebagai $\mathbf{X}_1 = \tilde{\mathbf{X}}$ dan $\mathbf{y}_1 = \tilde{\mathbf{y}}$.

a) Menentukan vektor komponen pertama $\mathbf{t}_1$

Seperti yang telah dijelaskan sebelumnya, vektor komponen yang dibentuk merupakan kombinasi linier dengan setiap variabel prediktor dan berdasarkan persamaan (3.2.3), untuk vektor komponen pertama, $\mathbf{t}_1$ dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{t}_1 = \mathbf{X}_1\mathbf{w}_1 \qquad (3.2.4)$$

dimana $\mathbf{w}_1$ adalah bobot yang merupakan penjumlahan fungsi kovariansi antara setiap variabel prediktor $(\tilde{\mathbf{x}}_1,...,\tilde{\mathbf{x}}_k)$ dalam matriks $\mathbf{X}_1$ dan vektor respon $\mathbf{y}_1$. Dengan demikian, $\mathbf{w}_1$ dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{w}_1 = \frac{\sum_{l=1}^{k} \text{cov}(\tilde{\mathbf{x}}_l, \tilde{\mathbf{y}})}{\sqrt{\sum_{l=1}^{k} \text{cov}(\tilde{\mathbf{x}}_l, \tilde{\mathbf{y}})^2}}, \ l = 1,\ldots,k \tag{3.2.5}$$

Sebelum menjabarkan persamaan (3.2.5), terlebih dahulu akan didefinisikan bentuk cov($\tilde{\mathbf{x}}_l$, $\tilde{\mathbf{y}}$). Berdasarkan penjabaran persamaan (3.2.1), maka $\tilde{\mathbf{x}}_l$ dan $\tilde{\mathbf{y}}$ dapat ditulis sebagai :

$$\tilde{\mathbf{x}}_l = \begin{bmatrix} x_{1l} - \bar{x}_l \\ \vdots \\ x_{nl} - \bar{x}_l \end{bmatrix} \text{dan } \tilde{\mathbf{y}} = \begin{bmatrix} y_1 - \bar{y} \\ \vdots \\ y_n - \bar{y} \end{bmatrix}$$

Dengan menggunakan penjelasan mengenai matriks variansi kovariansi yang ada pada subbab 2.4, dimana $s_{lq} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_{il} - \bar{x}_l)(x_{iq} - \bar{x}_q)}{n-1}$ menyatakan kovariansi antara variabel acak ke-*l* dan variabel acak ke-*q* dimana *l*, *q* = 1,…,*k* dan *l* ≠ *q*, dengan

$$\mathbf{x}_l = \begin{bmatrix} x_{1l} \\ \vdots \\ x_{nl} \end{bmatrix} \text{ dan } \mathbf{x}_q = \begin{bmatrix} x_{1q} \\ \vdots \\ x_{nq} \end{bmatrix}$$

maka cov($\tilde{\mathbf{x}}_l$, $\tilde{\mathbf{y}}$) dinyatakan sebagai

$$\text{cov}(\tilde{\mathbf{x}}_l, \tilde{\mathbf{y}}) = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_{il} - \bar{x}_l)(y_i - \bar{y})}{n-1}$$

sehingga $\mathbf{w}_1$ dapat dijabarkan menjadi :

$$\mathbf{w}_1 = \frac{\sum_{l=1}^{k} \text{cov}(\tilde{x}_l, \tilde{y})}{\sqrt{\sum_{l=1}^{k} \text{cov}(\tilde{x}_l, \tilde{y})^2}}$$

$$\mathbf{w}_1 = \frac{\sum_{l=1}^{k}\left[\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_{il}-\bar{x}_l)(y_i-\bar{y})}{n-1}\right]}{\sqrt{\left[\sum_{l=1}^{k}\left(\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_{il}-\bar{x}_l)(y_i-\bar{y})}{n-1}\right)^2\right]}}$$

$$\mathbf{w}_1 = \frac{\frac{1}{n-1}\sum_{l=1}^{k}\sum_{i=1}^{n}(x_{il}-\bar{x}_l)(y_i-\bar{y})}{\frac{1}{n-1}\sqrt{\left[\sum_{l=1}^{k}[\sum_{i=1}^{n}(x_{il}-\bar{x}_l)(y_i-\bar{y})]^2\right]}}$$

$$\mathbf{w}_1 = \frac{\sum_{l=1}^{k}\sum_{i=1}^{n}(x_{il}-\bar{x}_l)(y_i-\bar{y})}{\sqrt{\left[\sum_{l=1}^{k}[\sum_{i=1}^{n}(x_{il}-\bar{x}_l)(y_i-\bar{y})]^2\right]}}$$

Bentuk $\sum_{i=1}^{n}(x_{il}-\bar{x}_l)(y_i-\bar{y})$ dapat dijabarkan menjadi

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{n}(x_{il}-\bar{x}_l)(y_i-\bar{y}) &= \sum_{i=1}^{n}(x_{il}y_i - x_{il}\bar{y} - \bar{x}_l y_i + \bar{x}_l\bar{y}) \\
&= \sum_{i=1}^{n}x_{il}y_i - \sum_{i=1}^{n}x_{il}\bar{y} - \sum_{i=1}^{n}\bar{x}_l y_i + \sum_{i=1}^{n}\bar{x}_l\bar{y} \\
&= \sum_{i=1}^{n}x_{il}y_i - \bar{y}\sum_{i=1}^{n}x_{il} - \bar{x}_l\sum_{i=1}^{n}y_i + n\bar{x}_l\bar{y} \\
&= \sum_{i=1}^{n}x_{il}y_i - n\bar{x}_l\bar{y} - n\bar{x}_l\bar{y} + n\bar{x}_l\bar{y} \\
&= \sum_{i=1}^{n}x_{il}y_i - n\bar{x}_l\bar{y}
\end{aligned}$$

sehingga $\mathbf{w}_1$ dapat ditulis sebagai :

$$\mathbf{w}_1 = \frac{\sum_{l=1}^{k}(\sum_{i=1}^{n}x_{il}y_i - n\bar{x}_l\bar{y})}{\sqrt{\sum_{l=1}^{k}(\sum_{i=1}^{n}x_{il}y_i - n\bar{x}_l\bar{y})^2}}$$

$$\mathbf{w}_1 = \frac{\sum_{l=1}^{k}(\sum_{i=1}^{n} x_{il}y_i - n\bar{x}_l\bar{y})}{\sqrt{\sum_{l=1}^{k}(\sum_{i=1}^{n} x_{il}y_i - n\bar{x}_l\bar{y})^2}}$$

$$\mathbf{w}_1 = \frac{(\sum_{i=1}^{n} x_{i1}y_i - n\bar{x}_1\bar{y}) + \ldots + (\sum_{i=1}^{n} x_{ik}y_i - n\bar{x}_k\bar{y})}{\sqrt{(\sum_{i=1}^{n} x_{i1}y_i - n\bar{x}_1\bar{y})^2 + \ldots + (\sum_{i=1}^{n} x_{ik}y_i - n\bar{x}_k\bar{y})^2}}$$

$$\mathbf{w}_1 = \frac{\tilde{\mathbf{x}}_1^T\tilde{\mathbf{y}} + \ldots + \tilde{\mathbf{x}}_k^T\tilde{\mathbf{y}}}{\sqrt{(\tilde{\mathbf{x}}_1^T\tilde{\mathbf{y}})^2 + \ldots + (\tilde{\mathbf{x}}_k^T\tilde{\mathbf{y}})^2}}$$

$$\mathbf{w}_1 = \frac{\tilde{\mathbf{X}}^T\tilde{\mathbf{y}}}{\|\tilde{\mathbf{X}}^T\tilde{\mathbf{y}}\|}$$

$$\mathbf{w}_1 = \frac{\mathbf{X}_1^T\mathbf{y}_1}{\|\mathbf{X}_1^T\mathbf{y}_1\|}$$

Jadi dengan penjelasan di atas, $\mathbf{w}_1$ pada persamaan (3.2.5) dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{w}_1 = \frac{\mathbf{X}_1^T\mathbf{y}_1}{\|\mathbf{X}_1^T\mathbf{y}_1\|} \qquad (3.2.6)$$

sehingga dengan menggunakan persamaan (3.2.6), vektor komponen pertama $\mathbf{t}_1$ dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{t}_1 = \frac{\mathbf{X}_1\mathbf{X}_1^T\mathbf{y}_1}{\|\mathbf{X}_1^T\mathbf{y}_1\|} \qquad (3.2.7)$$

b) Menentukan vektor *loading* pertama $\mathbf{p}_1$

Setelah mendapatkan vektor komponen pertama $\mathbf{t}_1$ dan berdasarkan persamaan (3.2.1), dilakukan regresi antara variabel-variabel pada matriks $\mathbf{X}_1$ yang berperan sebagai variabel-variabel respon dan vektor komponen $\mathbf{t}_1$ yang berperan sebagai variabel prediktor. Bentuk model regresi antara $\mathbf{X}_1$ dengan $\mathbf{t}_1$ dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{X}_1 = \mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T + \mathbf{e}_1 \qquad (3.2.8)$$

dimana,

$\mathbf{X}_1$ adalah matriks *mean centered* $\tilde{\mathbf{X}}$ yang berperan sebagai k variabel respon berukuran n x k,

$\mathbf{t}_1$ adalah vektor komponen pertama yang berperan sebagai prediktor berukuran *n* x 1,

$\mathbf{p}_1$ adalah vektor *loading* pertama yang berperan sebagai parameter regresi berukuran *k* x 1,

$\mathbf{e}_1$ adalah matriks *error* yang berukuran *n* x *k*.

Bentuk regresi dalam persamaan (3.2.8) merupakan regresi multivariat. Menurut Rencher, 2000, salah satu metode untuk menaksir parameter regresi adalah metode *Least squares.* Untuk mencari dan menaksir parameter $\mathbf{p}_1$, *least squares* meminimumkan SSE, dalam hal ini adalah yang meminimumkan $tr\left(\mathbf{e}_1^T\mathbf{e}_1\right) = tr\left(\mathbf{X}_1 - \mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T\right)^T\left(\mathbf{X}_1 - \mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T\right)$, sehingga dengan menggunakan metode *least squares* untuk regresi multivariat seperti pada subbab 2.8, dapat diperoleh (bukti diberikan pada lampiran 4.1)

$$\mathbf{p}_1 = \left(\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1\right)^{-1}\mathbf{X}_1^T\mathbf{t}_1 \qquad (3.2.9)$$

yang kemudian didapatkan

$$\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 = \mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T \qquad (3.2.10)$$

$$\begin{bmatrix} \tilde{\tilde{x}}_{11} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{1k} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{\tilde{x}}_{n1} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{nk} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_{11}p_{11} & \cdots & t_{11}p_{k1} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{n1}p_{11} & \cdots & t_{n1}p_{k1} \end{bmatrix}$$

c) Selanjutnya, berdasarkan persamaan (3.2.2) dan menggunakan vektor komponen pertama $\mathbf{t}_1$ yang telah diperoleh, dilakukan regresi antara $\mathbf{y}_1$ sebagai variabel respon dan $\mathbf{t}_1$ sebagai variabel prediktor sehingga bentuk regresi antara $\mathbf{y}_1$ dengan $\mathbf{t}_1$ merupakan regresi linier sederhana dan dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{y}_1 = \mathbf{t}_1c_1 + \mathbf{f}_1 \qquad (3.2.11)$$

dimana,

$\mathbf{y}_1$ adalah vektor *mean centered* dari observasi variabel respon Y yang berukuran *n* x 1,

$\mathbf{t}_1$ adalah vektor komponen pertama yang berperan sebagai prediktor berukuran *n* x 1

c_1 adalah parameter regresi berukuran 1 x 1,

$\mathbf{f}_1$ adalah vektor *error* berukuran *n* x 1.

Dengan menggunakan OLS, dapat ditunjukkan taksiran untuk c_1 (bukti diberikan pada lampiran 5.1) adalah sebagai berikut :

$$\hat{c}_1 = \left(\mathbf{t}_1^T \mathbf{t}_1\right)^{-1} \mathbf{t}_1^T \mathbf{y}_1 \tag{3.2.12}$$

sehingga taksiran untuk $\mathbf{y}_1$ yaitu $\hat{\mathbf{y}}_1$ dapat ditulis sebagai

$$\hat{\mathbf{y}}_1 = \mathbf{t}_1 \hat{c}_1 \tag{3.2.13}$$

Kemudian, untuk mengetahui besarnya hubungan antara tiap variabel prediktor pada matriks $\mathbf{X}_1$ yang telah diubah atau didekomposisikan menjadi vektor komponen pertama $\mathbf{t}_1$, dapat diketahui melalui matriks variansi kovariansi sampel $\mathbf{X}_1$. Pada kondisi dimana $\mathbf{X}_1$ dapat dijelaskan hanya dengan menggunakan vektor komponen pertama $\mathbf{t}_1$, dalam notasi matriks $\mathbf{X}_1$ dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{X}_1 = \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 = \mathbf{t}_1 \mathbf{p}_1^T \tag{3.2.14}$$

dengan uraian sebagai berikut

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} x_{11} - \bar{x}_1 & \cdots & x_{1k} - \bar{x}_k \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n1} - \bar{x}_1 & \cdots & x_{nk} - \bar{x}_k \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} t_{11} p_{11} & \cdots & t_{11} p_{k1} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{n1} p_{11} & \cdots & t_{n1} p_{k1} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{x}}_{11} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{1k} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{\tilde{x}}_{n1} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{nk} \end{bmatrix},
\end{aligned}$$

maka berdasarkan subbab (2.4) mengenai matriks variansi kovariansi sampel, variansi sampel untuk setiap prediktor pada matriks $\mathbf{X}_1$ adalah

$$s_{ll} = s_l^{\,2} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_{il} - \bar{x}_l)^2}{n-1} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (\tilde{\tilde{x}}_{il})^2}{n-1} \tag{3.2.15}$$

dan kovariansi antara prediktor ke-*l* dan ke-*q* pada $\mathbf{X}_1$ adalah

$$s_{lq} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_{il} - \bar{x}_l)(x_{iq} - \bar{x}_q)}{n-1} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (\tilde{\tilde{x}}_{il})(\tilde{\tilde{x}}_{iq})}{n-1},\ l\,,\ q = 1,\ldots,k,\ \ l \neq q \tag{3.2.16}$$

Dengan menggunakan persamaan (3.2.15) dan (3.2.16), maka bentuk matriks variansi kovariansi $\mathbf{X}_1$, dinotasikan S_1^* adalah sebagai berikut :

$$S_1^* = \frac{\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1}{n-1} = \frac{\mathbf{p}_1 \mathbf{t}_1^T \mathbf{t}_1 \mathbf{p}_1^T}{n-1} \tag{3.2.17}$$

dimana S_1^* tersebut menjelaskan seberapa besar variasi atau informasi dari $\mathbf{X}_1$ yang dijelaskan oleh vektor komponen $\mathbf{t}_1$ atau dengan kata lain untuk mengukur variabilitas dari $\mathbf{X}_1$ yang dijelaskan oleh vektor komponen $\mathbf{t}_1$.

Berdasarkan subbab 2.6 mengenai pengukuran keseluruhan variabilitas, untuk mengetahui seberapa besar variasi dari $\mathbf{X}_1$ yang dijelaskan oleh vektor komponen $\mathbf{t}_1$ dapat ditentukan melalui *trace* dari S_1^* yang kemudian dibandingkan dengan *trace* dari S atau *trace* dari matriks variansi kovariansi sampel $\mathbf{X}$ yang disebut proporsi variansi total $\mathbf{X}_1$ yang dijelaskan oleh komponen pertama.

Jika nilai proporsi variansi kecil berarti vektor komponen pertama $\mathbf{t}_1$ tidak cukup dalam menjelaskan variasi $\mathbf{X}_1$, maka dibutuhkan vektor komponen berikutnya, akan tetapi jika nilainya besar misalkan sekitar 80% (Jorgensen & Goegebeur, 2007) berarti hanya dengan vektor komponen pertama, maka $\mathbf{t}_1$ sudah cukup dalam menjelaskan variasi $\mathbf{X}_1$. Namun, selain perbandingan antara *trace* S_1^* dengan *trace* S, kriteria paling utama berikut ini juga menentukan keputusan apakah dibutuhkan vektor komponen selanjutnya yaitu vektor komponen kedua atau sebaliknya.

Kemudian, setelah diperoleh vektor komponen pertama $\mathbf{t}_1$ dan kondisi $\tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{X}_1$ pada iterasi pertama dalam pembentukan vektor komponen pertama $\mathbf{t}_1$, persamaan (3.2.1) dapat ditulis sebagai

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathbf{X}} &= \mathbf{T}\mathbf{P}^T + \mathbf{E} \\
\mathbf{X}_1 &= \sum_{j=1}^{m} \mathbf{t}_j \mathbf{p}_j^T + \mathbf{E} \\
\mathbf{X}_1 &= \mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T + \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T + \ldots + \mathbf{t}_{m-1}\mathbf{p}_{m-1}^T + \mathbf{t}_m\mathbf{p}_m^T + \mathbf{E}
\end{aligned}$$

Berdasarkan persamaan (3.2.10) yaitu $\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 = \mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T$, maka

$$\mathbf{X}_1 = \tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T + \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T + \ldots + \mathbf{t}_{m-1}\mathbf{p}_{m-1}^T + \mathbf{t}_m\mathbf{p}_m^T + \mathbf{E}$$
$$\mathbf{X}_1 = \tilde{\mathbf{X}} = \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 + \mathbf{X}_2$$

Berdasarkan uraian tersebut, maka matriks $\mathbf{X}_2$ merupakan matriks *residual* dan dinyatakan sebagai :

$$\mathbf{X}_2 = \mathbf{X}_1 - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1$$
$$\mathbf{X}_2 = \mathbf{X}_1 - \mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T \qquad (3.2.18)$$

Matriks *residual* tersebut menerangkan seberapa besar $\mathbf{X}_1$ yang tidak dijelaskan di dalam vektor komponen $\mathbf{t}_1$. Jika $\mathbf{X}_2$ yang terbentuk bukan matriks nol, maka untuk menjelaskan $\tilde{\mathbf{X}}$ dibutuhkan komponen kedua.

Selain itu, berdasarkan kondisi $\tilde{\mathbf{y}} = \mathbf{y}_1$ pada pembentukan vektor komponen pertama $\mathbf{t}_1$, maka persamaan (3.2.2) dapat ditulis sebagai

$$\tilde{\mathbf{y}} = \mathbf{Tc} + \mathbf{F}$$
$$\mathbf{y}_1 = \sum_{j=1}^{m} \mathbf{t}_j c_j + \mathbf{F}$$
$$\mathbf{y}_1 = \mathbf{t}_1 c_1 + \mathbf{t}_2 c_2 + \ldots + \mathbf{t}_{m-1} c_{m-1} + \mathbf{t}_m c_m + \mathbf{F}$$

Berdasarkan persamaan (3.2.13) yaitu $\hat{\mathbf{y}}_1 = \mathbf{t}_1 \hat{c}_1$, maka

$$\mathbf{y}_1 = \hat{\mathbf{y}}_1 + \mathbf{y}_2$$

Vektor $\mathbf{y}_2$ merupakan vektor *residual* dan dinyatakan sebagai :

$$\mathbf{y}_2 = \mathbf{y}_1 - \hat{\mathbf{y}}_1$$
$$\mathbf{y}_2 = \mathbf{y}_1 - \mathbf{t}_1\hat{\mathbf{c}}_1 \qquad (3.2.19)$$

Jika vektor *residual* $\mathbf{y}_2$ yang terbentuk bukan vektor nol, maka dibutuhkan vektor komponen kedua untuk menjelaskan $\tilde{\mathbf{X}}$.

Selanjutnya, $\mathbf{X}_2$ dan $\mathbf{y}_2$ yang telah didapatkan, digunakan sebagai langkah awal dalam pembentukan vektor komponen dan loading kedua.

Berikut ini akan dijelaskan mengenai cara pembentukan vektor komponen kedua $\mathbf{t}_2$ dan vektor loading kedua $\mathbf{p}_2$.

3.2.2 Pembentukan Vektor Komponen dan *Loading* Kedua

Berdasarkan subbab 3.1.2, jika matriks *residual* $\mathbf{X}_2$ bukan matriks nol dan vektor $\mathbf{y}_2$ bukan vektor nol, maka dibutuhkan vektor komponen kedua, dimana $\mathbf{X}_2$ dan $\mathbf{y}_2$ digunakan sebagai langkah awal dalam pembentukan vektor komponen dan *loading* kedua.

Selanjutnya, persamaan (3.2.18) yaitu $\mathbf{X}_2 = \mathbf{X}_1 - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1$ dapat diuraikan sebagai berikut :

$$
\begin{aligned}
\mathbf{X}_2 &= \mathbf{X}_1 - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 \\
&= \begin{bmatrix} x_{11} - \bar{x}_1 & \cdots & x_{1k} - \bar{x}_k \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n1} - \bar{x}_1 & \cdots & x_{nk} - \bar{x}_k \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{x}}_{11} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{1k} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{\tilde{x}}_{n1} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{nk} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \tilde{x}_{11} & \cdots & \tilde{x}_{1k} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{x}_{n1} & \cdots & \tilde{x}_{nk} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{x}}_{11} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{1k} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{\tilde{x}}_{n1} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{nk} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} x_{11(2)} & \cdots & x_{1k(2)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n1(2)} & \cdots & x_{nk(2)} \end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{3.2.20}
$$

dan persamaan (3.2.19) yaitu $\mathbf{y}_2 = \mathbf{y}_1 - \hat{\mathbf{y}}_1$ dapat diuraikan sebagai berikut :

$$
\begin{aligned}
\mathbf{y}_2 &= \mathbf{y}_1 - \hat{\mathbf{y}}_1 \\
&= \begin{bmatrix} \tilde{y}_1 - t_{11}\hat{c}_1 \\ \vdots \\ \tilde{y}_n - t_{n1}\hat{c}_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_{1(2)} \\ \vdots \\ y_{n(2)} \end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{3.2.21}
$$

Similar dengan subbab sebelumnya, cara pembentukan vektor komponen kedua $\mathbf{t}_2$ dan vektor *loading* kedua $\mathbf{p}_2$ dapat diuraikan dalam langkah-langkah berikut :

a) Menentukan vektor komponen kedua $\mathbf{t}_2$

   Similar dengan pembentukan $\mathbf{t}_1$, berdasarkan persamaan (3.2.3), maka untuk membentuk vektor komponen kedua, $\mathbf{t}_2$ dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{t}_2 = \mathbf{X}_2\mathbf{w}_2 \tag{3.2.22}$$

dimana $\mathbf{w}_2$ adalah bobot yang merupakan penjumlahan fungsi kovariansi antara setiap variabel prediktor $\mathbf{X}_2$ dan respon $\mathbf{y}_2$, sehingga $\mathbf{w}_2$ dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{w}_2 = \frac{\sum_{l=1}^{k} \mathrm{cov}(\mathbf{x}_{l(2)}, \mathbf{y}_{(2)})}{\sqrt{\sum_{l=1}^{k} \mathrm{cov}(\mathbf{x}_{l(2)}, \mathbf{y}_{(2)})^2}}, \quad l = 1, \ldots, k \tag{3.2.23}$$

Berdasarkan subbab 2.4. mengenai matriks variansi kovariansi sampel dan cara yang similar dengan pembentukan $\mathbf{w}_1$ untuk $\mathbf{t}_1$, maka persamaan (3.2.23) dapat ditulis sebagai (penjabaran diberikan pada lampiran 6.1)

$$\mathbf{w}_2 = \frac{\mathbf{X}_2^T\mathbf{y}_2}{\| \mathbf{X}_2^T\mathbf{y}_2 \|} \tag{3.2.24}$$

dan dengan menggunakan persamaan (3.2.24), vektor komponen kedua $\mathbf{t}_2$ dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{t}_2 = \mathbf{X}_2\mathbf{w}_2 = \frac{\mathbf{X}_2\mathbf{X}_2^T\mathbf{y}_2}{\| \mathbf{X}_2^T\mathbf{y}_2 \|} \tag{3.2.25}$$

b) Menentukan vektor *loading* kedua $\mathbf{p}_2$

Kemudian, setelah didapatkannya vektor komponen kedua $\mathbf{t}_2$, berdasarkan persamaan (3.1.2), dilakukan regresi antara variabel-variabel matriks $\mathbf{X}_2$ yang berperan sebagai variabel-variabel respon dan $\mathbf{t}_2$ yang berperan sebagai variabel prediktor dan merupakan regresi multivariat, sehingga bentuk regresi antara $\mathbf{X}_2$ dengan $\mathbf{t}_2$ dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{X}_2 = \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T + \mathbf{e}_2 \tag{3.2.26}$$

dimana

$\mathbf{X}_2$ adalah matriks *residual* yang berperan sebagai *k* variabel respon berukuran *n* x *k*,

$\mathbf{t}_2$ adalah vektor komponen kedua yang berperan sebagai prediktor berukuran *n* x 1,

$\mathbf{p}_2$ adalah vektor *loading* kedua yang berperan sebagai parameter regresi yang berukuran *k* x 1,

$\mathbf{e}_2$ adalah matriks *error* yang berukuran *n* x *k*.

Dengan menggunakan metode *least squares* untuk regresi multivariat pada persamaan (3.2.26), dapat diperoleh (bukti diberikan pada lampiran 4.2)

$$\mathbf{p}_2 = \left(\mathbf{t}_2^T \mathbf{t}_2\right)^{-1} \mathbf{X}_2^T \mathbf{t}_2 \tag{3.2.27}$$

sehingga didapatkan

$$\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2 = \mathbf{t}_2 \mathbf{p}_2^T \tag{3.2.28}$$

$$\begin{bmatrix} \tilde{\tilde{x}}_{11(2)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{1k(2)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{\tilde{x}}_{n1(2)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{nk(2)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_{12} p_{12} & \cdots & t_{12} p_{k2} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{n2} p_{12} & \cdots & t_{n2} p_{k2} \end{bmatrix}$$

c) Selanjutnya, berdasarkan persamaan (3.2.2) dan menggunakan vektor komponen kedua $\mathbf{t}_2$ yang telah diperoleh , dibentuk regresi linier sederhana antara $\mathbf{y}_2$ sebagai variabel respon dan $\mathbf{t}_2$ sebagai variabel prediktor yaitu

$$\mathbf{y}_2 = \mathbf{t}_2 c_2 + \mathbf{f}_2 \tag{3.2.29}$$

dimana

$\mathbf{y}_2$ adalah vektor *residual* dari $\mathbf{y}_1$ yang berperan sebagai vaiabel respon berukuran *n* x 1,

$\mathbf{t}_2$ adalah vektor komponen kedua yang berperan sebagai prediktor berukuran *n* x 1,

c_2 adalah parameter regresi berukuran 1 x 1,

$\mathbf{f}_2$ adalah vektor *error* berukuran *n* x 1.

Dengan menggunakan OLS, dapat ditunjukkan taksiran untuk c_2 (bukti diberikan pada lampiran 5.2) adalah

$$\hat{c}_2 = \left(\mathbf{t}_2^T \mathbf{t}_2\right)^{-1} \mathbf{t}_2^T \mathbf{y}_2 \tag{3.2.30}$$

sehingga taksiran untuk $\mathbf{y}_2$ yaitu $\hat{\mathbf{y}}_2$ adalah

$$\hat{\mathbf{y}}_2 = \mathbf{t}_2 \hat{c}_2 \tag{3.2.31}$$

Untuk mengetahui besarnya hubungan antara tiap variabel prediktor pada matriks $\mathbf{X}_2$ yang telah diubah atau didekomposisikan menjadi vektor komponen kedua $\mathbf{t}_2$, dapat diketahui melalui matriks variansi kovariansi sampel $\mathbf{X}_2$. Pada kondisi dimana $\mathbf{X}_2$ dapat dijelaskan hanya dengan menggunakan vektor komponen kedua $\mathbf{t}_2$, maka $\mathbf{X}_2$ dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{X}_2 = \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2 = \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T \tag{3.2.32}$$

$$\begin{bmatrix} x_{11(2)} & \cdots & x_{1k(2)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n1(2)} & \cdots & x_{nk(2)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{x}}_{11(2)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{1k(2)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{\tilde{x}}_{n1(2)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{nk(2)} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} t_{12}p_{12} & \cdots & t_{12}p_{k2} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{n2}p_{12} & \cdots & t_{n2}p_{k2} \end{bmatrix}$$

Berdasarkan persamaan (3.2.20) yaitu $\mathbf{X}_2 = \mathbf{X}_1 - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1$ dengan uraian

$$\begin{bmatrix} x_{11(2)} & \cdots & x_{1k(2)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n1(2)} & \cdots & x_{nk(2)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{11} - \overline{x}_1 & \cdots & x_{1k} - \overline{x}_k \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n1} - \overline{x}_1 & \cdots & x_{nk} - \overline{x}_k \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{x}}_{11} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{1k} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{\tilde{x}}_{n1} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{nk} \end{bmatrix}$$

dan persamaan (3.2.10) yaitu $\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2 = \mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T$ dengan uraian

$$\begin{bmatrix} \tilde{\tilde{x}}_{11} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{1k} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{\tilde{x}}_{n1} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{nk} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_{11}p_{11} & \cdots & t_{11}p_{k1} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{n1}p_{11} & \cdots & t_{n1}p_{k1} \end{bmatrix},$$

maka persamaan (3.2.32) dapat ditulis sebagai

$$\begin{bmatrix} t_{12}p_{12} & \cdots & t_{12}p_{k2} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{n2}p_{12} & \cdots & t_{n2}p_{k2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{11} - \overline{x}_1 & \cdots & x_{1k} - \overline{x}_k \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n1} - \overline{x}_1 & \cdots & x_{nk} - \overline{x}_k \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} t_{11}p_{11} & \cdots & t_{11}p_{k1} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{n1}p_{11} & \cdots & t_{n1}p_{k1} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} t_{12}p_{12} & \cdots & t_{12}p_{k2} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{n2}p_{12} & \cdots & t_{n2}p_{k2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{x}_{11} & \cdots & \tilde{x}_{1k} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{x}_{n1} & \cdots & \tilde{x}_{nk} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{x}}_{11} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{1k} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{\tilde{x}}_{n1} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{nk} \end{bmatrix}$$

Berdasarkan subbab (2.4) mengenai matriks variansi kovariansi sampel, variansi sampel untuk setiap prediktor pada matriks $\mathbf{X}_2$ adalah

$$s_{ll} = s_l{}^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_{il} - \overline{x}_l - t_{i1}p_{l1})^2}{n-1} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(\tilde{x}_{il} - \tilde{\tilde{x}}_{il})^2}{n-1} \qquad (3.2.33)$$

dan kovariansi antara prediktor ke-*l* dan ke-*q* pada $\mathbf{X}_2$ adalah

$$s_{lq} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_{il} - \overline{x}_l - t_{i1}p_{l1})(x_{iq} - \overline{x}_q - t_{i1}p_{q1})}{n-1} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(\tilde{x}_{il} - \tilde{\tilde{x}}_{il})(\tilde{x}_{iq} - \tilde{\tilde{x}}_{iq})}{n-1} \qquad (3.2.34)$$

$l, q = 1,\ldots,k,\ l \neq q.$

Dengan menggunakan persamaan (3.2.33) dan (3.2.34), matriks variansi kovariansi sampel $\mathbf{X}_2$ dapat ditulis sebagai

$$S_2^* = \frac{\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2}{n-1} = \frac{\mathbf{p}_2 \mathbf{t}_2^T \mathbf{t}_2 \mathbf{p}_2^T}{n-1} \qquad (3.2.35)$$

Pembuktian persamaan (3.2.35) dapat dilihat pada lampiran 2.2.

S_2^* yang telah didapatkan menjelaskan seberapa besar variasi atau informasi dari $\mathbf{X}_2$ yang dijelaskan oleh vektor komponen $\mathbf{t}_2$ atau dengan kata lain untuk mengukur variabilitas dari $\mathbf{X}_2$ yang dijelaskan oleh vektor komponen $\mathbf{t}_2$.

Berdasarkan subbab 2.6 mengenai pengukuran keseluruhan variabilitas, untuk mengetahui seberapa besar variasi dari $\mathbf{X}_2$ yang dijelaskan oleh vektor komponen $\mathbf{t}_2$ dapat ditentukan melalui *trace* dari S_2^* yang kemudian dibandingkan dengan *trace* dari S atau *trace* dari matriks variansi kovariansi sampel **X**. Jika nilai perbandingan antara *trace* dari S_2^* dengan *trace* dari S (proporsi variansi total $\mathbf{X}_1$ yang dijelaskan komponen kedua) yang kemudian hasilnya dijumlah dengan nilai perbandingan antara *trace* dari S_1^* dengan *trace* dari S pada pembentukan vektor komponen pertama kecil berarti vektor komponen kedua $\mathbf{t}_2$ tidak cukup dalam menjelaskan variasi $\mathbf{X}_2$, maka dibutuhkan vektor komponen berikutnya.

Akan tetapi jika nilai perbandingannya besar berarti hanya dengan vektor komponen kedua, maka $\mathbf{t}_2$ sudah cukup dalam menjelaskan variasi $\mathbf{X}_2$.

. Kemudian, setelah diperoleh vektor komponen kedua $\mathbf{t}_2$, persamaan (3.2.1) dapat diuraikan menjadi

$$\tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{T}\mathbf{P}^T + \mathbf{E}$$

$$\mathbf{X}_1 = \sum_{j=1}^{m} \mathbf{t}_j \mathbf{p}_j^T + \mathbf{E}$$

$$\mathbf{X}_1 = \mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T + \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T + \ldots + \mathbf{t}_{m-1}\mathbf{p}_{m-1}^T + \mathbf{t}_m\mathbf{p}_m^T + \mathbf{E} \quad (3.2.36)$$

Berdasarkan persamaan (3.2.10) yaitu $\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 = \mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T$ dan (3.2.26) yaitu $\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2 = \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T$, maka persamaan (3.2.36) dapat ditulis sebagai

$$\tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{X}_1 = \mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T + \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T + \ldots + \mathbf{t}_{m-1}\mathbf{p}_{m-1}^T + \mathbf{t}_m\mathbf{p}_m^T + \mathbf{E}$$

$$\tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{X}_1 = \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 + \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2 + \mathbf{X}_3 \quad (3.2.37)$$

dan berdasarkan persamaan (3.2.18) yaitu $\mathbf{X}_2 = \mathbf{X}_1 - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1$, maka persamaan (3.2.37) dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{X}_1 - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 = \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2 + \mathbf{X}_3$$

$$\mathbf{X}_2 = \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2 + \mathbf{X}_3 \quad (3.2.38)$$

Berdasarkan persamaan (3.2.38), maka matriks $\mathbf{X}_3$ merupakan matriks *residual* dan dinyatakan sebagai :

$$\mathbf{X}_3 = \mathbf{X}_2 - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2$$

$$\mathbf{X}_3 = \mathbf{X}_2 - \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T \quad (3.2.39)$$

Matriks *residual* tersebut menerangkan seberapa besar $\mathbf{X}_2$ yang tidak dijelaskan di dalam komponen $\mathbf{t}_2$. Jika $\mathbf{X}_3$ yang terbentuk bukan matriks nol, maka untuk menjelaskan $\tilde{\mathbf{X}}$ dibutuhkan komponen ketiga.

Selain itu, berdasarkan kondisi $\tilde{\mathbf{y}} = \mathbf{y}_1$ pada pembentukan vektor komponen pertama $\mathbf{t}_1$, maka persamaan (3.2.2) dapat ditulis sebagai

$$\tilde{\mathbf{y}} = \mathbf{T}\mathbf{c} + \mathbf{F}$$

$$\mathbf{y}_1 = \sum_{j=1}^{m} \mathbf{t}_j c_j + \mathbf{F}$$

$$\mathbf{y}_1 = \mathbf{t}_1 c_1 + \mathbf{t}_2 c_2 + \ldots + \mathbf{t}_{m-1} c_{m-1} + \mathbf{t}_m c_m + \mathbf{F}$$

Berdasarkan persamaan (3.2.13) yaitu $\hat{\mathbf{y}}_1 = \mathbf{t}_1\hat{c}_1$ dan (3.2.31) yaitu $\hat{\mathbf{y}}_2 = \mathbf{t}_2\hat{c}_2$, maka

$$\mathbf{y}_1 = \hat{\mathbf{y}}_1 + \hat{\mathbf{y}}_2 + \mathbf{y}_3 \quad (3.2.40)$$

dan berdasarkan persamaan (3.2.19) yaitu $\mathbf{y}_2 = \mathbf{y}_1 - \hat{\mathbf{y}}_1$, maka persamaan (3.2.40) dapat ditulis sebagai

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_1 &= \hat{\mathbf{y}}_1 + \hat{\mathbf{y}}_2 + \mathbf{y}_3 \\ \mathbf{y}_1 - \hat{\mathbf{y}}_1 &= \hat{\mathbf{y}}_2 + \mathbf{y}_3 \\ \mathbf{y}_2 &= \hat{\mathbf{y}}_2 + \mathbf{y}_3 \end{aligned}$$

Vektor $\mathbf{y}_3$ merupakan merupakan vektor *residual* dan dinyatakan sebagai

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_3 &= \mathbf{y}_2 - \hat{\mathbf{y}}_2 \\ \mathbf{y}_3 &= \mathbf{y}_2 - \mathbf{t}_2\hat{c}_2 \end{aligned} \tag{3.2.41}$$

Jika vektor *residual* $\mathbf{y}_3$ yang terbentuk bukan vektor nol, maka dibutuhkan vektor komponen ketiga untuk menjelaskan $\tilde{\mathbf{X}}$.

Selanjutnya, $\mathbf{X}_3$ dan $\mathbf{y}_3$ yang telah didapatkan, digunakan sebagai langkah awal dalam pembentukan komponen ketiga dan iterasi akan terus berjalan hingga matriks dan vektor *residual* yang terbentuk merupakan matriks nol, sehingga banyaknya vektor komponen yang terbentuk dapat menjelaskan $\tilde{\mathbf{X}}$.

Misalkan iterasi telah berjalan hingga mendapat *m*-1 vektor komponen yaitu $\mathbf{t}_{m-1}$ dan *m*-1 matriks variansi kovariansi sampel yaitu S^*_{m-1} yang menjelaskan seberapa besar variansi dari $\tilde{\mathbf{X}}$ yang telah diubah atau didekomposisikan menjadi *m*-1 vektor komponen. Kemudian, misalkan untuk menjelaskan $\tilde{\mathbf{X}}$, dibutuhkan *m* komponen, maka persamaan (3.2.1) diuraikan menjadi

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{X}} &= \mathbf{TP}^T + \mathbf{E} \\ \mathbf{X}_1 &= \sum_{j=1}^{m} \mathbf{t}_j \mathbf{p}_j^T + \mathbf{E} \\ \mathbf{X}_1 &= \mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T + \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T + \ldots + \mathbf{t}_{m-1}\mathbf{p}_{m-1}^T + \mathbf{t}_m\mathbf{p}_m^T + \mathbf{E} \end{aligned} \tag{3.2.42}$$

Karena iterasi telah berjalan hingga *m*-1 komponen berarti telah didapatkan vektor komponen ke-(*m*-1) $\mathbf{t}_{m-1}$ dan vektor *loading* ke-(*m*-1), maka telah didapatkan pula persamaan $\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1} = \mathbf{t}_{m-1}\mathbf{p}_{m-1}^T$ dan berdasarkan persamaan (3.2.10) yaitu $\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 = \mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T$ dan (3.2.26) yaitu $\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2 = \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T$, maka persamaan (3.2.42) dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{X}_1 = \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 + \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2 + \ldots + \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1} + \mathbf{X}_m \tag{3.2.43}$$

Berdasarkan persamaan (3.2.18) yaitu $\mathbf{X}_2 = \mathbf{X}_1 - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1$ dan (3.2.36) yaitu $\mathbf{X}_3 = \mathbf{X}_2 - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2$, maka persamaan (3.2.43) menjadi

$$\underbrace{\underbrace{\underbrace{\mathbf{X}_1 - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1}_{\mathbf{X}_2} - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2}_{\mathbf{X}_3} - \dots}_{\mathbf{X}_{m-1}} - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1} = \mathbf{X}_m$$

$$\mathbf{X}_1 - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2 - \dots - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1} = \mathbf{X}_m \qquad (3.2.44)$$

$$\mathbf{X}_{m-1} - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1} = \mathbf{X}_m \qquad (3.2.45)$$

maka berdasarkan persamaan (3.2.45), terdapat $\mathbf{X}_m$ yang merupakan matriks *residual* dinyatakan sebagai :

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_m &= \mathbf{X}_{m-1} - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1} \\ \mathbf{X}_m &= \mathbf{X}_{m-1} - \mathbf{t}_{m-1}\mathbf{p}_{m-1}' \end{aligned} \qquad (3.2.46)$$

Matriks *residual* tersebut menerangkan seberapa besar $\mathbf{X}_{m-1}$ yang tidak dijelaskan di dalam komponen $\mathbf{t}_{m-1}$. Jika $\mathbf{X}_m$ yang terbentuk bukan matriks nol, maka untuk menjelaskan $\tilde{\mathbf{X}}$ dibutuhkan komponen ke-*m*.

Selain itu, berdasarkan persamaan (3.2.2) yang diuraikan menjadi

$$\tilde{\mathbf{y}} = \mathbf{Tc} + \mathbf{F}$$

$$\mathbf{y}_1 = \sum_{j=1}^{m} \mathbf{t}_j c_j + \mathbf{F}$$

$$\mathbf{y}_1 = \mathbf{t}_1 c_1 + \mathbf{t}_2 c_2 + \dots + \mathbf{t}_{m-1} c_{m-1} + \mathbf{t}_m c_m + \mathbf{F}$$

dan karena iterasi telah berjalan hingga *m*-1 komponen berarti telah didapatkan vektor komponen ke-(*m*-1) $\mathbf{t}_{m-1}$ dan taksiran c_{m-1} yaitu $\hat{c}_{m-1}$, maka didapatkan persamaan $\hat{\mathbf{y}}_{m-1} = \mathbf{t}_{m-1}\hat{c}_{m-1}$ dan berdasarkan persamaan (3.2.13) yaitu $\hat{\mathbf{y}}_1 = \mathbf{t}_1\hat{c}_1$ dan (3.2.31) yaitu $\hat{\mathbf{y}}_2 = \mathbf{t}_2\hat{c}_2$, maka

$$\mathbf{y}_1 = \hat{\mathbf{y}}_1 + \hat{\mathbf{y}}_2 + \dots + \hat{\mathbf{y}}_{m-1} + \mathbf{y}_m \qquad (3.2.47)$$

Berdasarkan persamaan (3.2.19) yaitu $\mathbf{y}_2 = \mathbf{y}_1 - \hat{\mathbf{y}}_1$ dan (3.2.37) yaitu $\mathbf{y}_3 = \mathbf{y}_2 - \hat{\mathbf{y}}_2$, maka persamaan (3.2.47) menjadi

$$\underbrace{\underbrace{\underbrace{\underbrace{\mathbf{y}_1 - \hat{\mathbf{y}}_1}_{\mathbf{y}_2} - \hat{\mathbf{y}}_2}_{\mathbf{y}_3} - \ldots}_{\ldots} - \hat{\mathbf{y}}_{m-1}}_{\mathbf{y}_{m-1}} = \mathbf{y}_m$$

$$\mathbf{y}_1 - \hat{\mathbf{y}}_1 - \hat{\mathbf{y}}_2 - \ldots - \hat{\mathbf{y}}_{m-1} = \mathbf{y}_m$$
$$\mathbf{y}_{m-1} - \hat{\mathbf{y}}_{m-1} = \mathbf{y}_m$$

$\mathbf{y}_m$ merupakan vektor *residual* dan ditulis sebagai :

$$\begin{aligned}\mathbf{y}_m &= \mathbf{y}_{m-1} - \hat{\mathbf{y}}_{m-1} \\ \mathbf{y}_m &= \mathbf{y}_{m-1} - \mathbf{t}_{m-1}\hat{\mathbf{c}}_{m-1}\end{aligned} \tag{3.2.48}$$

Jika vektor *residual* $\mathbf{y}_m$ yang terbentuk bukan vektor nol, maka dibutuhkan komponen ke-m untuk menjelaskan $\tilde{\mathbf{X}}$.

Selanjutnya, $\mathbf{X}_m$ dan $\mathbf{y}_m$ yang telah didapatkan, digunakan sebagai langkah awal dalam pembentukan komponen ke-*m*.

3.2.3 Pembentukan Komponen dan *Loading* ke-*m*

Berdasarkan subbab 3.2.2, jika matriks $\mathbf{X}_m$ bukan matriks nol dan vektor $\mathbf{y}_m$ bukan vektor nol, maka dibutuhkan vektor komponen ke-*m*, dimana $\mathbf{X}_m$ dan $\mathbf{y}_m$ digunakan sebagai langkah awal dalam pembentukan vektor komponen dan *loading* ke-*m*.

Selanjutnya, persamaan (3.2.46) yaitu dapat diuraikan sebagai berikut :

$$\begin{aligned}\mathbf{X}_m &= \mathbf{X}_{m-1} - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1} \\ &= \begin{bmatrix} x_{11(m-1)} & \cdots & x_{1k(m-1)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n1(m-1)} & \cdots & x_{nk(m-1)} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{x}}_{11(m-1)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{1k(m-1)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{\tilde{x}}_{n1(m-1)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{nk(m-1)} \end{bmatrix}\end{aligned}$$

$$\mathbf{X}_m = \begin{bmatrix} x_{11(m)} & \cdots & x_{1k(m)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n1(m)} & \cdots & x_{nk(m)} \end{bmatrix} \quad (3.2.49)$$

dan persamaan (3.2.48) yaitu $\mathbf{y}_m = \mathbf{y}_{m-1} - \hat{\mathbf{y}}_{m-1}$ dapat diuraikan sebagai berikut :

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_m &= \mathbf{y}_{m-1} - \hat{\mathbf{y}}_{m-1} \\ &= \begin{bmatrix} y_{1(m-1)} - t_{1(m-1)}\hat{c}_m \\ \vdots \\ y_{n(m-1)} - t_{n(m-1)}\hat{c}_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_{1(m)} \\ \vdots \\ y_{n(m)} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.2.50)$$

Cara pembentukan vektor komponen ke-*m* $\mathbf{t}_m$ dan vektor *loading* ke-*m* $\mathbf{p}_m$ dapat diuraikan dalam langkah-langkah berikut :

a) Menentukan vektor komponen ke-*m* $\mathbf{t}_m$

Similar dengan pembentukan vektor komponen berikutnya, berdasarkan persamaan (3.2.3), maka untuk membentuk vektor komponen ke-*m*, $\mathbf{t}_m$ dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{t}_m = \mathbf{X}_m \mathbf{w}_m \quad (3.2.51)$$

dimana $\mathbf{w}_m$ adalah bobot yang merupakan penjumlahan fungsi kovariansi antara setiap variabel prediktor dalam matriks $\mathbf{X}_m$ dan vektor respon $\mathbf{y}_m$, sehingga $\mathbf{w}_m$ dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{w}_m = \frac{\sum_{l=1}^{k} \mathrm{cov}(x_{l(m)}, y_{(m)})}{\sqrt{\sum_{l=1}^{k} \mathrm{cov}(x_{l(m)}, y_{(m)})^2}}, \ l = 1,\ldots,k \quad (3.2.52)$$

Berdasarkan subbab 2.4, dan cara yang yang similar dengan pembentukan vektor bobot untuk vektor komponen sebelumnya, maka persamaan (3.2.52) dapat ditulis sebagai (penjabaran diberikan pada lampiran 6.2)

$$\mathbf{w}_m = \frac{\mathbf{X}_m^T \mathbf{y}_m}{\| \mathbf{X}_m^T \mathbf{y}_m \|} \quad (3.2.53)$$

dan dengan menggunakan persamaan (3.2.53), vektor komponen ke-*m*, $\mathbf{t}_m$ dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{t}_m = \mathbf{X}_m \mathbf{w}_m = \frac{\mathbf{X}_m \mathbf{X}_m^T \mathbf{y}_m}{\| \mathbf{X}_m^T \mathbf{y}_m \|} \tag{3.2.54}$$

b) Menentukan vektor *loading* ke-*m* $\mathbf{p}_m$

Kemudian, setelah didapatkannya vektor komponen k-*m* $\mathbf{t}_m$, berdasarkan persamaan (3.2.1), dilakukan regresi antara variabel-variabel pada matriks $\mathbf{X}_m$ yang berperan sebagai variabel-variabel respon dan $\mathbf{t}_m$ yang berperan sebagai variabel prediktor dan merupakan regresi multivariat, sehingga bentuk regresi antara $\mathbf{X}_m$ dengan $\mathbf{t}_m$ dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{X}_m = \mathbf{t}_m \mathbf{p}_m^T + \mathbf{e}_m \tag{3.2.55}$$

dimana

$\mathbf{X}_m$ adalah matriks *residual* dari $\mathbf{X}_{m-1}$ yang berperan sebagai *k* variabel respon berukuran *n* x *k*,

$\mathbf{t}_m$ adalah vektor komponen kedua yang berperan sebagai prediktor berukuran *n* x 1,

$\mathbf{p}_m$ adalah vektor *loading* kedua yang berperan sebagai parameter regresi berukuran *k* x 1,

$\mathbf{e}_m$ adalah matriks *error* yang berukuran *n* x *k*.

Dengan menggunakan metode *least squares* untuk regresi multivariat tersebut, dapat diperoleh (bukti diberikan pada lampiran 4.3)

$$\mathbf{p}_m = \left(\mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m\right)^{-1} \mathbf{X}_m^T \mathbf{t}_m \tag{3.2.56}$$

yang kemudian didapatkan

$$\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_m = \mathbf{t}_m \mathbf{p}_m^T$$

$$\begin{bmatrix} \tilde{\tilde{x}}_{11(m)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{1k(m)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{\tilde{x}}_{n1(m)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{nk(m)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_{1m} p_{1m} & \cdots & t_{1m} p_{km} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{nm} p_{1m} & \cdots & t_{nm} p_{km} \end{bmatrix} \tag{3.2.57}$$

c) Selanjutnya, berdasarkan persamaan (3.2.2) dan menggunakan vektor komponen ke-*m* $\mathbf{t}_m$ yang telah diperoleh , dilakukan regresi antara $\mathbf{y}_m$ sebagai variabel respon dan $\mathbf{t}_m$ sebagai prediktor sehingga bentuk regresi antara $\mathbf{y}_m$ dengan $\mathbf{t}_m$ yang merupakan regresi linier sedehana dapat dinyatakan sebagai

$$\mathbf{y}_m = \mathbf{t}_m c_m + \mathbf{f}_m \tag{3.2.58}$$

dimana

$\mathbf{y}_m$ adalah vektor *residual* dari $\mathbf{y}_{m-1}$ yang berperan sebagai variabel respon berukuran *n* x 1,

$\mathbf{t}_m$ adalah vektor komponen kedua yang berperan sebagai prediktor berukuran *n* x 1,

c_m adalah parameter regresi berukuran 1 x 1,

$\mathbf{f}_m$ adalah vektor *error* berukuran *n* x 1.

Dengan menggunakan OLS, dapat ditunjukkan taksiran untuk c_m (bukti diberikan pada lampiran 5.3) adalah

$$\hat{c}_m = \left(\mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m\right)^{-1} \mathbf{t}_m^T \mathbf{y}_m \tag{3.2.59}$$

sehingga taksiran dari $\mathbf{y}_m$ yaitu $\hat{\mathbf{y}}_m$ dapat ditulis sebagai

$$\hat{\mathbf{y}}_m = \mathbf{t}_m \hat{c}_m \tag{3.2.60}$$

Kemudian, similar dengan iterasi-iterasi sebelumnya dalam menentukan vektor - vektor komponen, langkah berikutnya setelah mendapatkan vektor komponen ke-*m* adalah menentukan matriks variansi kovariansi sampel $\mathbf{X}_m$.

Pada kondisi dimana $\mathbf{X}_m$ dapat dijelaskan hanya dengan menggunakan vektor komponen ke-*m* $\mathbf{t}_m$, $\mathbf{X}_m$ dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{X}_m = \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_m = \mathbf{t}_m \mathbf{p}_m^T \tag{3.2.61}$$

$$\begin{bmatrix} x_{11(m)} & \cdots & x_{1k(m)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n1(m)} & \cdots & x_{nk(m)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{x}}_{11(m)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{1k(m)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{\tilde{x}}_{n1(m)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{nk(m)} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} t_{1m} p_{1m} & \cdots & t_{1m} p_{km} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{nm} p_{1m} & \cdots & t_{nm} p_{km} \end{bmatrix}$$

Berdasarkan persamaan (3.2.44) yaitu $\mathbf{X}_m = \mathbf{X}_1 - \ldots - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1}$ dengan uraian

$$\begin{bmatrix} x_{11(m)} & \cdots & x_{1k(m)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n1(m)} & \cdots & x_{nk(m)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{11} - \overline{x}_1 & \cdots & x_{1k} - \overline{x}_k \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n1} - \overline{x}_1 & \cdots & x_{nk} - \overline{x}_k \end{bmatrix} - \ldots - \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{x}}_{11(m-1)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{1k(m-1)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{\tilde{x}}_{n1(m-1)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{nk(m-1)} \end{bmatrix}$$

dan persamaan (3.2.57) yaitu $\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_m = \mathbf{t}_m \mathbf{p}_m^T$ dengan uraian

$$\begin{bmatrix} \tilde{\tilde{x}}_{11(m)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{1k(m)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{\tilde{x}}_{n1(m)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{nk(m)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_{1m} p_{1m} & \cdots & t_{1m} p_{km} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{nm} p_{1m} & \cdots & t_{nm} p_{km} \end{bmatrix},$$

maka persamaan (3.2.61) dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{X}_m = \mathbf{X}_1 - \ldots - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1}$$

$$\begin{bmatrix} t_{1m} p_{1m} & \cdots & t_{1m} p_{km} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{nm} p_{12} & \cdots & t_{nm} p_{km} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{11} - \bar{x}_1 & \cdots & x_{1k} - \bar{x}_k \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n1} - \bar{x}_1 & \cdots & x_{nk} - \bar{x}_k \end{bmatrix} - \ldots - \begin{bmatrix} t_{1(m-1)} p_{1(m-1)} & \cdots & t_{1(m-1)} p_{k(m-1)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{n(m-1)} p_{1(m-1)} & \cdots & t_{n(m-1)} p_{k(m-1)} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} t_{1m} p_{1m} & \cdots & t_{1m} p_{km} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{nm} p_{12} & \cdots & t_{nm} p_{km} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{x}_{11} & \cdots & \tilde{x}_{1k} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{x}_{n1} & \cdots & \tilde{x}_{nk} \end{bmatrix} - \ldots - \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{x}}_{11(m-1)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{1k(m-1)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{\tilde{x}}_{n1(m-1)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{nk(m-1)} \end{bmatrix}$$

Berdasarkan subbab (2.4) mengenai matriks variansi kovariansi sampel, variansi sampel untuk tiap variabel prediktor pada $\mathbf{X}_m$ adalah

$$s_{ll} = s_l^{\,2} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_{il} - \bar{x}_l - \ldots - t_{i(m-1)} p_{l(m-1)})^2}{n-1}$$
$$= \frac{\sum_{i=1}^{n} (\tilde{x}_{il} - \ldots - \tilde{\tilde{x}}_{il(m-1)})^2}{n-1} \tag{3.2.62}$$

dan kovariansi antara variabel prediktor ke-l dan ke-q pada $\mathbf{X}_m$ adalah

$$s_{lq} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_{il} - \bar{x}_l - \ldots - t_{i(m-1)} p_{l(m-1)})(x_{iq} - \bar{x}_q - \ldots - t_{i(m-1)} p_{q(m-1)})}{n-1}$$
$$= \frac{\sum_{i=1}^{n} (\tilde{x}_{il} - \ldots - \tilde{\tilde{x}}_{il(m-1)})(\tilde{x}_{iq} - \ldots - \tilde{\tilde{x}}_{iq(m-1)})}{n-1} \tag{3.2.63}$$

l, q = 1,…,k. Dengan menggunakan persamaan (3.2.62) dan (3.2.63), matriks variansi kovariansi sampel $\mathbf{X}_m$ dapat ditulis sebagai

$$S_m^* = \frac{\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_m^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_m}{n-1} = \frac{\mathbf{p}_m \mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m \mathbf{p}_m^T}{n-1} \tag{3.2.64}$$

Pembuktian persamaan (3.2.64) dapat dilihat pada lampiran 2.3.

S_m^* yang telah didapatkan menjelaskan seberapa besar variasi atau informasi dari $\mathbf{X}_m$ yang dijelaskan oleh vektor komponen $\mathbf{t}_m$ atau dengan kata lain untuk mengukur variabilitas dari $\mathbf{X}_m$ yang dijelaskan oleh vektor komponen $\mathbf{t}_m$.

Berdasarkan subbab 2.6 mengenai pengukuran keseluruhan variabilitas, untuk mengetahui seberapa besar variasi dari $\mathbf{X}_m$ yang dijelaskan oleh vektor komponen $\mathbf{t}_m$ dapat ditentukan melalui *trace* dari S_m^* yang kemudian dibandingkan dengan *trace* dari S atau *trace* dari matriks variansi kovariansi sampel **X** (proporsi variansi total $\mathbf{X}_1$ yang dijelaskan komponen ke-*m*).

Karena iterasi berjalan hingga mendapatkan *m* vektor komponen, nilai perbandingan antara kumulatif *trace* dari S_j^*, $j = 1,\ldots,m$ dengan *trace* dari S akan bernilai satu, maka *m* vektor komponen yang telah diperoleh dapat menjelaskan variasi $\tilde{\mathbf{X}}$.

Dengan demikian, secara umum untuk mendapatkan matriks komponen dan loading dapat menggunakan algoritma NIPALS yang dapat dijelaskan dalam langkah-langkah berikut ini :

1. Algoritma ini dimulai dengan inisialisasi $j = 1$ dimana $j = 1,\ldots,m$.
2. Menentukan bobot $\mathbf{w}_j$ yaitu $\mathbf{w}_j = \dfrac{\mathbf{X}_j^T\mathbf{y}_j}{\|\mathbf{X}_j^T\mathbf{y}_j\|}$.
3. Menentukan komponen $\mathbf{t}_j$ yaitu $\mathbf{t}_j = \mathbf{X}_j\mathbf{w}_j$.
4. Menentukan *loading* $\mathbf{p}_j$ yaitu $\mathbf{p}_j = \dfrac{\mathbf{X}_j^T\mathbf{t}_j}{\mathbf{t}_j^T\mathbf{t}_j}$.
5. Menentukan **c**. Berdasarkan persamaan (3.1.3), dengan meregresikan $\mathbf{y}_j$ dengan $\mathbf{t}_j$ dengan menggunakan OLS diperoleh $\hat{c}_j = \dfrac{\mathbf{t}_j^T\mathbf{y}_j}{\mathbf{t}_j^T\mathbf{t}_j}$.
6. Menentukan *residual* untuk **X** dan **y** yaitu $\mathbf{X}_{j+1} = \mathbf{X}_j - \mathbf{t}_j\mathbf{p}_j^T$ dan $\mathbf{y}_{j+1} = \mathbf{y}_j - \mathbf{t}_j\hat{c}_j$.

Proses ini akan berlanjut hingga **E** adalah matriks nol, lalu bentuk matriks **W**, **T** dan **P** dengan kolom-kolom $\mathbf{w}_j$, $\mathbf{t}_j$ dan $\mathbf{p}_j$.

Untuk mengetahui seberapa besar variasi dari $\tilde{\mathbf{X}}$ yang dijelaskan oleh komponen-komponen ke-*j*, *j* = 1,…,*m* dapat dinyatakan melalui matriks variansi kovariansi $\mathbf{X}_j$ yaitu

$$S_j^* = \frac{\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_j^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_j}{n-1} = \frac{\mathbf{p}_j \mathbf{t}_j^T \mathbf{t}_j \mathbf{p}_j^T}{n-1} \tag{3.2.65}$$

Dari prosedur NIPALS tersebut, algoritma menghasilkan vektor-vektor komponen yang ortogonal. Selain komponen yang ortogonal, NIPALS juga menjamin bobot yang dihasikan ortogonal.

Dalam subbab berikut akan dibuktikan bahwa matriks komponen dan bobot yang terbentuk adalah ortogonal.

3.2.4 Pembuktian Keortogonalan Matriks Komponen

Pada algoritma NIPALS, untuk mendapatkan vektor komponen berikutnya diperlukan suatu matriks *residual*. Penjabaran matriks *residual* dapat ditulis sebagai berikut :

Sebelum pembentukan vektor komponen kedua diperoleh matriks *residual* yaitu :

$$\mathbf{X}_2 = \mathbf{X}_1 - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1$$

$$\begin{aligned}\mathbf{X}_2 &= \mathbf{X}_1 - \mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T \\ &= \mathbf{X}_1 - \frac{\mathbf{t}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{X}_1}{\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1} \\ &= \mathbf{X}_1 - \frac{\mathbf{t}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{X}_1}{c} \\ &= \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{t}_1\mathbf{t}_1^T}{c}\right)\mathbf{X}_1\end{aligned}$$

$\mathbf{t}_j^T\mathbf{t}_j$ berukuran 1 x 1(skalar) sehingga dapat ditulis $\mathbf{t}_j^T\mathbf{t}_j$ = c.

Sebelum pembentukan vektor komponen ketiga diperoleh matriks *residual* yaitu :

$$\mathbf{X}_3 = \mathbf{X}_2 - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2$$

$$
\begin{aligned}
\mathbf{X}_3 &= \mathbf{X}_2 - \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T \\
&= \mathbf{X}_2 - \frac{\mathbf{t}_2\mathbf{t}_2^T\mathbf{X}_2}{\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2} \\
&= \mathbf{X}_2 - \frac{\mathbf{t}_2\mathbf{t}_2^T\mathbf{X}_2}{c} \\
&= \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{t}_2\mathbf{t}_2^T}{c}\right)\mathbf{X}_2 \\
&= \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{t}_2\mathbf{t}_2^T}{c}\right)\left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{t}_1\mathbf{t}_2^T}{c}\right)\mathbf{X}_1
\end{aligned}
$$

$\vdots$

Sebelum pembentukan vektor komponen ke-*m* diperoleh matriks *residual* yaitu :

$$
\begin{aligned}
\mathbf{X}_m &= \mathbf{X}_{m-1} - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1} \\
\mathbf{X}_m &= \mathbf{X}_{m-1} - \mathbf{t}_{m-1}\mathbf{p}_{m-1}^T \\
&= \mathbf{X}_{m-1} - \frac{\mathbf{t}_{m-1}\mathbf{t}_{m-1}^T\mathbf{X}_{m-1}}{\mathbf{t}_{m-1}^T\mathbf{t}_{m-1}} \\
&= \mathbf{X}_{m-1} - \frac{\mathbf{t}_{m-1}\mathbf{t}_{m-1}^T\mathbf{X}_{m-1}}{c} \\
&= \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{t}_{m-1}\mathbf{t}_{m-1}^T}{c}\right)\mathbf{X}_{m-1} \\
&= \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{t}_{m-1}\mathbf{t}_{m-1}^T}{c}\right)\ldots\left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{t}_1\mathbf{t}_1^T}{c}\right)\mathbf{X}_1
\end{aligned}
$$

Dari penjabaran matriks *residual* diatas dan untuk $i \neq j$, i, $j = 1,\ldots,m$, maka $\mathbf{X}_j$ dapat dinyatakan sebagai :

$$
\mathbf{X}_j = \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{t}_{j-1}\mathbf{t}_{j-1}^T}{c}\right)\ldots\left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{t}_i\mathbf{t}_i^T}{c}\right)\ldots\left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{t}_1\mathbf{t}_1^T}{c}\right)\mathbf{X}_1 \qquad (3.2.66)
$$

Berdasarkan subbab 2.1.6 mengenai keortogonalan, maka untuk *i* dan *j* sembarang dimana $i \neq j$ akan dibuktikan tiap pasang vektor $\mathbf{t}_j$ ortogonal, dengan kata lain akan dibuktikan $\mathbf{t}_i^T\mathbf{t}_j = 0$!

Bukti :

dengan menggunakan persamaan (3.2.66), maka

$$
\mathbf{t}_i^T\mathbf{t}_j = \mathbf{t}_i^T\mathbf{X}_j\mathbf{w}_j
$$

$$= \mathbf{t}_i^T \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{t}_{j-1}\mathbf{t}_{j-1}^T}{c} \right) \ldots \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{t}_i\mathbf{t}_i^T}{c} \right) \ldots . \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{t}_1\mathbf{t}_1^T}{c} \right) \mathbf{X}_1 \mathbf{w}_j$$

$$= \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{t}_{j-1}\mathbf{t}_{j-1}^T}{c} \right) \ldots \underbrace{\left(\mathbf{t}_i^T - \frac{c\mathbf{t}_i^T}{c} \right)}_{0} \ldots \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{t}_1\mathbf{t}_1^T}{c} \right) \mathbf{X}_1 \mathbf{w}_j$$

$$= 0$$

$\therefore$ terbukti **T** ortogonal

Selain membuktikan **T** ortogonal, akan dibuktikan pula **W** ortogonal.

Dengan menggunakan persamaan (3.2.66) dan untuk $i \neq j$, $i, j = 1,\ldots,m$, i dan j sembarang, akan dibuktikan $\mathbf{w}_i^T \mathbf{w}_j = 0$!

$$\mathbf{w}_i^T \mathbf{w}_j = \mathbf{w}_i^T \mathbf{X}_j^T \mathbf{y}_j$$

$$= \mathbf{w}_i^T \mathbf{X}_i^T \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{t}_{j-1}\mathbf{t}_{j-1}^T}{c} \right) \ldots \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{t}_i\mathbf{t}_i^T}{c} \right) \mathbf{y}_j$$

$$= \mathbf{t}_i^T \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{t}_{j-1}\mathbf{t}_{j-1}^T}{c} \right) \ldots \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{t}_i\mathbf{t}_i^T}{c} \right) \mathbf{y}_j$$

$$= \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{t}_{j-1}\mathbf{t}_{j-1}^T}{c} \right) \ldots \underbrace{\left(\mathbf{t}_i^T - \frac{c\mathbf{t}_i^T}{c} \right)}_{0} \mathbf{y}_j$$

$$= 0$$

Terbukti **W** ortogonal.

Dari bukti diatas, dapat disimpulkan pembentukan matriks komponen **T** dan matriks bobot **W** yang diperoleh dengan algoritma NIPALS adalah ortogonal.

Berikut ini akan dijelaskan mengenai penentuan banyak komponen pada univariat PLSR.

3.3 Penentuan Banyak Komponen Pada Univariat PLSR

Pada subbab sebelumnya telah dijelaskan tentang cara memperoleh komponen pada univariat PLSR, selanjutnya akan dibahas mengenai banyak komponen yang masuk ke dalam model PLSR.

Berdasarkan persamaan (3.2.64), maka matriks variansi kovariansi $\tilde{\mathbf{X}}$ yang dijelaskan oleh komponen j, $j = 1,\ldots,m$ yaitu :

$$S_j^* = \frac{\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_j^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_j}{n-1} = \frac{\mathbf{p}_j \mathbf{t}_j^T \mathbf{t}_j \mathbf{p}_j^T}{n-1}$$

dan penjelasan sebelumnya pada subbab (2.6) mengenai pengukuran keseluruhan variabilitas yang dinyatakan dengan *trace*, maka untuk mengetahui variansi sampel total atau variabilitas $\tilde{\mathbf{X}}$ yang dijelaskan oleh komponen j, $j = 1,\ldots,m$ dapat dinyatakan sebagai

$$tr(S_j^*) = tr\left(\frac{\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_j^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_j}{n-1}\right) = tr\left(\frac{\mathbf{p}_j \mathbf{t}_j^T \mathbf{t}_j \mathbf{p}_j^T}{n-1}\right)$$

$$tr\left(\mathbf{p}_j \mathbf{t}_j^T \mathbf{t}_j \mathbf{p}_j^T\right)$$

$$= tr\left(\begin{bmatrix} p_{1j} \\ p_{2j} \\ \vdots \\ p_{kj} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{1j} & \cdots & t_{nj} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{1j} \\ \vdots \\ t_{nj} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_{1j} & p_{2j} & \cdots & p_{kj} \end{bmatrix}\right)$$

$$= tr\left(\begin{bmatrix} p_{1j}t_{1j} & \cdots & p_{1j}t_{nj} \\ p_{2j}t_{1j} & \cdots & p_{2j}t_{nj} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ p_{kj}t_{1j} & \cdots & p_{kj}t_{nj} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{1j}p_{1j} & t_{1j}p_{2j} & \cdots & t_{1j}p_{kj} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{nj}p_{1j} & t_{nj}p_{2j} & \cdots & t_{nj}p_{kj} \end{bmatrix}\right)$$

$$= tr\begin{bmatrix} \left(p_{1j}^2 t_{1j}^2 + \ldots + p_{1j}^2 t_{nj}^2\right) & p_{1j}t_{1j}t_{1j}p_{2j} + \ldots + p_{1j}t_{nj}t_{nj}p_{2j} & \cdots & p_{1j}t_{1j}t_{1j}p_{kj} + \ldots + p_{1j}t_{nj}t_{nj}p_{2j} \\ p_{2j}t_{1j}t_{1j}p_{1j} + \ldots + p_{2j}t_{nj}t_{nj}p_{1j} & \left(p_{2j}^2 t_{1j}^2 + \ldots + p_{2j}^2 t_{nj}^2\right) & \cdots & p_{2j}t_{1j}t_{1j}p_{kj} + \ldots + p_{2j}t_{nj}t_{nj}p_{2j} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{kj}t_{1j}t_{1j}p_{1j} + \ldots + p_{kj}t_{nj}t_{nj}p_{1j} & p_{kj}t_{1j}t_{1j}p_{2j} + \ldots + t_{nj}p_{2j}p_{kj}t_{nj} & \cdots & \left(p_{kj}^2 t_{1j}^2 + \ldots + p_{kj}^2 t_{nj}^2\right) \end{bmatrix}$$

$$tr\left(\mathbf{p}_j \mathbf{t}_j^T \mathbf{t}_j \mathbf{p}_j^T\right)$$

$$= \left(p_{1j}^2 t_{1j}^2 + \ldots + p_{1j}^2 t_{nj}^2\right) + \left(p_{2j}^2 t_{1j}^2 + \ldots + p_{2j}^2 t_{nj}^2\right) + \ldots + \left(p_{kj}^2 t_{1j}^2 + \ldots + p_{kj}^2 t_{nj}^2\right)$$

$$= \mathbf{t}_j^T \mathbf{t}_j \mathbf{p}_j^T \mathbf{p}_j$$

Jadi, dapat dikatakan variansi $\tilde{\mathbf{X}}$ yang dijelaskan oleh komponen j dapat dihitung dengan,

$$\frac{\mathbf{t}_j^T \mathbf{t}_j \mathbf{p}_j^T \mathbf{p}_j}{n-1} \qquad (3.3.1)$$

dimana $j = 1,\ldots,m$.

Untuk mengetahui proporsi variansi total $\tilde{\mathbf{X}}$ yang dijelaskan oleh komponen j dapat dihitung dengan membandingkan S_j^* dengan S yaitu :

$$\frac{tr(S_j^*)}{tr(S)} = \frac{\mathbf{t}_j^T \mathbf{t}_j \mathbf{p}_j^T \mathbf{p}_j}{tr\left(\tilde{\mathbf{X}}^T \tilde{\mathbf{X}}\right)} \tag{3.3.2}$$

dan kumulatif proporsi variansi total $\tilde{\mathbf{X}}$ yang dijelaskan oleh komponen j dapat dihitung dengan

$$\frac{\sum_{j=1}^{m} \mathbf{t}_j^T \mathbf{t}_j \mathbf{p}_j^T \mathbf{p}_j}{tr\left(\tilde{\mathbf{X}}^T \tilde{\mathbf{X}}\right)} \tag{3.3.3}$$

Selain menentukan variansi pada $\tilde{\mathbf{X}}$ yang dijelaskan oleh komponen *j*, variansi pada $\tilde{\mathbf{y}}$ yang dijelaskan oleh komponen *j* juga berpengaruh dalam menentukan banyaknya komponen yang digunakan.

Misalkan **y** adalah vektor *random* dari observasi variabel respon yang berukuran *n* x 1dan $\tilde{\mathbf{y}}$ adalah vektor *mean centered* dari observasi variabel respon **y** yang berukuran *n* x 1. Berdasarkan subbab 2.7.3 telah disebutkan bahwa R^2 adalah proporsi variasi **y** yang dijelaskan oleh prediktor **X** dimana

$$R^2 = \frac{SS_R}{SS_T} = 1 - \frac{SS_{Res}}{SS_T}$$

dengan $SS_T = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \overline{y})^2$ dan $SS_{Res} = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2$.

Dengan menggunakan notasi $\tilde{\mathbf{y}}$, maka SS_T dan SS_{Res} dapat ditulis sebagai

$$SS_T = \sum_{i=1}^{n} (\tilde{y}_i)^2 = \tilde{\mathbf{y}}^T \tilde{\mathbf{y}}$$

$$SS_{Res} = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \hat{y}_i\right)^2 = \left(\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}\right)^T \left(\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}\right)$$

$$SS_{Res} = \left[\left(\mathbf{y} - \overline{\mathbf{y}}\right) - \left(\hat{\mathbf{y}} - \overline{\mathbf{y}}\right)\right]^T \left[\left(\mathbf{y} - \overline{\mathbf{y}}\right) - \left(\hat{\mathbf{y}} - \overline{\mathbf{y}}\right)\right]$$

$$SS_{Res} = \left(\tilde{\mathbf{y}} - \hat{\tilde{\mathbf{y}}}\right)^T \left(\tilde{\mathbf{y}} - \hat{\tilde{\mathbf{y}}}\right)$$

sehingga variansi data untuk $\tilde{\mathbf{y}}$ dapat ditulis sebagai

$$1 - \frac{\left(\tilde{\mathbf{y}} - \hat{\tilde{\mathbf{y}}}\right)^T \left(\tilde{\mathbf{y}} - \hat{\tilde{\mathbf{y}}}\right)}{\tilde{\mathbf{y}}^T \tilde{\mathbf{y}}} \tag{3.3.4}$$

Pada saat $\tilde{\mathbf{y}}$ dapat dijelaskan oleh vektor komponen pertama yaitu $\mathbf{t}_1$ dan menghasilkan $\hat{\mathbf{y}}_1 = \mathbf{t}_1\hat{\mathbf{c}}_1$, maka untuk menentukan proposi variansi $\tilde{\mathbf{y}}$ yang dijelaskan oleh vektor komponen pertama dapat dihitung dengan

$$R_1^2 = 1 - \frac{\left(\tilde{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{y}}_1\right)^T \left(\tilde{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{y}}_1\right)}{\tilde{\mathbf{y}}^T \tilde{\mathbf{y}}} \tag{3.3.5}$$

Kemudian pada saat $\mathbf{y}$ dapat dijelaskan oleh komponen kedua yaitu $\mathbf{t}_2$ dan menghasilkan $\hat{\mathbf{y}}_2 = \mathbf{t}_2\hat{\mathbf{c}}_2$, maka untuk menentukan proposi variansi $\mathbf{y}$ yang dijelaskan oleh komponen kedua dapat dihitung dengan

$$R_2^2 = 1 - \frac{\left(\tilde{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{y}}_2\right)^T \left(\tilde{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{y}}_2\right)}{\tilde{\mathbf{y}}^T \tilde{\mathbf{y}}}, \tag{3.3.6}$$

begitu seterusnya hingga komponen ke-*m* yaitu

$$R_m^2 = 1 - \frac{\left(\tilde{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{y}}_m\right)^T \left(\tilde{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{y}}_m\right)}{\tilde{\mathbf{y}}^T \tilde{\mathbf{y}}} \tag{3.3.7}$$

Jadi, untuk menentukan proporsi variansi data $\tilde{\mathbf{y}}$ yang dijelaskan oleh komponen j, $j = 1,\ldots,m$ dapat dihitung dengan

$$R_j^2 = 1 - \frac{\left(\tilde{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{y}}_j\right)^T \left(\tilde{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{y}}_j\right)}{\tilde{\mathbf{y}}^T \tilde{\mathbf{y}}} \tag{3.3.8}$$

dan kumulatif proporsi variansi data total $\tilde{\mathbf{y}}$ yang dijelaskan oleh komponen j dapat dihitung dengan

$$R_j^2 = \sum_{j=1}^{m} \left(1 - \frac{\left(\tilde{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{y}}_j\right)^T \left(\tilde{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{y}}_j\right)}{\tilde{\mathbf{y}}^T \tilde{\mathbf{y}}} \right) \tag{3.3.9}$$

Penentuan banyak komponen yang masuk ke dalam model dapat ditentukan sendiri oleh *user* (Qiang Zeng *et al.*, 2007) atau berdasarkan penjelasan sebelumnya dapat dipilih sedemikian sehingga besarnya variansi $\tilde{\mathbf{X}}$ dan $\tilde{\mathbf{y}}$ yang dijelaskan oleh komponen j besar misalkan 80%-90%.

Setelah mendapatkan vektor komponen yang akan masuk ke dalam model, langkah berikutnya adalah estimasi parameter regresi. Berikut ini akan dijelaskan mengenai taksiran parameter pada univariat PLSR.

3.4 Taksiran Parameter Pada Univariat PLSR

Misalkan telah didapatkan *m* vektor komponen berdasarkan algoritma NIPALS pada pembahasan subbab sebelumnya, maka $\tilde{\mathbf{X}}$ didekomposisikan menjadi

$$\tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{T}\mathbf{P}^T + \mathbf{E}$$

dengan menggunakan metode *least squares* (dapat dilihat pada lampiran 4.4) didapat $\mathbf{P} = \left(\mathbf{T}^T\mathbf{T}\right)^{-1}\tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{T}$ dan dengan menggunakan sifat-sifat pada matriks, maka

$$\mathbf{P} = \left(\mathbf{T}^T\mathbf{T}\right)^{-1}\tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{T}$$

$$\mathbf{P} = \mathbf{I}\tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{T} \qquad \text{(sifat keortogonalan matriks } \mathbf{T}, \mathbf{T}^T\mathbf{T} = \mathbf{I}\text{)}$$

$$\mathbf{P} = \tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{T} \qquad \text{(sifat matriks identitas)} \qquad (3.4.1)$$

Berdasarkan persamaan (3.2.3) dimana $\mathbf{T} = \tilde{\mathbf{X}}\mathbf{W}$, persamaan (3.4.1) menjadi

$$\mathbf{P} = \tilde{\mathbf{X}}^T\tilde{\mathbf{X}}\mathbf{W} \qquad (3.4.2)$$

Kemudian, dilakukan regresi antara $\tilde{\mathbf{y}}$ dan $\mathbf{T}$ dengan bentuk model regresi sebagai

$$\tilde{\mathbf{y}} = \mathbf{T}\mathbf{c} + \mathbf{F}$$

dan taksiran dari $\tilde{\mathbf{y}}$ dapat ditulis sebagai

$$\hat{\tilde{\mathbf{y}}} = \mathbf{T}\hat{\mathbf{c}} \qquad (3.4.3)$$

dengan menggunakan metode *least squares* (dapat dilihat pada lampiran 5) didapat $\hat{\mathbf{c}} = \left(\mathbf{T}^T\mathbf{T}\right)^{-1}\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}}$ dan dengan menggunakan sifat-sifat matriks, maka

$$\hat{\mathbf{c}} = \left(\mathbf{T}^T\mathbf{T}\right)^{-1}\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}}$$

$$\hat{\mathbf{c}} = \mathbf{I}\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}} \qquad \text{(sifat keortogonalan matriks } \mathbf{T},\ \mathbf{T}^T\mathbf{T} = \mathbf{I}\text{)}$$

$$\hat{\mathbf{c}} = \mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}} \qquad \text{(sifat matriks identitas)}$$

$$\hat{\mathbf{c}} = \mathbf{W}^T\tilde{\mathbf{X}}^T\tilde{\mathbf{y}} \qquad \text{(sifat tranpos matriks, } \mathbf{T}^T = \left(\tilde{\mathbf{X}}\mathbf{W}\right)^T \qquad (3.4.4)$$

dimana

$\tilde{\mathbf{X}}$ adalah matriks *mean centered* dari *k* variabel prediktor yang berukuran *n* x *k*,

P adalah matriks *loading* berukuran *k* x *m*,

T adalah matriks komponen berukuran *n* x *m*,

E adalah matriks *error* berukuran *n* x *k*,

$\tilde{\mathbf{y}}$ adalah vektor *random mean centered* dari observasi variabel respon Y yang berukuran *n* x 1,

$\mathbf{c}$ adalah matriks parameter regresi berukuran *m* x 1,

F adalah matriks *error* berukuran *n* x 1, dan

W adalah matriks bobot berukuran *k* x *m*.

Untuk mendapatkan taksiran parameter univariat PLSR yang berpadanan dengan persamaan (3.1.1) yaitu

$$\tilde{\mathbf{y}} = \tilde{\mathbf{X}}\boldsymbol{\beta}_1 + \boldsymbol{\varepsilon}$$

dimana,

$\tilde{\mathbf{y}}$ adalah vektor *random mean centered* dari observasi variabel respon Y yang berukuran *n* x 1,

$\tilde{\mathbf{X}}$ adalah matriks *mean centered* dari *k* variabel prediktor yang berukuran *n* x *k*,

$\boldsymbol{\beta}_1$ adalah vektor parameter regresi yang berukuran *k* x 1,

$\boldsymbol{\varepsilon}$ adalah vektor *error* yang berukuran *n* x 1,

substitusi $\hat{\mathbf{c}} = \left(\mathbf{T}^T\mathbf{T}\right)^{-1}\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}}$ ke dalam persamaan (3.4.3) menjadi

$$\begin{aligned}\hat{\tilde{\mathbf{y}}} &= \mathbf{T}\hat{\mathbf{c}} \\ &= \mathbf{T}\left(\mathbf{T}^T\mathbf{T}\right)^{-1}\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}}\end{aligned} \qquad (3.4.5)$$

Kemudian substitusikan $\mathbf{T} = \tilde{\mathbf{X}}\mathbf{W}$ ke dalam persamaan (3.4.5) menjadi

$$\hat{\tilde{\mathbf{y}}} = \tilde{\mathbf{X}}\mathbf{W}\left(\mathbf{W}^T\tilde{\mathbf{X}}^T\tilde{\mathbf{X}}\mathbf{W}\right)^{-1}\mathbf{W}^T\tilde{\mathbf{X}}^T\tilde{\mathbf{y}} \qquad (3.4.6)$$

sehingga berdasarkan sifat tranpos pada persamaan (3.4.2) dan persamaan (3.4.4), persamaan (3.4.6) dapat ditulis sebagai :

$$\hat{\tilde{\mathbf{y}}} = \tilde{\mathbf{X}}\mathbf{W}\left(\mathbf{W}^T\tilde{\mathbf{X}}^T\tilde{\mathbf{X}}\mathbf{W}\right)^{-1}\mathbf{W}^T\tilde{\mathbf{X}}^T\tilde{\mathbf{y}}$$

$$\hat{\tilde{\mathbf{y}}} = \tilde{\mathbf{X}}\mathbf{W}\left(\mathbf{P}^T\mathbf{W}\right)^{-1}\hat{\mathbf{c}} \quad \text{(sifat tranpos matriks, } \mathbf{P}^T = \left(\tilde{\mathbf{X}}^T\tilde{\mathbf{X}}\mathbf{W}\right)^T\text{)} \qquad (3.4.7)$$

Bentuk model regresi umum antara variabel respon **y** dengan variabel-variabel prediktor **X** adalah $\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}$, dengan model penduga $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}$, maka dari persamaan (3.4.7) diperoleh taksiran dari $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{pls}$ yaitu :

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_1 = \hat{\boldsymbol{\beta}}_{pls} = \mathbf{W}\left(\mathbf{P}^T\mathbf{W}\right)^{-1}\hat{\mathbf{c}}. \qquad (3.4.8)$$

BAB 4
CONTOH PENERAPAN

Dalam bab ini akan dibahas mengenai contoh penerapan pada *univariat partial least squares regression* yang meliputi pembentukan matriks komponen **T** dan matriks *loading* **P**, pemilihan banyaknya komponen yang masuk ke dalam model serta taksiran parameter. Data yang digunakan dalam contoh penerapan ini adalah data yang bersumber dari Abdi.H, 2010. *Partial least Squares Regression and projection on Latent Structure Regression*.

4.1 Data

Data yang digunakan dalam contoh penerapan pada PLSR adalah data yang membahas mengenai *wine* (minuman anggur), bahan dasar pembuatan *wine* dan hal-hal yang mempengaruhi seseorang dalam penilaian terhadap *wine* (*likeability*).

Wine adalah minuman beralkohol yang dibuat dari sari anggur jenis *Vitis vinifera* yang biasanya hanya tumbuh di area 30 hingga 50 derajat lintang utara dan selatan. *Wine* juga merupakan minuman yang populer di banyak negara seperti Perancis, Italia, Amerika Serikat, Jerman, Spanyol, Argentina, Britania Raya, Republik Rakyat Cina, Rusia dan Rumania. *Wine* dibuat dengan fermentasi buah anggur yang nantinya akan menghasilkan alcohol. Berdasarkan harian kompas.com edisi Selasa, 1 Juni 2010, kandungan alkohol tersebut berkisar 14-20 % namun, beberapa jenis *wine* kandungan alkoholnya dapat kurang dari kisaran tersebut.

Selain anggur, bahan lain yang digunakan dalam pembuatan *wine* adalah gula. Pemberian gula bertujuan memberikan sensasi manis yang berbeda dengan gula buah yang ada pada anggur itu sendiri, dengan kadar yang diukur dalam %. Selain gula, senyawa asam yang diukur dengan satuan ph dan bahan-bahan lainnya juga digunakan dalam pembuatan *wine*.

Kemudian, selain dari bahan-bahan dasar pembuat *wine* yang telah disebutkan sebelumnya, informasi mengenai *wine* juga dapat dijelaskan berdasarkan jenis atau *likeability* pada *wine.* *Likeability* pada *wine* dapat didefinisikan sebagai jenis *wine* yang dibedakan berdasarkan jenis hidangan yang disajikan misalnya, *wine* yang dapat dinikmati bersama makanan disebut *table wine* seperti *red wine*, *rose wine* dan *white wine*. Menurut tradisinya, *red wine* disajikan dengan hidangan dari daging merah, seperti daging sapi, daging kambing dan sebagainya. *White wine* disajikan dengan hidangan dari daging putih seperti daging ayam, kepiting, kerang, kakap, udang galah, dan lain-lain, sedangkan *rose wine* disajikan dengan hidangan dari daging merah jambu misalnya daging babi. Disamping daging babi, *rose wine* juga cocok dosajikan dengan segala macam makanan karena sifatnya yang netral . Selain itu, ada juga *wine* yang disajikan bersama dengan hidangan penutup (*dessert wine*) seperti *champagne* dan terdapat pula *likeability* lainnya tergantung dari penikmat *wine* itu sendiri.

Hal-hal yang mempengaruhi seseorang dalam memberikan penilaian terhadap *likeability wine* itu sendiri berhubungan dengan komposisi bahan-bahan dasar pembuat *wine* selain itu, besarnya hargapun dianggap berkontribusi dalam mempengaruhi seseorang dalam memberikan penilaian terhadap *likeability wine*. Dugaan awalnya adalah semakin tinggi kadar dari bahan-bahan dasar pembuat wine dan tingginya harga akan memberikan *rate* yang tinggi pada *likeability wine*, untuk itu dibutuhkan analisa lebih lanjut untuk mengetahui hubungan penilaian *likeability* dari *wine* tersebut dengan bahan-bahan dasar pembuat *wine*. Dalam skripsi ini, *likeability wine* yang digunakan adalah *table wine.*

Berikut ini akan dibahas mengenai hubungan antara bahan-bahan dasar pembuat *wine* serta harga terhadap penilaian atau *rate likeability* pada *table wine*.

4.2 Analisis Data

Berdasarkan data yang ada, akan dilihat pola hubungan antara *likeability* pada *table wine* yang berperan sebagai variabel respon terhadap harga (dolar), kandungan gula (%) dan alkohol (%) serta tingkat keasaman (ph) yang berperan sebagai variabel prediktor dengan PLSR dengan *software matlab* 5.3.1.

Data dapat dilihat pada tabel berikut :

Wine	*Rate likeability table wine*	*Price*	*sugar*	*Alcohol*	*Acidity*
	Y	X_1	X_2	X_3	X_4
1	7	7	7	13	7
2	7	4	3	14	7
3	5	10	5	12	5
4	4	16	7	11	3
5	2 $\overline{y}=5$	13 $\overline{x}_1=10$	3 $\overline{x}_2=5$	10 $\overline{x}_3=12$	3 $\overline{x}_4=5$

Korelasi antara variabel prediktor dan respon dengan matriks korelasi dapat dilihat pada tabel 1 berikut :

Tabel 1
Entri matriks korelasi

Variables	*Price*	*Sugar*	*Alcohol*	*Acidity*	*Rate likeability table wine*
Price	**1.000**	0.316	-0.900	-0.949	-0.820
Sugar	0.316	**1.000**	0.000	0.000	0.236
Alcohol	-0.900	0.000	**1.000**	0.949	0.969
Acidity	-0.949	0.000	0.949	**1.000**	0.943
Rate likeability table wine	-0.820	0.236	0.969	0.943	**1.000**

Dari tabel 1 di atas, dapat disimpulkan bahwa terdapat multikolinieritas antara variabel-variabel prediktor dimana korelasi antara harga dengan alkohol, sebesar -0.9, korelasi antara harga dengan tingkat keasaman sebesar -0.94 dan korelasi antara alkohol dengan tingkat keasaman sebesar 0.94. Berdasarkan penjelasan mengenai efek dari multikolinieritas yang tertera pada lampiran 8.1, bahwa jika tetap menggunakan OLS untuk penaksiran parameter regresi, taksiran yang diperoleh menjadi kurang baik dan tidak stabil serta pengujian parsial parameternya menjadi tidak signifikan sehingga untuk mengatasi kasus ini, univariat PLSR dapat digunakan.

Didefinisikan model regresi PLS dapat ditulis sebagai berikut :

$$\tilde{\mathbf{y}} = \tilde{\mathbf{X}}\boldsymbol{\beta}_1 + \boldsymbol{\varepsilon} \tag{4.2.1}$$

$\tilde{\mathbf{y}}$ adalah vektor *random mean centered* penilaian *likeability* pada *table wine* yang berukuran 5 x 1,

$\tilde{\mathbf{X}}$ adalah matriks *mean centered* dari variabel prediktor harga, kandungan gula,alkohol dan tingkat keasaman yang berupa matriks 5 x 4,

$\boldsymbol{\beta}_1$ adalah vektor parameter regresi berukuran 4 x 1,

$\boldsymbol{\varepsilon}$ adalah vektor *error* berukuran 5 x 1.

Dalam bentuk matriks *mean centered*, data dapat ditulis sebagai

	$\tilde{\mathbf{y}}$	$\tilde{\mathbf{x}}_1$	$\tilde{\mathbf{x}}_2$	$\tilde{\mathbf{x}}_3$	$\tilde{\mathbf{x}}_4$
1	2	-3	2	1	2
2	2	-6	-2	2	2
3	0	0	0	0	0
4	-1	6	2	-1	-2
5	-3	3	-2	-2	-2

Langkah berikutnya adalah pembentukan matriks komponen **T** dan *loading* **P** yang disertai dengan matriks bobot **W**. Secara otomatis atau *software* memilih banyaknya komponen sedemikian sehingga matriks $\mathbf{X}_j$ menjadi matriks nol dengan toleransi 10^{-10} dan variansi kumulatif X dan variansi kumulatif y besar dan sempurna, terdapat 3 komponen yang terbentuk yaitu **T** = $\{\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \mathbf{t}_3\}$, *loading* **P** = $\{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3\}$ dan bobot **W** = $\{\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \mathbf{w}_3\}$. Secara rinci, hasil pembentukan **T**, **P** dan **W** dapat dilihat pada tabel berikut (output lengkap dapat dilihat pada lampiran 8) :

Tabel 2

Entri pada matriks bobot **W**, komponen **T** dan *loading* **P**

Variable	w_1	w_2	w_3
Price	-0.8437	0.2905	0.2299
Sugar	0.1023	0.9087	-0.2807
Alcohol	0.3324	0.244	0.911
Acidity	0.409	0.1738	-0.1958

Observation	t_1	t_2	t_3
1	3.886	2.3072	-0.5225
2	6.3402	-1.4693	0.479
3	0.000	0.000	0.000
4	-6.0079	1.792	0.4601
5	-4.2183	-2.617	-0.4167

Variable	p_1	p_2	p_3
Price	-0.9012	0.2697	0.2299
Sugar	-0.077	0.9342	-0.2807
Alcohol	0.284	0.1614	0.911
Acidity	0.3746	0.1915	-0.1958

dimana,

W adalah matriks bobot berukuran 4 x 3,

T adalah matriks komponen berukuran 5 x 3,

P adalah matriks *loading* berukuran 4 x 3.

Komponen yang terbentuk sudah tidak saling berkorelasi dengan kata lain ortogonal, hal tersebut dapat dilihat pada hasil berikut (ouput lengkap dapat dilihat pada lampiran 8) :

$$\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_2 = 1,5876.10^{-4} = 0$$
$$\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_3 = -0.0054 \approx 0$$
$$\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_3 = 0.0014 \approx 0$$

atau dapat terlihat dari matriks $\mathbf{T}^T\mathbf{T} = \mathbf{I}$ (matriks dapat dilihat lampiran 8)

Selain komponen yang ortogonal, bobot **W** yang didapatkan ortonormal

$$\mathbf{w}_1^T\mathbf{w}_2 = 5,496.10^{-5} \approx 0 \qquad \mathbf{w}_1^T\mathbf{w}_1 = 1.0001 \approx 1$$
$$\mathbf{w}_1^T\mathbf{w}_3 = 5,196.10^{-5} \approx 0 \qquad \mathbf{w}_2^T\mathbf{w}_2 = 0.999 \approx 1$$
$$\mathbf{w}_2^T\mathbf{w}_3 = -3,218.10^{-5} \approx 0 \qquad \mathbf{w}_1^T\mathbf{w}_3 = 0.999 \approx 1$$

atau dapat terlihat dari matriks $\mathbf{W}^T\mathbf{W} = \mathbf{I}$ (matriks dapat dilihat pada lampiran 8)

Kemudian, langkah berikutnya adalah meregresikan $\tilde{\mathbf{y}}$ dengan komponen **T** didapatkan taksiran parameter regresi **c** yaitu $\hat{\mathbf{c}}$ yang dapat dilihat pada tabel 3 berikut :

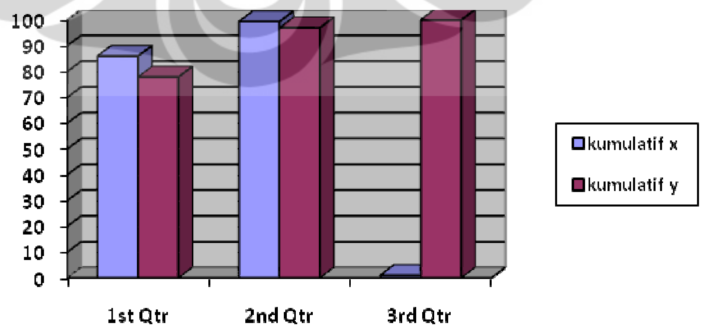
Tabel 3
Nilai dari taksiran parameter regresi **c**

Variable	$\hat{c}_1$	$\hat{c}_2$	$\hat{c}_3$
Rate likeability table wine	0.3582	0.4428	0.7919

Dari tabel-tabel diatas, diketahui bahwa algoritma ini berhenti sedemikian sehingga terdapat 3 komponen yang terbentuk. Langkah selanjutnya adalah menentukan berapa banyak komponen yang masuk ke dalam model. Untuk menentukan berapa komponen yang masuk ke dalam model dapat dilihat berdasarkan nilai kumulatif terhadap variabel respon dan variabel prediktor, sehingga cukup dua komponen yang masuk ke dalam model regresi, secara rinci dapat dilihat pada tabel 4 dan gambar 1 berikut :

Tabel 4
Nilai variansi untuk tiga komponen

Index	Comp1	Comp2	Comp3
R_j^2 (variansi y yang dijelaskan komponen j)	0.7785	0.1906	0.039
(variansi total X yang dijelaskan komponen j)	0.8596	0.1336	0.0067



Gambar 1
Nilai kumulatif variansi untuk tiga komponen

Variansi total dari variabel prediktor yang dijelaskan oleh dua komponen pertama sebesar 99.32% dan variansi dari variabel respon yang dijelaskan oleh dua komponen pertama sebesar 96,91%. Variansi yang dijelaskan oleh dua komponen pertama cukup besar dengan kata lain informasi pada variabel prediktor dan respon yang dijelaskan oleh dua komponen pertama cukup besar, sehingga dengan hanya dua komponen pertama, model prediksi dapat terbentuk dengan baik.

Setelah mendapatkan banyaknya komponen yang masuk ke dalam model, maka langkah selanjutnya adalah menaksir parameter regresi denan menggunakan rumus yang ada pada persamaan (3.4.5) yaitu

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_1 = \hat{\boldsymbol{\beta}}_{pls} = \mathbf{W}(\mathbf{P}^T\mathbf{W})^{-1}\hat{\mathbf{c}}$$

Karena banyaknya vektor komponen yang digunakan adalah dua, maka matriks **W** dan **P** yang digunakan adalah matriks yang terdiri dari dua vektor pertama yaitu ($\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2$) dan ($\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$), serta $\hat{\mathbf{c}}$ yang digunakan adalah $\hat{c}_1$ dan $\hat{c}_2$. Secara rinci, nilai parameter regresi pada PLSR dengan dua vektor komponen dan menggunakan rumus yang ada pada persamaan (3.4.5) pada subbab 3.4 dapat dilihat pada tabel 5 berikut :

Tabel 5

Nilai taksiran parameter regresi pada univariat PLSR

Variable	*Rate likeability table wine*
Price	*-0.2475*
Sugar	*0.448*
Alcohol	*0.2563*
Acidity	*0.2593*

Jadi, persamaan regresi univariat PLSR dapat ditulis sebagai berikut :

$$\hat{\tilde{\mathbf{y}}} = -0.2475\tilde{\mathbf{x}}_1 + 0.448\tilde{\mathbf{x}}_2 + 0.2563\tilde{\mathbf{x}}_3 + 0.2593\tilde{\mathbf{x}}_4 \qquad (4.2.2)$$

Jika dikembalikan ke bentuk original dimana variabel respon dan prediktornya bukan bentuk *mean centered*, maka persamaan regresi dapat ditulis sebagai :

$$\hat{y} = \bar{y} - 0.2475(x_1 - \bar{x}_1) + 0.448(x_2 - \bar{x}_2) + 0.2563(x_3 - \bar{x}_3) + 0.2593(x_4 - \bar{x}_4)$$

$$\hat{y} = 5 - 0.2475(x_1 - 10) + 0.448(x_2 - 5) + 0.2563(x_3 - 12) + 0.2593(x_4 - 5)$$

sehingga dapat ditulis sebagai :

$$\hat{y} = 0.8629 - 0.2475\,x_1 + 0.448\,x_2 + 0.2563\,x_3 + 0.2593\,x_4 \qquad (4.2.3)$$

BAB 5
KESIMPULAN DAN SARAN

5.1. Kesimpulan

1. Ide dasar dari PLSR mendekomposisikan matriks prediktor menjadi matriks komponen yang ortogonal dan matriks loading, dimana komponen merupakan kombinasi linier berbobot dari variabel-variabel prediktor
2. Untuk mendapatkan komponen pada PLSR, digunakan algoritma NIPALS
3. Komponen pada PLSR digunakan sebagai prediktor baru untuk memprediksi variabel respon
4. Pemilihan banyaknya komponen yang optimal dapat ditentukan dengan menghitung variansi sampel total variabel prediktor dan variabel respon yang dijelaskan oleh komponen *j*
5. Dengan menggunakan banyaknya komponen yang optimal, taksiran parameter univariat PLSR yang diperoleh berpadanan dengan taksiran parameter regresi linier univariat

5.2. Saran

1. Dengan algoritma yang sama yaitu NIPALS, dapat dilanjutkan pembahasan mengenai multivariat PLSR
2. Dapat dilanjutkan pembahasan dengan algortima SIMPLS
3. Pemilihan banyaknya komponen yang optimal dapat dilanjutkan dengan menggunakan *cross validation*

DAFTAR PUSTAKA

Abdi,Herve. (2003). *Partial Least Squares(PLS) Regression*. Encyclopedia of Social Science Research Methods.Thousand Oaks(CA):Sage

Abdi,Herve. (2010). *Partial Least Squares Regression and Projection on latent Structure Regression (PLS Regression)*. John Wiley & Sons,Inc.

A. Hőskuldsson. (1988). *PLS Regression Methods*. Journal of Chemometrics, 2:211–228, 1988.

Anton, H. (2000). *Dasar-Dasar Aljabar Linier*, Batam:Interaksara.

Bastiena, Philippe,*et all*. (2004). *PLS Generalised Linear Regression*. Computational Statistics & Data Analysis 48 (2005) 17 – 46.

Collins, Bob. (2010). *Partial Least Squares Regression*. LPAC group meeting

Eld0en, Lars. (2003). *Partial Least-Squares vs. Lanczos Bidiagonalization*: *Analysis of a Projection Method for Multiple Regression*. Computational Statistics & Data Analysis 46 (2004) 11 – 31.

Garthwaite, H. (1994). *An Interpretation of Partial Least Squares*. Journal of the American Statistical Association, Maret 1994,Vol 89,No.425.

Hogg, R. V., & Craig, A.T. (1995). *Introduction to Mathematical Statistics*. New Jersey-Prentice-Hall.

I.S. Helland. (1999). *Some Theoretical Aspects of Partial Least Squares Regression*. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 58:97–107, 1999.

Jorgensen, Bent., & Goegebeur,Yuri. (2007). *Module 7:Partial Least Squares Regression 1*".Department of Statistics, ST02:Multivariate Data Analysis and Chemometrics.

Montgomery, D. C.,*et all*. (2001). *Introduction to Linier Regression Analysis*. New York: John Wiley & Sons, Inc.

Phatak, Aloke., & De jong. (1996). *The Geometry of Partial Least Squares*. Journal of Chemometrics,vol 11,311-338,1997. John Wiley & Sons,Ltd.

Rencher, A. C. (1998). Multivariate Statistical Inference and Application. New York: John Wiley & Sons, Inc.

Rencher, A. C. (2002). Methods of Multivariate Analysis. New

York: John Wiley & Sons, Inc.

Rosipal, Roman., & Krämer, Nicole. (2006). *Overview and Recent Advance in Partial Least Squares*. C. Saunders et al. (Eds.): SLSFS 2005, LNCS 3940, pp. 34–51, 2006.@c Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2006.

Xue-Qiang Zeng, *et all*. (2007). *On the Number of Partial Least Squares Components in Dimension Reduction for Tumor Classification*. PAKDD 2007 Workshops, LNAI 4819, pp. 206–217, 2007.@c: Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2007.

Yeniay, Őzgűr., & Gőktas,Atilla. (2002). *A Comparison of Partial Least Squares Regression with Other Prediction Methods*. Hacettepe Journal of Mathematics and Statistics,vol 31(2002),99-111.

LAMPIRAN 1

Bukti $\hat{\boldsymbol{\beta}} = \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y}$ dan $\hat{\mathbf{B}} = \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{Y}$

Mengenai Metode *Least Squares* pada Regresi Linier Berganda Univariat dan Multivariat

Berikut ini akan dibuktikan persamaan (2.7.9) yaitu

$S(\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{y}^T\mathbf{y} - 2\boldsymbol{\beta}^T\mathbf{X}^T\mathbf{y} + \boldsymbol{\beta}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$ menjadi $\frac{\partial S}{\partial \boldsymbol{\beta}}\Big|_{\hat{\boldsymbol{\beta}}} = -2\mathbf{X}^T\mathbf{y} + 2\mathbf{X}^T\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} = 0$ sedemikian sehingga $\hat{\boldsymbol{\beta}} = \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y}$ dan persamaan (2.8.4) yaitu

$S(\mathbf{B}) = tr(\mathbf{Y}^T\mathbf{Y} - 2\mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{Y} + \mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{B})$ menjadi $\frac{\partial S}{\partial \mathbf{B}}\Big|_{\hat{\mathbf{B}}} = -2\hat{\mathbf{B}}^T\mathbf{X}^T\mathbf{y} + 2\mathbf{X}^T\mathbf{X}\hat{\mathbf{B}} = 0$

sedemikian sehingga $\hat{\mathbf{B}} = \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{Y}$.

Untuk membuktikan persamaan (2.3.9), akan dibuktikan

$$\frac{\partial\left(-2\boldsymbol{\beta}^T\mathbf{X}^T\mathbf{y}\right)}{\partial \boldsymbol{\beta}} = -2\mathbf{X}^T\mathbf{y} \text{ dan } \frac{\partial\left(\boldsymbol{\beta}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}\right)}{\partial \boldsymbol{\beta}}\Big|_{\hat{\boldsymbol{\beta}}} = 2\mathbf{X}^T\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}$$

L.1.1.1 Pembuktian $\frac{\partial\left(-2\boldsymbol{\beta}^T\mathbf{X}^T\mathbf{y}\right)}{\partial \boldsymbol{\beta}} = -2\mathbf{X}^T\mathbf{y}$

$$\boldsymbol{\beta}^T\mathbf{X}^T\mathbf{y} = [\beta_0 \quad \beta_1 \quad \cdots \quad \beta_k]\begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{n1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{1k} & x_{2k} & \cdots & x_{nk} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{\beta}^T\mathbf{X}^T\mathbf{y} = \left[\ (\beta_0 + \beta_1 x_{11} + ... + \beta_k x_{1k}) \quad (\beta_0 + \beta_1 x_{21} + ... + \beta_k x_{2k}) \quad \cdots \quad (\beta_0 + \beta_1 x_{n1} + ... + \beta_k x_{nk})\right]\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{\beta}^T\mathbf{X}^T\mathbf{y} = \left[(\beta_0 + \beta_1 x_{11} + ... + \beta_k x_{1k})\,y_1 + (\beta_0 + \beta_1 x_{21} + ... + \beta_k x_{2k})\,y_2 + ... + (\beta_0 + \beta_1 x_{n1} + ... + \beta_k x_{nk})\,y_n\right]$$

$$\frac{\partial\left(\boldsymbol{\beta}^T\mathbf{X}^T\mathbf{y}\right)}{\partial\boldsymbol{\beta}}=\begin{bmatrix}\frac{\partial\left(\boldsymbol{\beta}^T\mathbf{X}^T\mathbf{y}\right)}{\partial\beta_0}|_{\hat{\beta}_0}\\ \frac{\partial\left(\boldsymbol{\beta}^T\mathbf{X}^T\mathbf{y}\right)}{\partial\beta_1}|_{\hat{\beta}_1}\\ \vdots\\ \frac{\partial\left(\boldsymbol{\beta}^T\mathbf{X}^T\mathbf{y}\right)}{\partial\beta_k}|_{\hat{\beta}_k}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}y_1+y_2+...+y_n\\ x_{21}y_1+x_{21}y_2+...+x_{n1}y_n\\ \vdots\\ x_{1k}y_1+x_{2k}y_2+...+x_{nk}y_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&1&\cdots&1\\ x_{11}&x_{21}&\cdots&x_{n1}\\ \vdots&\vdots&\cdots&\vdots\\ x_{1k}&x_{2k}&\cdots&x_{nk}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}y_1\\ y_2\\ \vdots\\ y_n\end{bmatrix}=\mathbf{X}^T\mathbf{y}$$

$$\therefore\frac{\partial\left(-2\boldsymbol{\beta}^T\mathbf{X}^T\mathbf{y}\right)}{\partial\boldsymbol{\beta}}=-2\mathbf{X}^T\mathbf{y}$$

Terbukti

L.1.1.2 Pembuktian $\frac{\partial\left(\boldsymbol{\beta}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}\right)}{\partial\boldsymbol{\beta}}|_{\hat{\boldsymbol{\beta}}}=2\mathbf{X}^T\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}$

$$\boldsymbol{\beta}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}=\begin{bmatrix}\beta_0&\beta_1&\cdots&\beta_k\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&1&\cdots&1\\ x_{11}&x_{21}&\cdots&x_{n1}\\ \vdots&\vdots&\cdots&\vdots\\ x_{1k}&x_{2k}&\cdots&x_{nk}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&x_{11}&\cdots&x_{1k}\\ 1&x_{21}&\cdots&x_{2k}\\ \vdots&\vdots&\cdots&\vdots\\ 1&x_{n1}&\cdots&x_{nk}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\beta_0\\ \beta_1\\ \vdots\\ \beta_k\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}\beta_0+\beta_1x_{11}+...+\beta_kx_{1k}&\beta_0+\beta_1x_{21}+...+\beta_kx_{2k}&...&\beta_1+\beta_1x_{n1}+...+\beta_kx_{nk}\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}\beta_0+\beta_1x_{11}+...+\beta_kx_{1k}\\ \beta_0+\beta_1x_{21}+...+\beta_kx_{2k}\\ \vdots\\ \beta_0+\beta_1x_{n1}+...+\beta_kx_{nk}\end{bmatrix}$$

$$=\left(\beta_0+\beta_1x_{11}+...+\beta_kx_{1k}\right)^2+\left(\beta_0+\beta_1x_{21}+...+\beta_kx_{2k}\right)^2+...+\left(\beta_0+\beta_1x_{n1}+...+\beta_kx_{nk}\right)^2$$

$$\frac{\partial\left(\boldsymbol{\beta}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}\right)}{\partial\boldsymbol{\beta}}\Big|_{\hat{\boldsymbol{\beta}}}=\begin{bmatrix}\frac{\partial\left(\boldsymbol{\beta}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}\right)}{\partial\beta_0}\Big|_{\hat{\beta}_0}\\ \frac{\partial\left(\boldsymbol{\beta}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}\right)}{\partial\beta_1}\Big|_{\hat{\beta}_1}\\ \vdots\\ \frac{\partial\left(\boldsymbol{\beta}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}\right)}{\partial\beta_k}\Big|_{\hat{\beta}_k}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2n\beta_0+\ldots+\beta_k(x_{1k}+\ldots+x_{nk})\\ 2\beta_0(x_{11}+\ldots+x_{n1})+\ldots+2\beta_k(x_{11}x_{1k}+\ldots+x_{n1}x_{nk})\\ \vdots\\ 2\beta_0(x_{1k}+\ldots+x_{nk})+\ldots+2\beta_k(x_{1k}^2+\ldots+x_{nk}^2)\end{bmatrix}$$

$$=2\begin{bmatrix}1 & 1 & \cdots & 1\\ x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{n1}\\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots\\ x_{1k} & x_{2k} & \cdots & x_{nk}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & x_{11} & \cdots & x_{1k}\\ 1 & x_{21} & \cdots & x_{2k}\\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots\\ 1 & x_{n1} & \cdots & x_{nk}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\beta_0\\ \beta_1\\ \vdots\\ \beta_k\end{bmatrix}$$

$$=2\mathbf{X}^T\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}$$

$$\frac{\partial S}{\partial\boldsymbol{\beta}}=-2\mathbf{X}^T\mathbf{y}+2\mathbf{X}^T\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}=0$$

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}=\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y}$$

Jadi, jika $S(\boldsymbol{\beta})=\mathbf{y}^T\mathbf{y}\text{ - }2\boldsymbol{\beta}^T\mathbf{X}^T\mathbf{y}+\boldsymbol{\beta}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$ diturunkan terhadap $\boldsymbol{\beta}$ maka menjadi $\frac{\partial S}{\partial\boldsymbol{\beta}}\Big|_{\hat{\boldsymbol{\beta}}}=-2\mathbf{X}^T\mathbf{y}+2\mathbf{X}^T\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}=0$ sedemkian sehingga $\hat{\boldsymbol{\beta}}=\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y}$

Terbukti

Kemudian, akan dibuktikan persamaan (2.4.4) yaitu

$S(\mathbf{B})=tr\left(\mathbf{Y}^T\mathbf{Y}\text{ - }2\mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{Y}+\mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{B}\right)$ menjadi $\frac{\partial S}{\partial\mathbf{B}}\Big|_{\hat{\mathbf{B}}}=-2\hat{\mathbf{B}}^T\mathbf{X}^T\mathbf{y}+2\mathbf{X}^T\mathbf{X}\hat{\mathbf{B}}=0$

sedemikian sehingga $\hat{\mathbf{B}}=\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{Y}$

Untuk membuktikan persamaan (2.3.9), akan dibuktikan

$$\frac{\partial tr\left(-2\mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{Y}\right)}{\partial\mathbf{B}}\Big|_{\hat{\mathbf{B}}}=-2\mathbf{X}^T\mathbf{Y}\text{ dan }\frac{\partial tr\left(\mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{B}\right)}{\partial\mathbf{B}}\Big|_{\hat{\mathbf{B}}}=2\mathbf{X}^T\mathbf{X}\hat{\mathbf{B}}$$

L.1.2.1 pembuktian $\dfrac{\partial tr\left(-2\mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{Y}\right)}{\partial \mathbf{B}}\Big|_{\hat{\mathbf{B}}} = -2\mathbf{X}^T\mathbf{Y}$

Bukti:

$$\mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{Y}=\begin{bmatrix}\beta_{01} & \beta_{11} & \cdots & \beta_{k1}\\ \beta_{02} & \beta_{12} & \cdots & \beta_{k1}\\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots\\ \beta_{0p} & \beta_{1p} & \cdots & \beta_{kp}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 1 & \cdots & 1\\ x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{n1}\\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots\\ x_{1k} & x_{2k} & \cdots & x_{nk}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}y_{11} & y_{12} & \cdots & y_{1p}\\ y_{21} & y_{22} & \cdots & y_{2p}\\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots\\ y_{n1} & y_{n2} & \cdots & y_{np}\end{bmatrix}$$

$$\mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{Y}=\begin{bmatrix}(\beta_{01}+\beta_{11}x_{11}+...+\beta_{k1}x_{1k})y_{11}+...+(\beta_{01}+\beta_{11}x_{n1}+...+\beta_{k1}x_{nk})y_{n1} & \cdots & (\beta_{01}+\beta_{11}x_{11}+...+\beta_{k1}x_{1k})y_{1p}+..+(\beta_{01}+\beta_{11}x_{n1}+...+\beta_{k1}x_{nk})y_{np}\\ \vdots & \cdots & \vdots\\ (\beta_{0p}+\beta_{1p}x_{11}+...+\beta_{kp}x_{1k})y_{11}+...+(\beta_{0p}+\beta_{1p}x_{n1}+...+\beta_{kp}x_{nk})y_{n1} & \cdots & (\beta_{0p}+\beta_{1p}x_{11}+...+\beta_{kp}x_{1k})y_{1p}+..+(\beta_{0p}+\beta_{1p}x_{n1}+...+\beta_{kp}x_{nk})y_{np}\end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned}\partial tr(\mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{Y})=&\left[(\beta_{01}+\beta_{11}x_{11}+...+\beta_{k1}x_{1k})y_{11}+...+(\beta_{01}+\beta_{11}x_{n1}+..+\beta_{k1}x_{nk})y_{n1}\right]\\ &+...+\left[(\beta_{0p}+\beta_{1p}x_{11}+...+\beta_{kp}x_{1k})y_{1p}+..+(\beta_{0p}+\beta_{1p}x_{n1}+...+\beta_{kp}x_{nk})y_{np}\right]\end{aligned}$$

$$\frac{\partial tr\left(\mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{Y}\right)}{\partial \mathbf{B}}\Big|_{\hat{\mathbf{B}}}=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial tr\left(\mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{Y}\right)}{\partial \beta_{01}}\Big|_{\hat{\beta}_{01}} & \cdots & \dfrac{\partial tr\left(\mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{Y}\right)}{\partial \beta_{0p}}\Big|_{\hat{\beta}_{0p}}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ \dfrac{\partial tr\left(\mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{Y}\right)}{\partial \beta_{k1}}\Big|_{\hat{\beta}_{k1}} & \cdots & \dfrac{\partial tr\left(\mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{Y}\right)}{\partial \beta_{kp}}\Big|_{\hat{\beta}_{kp}}\end{bmatrix}$$

$$\frac{\partial tr\left(\mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{Y}\right)}{\partial \mathbf{B}}\Big|_{\hat{\mathbf{B}}}=\begin{bmatrix}y_{11}+...+y_{n1} & \cdots & y_{1p}+...+y_{np}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ x_{1k}y_{11}+...+x_{nk}y_{n1} & \cdots & x_{1k}y_{1p}+...+x_{nk}y_{np}\end{bmatrix}$$

$$\therefore \frac{\partial tr(-2\mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{Y})}{\partial \mathbf{B}}\Big|_{\hat{\mathbf{B}}}=-2\begin{bmatrix}1 & 1 & \cdots & 1\\ x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{n1}\\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots\\ x_{1k} & x_{2k} & \cdots & x_{nk}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}y_{11} & y_{12} & \cdots & y_{1p}\\ y_{21} & y_{22} & \cdots & y_{2p}\\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots\\ y_{n1} & y_{n2} & \cdots & y_{np}\end{bmatrix}=-2\mathbf{X}^T\mathbf{Y}$$

Terbukti

L.1.2.2 Pembuktian $\dfrac{\partial tr\left(\mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{B}\right)}{\partial \mathbf{B}}\Big|_{\hat{\mathbf{B}}}=2\mathbf{X}^T\mathbf{X}\hat{\mathbf{B}}$

Bukti :

$$\mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{B}=\begin{bmatrix}\beta_{01} & \beta_{11} & \cdots & \beta_{k1}\\ \beta_{02} & \beta_{12} & \cdots & \beta_{k1}\\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots\\ \beta_{0p} & \beta_{1p} & \cdots & \beta_{kp}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 1 & \cdots & 1\\ x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{n1}\\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots\\ x_{1k} & x_{2k} & \cdots & x_{nk}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & x_{11} & \cdots & x_{1k}\\ 1 & x_{21} & \cdots & x_{2k}\\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots\\ 1 & x_{n1} & \cdots & x_{nk}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\beta_{01} & \beta_{02} & \cdots & \beta_{0p}\\ \beta_{11} & \beta_{12} & \cdots & \beta_{1p}\\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots\\ \beta_{k1} & \beta_{k2} & \cdots & \beta_{kp}\end{bmatrix}$$

$$\mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{B}=\begin{bmatrix}\left(\beta_{01}+\beta_{11}x_{11}+...+\beta_{k1}x_{1k}\right) & \cdots & \left(\beta_{01}+\beta_{11}x_{n1}+...+\beta_{k1}x_{nk}\right)\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ \left(\beta_{0p}+\beta_{1p}x_{11}+...+\beta_{kp}x_{1k}\right) & \cdots & \left(\beta_{0p}+\beta_{1p}x_{n1}+...+\beta_{kp}x_{nk}\right)\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\left(\beta_{01}+\beta_{11}x_{11}+...+\beta_{k1}x_{1k}\right) & \cdots & \left(\beta_{0p}+\beta_{1p}x_{11}+...+\beta_{kp}x_{1k}\right)\\ \vdots & \cdots & \vdots\\ \left(\beta_{01}+\beta_{11}x_{n1}+...+\beta_{k1}x_{nk}\right) & \cdots & \left(\beta_{0p}+\beta_{1p}x_{n1}+...+\beta_{kp}x_{nk}\right)\end{bmatrix}$$

$$\partial tr\left(\mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{B}\right)=\left[\left(\beta_{01}+\beta_{11}x_{11}+...+\beta_{k1}x_{1k}\right)^2+...+\left(\beta_{01}+\beta_{11}x_{n1}+...+\beta_{k1}x_{nk}\right)^2\right]+...+$$
$$\left[\left(\beta_{0p}+\beta_{1p}x_{11}+...+\beta_{kp}x_{1k}\right)^2+..+\left(\beta_{0p}+\beta_{1p}x_{n1}+...+\beta_{kp}x_{nk}\right)^2\right]$$

$$\frac{\partial tr\left(\mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{B}\right)}{\partial\mathbf{B}}\Big|_{\hat{\mathbf{B}}}=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial tr\left(\mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{B}\right)}{\partial\beta_{01}}\Big|_{\hat\beta_{01}} & \cdots & \dfrac{\partial tr\left(\mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{B}\right)}{\partial\beta_{0p}}\Big|_{\hat\beta_{1p}}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ \dfrac{\partial tr\left(\mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{B}\right)}{\partial\beta_{k1}}\Big|_{\hat\beta_{k1}} & \cdots & \dfrac{\partial tr\left(\mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{B}\right)}{\partial\beta_{kp}}\Big|_{\hat\beta_{kp}}\end{bmatrix}$$

$$\frac{\partial tr\left(\mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{B}\right)}{\partial\mathbf{B}}\Big|_{\hat{\mathbf{B}}}=\begin{bmatrix}2n\hat\beta_{01}+...+\hat\beta_{k1}\left(x_{1k}+...+x_{nk}\right) & \cdots & 2n\hat\beta_{0p}+...+\hat\beta_{kp}\left(x_{1k}+...+x_{nk}\right)\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ 2\hat\beta_{01}\left(x_{1k}+...+x_{nk}\right)+...+\hat\beta_{k1}\left(x_{1k}^2+...+x_{nk}^2\right) & \cdots & 2\hat\beta_{0p}\left(x_{1k}+...+x_{nk}\right)+...+\hat\beta_{kp}\left(x_{1k}^2+...+x_{nk}^2\right)\end{bmatrix}$$

$$\therefore\frac{\partial tr\left(\mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{B}\right)}{\partial\mathbf{B}}\Big|_{\hat{\mathbf{B}}}=2\begin{bmatrix}1 & 1 & \cdots & 1\\ x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{n1}\\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots\\ x_{1k} & x_{2k} & \cdots & x_{nk}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & x_{11} & \cdots & x_{1k}\\ 1 & x_{21} & \cdots & x_{2k}\\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots\\ 1 & x_{n1} & \cdots & x_{nk}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\beta_{01} & \beta_{02} & \cdots & \beta_{0p}\\ \beta_{11} & \beta_{12} & \cdots & \beta_{1p}\\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots\\ \beta_{k1} & \beta_{k2} & \cdots & \beta_{kp}\end{bmatrix}=2\mathbf{X}^T\mathbf{X}\hat{\mathbf{B}}$$

Jadi, jika $S(\mathbf{B})=tr\left(\mathbf{Y}^T\mathbf{Y}-2\mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{Y}+\mathbf{B}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{B}\right)$ diturunkan terhadap $\mathbf{B}$ maka menjadi $\frac{\partial S}{\partial\mathbf{B}}\Big|_{\hat{\mathbf{B}}}=-2\mathbf{X}^T\mathbf{y}+2\mathbf{X}^T\mathbf{X}\hat{\mathbf{B}}=0$ sedemikian sehingga $\hat{\mathbf{B}}=\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{Y}$

Terbukti

LAMPIRAN 2

Pembuktian $S_1^* = \dfrac{\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1}{n-1} = \dfrac{\mathbf{p}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T}{n-1}$ (3.2.17), $S_2^* = \dfrac{\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2}{n-1} = \dfrac{\mathbf{p}_2\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T}{n-1}$ (3.2.34) dan $S_m^* = \dfrac{\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_m^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_m}{n-1} = \dfrac{\mathbf{p}_m\mathbf{t}_m^T\mathbf{t}_m\mathbf{p}_m^T}{n-1}$ (3.2.53) Mengenai Matriks Variansi Kovariansi pada Pembentukan Matriks komponen **T**

L.2.1 Pembuktian persamaan (3.2.17)

Pada kondisi dimana $\mathbf{X}_1$ dapat dijelaskan hanya dengan menggunakan vektor komponen pertama $\mathbf{t}_1$, dalam notasi matriks $\mathbf{X}_1$ dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{X}_1 = \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 = \mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T$$

dengan uraian sebagai berikut

$$\begin{bmatrix} x_{11}-\bar{x}_1 & \cdots & x_{1k}-\bar{x}_k \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n1}-\bar{x}_1 & \cdots & x_{nk}-\bar{x}_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_{11}p_{11} & \cdots & t_{11}p_{k1} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{n1}p_{11} & \cdots & t_{n1}p_{k1} \end{bmatrix}, \\ = \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{x}}_{11} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{1k} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{\tilde{x}}_{n1} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{nk} \end{bmatrix}$$

maka berdasarkan subbab (2.4) mengenai matriks variansi kovariansi sampel, variansi sampel untuk setiap prediktor pada matriks $\mathbf{X}_1$ adalah

$$s_{ll} = s_l^{\,2} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_{il}-\bar{x}_l)^2}{n-1} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(\tilde{\tilde{x}}_{il})^2}{n-1}$$

dan kovariansi sampel antara prediktor ke-l dan ke-q pada $\mathbf{X}_1$ adalah

$$s_{lq} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_{il}-\bar{x}_l)(x_{iq}-\bar{x}_q)}{n-1} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(\tilde{\tilde{x}}_{il})(\tilde{\tilde{x}}_{iq})}{n-1}, \; l, q = 1,\ldots,k,\; l \neq q.$$

Berikut ini akan dibuktikan $S_1* = s_{lq} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1k} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{k1} & s_{k2} & \cdots & s_{kk} \end{bmatrix}$ dimana

$$s_{ll} = s_l^{\,2} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_{il} - \overline{x}_l)^2}{n-1} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(\tilde{\tilde{x}}_{il})^2}{n-1}$$

dan $$s_{lq} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_{il} - \overline{x}_l)(x_{iq} - \overline{x}_q)}{n-1} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(\tilde{\tilde{x}}_{il})(\tilde{\tilde{x}}_{iq})}{n-1}$$

sama dengan $S_1^* = \dfrac{\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1}{n-1} = \dfrac{\mathbf{p}_1 \mathbf{t}_1^T \mathbf{t}_1 \mathbf{p}_1^T}{n-1}$.

Sebelumnya, akan dibuktikan terlebih dahulu $S_1^* = s_{lq} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1k} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{k1} & s_{k2} & \cdots & s_{kk} \end{bmatrix}$

sama dengan $S_1^* = \dfrac{1}{n-1}\left(\sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i^T - n\overline{\mathbf{x}}\,\overline{\mathbf{x}}^T \right)$.

L.2.1.1 Pembuktian $S_1^* = s_{lq} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1k} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{k1} & s_{k2} & \cdots & s_{kk} \end{bmatrix}$ sama dengan

$$S_1^* = \frac{1}{n-1}\left(\sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i^T - n\overline{\mathbf{x}}\,\overline{\mathbf{x}}^T \right)$$

misalkan $\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1k} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nk} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1^T \\ \mathbf{x}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{x}_n^T \end{bmatrix}$

$\mathbf{x}_i = \begin{bmatrix} x_{i1} \\ \vdots \\ x_{ik} \end{bmatrix}$, dengan mean vektor $\overline{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \overline{x}_1 \\ \vdots \\ \overline{x}_k \end{bmatrix}$ dimana $\overline{x}_l = \dfrac{\sum_{i=n}^{n} x_{il}}{n}$

Kemudian, apabila $s_{lq} = \dfrac{\sum_{i=1}^{n}(x_{il}-\bar{x}_l)(x_{iq}-\bar{x}_q)}{n-1} = \dfrac{\sum_{i=1}^{n} x_{il}x_{iq} - n\bar{x}_l\bar{x}_q)}{n-1}$, bagian pembilangnya dijabarkan, dimana l, q = 1,…,k , maka dapat ditulis sebagai

$$\begin{matrix} x_{11}x_{11}+...+x_{n1}x_{n1}-n\bar{x}_1\bar{x}_1 \cdots x_{11}x_{1k}+...+x_{n1}x_{nk}-n\bar{x}_1\bar{x}_k \\ \vdots \qquad\qquad\qquad \vdots \\ x_{1k}x_{11}+...+x_{nk}x_{n1}-n\bar{x}_k\bar{x}_1 \cdots x_{1k}x_{1k}+...+x_{nk}x_{nk}-n\bar{x}_k\bar{x}_k \end{matrix} \tag{L.2.1.1}$$

Jika ditulis dalam bentuk matriks, persamaan (L.2.1.1) dapat ditulis sebagai

$$\begin{bmatrix} x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{n1} \\ x_{12} & x_{22} & \cdots & x_{n2} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{1k} & x_{2k} & \cdots & x_{nk} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1k} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nk} \end{bmatrix} - n \begin{bmatrix} \bar{x}_1 \\ \bar{x}_2 \\ \vdots \\ \bar{x}_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{x}_1 & \bar{x}_2 & \cdots & \bar{x}_k \end{bmatrix}$$

Karena $\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1k} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nk} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1^T \\ \mathbf{x}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{x}_n^T \end{bmatrix}$ dan $\bar{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \bar{x}_1 \\ \vdots \\ \bar{x}_k \end{bmatrix}$,

maka $\mathbf{X}^T = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{n1} \\ x_{12} & x_{22} & \cdots & x_{n2} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{1k} & x_{2k} & \cdots & x_{nk} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_n \end{bmatrix}$ dan $\bar{\mathbf{x}}^T = \begin{bmatrix} \bar{x}_1 & \cdots & \bar{x}_k \end{bmatrix}$

sehingga persamaan (L.2.1.1) dapat ditulis sebagai

$$= \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1^T \\ \mathbf{x}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{x}_n^T \end{bmatrix} - n \begin{bmatrix} \bar{x}_1 \\ \bar{x}_2 \\ \vdots \\ \bar{x}_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{x}_1 & \bar{x}_2 & \cdots & \bar{x}_k \end{bmatrix}$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_i\mathbf{x}_i^T - n\bar{\mathbf{x}}\bar{\mathbf{x}}^T$$

Terbukti $s_{lq} = \dfrac{\sum_{i=1}^{n}(x_{il}-\bar{x}_l)(x_{iq}-\bar{x}_q)}{n-1} = \dfrac{\sum_{i=1}^{n} x_{il}x_{iq} - n\bar{x}_l\bar{x}_q)}{n-1} = \dfrac{1}{n-1}\left(\sum_{i=1}^{n}\mathbf{x}_i\mathbf{x}_i^T - n\bar{\mathbf{x}}\bar{\mathbf{x}}^T\right)$

Jadi, $S_1^* = s_{lq} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1k} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{k1} & s_{k2} & \cdots & s_{kk} \end{bmatrix}$ sama dengan $S_1^* = \dfrac{1}{n-1}\left(\sum_{i=1}^{n}\mathbf{x}_i\mathbf{x}_i^T - n\bar{\mathbf{x}}\bar{\mathbf{x}}^T\right)$

Terbukti

L.2.1.2 Pembuktian $S_1^* = \frac{1}{n-1}\left(\sum_{i=1}^{n}\mathbf{x}_i\mathbf{x}_i^T - n\bar{\mathbf{x}}\,\bar{\mathbf{x}}^T\right) = \frac{\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1^T\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1}{n-1}$

Kemudian, setelah membuktikan $S_1^* = s_{lq} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1k} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{k1} & s_{k2} & \cdots & s_{kk} \end{bmatrix}$ sama dengan $S_1^* = \frac{1}{n-1}\left(\sum_{i=1}^{n}\mathbf{x}_i\mathbf{x}_i^T - n\bar{\mathbf{x}}\,\bar{\mathbf{x}}^T\right)$ akan dibuktikan $S_1^* = \frac{1}{n-1}\left(\sum_{i=1}^{n}\mathbf{x}_i\mathbf{x}_i^T - n\bar{\mathbf{x}}\,\bar{\mathbf{x}}^T\right) = \frac{\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1^T\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1}{n-1}$

Bukti:

salah satu bagian sisi kanan dari S_1^* yaitu $\sum_{i=1}^{n}\mathbf{x}_i\mathbf{x}_i^T$ yang dapat ditulis sebagai $\sum_{i=1}^{n}\mathbf{x}_i\mathbf{x}_i^T = \mathbf{x}_1\mathbf{x}_1^T + ... + \mathbf{x}_n\mathbf{x}_n^T = \mathbf{X}^T\mathbf{X}$, maka S_1^* dapat dituliskan sebagai :

$$S_1^* = \frac{1}{n-1}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X} - \frac{1}{n}\mathbf{X}^T\mathbf{j}\mathbf{j}^T\mathbf{X}\right)$$

$$S_1^* = \frac{1}{n-1}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X} - \mathbf{X}^T\left(\frac{1}{n}\mathbf{J}\right)\mathbf{X}\right)$$

$$S_1^* = \frac{1}{n-1}\mathbf{X}^T\left(\mathbf{I} - \frac{1}{n}\mathbf{J}\right)\mathbf{X}$$

Bagian dari S_1^* yaitu $\left(\mathbf{I} - \frac{1}{n}\mathbf{J}\right)$ dapat diuraikan menjadi

$$\left(\mathbf{I} - \frac{1}{n}\mathbf{J}\right)^T\left(\mathbf{I} - \frac{1}{n}\mathbf{J}\right) = \left(\mathbf{I} - \frac{1}{n}\mathbf{J}\right).$$

(bukti diberikan pada lampiran 3)

Dengan demikian S_1^* dapat dinotasikan sebagai

$$S_1^* = \frac{1}{n-1}\mathbf{X}^T\left(\mathbf{I} - \frac{1}{n}\mathbf{J}\right)^T\left(\mathbf{I} - \frac{1}{n}\mathbf{J}\right)\mathbf{X}$$

Berdasarkan sifat perkalian matriks, bagian dari S_1^* yaitu $\left(\mathbf{I}-\frac{1}{n}\mathbf{J}\right)\mathbf{X}$ dapat diuraikan menjadi

$$\begin{aligned}\left(\mathbf{I}-\frac{1}{n}\mathbf{J}\right)\mathbf{X} &= \mathbf{X}-\frac{1}{n}\mathbf{JX}\\ &= \mathbf{X}-\frac{1}{n}\mathbf{jj}^T\mathbf{X}\\ &= \mathbf{X}-\mathbf{j}\bar{\mathbf{x}}^T\\ &= \tilde{\mathbf{X}}\\ &= \mathbf{X}_1\end{aligned}$$

Sehingga berdasarkan sifat transpos dan perkalian matriks, juga diperoleh

$$\mathbf{X}^T\left(\mathbf{I}-\frac{1}{n}\mathbf{J}\right)^T = \left(\left(\mathbf{I}-\frac{1}{n}\mathbf{J}\right)\mathbf{X}\right)^T = \tilde{\mathbf{X}}^T = \mathbf{X}_1^T$$

Jadi, bentuk S_1^* adalah

$$S_1^* = \frac{1}{n-1}\left(\sum_{i=1}^{n}\mathbf{x}_i\mathbf{x}_i^T - n\bar{\mathbf{x}}\,\bar{\mathbf{x}}^T\right) = \frac{1}{n-1}\tilde{\mathbf{X}}^T\tilde{\mathbf{X}} = \frac{1}{n-1}\mathbf{X}_1^T\mathbf{X}_1.$$

Pada kondisi dimana $\mathbf{X}_1$ dapat dijelaskan hanya dengan menggunakan vektor komponen pertama $\mathbf{t}_1$, maka $\mathbf{X}_1$ dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{X}_1 = \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 = \mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T$$

sehingga dapat disimpulkan

$$S_1^* = \frac{\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1^T\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1}{n-1} = \frac{\mathbf{p}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T}{n-1}$$

Terbukti

L.2.2 Pembuktian persamaan (3.2.34)

Pada kondisi dimana $\mathbf{X}_2$ dapat dijelaskan hanya dengan menggunakan vektor komponen kedua $\mathbf{t}_2$, maka $\mathbf{X}_2$ dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{X}_2 = \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2 = \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T$$

Kemudian, berdasarkan iterasi sebelumnya akan diperoleh suatu persamaan $\mathbf{X}_2 = \mathbf{X}_1 - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1$. Penjabaran notasi matriks tersebut dapat diuraikan sebagai berikut:

$$\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2 = \mathbf{X}_2$$

$$\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2 = \mathbf{X}_1 - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1$$

$$\begin{bmatrix} t_{12}p_{12} & \cdots & t_{12}p_{k2} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{n2}p_{12} & \cdots & t_{n2}p_{k2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{11} - \bar{x}_1 & \cdots & x_{1k} - \bar{x}_k \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n1} - \bar{x}_1 & \cdots & x_{nk} - \bar{x}_1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} t_{11}p_{11} & \cdots & t_{11}p_{k1} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{n1}p_{11} & \cdots & t_{n1}p_{k1} \end{bmatrix}$$

dengan berdasarkan penjabaran $\begin{bmatrix} t_{11}p_{11} & \cdots & t_{11}p_{k1} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{n1}p_{11} & \cdots & t_{n1}p_{k1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{x}}_{11} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{1k} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{\tilde{x}}_{n1} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{nk} \end{bmatrix}$,

maka penjabaran matriks $\mathbf{X}_2$ dapat ditulis sebagai

$$\begin{bmatrix} t_{12}p_{12} & \cdots & t_{12}p_{k2} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{n2}p_{12} & \cdots & t_{n2}p_{k2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{x}_{11} & \cdots & \tilde{x}_{1k} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{x}_{n1} & \cdots & \tilde{x}_{nk} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{x}}_{11} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{1k} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{\tilde{x}}_{n1} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{nk} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} t_{12}p_{12} & \cdots & t_{12}p_{k2} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{n2}p_{12} & \cdots & t_{n2}p_{k2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{x}}_1{}^T \\ \vdots \\ \tilde{\mathbf{x}}_n{}^T \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_1{}^T \\ \vdots \\ \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_n{}^T \end{bmatrix}$$

Berdasarkan subbab (2.6) mengenai matriks variansi kovariansi sampel, variansi sampel untuk setiap prediktor pada matriks $\mathbf{X}_2$ adalah

$$s_{ll} = s_l{}^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_{il} - \bar{x}_l - t_{i1}p_{l1})^2}{n-1} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (\tilde{x}_{il} - \tilde{\tilde{x}}_{il})^2}{n-1}$$

dan kovariansi sampel antara prediktor ke-l dan ke-q pada $\mathbf{X}_2$ adalah

$$s_{lq} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_{il} - \bar{x}_l - t_{i1}p_{l1})(x_{iq} - \bar{x}_q - t_{i1}p_{q1})}{n-1} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (\tilde{x}_{il} - \tilde{\tilde{x}}_{il})(\tilde{x}_{iq} - \tilde{\tilde{x}}_{iq})}{n-1}$$

$l, q = 1,\ldots,k,\ l \neq q$.

Berikut ini akan dibuktikan $S_2^* = s_{lq} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1k} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{k1} & s_{k2} & \cdots & s_{kk} \end{bmatrix}$ dimana

Berikut ini akan dibuktikan $S_2^* = s_{lq} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1k} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{k1} & s_{k2} & \cdots & s_{kk} \end{bmatrix}$ dimana

$$s_{ll} = s_l{}^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_{il} - \overline{x}_l - t_{i1} p_{l1})^2}{n-1} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (\tilde{x}_{il} - \tilde{\tilde{x}}_{il})^2}{n-1} \text{ dan}$$

$$s_{lq} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_{il} - \overline{x}_l - t_{i1} p_{l1})(x_{iq} - \overline{x}_q - t_{i1} p_{q1})}{n-1} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (\tilde{x}_{il} - \tilde{\tilde{x}}_{il})(\tilde{x}_{iq} - \tilde{\tilde{x}}_{iq})}{n-1} \quad \text{sama dengan}$$

$$S_2^* = \frac{\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2}{n-1}.$$

Sebelumnya, terlebih dahulu akan dibuktikan $S_2^* = s_{lq} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1k} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{k1} & s_{k2} & \cdots & s_{kk} \end{bmatrix}$ sama dengan $S_2^* = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} \left(\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i \right) \left(\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i \right)^T = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} \left(\tilde{\mathbf{x}}_i \tilde{\mathbf{x}}_i^T - \tilde{\mathbf{x}}_i \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i^T - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i \tilde{\mathbf{x}}_i^T + \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i^T \right)$

L.2.2.1 Pembuktian $S_2^* = s_{lq} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1k} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{k1} & s_{k2} & \cdots & s_{kk} \end{bmatrix}$ sama dengan

$$S_2^* = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} \left(\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i \right) \left(\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i \right)^T = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} \left(\tilde{\mathbf{x}}_i \tilde{\mathbf{x}}_i^T - \tilde{\mathbf{x}}_i \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i^T - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i \tilde{\mathbf{x}}_i^T + \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i^T \right)$$

Misalkan $s_{lq} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_{il} - \overline{x}_l - t_{i1} p_{l1})(x_{iq} - \overline{x}_q - t_{i1} p_{q1})}{n-1} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (\tilde{x}_{il} - \tilde{\tilde{x}}_{il})(\tilde{x}_{iq} - \tilde{\tilde{x}}_{iq})}{n-1}$

bagian pembilangnya dijabarkan, dimana $l = 1,\ldots,k$, $q = 1,\ldots,k$, maka dapat ditulis sebagai

$$\begin{matrix}
(\tilde{x}_{11}\tilde{x}_{11}+\ldots+\tilde{x}_{n1}\tilde{x}_{n1})-(\tilde{x}_{11}\tilde{\tilde{x}}_{11}+\ldots+\tilde{x}_{n1}\tilde{\tilde{x}}_{n1})-(\tilde{\tilde{x}}_{11}\tilde{x}_{11}+\ldots+\tilde{\tilde{x}}_{n1}\tilde{x}_{n1})+(\tilde{\tilde{x}}_{11}\tilde{\tilde{x}}_{11}+\ldots+\tilde{\tilde{x}}_{n1}\tilde{\tilde{x}}_{n1}) & \cdots & (\tilde{x}_{11}\tilde{x}_{1k}+\ldots+\tilde{x}_{n1}\tilde{x}_{nk})-(\tilde{x}_{11}\tilde{\tilde{x}}_{1k}+\ldots+\tilde{x}_{n1}\tilde{\tilde{x}}_{nk})-(\tilde{\tilde{x}}_{11}\tilde{x}_{1k}+\ldots+\tilde{\tilde{x}}_{n1}\tilde{x}_{nk})+(\tilde{\tilde{x}}_{11}\tilde{\tilde{x}}_{1k}+\ldots+\tilde{\tilde{x}}_{n1}\tilde{\tilde{x}}_{nk}) \\
\vdots & & \vdots \\
(\tilde{x}_{1k}\tilde{x}_{11}+\ldots+\tilde{x}_{nk}\tilde{x}_{n1})-(\tilde{x}_{1k}\tilde{\tilde{x}}_{11}+\ldots+\tilde{x}_{nk}\tilde{\tilde{x}}_{n1})-(\tilde{\tilde{x}}_{1k}\tilde{x}_{11}+\ldots+\tilde{\tilde{x}}_{nk}\tilde{x}_{n1})+(\tilde{\tilde{x}}_{1k}\tilde{\tilde{x}}_{11}+\ldots+\tilde{\tilde{x}}_{nk}\tilde{\tilde{x}}_{n1}) & \cdots & (\tilde{x}_{1k}\tilde{x}_{1k}+\ldots+\tilde{x}_{nk}\tilde{x}_{nk})-(\tilde{x}_{1k}\tilde{\tilde{x}}_{1k}+\ldots+\tilde{x}_{nk}\tilde{\tilde{x}}_{nk})-(\tilde{\tilde{x}}_{1k}\tilde{x}_{1k}+\ldots+\tilde{\tilde{x}}_{nk}\tilde{x}_{nk})+(\tilde{\tilde{x}}_{1k}\tilde{\tilde{x}}_{1k}+\ldots+\tilde{\tilde{x}}_{nk}\tilde{\tilde{x}}_{nk})
\end{matrix}$$

Jika ditulis dalam bentuk matriks, uraian tersebut dapat ditulis sebagai

$$= \begin{bmatrix} \tilde{x}_{11} & \cdots & \tilde{x}_{n1} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{x}_{1k} & \cdots & \tilde{x}_{nk} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{x}_{11} & \cdots & \tilde{x}_{1k} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{x}_{n1} & \cdots & \tilde{x}_{nk} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \tilde{x}_{11} & \cdots & \tilde{x}_{n1} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{x}_{1k} & \cdots & \tilde{x}_{nk} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{x}}_{11} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{1k} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{\tilde{x}}_{n1} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{nk} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{x}}_{11} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{n1} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{\tilde{x}}_{1k} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{nk} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{x}_{11} & \cdots & \tilde{x}_{n1} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{x}_{n1} & \cdots & \tilde{x}_{nk} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{x}}_{11} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{n1} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{\tilde{x}}_{1k} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{nk} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{x}}_{11} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{1k} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{\tilde{x}}_{n1} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{nk} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{x}}_1 & \cdots & \tilde{\mathbf{x}}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{x}}_1{}' \\ \vdots \\ \tilde{\mathbf{x}}_n{}' \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{x}}_1 & \cdots & \tilde{\mathbf{x}}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_1{}^T \\ \vdots \\ \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_n{}^T \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_1 & \cdots & \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{x}}_1{}^T \\ \vdots \\ \tilde{\mathbf{x}}_n{}^T \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_1 & \cdots & \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_1{}^T \\ \vdots \\ \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_n{}^T \end{bmatrix}$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \left(\tilde{\mathbf{x}}_i \tilde{\mathbf{x}}_i{}^T - \tilde{\mathbf{x}}_i \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i{}^T - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i \tilde{\mathbf{x}}_i{}^T + \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i{}^T \right)$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \left(\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i \right) \left(\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i \right)^T$$

Terbukti

$$s_{lq} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_{il} - \overline{x}_l - t_{i1} p_{l1})(x_{iq} - \overline{x}_q - t_{i1} p_{q1})}{n-1} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (\tilde{x}_{il} - \tilde{\tilde{x}}_{il})(\tilde{x}_{iq} - \tilde{\tilde{x}}_{iq})}{n-1}$$

$$= \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} \left(\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i \right) \left(\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i \right)^T$$

Jadi,

$$S_2^* = s_{lq} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1k} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{k1} & s_{k2} & \cdots & s_{kk} \end{bmatrix}$$

dimana $s_{ll} = s_l{}^2 = \dfrac{\sum_{i=1}^{n} (x_{il} - \overline{x}_l - t_{i1} p_{l1})^2}{n-1} = \dfrac{\sum_{i=1}^{n} (\tilde{x}_{il} - \tilde{\tilde{x}}_{il})^2}{n-1}$ dan

$$s_{lq} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_{il} - \overline{x}_l - t_{i1} p_{l1})(x_{iq} - \overline{x}_q - t_{i1} p_{q1})}{n-1} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (\tilde{x}_{il} - \tilde{\tilde{x}}_{il})(\tilde{x}_{iq} - \tilde{\tilde{x}}_{iq})}{n-1}$$

sama dengan $S_2^* = \dfrac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} \left(\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i \right) \left(\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i \right)^T = \dfrac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} \left(\tilde{\mathbf{x}}_i \tilde{\mathbf{x}}_i^T - \tilde{\mathbf{x}}_i \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i^T - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i \tilde{\mathbf{x}}_i^T + \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i^T \right)$

Terbukti

L.2.2.2 Pembuktian

$$S_2^* = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} \left(\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i \right) \left(\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i \right)^T = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} \left(\tilde{\mathbf{x}}_i \tilde{\mathbf{x}}_i^T - \tilde{\mathbf{x}}_i \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i^T - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i \tilde{\mathbf{x}}_i^T + \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i^T \right) = \frac{\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2}{n-1}$$

Kemudian, setelah membuktikan $S_2^* = s_{lq} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1k} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{k1} & s_{k2} & \cdots & s_{kk} \end{bmatrix}$ sama dengan

$$S_2^* = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}\left(\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i\right)\left(\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i\right)^T = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}\left(\tilde{\mathbf{x}}_i\tilde{\mathbf{x}}_i^T - \tilde{\mathbf{x}}_i\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i^T - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i\tilde{\mathbf{x}}_i^T + \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i^T\right),$$

akan dibuktikan

$$S_2^* = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}\left(\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i\right)\left(\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i\right)^T = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}\left(\tilde{\mathbf{x}}_i\tilde{\mathbf{x}}_i^T - \tilde{\mathbf{x}}_i\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i^T - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i\tilde{\mathbf{x}}_i^T + \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i^T\right) = \frac{\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2^T\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2}{n-1}$$

Bukti:

Didefinisikan vektor *mean* untuk $\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1$ yaitu

$\bar{\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}}_1 = \begin{bmatrix} \bar{\tilde{\tilde{x}}}_1 \\ \vdots \\ \bar{\tilde{\tilde{x}}}_k \end{bmatrix}$ dimana $\bar{\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}}_1 = \frac{1}{n}\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1^T\mathbf{j} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\tilde{x}_{il}$. Dengan menggunakan persamaan

$$S_2^* = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}\left(\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i\right)\left(\tilde{\mathbf{x}}_i - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i\right)^T = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}\left(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}} - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i\right)\left(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}} - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i\right)^T \qquad \text{(L.2.2.1)}$$

maka persamaan (L.2.2.1) dapat diuraikan menjadi

$$S_2^* = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}\left(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}} - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i\right)\left(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}} - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i\right)^T$$

$$S_2^* = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}\left(\mathbf{x}_i\mathbf{x}_i^T - \mathbf{x}_i\bar{\mathbf{x}}^T - \mathbf{x}_i\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i^T - \bar{\mathbf{x}}\mathbf{x}_i^T + \bar{\mathbf{x}}\,\bar{\mathbf{x}}^T + \bar{\mathbf{x}}\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i^T - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i\mathbf{x}_i^T + \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i\bar{\mathbf{x}} + \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i^T\right)$$

$$S_2^* = \frac{1}{n-1}\left(\sum_{i=1}^{n}\mathbf{x}_i\mathbf{x}_i^T - n\bar{\mathbf{x}}\,\bar{\mathbf{x}}^T - \sum_{i=1}^{n}\mathbf{x}_i\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i^T + n\bar{\mathbf{x}}\bar{\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}}_1^T - \sum_{i=1}^{n}\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i\mathbf{x}_i^T + n\bar{\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}}_1\bar{\mathbf{x}} + \sum_{i=1}^{n}\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i^T\right)$$

$$S_2^* = \frac{1}{n-1}\left(\underbrace{\sum_{i=1}^{n}\mathbf{x}_i\mathbf{x}_i^T - n\bar{\mathbf{x}}\,\bar{\mathbf{x}}^T}_{a} - \underbrace{\left(\sum_{i=1}^{n}\mathbf{x}_i\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i^T - n\bar{\mathbf{x}}\bar{\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}}_1^T\right)}_{b} - \underbrace{\left(\sum_{i=1}^{n}\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i\mathbf{x}_i^T - n\bar{\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}}_1\bar{\mathbf{x}}\right)}_{c} + \underbrace{\sum_{i=1}^{n}\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i^T}_{d}\right)$$

a) Berdasarkan bukti L.2.1.2 sebelumnnya, telah dibuktikan $\sum_{i=1}^{n}\mathbf{x}_i\mathbf{x}_i^T - n\bar{\mathbf{x}}\,\bar{\mathbf{x}}^T$ sama dengan $\mathbf{X}_1^T\mathbf{X}_1$.

b) $\sum_{i=1}^{n}\mathbf{x}_i\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i^T$ dapat ditulis sebagai sebagai $\mathbf{X}^T\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1$ dengan penjelasan sebagai berikut

$$\sum_{i=1}^{n}\mathbf{x}_i\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i^T = \mathbf{x}_1\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_1^T + \ldots + \mathbf{x}_n\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_n^T$$

$$= \begin{bmatrix}\mathbf{x}_1 & \cdots & \mathbf{x}_n\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_1^T \\ \vdots \\ \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_n^T\end{bmatrix}$$

$$= \mathbf{X}^T\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1$$

dan karena $\bar{\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}}_1 = \begin{bmatrix}\bar{\tilde{\tilde{x}}}_1 \\ \vdots \\ \bar{\tilde{\tilde{x}}}_k\end{bmatrix}$ dimana $\bar{\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}}_1 = \frac{1}{n}\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1^T j = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\tilde{x}_{il}$ serta $\bar{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix}\bar{x}_1 \\ \vdots \\ \bar{x}_k\end{bmatrix}$ dimana

$\bar{\mathbf{x}} = \frac{1}{n}\mathbf{X}^T\mathbf{j} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_{il}$, maka bagian b untuk S_2^* menjadi

$$\left(\sum_{i=1}^{n}\mathbf{x}_i\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i^T - n\bar{\mathbf{x}}\bar{\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}}_1^T\right) = \left(\mathbf{X}^T\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 - n\frac{1}{n}\mathbf{X}^T\mathbf{j}\mathbf{j}^T\frac{1}{n}\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1\right)$$

Karena $\mathbf{j}\mathbf{j}^T = \mathbf{J}$, persamaan ini menjadi

$$\left(\sum_{i=1}^{n}\mathbf{x}_i\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i^T - n\bar{\mathbf{x}}\bar{\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}}_1^T\right) = \left(\mathbf{X}^T\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 - \mathbf{X}^T\left(\frac{1}{n}\mathbf{J}\right)\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1\right)$$

c) berdasarkan sifat transpos matriks dan hasil b), $\sum_{i=1}^{n}\mathbf{x}_i\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i^T$ dapat ditulis sebagai $\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1^T\mathbf{X}$ sehingga

$$\left(\sum_{i=1}^{n}\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i\mathbf{x}_i^T - n\bar{\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}}_1\bar{\mathbf{x}}\right) = \left(\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1^T\mathbf{X} - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1^T\left(\frac{1}{n}\mathbf{j}\right)\mathbf{X}\right)$$

d) Bentuk $\sum_{i=1}^{n}\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i^T$ dapat dituliskan sebagai $\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1^T\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1$ dengan penjelasan sebagai berikut :

$$\sum_{i=1}^{n} \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_i^T = \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_1 \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_1^T + \ldots + \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_n \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_n^T$$

$$= \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_1 & \cdots & \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_1^T \\ \vdots \\ \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_n^T \end{bmatrix}$$

$$= \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1$$

$\left(\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1^T \mathbf{X} - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1^T \left(\frac{1}{n} \mathbf{j} \right) \mathbf{X} \right)$ berukuran k x k dan berdasarkan sifat transpos pada matriks, bentuk $\left(\mathbf{X}^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 - \mathbf{X}^T (\frac{1}{n} \mathbf{j}) \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 \right)^T = \left(\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1^T \mathbf{X} - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1^T \left(\frac{1}{n} \mathbf{j} \right) \mathbf{X} \right)$ juga berukuran k x k sehingga S_2^* dapat dinyatakan sebagai

$$S_2^* = \frac{1}{n-1} \left\{ \mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_1 - 2 \left(\mathbf{X}^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 - \mathbf{X}^T \left(\frac{1}{n} \mathbf{j} \right) \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 \right) + \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 \right\}$$

$$S_2^* = \frac{1}{n-1} \left\{ \mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_1 - 2 \left(\underbrace{\mathbf{X}^T \left(1 - \frac{1}{n} \mathbf{J} \right)}_{\text{e}} \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 \right) + \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 \right\}$$

e) Telah dibuktikan pada lampiran L.2.1.2, $\mathbf{X}^T \left(1 - \frac{1}{n} \mathbf{J} \right) = \mathbf{X}_1^T$ sehingga $\left(\mathbf{X}^T (1 - \frac{1}{n} \mathbf{J}) \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 \right) = \mathbf{X}_1^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1$, maka S_2^* dapat ditulis sebagai

$$S_2^* = \frac{1}{n-1} \left\{ \mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_1 - 2 \mathbf{X}_1^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 + \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 \right\}$$

$$S_2^* = \frac{1}{n-1} \left(\mathbf{X}_1 - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 \right)^T \left(\mathbf{X}_1 - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 \right)$$

$$S_2^* = \frac{1}{n-1} \mathbf{X}_2^T \mathbf{X}_2$$

Karena pada kondisi dimana $\mathbf{X}_2$ dapat dijelaskan hanya dengan menggunakan vektor komponen kedua $\mathbf{t}_2$, $\mathbf{X}_2$ dapat ditulis sebagai $\mathbf{X}_2 = \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2 = \mathbf{t}_2 \mathbf{p}_2^T$, maka S_2^* dapat ditulis sebagai $S_2^* = \frac{\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2}{n-1} = \frac{\mathbf{p}_2 \mathbf{t}_2^T \mathbf{t}_2 \mathbf{p}_2^T}{n-1}$

Terbukti

L.2.3 Pembuktian persamaan (3.2.63)

Pada kondisi dimana $\mathbf{X}_m$ dapat dijelaskan hanya dengan menggunakan vektor komponen ke-*m* $\mathbf{t}_m$, dalam notasi matriks, $\mathbf{X}_m$ dapat ditulis sebagai

$$\mathbf{X}_m = \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_m = \mathbf{t}_m \mathbf{p}_m{}^T$$

Kemudian, berdasarkan iterasi sebelumnya akan diperoleh suatu persamaan $\mathbf{X}_m = \mathbf{X}_{m-1} - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1}$. Dengan menggunakan persamaan-persamaan yang telah diperoleh pada iterasi-iterasi sebelumnya, penjabaran notasi matriks tersebut dapat diuraikan sebagai berikut :

$$\mathbf{X}_m = \mathbf{X}_1 - ... - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1}$$

$$\begin{bmatrix} t_{1m}p_{1m} & \cdots & t_{1m}p_{km} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{nm}p_{12} & \cdots & t_{nm}p_{km} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{11}-\overline{x}_1 & \cdots & x_{1k}-\overline{x}_k \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n1}-\overline{x}_1 & \cdots & x_{nk}-\overline{x}_k \end{bmatrix} - ... - \begin{bmatrix} t_{1(m-1)}p_{1(m-1)} & \cdots & t_{1(m-1)}p_{k(m-1)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{n(m-1)}p_{1(m-1)} & \cdots & t_{n(m-1)}p_{k(m-1)} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} t_{1m}p_{1m} & \cdots & t_{1m}p_{km} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{nm}p_{12} & \cdots & t_{nm}p_{km} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{x}_{11} & \cdots & \tilde{x}_{1k} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{x}_{n1} & \cdots & \tilde{x}_{nk} \end{bmatrix} - ... - \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{x}}_{11(m-1)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{1k(m-1)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{\tilde{x}}_{n1(m-1)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{nk(m-1)} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} t_{1m}p_{1m} & \cdots & t_{1m}p_{km} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{nm}p_{12} & \cdots & t_{nm}p_{km} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{x}}_1^T \\ \vdots \\ \tilde{\mathbf{x}}_n^T \end{bmatrix} - ... - \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{1(m-1)}^T \\ \vdots \\ \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{n(m-1)}^T \end{bmatrix}$$

Berdasarkan subbab (2.6) mengenai matriks variansi kovariansi sampel, variansi untuk tiap variabel prediktor pada $\mathbf{X}_m$ adalah

$$s_{ll} = s_l{}^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_{il} - \overline{x}_l - ... - t_{i(m-1)}p_{l(m-1)})^2}{n-1}$$

$$= \frac{\sum_{i=1}^{n}(\tilde{x}_{il} - ... - \tilde{\tilde{x}}_{il(m-1)})^2}{n-1}$$

dan kovariansi antara variabel prediktor ke-*l* dan ke-*q* pada $\mathbf{X}_m$ adalah

$$s_{lq}=\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_{il}-\overline{x}_l-\ldots-t_{i(m-1)}p_{l(m-1)})(x_{iq}-\overline{x}_q-\ldots-t_{i(m-1)}p_{q(m-1)})}{n-1}$$
$$=\frac{\sum_{i=1}^{n}(\tilde{x}_{il}-\ldots-\tilde{\tilde{x}}_{il(m-1)})(\tilde{x}_{iq}-\ldots-\tilde{\tilde{x}}_{iq(m-1)})}{n-1}$$

l, $q = 1,\ldots,k$.

Berikut ini akan dibuktikan $S_m^*=s_{lq}=\begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1k}\\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2k}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ s_{k1} & s_{k2} & \cdots & s_{kk}\end{bmatrix}$

Sama dengan $S_m^*=\dfrac{\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_m^T\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_m}{n-1}$. Sebelumnya, terlebih dahulu akan dibuktikan

$S_m^*=s_{lq}=\begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1k}\\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2k}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ s_{k1} & s_{k2} & \cdots & s_{kk}\end{bmatrix}$ sama dengan

$$S_m^*=\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}\left(\mathbf{x}_i-\overline{\mathbf{x}}-\ldots-\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}\right)\left(\mathbf{x}_i-\overline{\mathbf{x}}-\ldots-\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}\right)^T$$

L.2.3.1 Pembuktian $S_m^*=s_{lq}=\begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1k}\\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2k}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ s_{k1} & s_{k2} & \cdots & s_{kk}\end{bmatrix}$ sama dengan

$$S_m^*=\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}\left(\mathbf{x}_i-\overline{\mathbf{x}}-\ldots-\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}\right)\left(\mathbf{x}_i-\overline{\mathbf{x}}-\ldots-\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}\right)^T$$

Dengan menjabarkan pembilang pada

$$s_{lq}=\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_{il}-\overline{x}_l-\ldots-t_{i(m-1)}p_{l(m-1)})(x_{iq}-\overline{x}_q-\ldots-t_{i(m-1)}p_{q(m-1)})}{n-1}$$
$$=\frac{\sum_{i=1}^{n}(\tilde{x}_{il}-\ldots-\tilde{\tilde{x}}_{il(m-1)})(\tilde{x}_{iq}-\ldots-\tilde{\tilde{x}}_{iq(m-1)})}{n-1}$$

dimana l, $q = 1,\ldots,k$, diperoleh uraian dalam matriks seperti berikut :

$$= \begin{bmatrix} \tilde{x}_{11} & \cdots & \tilde{x}_{n1} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{x}_{1k} & \cdots & \tilde{x}_{nk} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{x}_{11} & \cdots & \tilde{x}_{1k} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{x}_{n1} & \cdots & \tilde{x}_{nk} \end{bmatrix} - \ldots - \begin{bmatrix} \tilde{x}_{11} & \cdots & \tilde{x}_{n1} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{x}_{1k} & \cdots & \tilde{x}_{nk} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{x}}_{11(m-1)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{1k(m-1)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{\tilde{x}}_{n1(m-1)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{nk(m-1)} \end{bmatrix} - \ldots - \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{x}}_{11(m-1)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{n1(m-1)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{\tilde{x}}_{1k(m-1)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{nk(m-1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{x}_{11} & \cdots & \tilde{x}_{1k} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{x}_{n1} & \cdots & \tilde{x}_{nk} \end{bmatrix} - \ldots - \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{x}}_{11(m-1)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{n1(m-1)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{\tilde{x}}_{1k(m-1)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{nk(m-1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{x}}_{11(m-1)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{1k(m-1)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{\tilde{x}}_{n1(m-1)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{nk(m-1)} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{x}}_1 & \cdots & \tilde{\mathbf{x}}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{x}}_1^T \\ \vdots \\ \tilde{\mathbf{x}}_n^T \end{bmatrix} - \ldots - \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{x}}_1 & \cdots & \tilde{\mathbf{x}}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_1^T \\ \vdots \\ \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_n^T \end{bmatrix} - \ldots - \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_1 & \cdots & \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{x}}_1^T \\ \vdots \\ \tilde{\mathbf{x}}_n^T \end{bmatrix} - \ldots + \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_1 & \cdots & \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_1^T \\ \vdots \\ \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_n^T \end{bmatrix}$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \left(\tilde{\mathbf{x}}_i \tilde{\mathbf{x}}_i^T - \ldots - \tilde{\mathbf{x}}_i \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}^T - \ldots - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)} \tilde{\mathbf{x}}_i^T - \ldots + \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)} \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}^T \right)$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \left(\tilde{\mathbf{x}}_i - \ldots - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)} \right) \left(\tilde{\mathbf{x}}_i - \ldots - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)} \right)^T$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \left(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}} - \ldots - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)} \right) \left(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}} - \ldots - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)} \right)^T$$

Jadi, $S_m^* = s_{lq} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1k} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{k1} & s_{k2} & \cdots & s_{kk} \end{bmatrix}$

dengan $s_{ll} = s_l^{\,2} = \dfrac{\sum_{i=1}^{n} (x_{il} - \bar{x}_l - \ldots - t_{i(m-1)} p_{l(m-1)})^2}{n-1} = \dfrac{\sum_{i=1}^{n} (\tilde{x}_{il} - \ldots - \tilde{\tilde{x}}_{il(m-1)})^2}{n-1}$

dan

$$s_{lq} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_{il} - \bar{x}_l - \ldots - t_{i(m-1)} p_{l(m-1)})(x_{iq} - \bar{x}_q - \ldots - t_{i(m-1)} p_{q(m-1)})}{n-1}$$

$$= \frac{\sum_{i=1}^{n} (\tilde{x}_{il} - \ldots - \tilde{\tilde{x}}_{il(m-1)})(\tilde{x}_{iq} - \ldots - \tilde{\tilde{x}}_{iq(m-1)})}{n-1}$$

l, *q* = 1,…,*k*.

sama dengan $S_m^* = \dfrac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} \left(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}} - \ldots - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)} \right) \left(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}} - \ldots - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)} \right)^T$

Terbukti

L.2.3.2 Pembuktian

$$S_m^* = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} \left(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}} - \ldots - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)} \right) \left(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}} - \ldots - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)} \right)^T = \frac{\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_m^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_m}{n-1} = \frac{\mathbf{p}_m \mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m \mathbf{p}_m^T}{n-1}$$

Setelah membuktikan $S_m^* = s_{lq} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1k} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{k1} & s_{k2} & \cdots & s_{kk} \end{bmatrix}$ sama dengan

$S_m^* = \dfrac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}\left(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}} - \ldots - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}\right)\left(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}} - \ldots - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}\right)^T$, akan dibuktikan

$$S_m^* = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}\left(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}} - \ldots - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}\right)\left(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}} - \ldots - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}\right)^T = \frac{\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_m^T\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_m}{n-1}.$$

Bukti :

Didefinisikan vektor *mean* untuk $\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1}$ yaitu $\bar{\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}}_{m-1} = \begin{bmatrix} \bar{\tilde{\tilde{x}}}_{1(m-1)} \\ \vdots \\ \bar{\tilde{\tilde{x}}}_{k(m-1)} \end{bmatrix}$ dimana

$\bar{\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}}_{m-1} = \dfrac{1}{n}\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1}^T\mathbf{j} = \dfrac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{il(m-1)}$. Dengan menggunakan persamaan

$$S_m^* = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}\left(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}} - \ldots - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}\right)\left(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}} - \ldots - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}\right)^T$$

maka dapat diuraikan menjadi :

$$S_m^* = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}\left(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}} - \ldots - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}\right)\left(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}} - \ldots - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}\right)^T$$

$$S_m^* = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}\left(\mathbf{x}_i\mathbf{x}_i^T - \mathbf{x}_i\bar{\mathbf{x}}^T - \ldots - \mathbf{x}_i\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}^T - \bar{\mathbf{x}}\mathbf{x}_i^T + \bar{\mathbf{x}}\bar{\mathbf{x}}^T + \ldots + \bar{\mathbf{x}}\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}^T - \ldots - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}\mathbf{x}_i^T + \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}\bar{\mathbf{x}} + \ldots + \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}^T\right)$$

$$S_m^* = \frac{1}{n-1}\left(\sum_{i=1}^{n}\mathbf{x}_i\mathbf{x}_i^T - n\bar{\mathbf{x}}\bar{\mathbf{x}}^T - \ldots - \sum_{i=1}^{n}\mathbf{x}_i\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}^T + n\bar{\mathbf{x}}\bar{\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}}_{m-1}^T - \ldots - \sum_{i=1}^{n}\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}\mathbf{x}_i^T + n\bar{\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}}_{m-1}\bar{\mathbf{x}} + \ldots + \sum_{i=1}^{n}\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}^T\right)$$

$$S_m^* = \frac{1}{n-1}\left(\underbrace{\sum_{i=1}^{n}\mathbf{x}_i\mathbf{x}_i^T - n\bar{\mathbf{x}}\bar{\mathbf{x}}^T}_{f} - \ldots - \left(\underbrace{\sum_{i=1}^{n}\mathbf{x}_i\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}^T - n\bar{\mathbf{x}}\bar{\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}}_{m-1}^T}_{g}\right) - \ldots - \left(\underbrace{\sum_{i=1}^{n}\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}\mathbf{x}_i^T - n\bar{\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}}_{m-1}\bar{\mathbf{x}}}_{h}\right) + \ldots + \underbrace{\sum_{i=1}^{n}\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}^T}_{i}\right)$$

f) Similar dengan hasil a), berdasarkan bukti L.2.1.2 sebelumnya, telah dibuktikan $\sum_{i=1}^{n}\mathbf{x}_i\mathbf{x}_i^T - n\bar{\mathbf{x}}\,\bar{\mathbf{x}}^T$ sama dengan $\mathbf{X}_1^T\mathbf{X}_1$.

g) $\sum_{i=1}^{n}\mathbf{x}_i\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}^T$ dapat ditulis sebagai $\mathbf{X}^T\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1}$ dengan penjelasan sebagai berikut:

$$\sum_{i=1}^{n}\mathbf{x}_i\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}^T = \mathbf{x}_1\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{1(m-1)}^T + \ldots + \mathbf{x}_n\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{n(m-1)}^T$$

$$= \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 & \cdots & \mathbf{x}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{1(m-1)}^T \\ \vdots \\ \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{n(m-1)}^T \end{bmatrix}$$

$$= \mathbf{X}^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1}$$

dan karena $\bar{\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}}_{m-1} = \begin{bmatrix} \bar{\tilde{\tilde{x}}}_{1(m-1)} \\ \vdots \\ \bar{\tilde{\tilde{x}}}_{k(m-1)} \end{bmatrix}$ dimana $\bar{\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}}_{m-1} = \frac{1}{n} \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1}^T \mathbf{j} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \tilde{\tilde{x}}_{il(m-1)}$ serta

$\bar{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \bar{x}_1 \\ \vdots \\ \bar{x}_k \end{bmatrix}$ dimana $\bar{\mathbf{x}} = \frac{1}{n} \mathbf{X}^T \mathbf{j} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_{il}$, maka bagian g) pada S_m^* dapat ditulis

sebagai

$$\left(\sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_i \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}^T - n\bar{\mathbf{x}} \bar{\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}}_{m-1}^T \right) = \left(\mathbf{X}^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1} - n \frac{1}{n} \mathbf{X}^T \mathbf{j}\mathbf{j}^T \frac{1}{n} \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1} \right)$$

Karena $\mathbf{j}\mathbf{j}^T = \mathbf{J}$, persamaan ini menjadi

$$\left(\sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_i \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}^T - n\bar{\mathbf{x}} \bar{\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}}_{m-1}^T \right) = \left(\mathbf{X}^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1} - \mathbf{X}^T \left(\frac{1}{n} \mathbf{J} \right) \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1} \right)$$

h) berdasarkan sifat transpos matriks dan hasil g), $\sum_{i=1}^{n} \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)} \mathbf{x}_i^T$ dapat ditulis

sebagai $\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1}^T \mathbf{X}$ sehingga

$$\left(\sum_{i=1}^{n} \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)} \mathbf{x}_i^T - n \bar{\tilde{\tilde{\mathbf{x}}}}_{m-1} \bar{\mathbf{x}} \right) = \left(\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1}^T \mathbf{X} - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1}^T \left(\frac{1}{n} \mathbf{j} \right) \mathbf{X} \right)$$

i) Bentuk $\sum_{i=1}^{n} \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)} \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}^T$ dapat dituliskan sebagai $\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1}^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1}$ dengan penjelasan

sebagai berikut

$$\sum_{i=1}^{n} \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)} \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{i(m-1)}^T = \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{1(m-1)} \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{1(m-1)}^T + \ldots + \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{n(m-1)} \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{n(m-1)}^T$$

$$= \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{1(m-1)} & \cdots & \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{n(m-1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{1(m-1)}^T \\ \vdots \\ \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{n(m-1)}^T \end{bmatrix}$$

$$= \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{(m-1)}^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1}$$

Dengan $\left(\mathbf{X}^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1} - \mathbf{X}^T \left(\frac{1}{n} \mathbf{J} \right) \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1} \right)$ berukuran k x k dan berdasarkan sifat transpos pada matriks, maka bentuk

$\left(\mathbf{X}^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1} - \mathbf{X}^T \left(\frac{\mathbf{1}}{n} \mathbf{j} \right) \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1} \right)^T = \left(\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1}^T \mathbf{X} - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1}^T \left(\frac{\mathbf{1}}{n} \mathbf{j} \right) \mathbf{X} \right)$ juga berukuran k x k

sehingga S_m^* dapat dinyatakan sebagai

$$S_m^* = \frac{1}{n-1} \left\{ \mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_1 - \ldots - \left(\mathbf{X}^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1} - \mathbf{X}^T \left(\frac{1}{n} \mathbf{j} \right) \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1} \right) - \left(\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1}^T \mathbf{X} - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1}^T \left(\frac{1}{n} \mathbf{j} \right) \mathbf{X} \right) + \ldots + \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1}^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1} \right\}$$

$$S_m^* = \frac{1}{n-1} \left\{ \mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_1 - \ldots - 2 \left(\mathbf{X}^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1} - \mathbf{X}^T \left(\frac{1}{n} \mathbf{j} \right) \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 \right) + \ldots + \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1}^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1} \right\}$$

$$S_m^* = \frac{1}{n-1} \left\{ \mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_1 - \ldots - 2 \left(\underbrace{\mathbf{X}^T \left(1 - \frac{1}{n} \mathbf{J} \right)}_{\mathrm{j}} \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1} \right) + \ldots + \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1}^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1} \right\}$$

j) Telah dibuktikan pada lampiran L.2.1.2, $\mathbf{X}^T \left(1 - \frac{1}{n} \mathbf{J} \right) = \mathbf{X}_1^T$ sehingga

$\left(\mathbf{X}^T \left(1 - \frac{1}{n} \mathbf{J} \right) \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1} \right) = \mathbf{X}_1^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1}$, maka S_m^* dapat ditulis sebagai

$$S_m^* = \frac{1}{n-1} \left\{ \mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_1 - \ldots - 2(\mathbf{X}_1^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1}) + \ldots + \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1}^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1} \right\}$$

$$S_m^* = \frac{1}{n-1} \left(\mathbf{X}_1 - \ldots - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1} \right)^T \left(\mathbf{X}_1 - \ldots - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1} \right)$$

$$S_m^* = \frac{1}{n-1} \mathbf{X}_m^T \mathbf{X}_m$$

Karena pada kondisi dimana $\mathbf{X}_m$ dapat dijelaskan hanya dengan menggunakan vektor komponen ke-m $\mathbf{t}_m$, dalam notasi matriks, $\mathbf{X}_m$ dapat ditulis sebagai

$\mathbf{X}_m = \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_m = \mathbf{t}_m \mathbf{p}_m^T$, maka S_m^* dapat ditulis sebagai

$$S_m^* = \frac{\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_m^T \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_m}{n-1} = \frac{\mathbf{p}_m \mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m \mathbf{p}_m^T}{n-1}$$ Terbukti

LAMPIRAN 3

Bukti $\left(\mathbf{I}-\frac{1}{n}\mathbf{J}\right)^T\left(\mathbf{I}-\frac{1}{n}\mathbf{J}\right)=\left(\mathbf{I}-\frac{1}{n}\mathbf{J}\right)$

Berikut ini akan dibuktikan $\left(\mathbf{I}-\frac{1}{n}\mathbf{J}\right)^T\left(\mathbf{I}-\frac{1}{n}\mathbf{J}\right)=\left(\mathbf{I}-\frac{1}{n}\mathbf{J}\right)$,

dimana $\mathbf{J}=\mathbf{j}\mathbf{j}^T$ dengan $\mathbf{j}=\begin{bmatrix}1\\1\\\vdots\\1\end{bmatrix}$ adalah vektor **1** berukuran *n* x 1.

Bukti :

Misalkan **I** adalah matriks identitas berukuran *n* x *n*, maka $\mathbf{I}^T\mathbf{J}=\mathbf{J}$ dan $\mathbf{J}^T\mathbf{I}=\mathbf{J}$, sehingga

$$\left(\mathbf{I}-\frac{1}{n}\mathbf{J}\right)^T\left(\mathbf{I}-\frac{1}{n}\mathbf{J}\right)=\mathbf{I}^T\mathbf{I}-\frac{1}{n}\mathbf{I}^T\mathbf{J}-\frac{1}{n}\mathbf{J}^T\mathbf{I}+\frac{1}{n}\mathbf{J}^T\frac{1}{n}\mathbf{J}$$

$$=\mathbf{I}-2\frac{1}{n}\mathbf{J}+\frac{1}{n^2}\mathbf{J}^T\mathbf{J}$$

Sedangkan bentuk dari $\mathbf{J}^T\mathbf{J}=n\mathbf{J}$

$$\mathbf{J}^T\mathbf{J}=\begin{bmatrix}1&1&\cdots&1\\1&1&\cdots&1\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\1&1&\cdots&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&1&\cdots&1\\1&1&\cdots&1\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\1&1&\cdots&1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}n&n&\cdots&n\\n&n&\cdots&n\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\n&n&\cdots&n\end{bmatrix}=n\begin{bmatrix}1&1&\cdots&1\\1&1&\cdots&1\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\1&1&\cdots&1\end{bmatrix}=n\mathbf{J}$$

$$\left(\mathbf{I}-\frac{1}{n}\mathbf{J}\right)^T\left(\mathbf{I}-\frac{1}{n}\mathbf{J}\right)$$

$$=\mathbf{I}^T\mathbf{I}-\frac{1}{n}\mathbf{I}^T\mathbf{J}-\frac{1}{n}\mathbf{J}^T\mathbf{I}+\frac{1}{n}\mathbf{J}^T\frac{1}{n}\mathbf{J}$$

$$=\mathbf{I}-2\frac{1}{n}\mathbf{J}+\frac{1}{n^2}\mathbf{J}^T\mathbf{J}$$

$$=\mathbf{I}-2\frac{1}{n}\mathbf{J}+\frac{1}{n}\mathbf{J}$$

$$=\mathbf{I}-\frac{1}{n}\mathbf{J}$$

Terbukti

LAMPIRAN 4

Pembuktian $\mathbf{p}_1 = \left(\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1\right)^{-1}\mathbf{X}_1^T\mathbf{t}_1, \mathbf{p}_2 = \left(\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2\right)^{-1}\mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2$ dan $\mathbf{p}_m = \left(\mathbf{t}_m^T\mathbf{t}_m\right)^{-1}\mathbf{X}_m^T\mathbf{t}_m$ dengan menggunakan metode *Least Square*

L.4.1 Pembuktian $\mathbf{p}_1 = \dfrac{\mathbf{X}_1^T\mathbf{t}_1}{\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1}$ dengan menggunakan metode *Least Square*

Berdasarkan persamaan (3.2.1) yaitu $\tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{TP}^T + \mathbf{E} = \sum_{\mathbf{j=1}}^{\mathbf{m}} \mathbf{t}_j\mathbf{p}_j^T + \mathbf{E}$ dan algoritma NIPALS, dengan menggunakan metode *Least Square* akan dibuktikan $\mathbf{p}_1 = \dfrac{\mathbf{X}_1^T\mathbf{t}_1}{\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1}$. Pada metode *least squares*, penaksir $\mathbf{p}_1$ adalah penaksir yang meminimumkan fungsi *least squares*, dalam hal ini adalah yang meminimumkan $tr\left(\mathbf{e}_1^T\mathbf{e}_1\right) = tr\left(\mathbf{X}_1 - \mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T\right)^T\left(\mathbf{X}_1 - \mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T\right)$ dengan $\mathbf{X}_1$ sebagai variabel-variabel respon dan $\mathbf{t}_1$ sebagai variabel prediktor.

Fungsi *Least Squares* dapat ditulis sebagai :

$$S\left(p_{11},....,p_{k1}\right) = tr\left(\sum_{i=1}^{k} e_{i1}^2\right) = tr\left(\mathbf{e}_1^T\mathbf{e}_1\right)$$

$$S\left(p_{11},....,p_{k1}\right) = tr\left(\mathbf{X}_1 - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1\right)^T\left(\mathbf{X}_1 - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1\right)$$

$$S\left(p_{11},....,p_{k1}\right) = tr\left(\mathbf{X}_1 - \mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T\right)^T\left(\mathbf{X}_1 - \mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T\right)$$

$$S\left(p_{11},....,p_{k1}\right) = tr\left(\mathbf{X}_1^T\mathbf{X}_1 - \mathbf{X}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T - \mathbf{p}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{X}_1 + \mathbf{p}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T\right)$$

Karena $\mathbf{p}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{X}_1$ berukuran *k* x *k* dan $\left(\mathbf{X}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T\right)^T = \mathbf{p}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{X}_1$ juga berukuran *k* x *k*, maka fungsi *least squares* dapat ditulis sebagai :

$$S\left(p_{11},....,p_{k1}\right) = tr\left(\mathbf{X}_1^T\mathbf{X}_1 - 2\mathbf{X}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T + \mathbf{p}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T\right)$$

Kemudian turunkan S terhadap $\mathbf{p}_1$ sehingga menjadi

$$\frac{\partial tr\left(\mathbf{X}_1^T\mathbf{X}_1 - 2\mathbf{X}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T + \mathbf{p}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T\right)}{\partial\mathbf{p}_1} = -2\mathbf{X}_1^T\mathbf{t}_1 + 2\mathbf{p}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1 = 0$$

Berikut ini akan dibuktikan

$$\frac{\partial tr\left(\mathbf{X}_1^T\mathbf{X}_1 - 2\mathbf{X}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T + \mathbf{p}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T\right)}{\partial \mathbf{p}_1} = -2\mathbf{X}_1^T\mathbf{t}_1 + 2\mathbf{p}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1 = 0 \text{ dengan}$$

membuktikan $\frac{\partial\ tr\left(-2\mathbf{X}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T\right)}{\mathbf{p}_1}|_{p_{11},\ldots,p_{k1}} = -2\mathbf{X}_1^T\mathbf{t}_1$ dan $\frac{\partial tr\left(\mathbf{p}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T\right)}{\partial \mathbf{p}_1}|_{p_{11},\ldots,p_{k1}} = 2\mathbf{p}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1$

L.4.1.1 Pembuktian untuk $\frac{\partial\ tr\left(-2\mathbf{X}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T\right)}{\mathbf{p}_1}|_{p_{11},\ldots,p_{k1}} = -2\mathbf{X}_1^T\mathbf{t}_1$

$$\mathbf{X}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T = \begin{bmatrix} \tilde{x}_{11} & \cdots & \tilde{x}_{n1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \tilde{x}_{1k} & \cdots & \tilde{x}_{nk} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{11} \\ \vdots \\ t_{n1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_{11} & \cdots & p_{k1} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{X}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T = \begin{bmatrix} (\tilde{x}_{11}t_{11} + \ldots + \tilde{x}_{n1}t_{n1})\,p_{11} & \cdots & (\tilde{x}_{11}t_{11} + \ldots + \tilde{x}_{n1}t_{n1})\,p_{k1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ (\tilde{x}_{1k}t_{11} + \ldots + \tilde{x}_{nk}t_{n1})\,p_{11} & \cdots & (\tilde{x}_{1k}t_{11} + \ldots + \tilde{x}_{nk}t_{n1})\,p_{k1} \end{bmatrix}$$

$$tr\left(\mathbf{X}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T\right) = tr\begin{bmatrix} (\tilde{x}_{11}t_{11} + \ldots + \tilde{x}_{n1}t_{n1})\,p_{11} & \cdots & (\tilde{x}_{11}t_{11} + \ldots + \tilde{x}_{n1}t_{n1})\,p_{k1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ (\tilde{x}_{1k}t_{11} + \ldots + \tilde{x}_{nk}t_{n1})\,p_{11} & \cdots & (\tilde{x}_{1k}t_{11} + \ldots + \tilde{x}_{nk}t_{n1})\,p_{k1} \end{bmatrix}$$

$$tr\left(\mathbf{X}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T\right) = (\tilde{x}_{11}t_{11} + \ldots + \tilde{x}_{n1}t_{n1})\,p_{11} + \ldots + (\tilde{x}_{1k}t_{11} + \ldots + \tilde{x}_{nk}t_{n1})\,p_{k1}$$

Kemudian turunkan tr($\mathbf{X}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T$) terhadap $\mathbf{p}_1$, sehingga

$$\frac{\partial tr\left(\mathbf{X}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T\right)}{\partial \mathbf{p}_1} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial tr\left(\mathbf{X}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T\right)}{\partial p_{11}} \\ \vdots \\ \dfrac{\partial tr\left(\mathbf{X}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T\right)}{\partial p_{k1}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \left(\tilde{x}_{11}t_{11} + \ldots + \tilde{x}_{n1}t_{n1}\right) \\ \vdots \\ \left(\tilde{x}_{1k}t_{11} + \ldots + \tilde{x}_{nk}t_{n1}\right) \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \tilde{x}_{11} & \cdots & \tilde{x}_{n1} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{x}_{1k} & \cdots & \tilde{x}_{nk} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{11} \\ \vdots \\ t_{n1} \end{bmatrix}$$

$$= \mathbf{X}_1^T\mathbf{t}_1$$

Terbukti $\frac{\partial\ tr\left(-2\mathbf{X}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T\right)}{\mathbf{p}_1}|_{p_{11},\ldots,p_{k1}} = -2\mathbf{X}_1^T\mathbf{t}_1$

L.4.1.2 Pembuktian untuk $\dfrac{\partial tr\left(\mathbf{p}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T\right)}{\partial \mathbf{p}_1}\Big|_{p_{11},\dots,p_{k1}} = 2\mathbf{p}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1$

$$\mathbf{p}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T = \begin{bmatrix} p_{11} \\ \vdots \\ p_{k1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{11} & \cdots & t_{n1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{11} \\ \vdots \\ t_{n1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_{11} & \cdots & p_{k1} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{p}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T = \begin{bmatrix} \left(p_{11}^2 t_{11}^2 + \ldots + p_{11}^2 t_{n1}^2\right) & \cdots & \left(p_{11} p_{k1} t_{11}^2 + \ldots + p_{11} p_{k1} t_{n1}^2\right) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \left(p_{11} p_{k1} t_{11}^2 + \ldots + p_{11} p_{k1} t_{n1}^2\right) & \cdots & \left(p_{k1}^2 t_{11}^2 + \ldots + p_{k1}^2 t_{n1}^2\right) \end{bmatrix}$$

$$tr(\mathbf{p}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T) = \left(p_{11}^2 t_{11}^2 + \ldots + p_{11}^2 t_{n1}^2\right) + \ldots + \left(p_{k1}^2 t_{11}^2 + \ldots + p_{k1}^2 t_{n1}^2\right)$$

Kemudian turunkan $tr\left(\mathbf{p}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T\right)$ terhadap $\mathbf{p}_1$, sehingga

$$\frac{\partial tr\left(\mathbf{p}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T\right)}{\partial \mathbf{p}_1}\Big|_{p_{11},\dots,p_{k1}} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial tr\left(\mathbf{p}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T\right)}{\partial p_{11}} \\ \vdots \\ \dfrac{\partial tr\left(\mathbf{p}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T\right)}{\partial p_{11}} \end{bmatrix} = 2\begin{bmatrix} p_{11}\left(t_{11}^2 + \ldots + t_{n1}^2\right) \\ \vdots \\ p_{k1}\left(t_{11}^2 + \ldots + t_{n1}^2\right) \end{bmatrix}$$

$$\frac{\partial tr\left(\mathbf{p}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T\right)}{\partial \mathbf{p}_1}\Big|_{p_{11},\dots,p_{k1}} = 2\begin{bmatrix} p_{11} \\ \vdots \\ p_{k1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{11} & \cdots & t_{n1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{11} \\ \vdots \\ t_{n1} \end{bmatrix}$$

$$= 2\mathbf{p}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1$$

Terbukti $\dfrac{\partial tr\left(\mathbf{p}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T\right)}{\partial \mathbf{p}_1}\Big|_{p_{11},\dots,p_{k1}} = 2\mathbf{p}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1$

Jadi, dengan terbuktinya

$$\frac{\partial tr\left(\mathbf{X}_1^T\mathbf{X}_1 - 2\mathbf{X}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T + \mathbf{p}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T\right)}{\partial \mathbf{p}_1} = -2\mathbf{X}_1^T\mathbf{t}_1 + 2\mathbf{p}_1\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1 = 0,$$

maka akan diperoleh

$$\mathbf{p}_1 = \frac{\mathbf{X}_1^T\mathbf{t}_1}{\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_1}$$

Terbukti

Dengan cara yang sama terbukti juga $\mathbf{p}_2 = \dfrac{\mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2}{\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2}, \ldots, \mathbf{p}_m = \dfrac{\mathbf{X}_m^T\mathbf{t}_m}{\mathbf{t}_m^T\mathbf{t}_m}$.

Berikut ini akan dibuktikan $\mathbf{p}_2 = \dfrac{\mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2}{\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2}$

L.4.2 Pembuktian $\mathbf{p}_2 = \dfrac{\mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2}{\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2}$ dengan menggunakan metode *Least Squares*

Berdasarkan persamaan (3.2.1) yaitu $\tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{TP}^T + \mathbf{E} = \sum_{j=1}^{m}\mathbf{t}_j\mathbf{p}_j^T + \mathbf{E}$ dan algoritma NIPALS, akan dibuktikan $\mathbf{p}_2 = \dfrac{\mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2}{\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2}$ dengan menggunakan metode *Least Squares*. Pada metode *least squares*, penaksir $\mathbf{p}_2$ adalah penaksir yang meminimumkan fungsi *least squares*, dalam hal ini adalah yang meminimumkan $tr\left(\mathbf{e}_2^T\mathbf{e}_2\right) = tr\left(\mathbf{X}_2 - \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T\right)^T\left(\mathbf{X}_2 - \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T\right)$ dengan $\mathbf{X}_2$ sebagai variabel-variabel respon dan $\mathbf{t}_2$ sebagai variabel prediktor. Fungsi *Least Squares* dapat ditulis sebagai :

$$S\left(p_{12},....,p_{k2}\right) = tr\left(\sum_{i=1}^{k} e_{i2}^2\right) = tr\left(\mathbf{e}_2^T\mathbf{e}_2\right)$$

$$S\left(p_{12},....,p_{k2}\right) = tr\left(\mathbf{X}_2 - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2\right)^T\left(\mathbf{X}_2 - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2\right)$$

$$S\left(p_{12},....,p_{k2}\right) = tr\left(\mathbf{X}_2 - \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T\right)^T\left(\mathbf{X}_2 - \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T\right)$$

$$S\left(p_{12},....,p_{k2}\right) = tr\left(\mathbf{X}_2^T\mathbf{X}_2 - \mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T - \mathbf{p}_2\mathbf{t}_2^T\mathbf{X}_2 + \mathbf{p}_2\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T\right)$$

Karena $\mathbf{p}_2\mathbf{t}_2^T\mathbf{X}_2$ berukuran *k* x *k* dan $\left(\mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T\right)^T = \mathbf{p}_2\mathbf{t}_2^T\mathbf{X}_2$ juga berukuran *k* x *k*, maka fungsi *least squares* dapat ditulis sebagai :

$$S\left(p_{12},....,p_{k2}\right) = tr\left(\mathbf{X}_2^T\mathbf{X}_2 - 2\mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T + \mathbf{p}_2\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T\right)$$

Kemudian turunkan S terhadap $\mathbf{p}_2$ sehingga menjadi

$$\frac{\partial tr(\mathbf{X}_2^T\mathbf{X}_2 - 2\mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T + \mathbf{p}_2\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T)}{\partial\mathbf{p}_2} = -2\mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2 + 2\mathbf{p}_2\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2 = 0$$

Berikut ini akan dibuktikan

$\dfrac{\partial tr\left(\mathbf{X}_2^T\mathbf{X}_2 - 2\mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T + \mathbf{p}_2\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T\right)}{\partial\mathbf{p}_2} = -2\mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2 + 2\mathbf{p}_2\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2 = 0$ dengan membuktikan

$\dfrac{\partial\left(-2\mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T\right)}{\mathbf{p}_2}\Big|_{\mathbf{p}_2} = -2\mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2$ dan $\dfrac{\partial tr\left(\mathbf{p}_2\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T\right)}{\partial\mathbf{p}_2}\Big|_{p_{12},...,p_{k2}} = 2\mathbf{p}_2\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2$

L.4.2.1 Pembuktian untuk $\dfrac{\partial\left(-2\mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T\right)}{\mathbf{p}_2}|_{\mathbf{p}_2} = -2\mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2$

$$\mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T = \begin{bmatrix} x_{11(2)} & \cdots & x_{n1(2)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{1k(2)} & \cdots & x_{nk(2)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{12} \\ \vdots \\ t_{n2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_{12} & \cdots & p_{k2} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T = \begin{bmatrix} \left(x_{11(2)}t_{12} + ... + x_{n1(2)}t_{n2}\right)p_{12} & \cdots & \left(x_{11(2)}t_{12} + ... + x_{n1(2)}t_{n2}\right)p_{k2} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \left(x_{1k(2)}t_{12} + ... + x_{nk(2)}t_{n2}\right)p_{12} & \cdots & \left(x_{1k(2)}t_{12} + ... + x_{nk(2)}t_{n2}\right)p_{k2} \end{bmatrix}$$

$$tr(\mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T) = tr\begin{bmatrix} \left(x_{11(2)}t_{12} + ... + x_{n1(2)}t_{n2}\right)p_{12} & \cdots & \left(x_{11(2)}t_{12} + ... + x_{n1(2)}t_{n2}\right)p_{k2} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \left(x_{1k(2)}t_{12} + ... + x_{nk(2)}t_{n2}\right)p_{12} & \cdots & \left(x_{1k(2)}t_{12} + ... + x_{nk(2)}t_{n2}\right)p_{k2} \end{bmatrix}$$

$$tr(\mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T) = \left(x_{11(2)}t_{12} + ... + x_{n1(2)}t_{n2}\right)p_{12} + ... + \left(x_{1k(2)}t_{12} + ... + x_{nk(2)}t_{n2}\right)p_{k2}$$

Kemudian dengan menurunkan $tr\left(\mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T\right)$ terhadap $\mathbf{p}_2$, maka

$$\frac{\partial tr\left(\mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T\right)}{\partial\mathbf{p}_2} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial tr\left(\mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T\right)}{\partial p_{12}} \\ \vdots \\ \dfrac{\partial tr\left(\mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T\right)}{\partial p_{k2}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \left(x_{11(2)}t_{12} + ... + x_{n1(2)}t_{n2}\right) \\ \vdots \\ \left(x_{1k(2)}t_{12} + ... + x_{nk(2)}t_{n2}\right) \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} x_{11(2)} & \cdots & x_{n1(2)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{1k(2)} & \cdots & x_{nk(2)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{12} \\ \vdots \\ t_{n2} \end{bmatrix}$$

$$= \mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2$$

Terbukti $\dfrac{\partial tr\left(-2\mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T\right)}{\partial\mathbf{p}_2} = -2\mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2$

L.4.2.2 Pembuktian untuk $\dfrac{\partial tr\left(\mathbf{p}_2\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T\right)}{\partial\mathbf{p}_2}|_{p_{12},...,p_{k2}} = 2\mathbf{p}_2\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2$

$$\mathbf{p}_2\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T = \begin{bmatrix} p_{12} \\ \vdots \\ p_{k2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{12} & \cdots & t_{n2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{12} \\ \vdots \\ t_{n2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_{12} & \cdots & p_{k2} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{p}_2\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T = \begin{bmatrix} \left(p_{12}^2t_{12}^2 + \ldots + p_{12}^2t_{n2}^2\right) & \cdots & \left(p_{12}p_{k2}t_{12}^2 + \ldots + p_{12}p_{k2}t_{n2}^2\right) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \left(p_{12}p_{k2}p_{12}^2t_{12}^2 + \ldots + p_{12}p_{k2}t_{n2}^2\right) & \cdots & \left(p_{k2}^2t_{12}^2 + \ldots + p_{k2}^2t_{n2}^2\right) \end{bmatrix}$$

$$tr\left(\mathbf{p}_2\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T\right) = \left(p_{12}^2t_{12}^2 + \ldots + p_{12}^2t_{n2}^2\right) + \ldots + \left(p_{k2}^2t_{12}^2 + \ldots + p_{k2}^2t_{n2}^2\right)$$

Kemudian dengan menurunkan $tr\left(\mathbf{p}_2\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T\right)$ terhadap $\mathbf{p}_2$, maka

$$\frac{\partial tr\left(\mathbf{p}_2\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T\right)}{\partial \mathbf{p}_2}\Big|_{p_{12},\ldots,p_{k2}} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial tr\left(\mathbf{p}_2\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T\right)}{\partial p_{12}} \\ \vdots \\ \dfrac{\partial tr\left(\mathbf{p}_2\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T\right)}{\partial p_{k2}} \end{bmatrix} = 2\begin{bmatrix} p_{12}\left(t_{12}^2 + \ldots + t_{n2}^2\right) \\ \vdots \\ p_{k2}\left(t_{12}^2 + \ldots + t_{n2}^2\right) \end{bmatrix}$$

$$\frac{\partial tr\left(\mathbf{p}_2\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T\right)}{\partial \mathbf{p}_2}\Big|_{p_{12},\ldots,p_{k2}} = 2\begin{bmatrix} p_{12} \\ \vdots \\ p_{k2} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} t_{12} & \cdots & t_{n2} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} t_{12} \\ \vdots \\ t_{n2} \end{bmatrix}$$

$$= 2\mathbf{p}_2\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2$$

Terbukti $\dfrac{\partial tr\left(\mathbf{p}_2\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T\right)}{\partial \mathbf{p}_2}\Big|_{p_{12},\ldots,p_{k2}} = 2\mathbf{p}_2\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2$

Jadi, dengan terbuktinya

$$\frac{\partial tr\left(\mathbf{X}_2^T\mathbf{X}_2 - 2\mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T + \mathbf{p}_2\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T\right)}{\partial \mathbf{p}_2} = 2\mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2 + 2\mathbf{p}_2\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2 = 0,$$

maka akan diperoleh

$$\mathbf{p}_2 = \frac{\mathbf{X}_2^T\mathbf{t}_2}{\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2}$$

Terbukti

L.4.3 Pembuktian $\mathbf{p}_m = \dfrac{\mathbf{X}_m^T\mathbf{t}_m}{\mathbf{t}_m^T\mathbf{t}_m}$ dengan menggunakan metode *Least Squares*

Berdasarkan persamaan (3.2.1) yaitu $\tilde{X} = TP^T + E \; = \sum_{j=1}^{m}\mathbf{t}_j\mathbf{p}_j^T + \mathbf{E}$ dan algoritma

NIPALS, akan dibuktikan $\mathbf{p}_m = \dfrac{\mathbf{X}_m^T \mathbf{t}_m}{\mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m}$ dengan menggunakan metode *Least Squares*. Pada metode *least squares*, penaksir $\mathbf{p}_m$ adalah penaksir yang meminimumkan fungsi *least squares*, dalam hal ini adalah yang meminimumkan $tr\left(\mathbf{e}_m^T \mathbf{e}_m\right) = tr\left(\mathbf{X}_m - \mathbf{t}_m \mathbf{p}_m^T\right)^T \left(\mathbf{X}_m - \mathbf{t}_m \mathbf{p}_m^T\right)$ dengan $\mathbf{X}_m$ sebagai variabel-variabel respon dan $\mathbf{t}_m$ sebagai variabel prediktor.

Fungsi *Least Squares* dapat ditulis sebagai :

$$S\left(p_{1m},\ldots., p_{km}\right) = tr\left(\sum_{i=1}^{k} e_{im}^2\right) = tr\left(\mathbf{e}_m^T \mathbf{e}_m\right)$$

$$S\left(p_{1m},\ldots., p_{km}\right) = tr\left(\mathbf{X}_m - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_m\right)^T \left(\mathbf{X}_m - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_m\right)$$

$$S\left(p_{1m},\ldots., p_{km}\right) = tr\left(\mathbf{X}_m - \mathbf{t}_m \mathbf{p}_m^T\right)^T \left(\mathbf{X}_m - \mathbf{t}_m \mathbf{p}_m^T\right)$$

$$S\left(p_{1m},\ldots., p_{km}\right) = tr\left(\mathbf{X}_m^T \mathbf{X}_m - \mathbf{X}_m^T \mathbf{t}_m \mathbf{p}_m^T - \mathbf{p}_m \mathbf{t}_m^T \mathbf{X}_m + \mathbf{p}_m \mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m \mathbf{p}_m^T\right)$$

Karena $\mathbf{p}_m \mathbf{t}_m^T \mathbf{X}_m$ berukuran k x k dan $\left(\mathbf{X}_m^T \mathbf{t}_m \mathbf{p}_m^T\right)^T = \mathbf{p}_m \mathbf{t}_m^T \mathbf{X}_m$ juga berukuran k x k, maka dapat ditulis sebagai :

$$S\left(p_{1m},\ldots., p_{km}\right) = tr\left(\mathbf{X}_m^T \mathbf{X}_m - 2\mathbf{X}_m^T \mathbf{t}_m \mathbf{p}_m^T + \mathbf{p}_m \mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m \mathbf{p}_m^T\right)$$

Kemudian turunkan S terhadap $\mathbf{p}_m$ sehingga menjadi

$$\frac{\partial tr\left(\mathbf{X}_m^T \mathbf{X}_m - 2\mathbf{X}_m^T \mathbf{t}_m \mathbf{p}_m^T + \mathbf{p}_m \mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m \mathbf{p}_m^T\right)}{\partial \mathbf{p}_m} = -2\mathbf{X}_m^T \mathbf{t}_m + 2\mathbf{p}_m \mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m = 0$$

Berikut ini akan dibuktikan

$$\frac{\partial tr\left(\mathbf{X}_m^T \mathbf{X}_m - 2\mathbf{X}_m^T \mathbf{t}_m \mathbf{p}_m^T + \mathbf{p}_m \mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m \mathbf{p}_m^T\right)}{\partial \mathbf{p}_m} = -2\mathbf{X}_m^T \mathbf{t}_m + 2\mathbf{p}_m \mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m = 0$$

L.4.3.1 Pembuktian untuk $\dfrac{\partial\left(-2\mathbf{X}_m^T \mathbf{t}_m \mathbf{p}_m^T\right)}{\mathbf{p}_m}\Big|_{\mathbf{p}_m} = -2\mathbf{X}_m^T \mathbf{t}_m$

$$\mathbf{X}_m^T\mathbf{t}_m\mathbf{p}_m^T = \begin{bmatrix} x_{11(m)} & \cdots & x_{n1(m)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{1k(m)} & \cdots & x_{nk(m)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{1m} \\ \vdots \\ t_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_{1m} & \cdots & p_{km} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{X}_m^T\mathbf{t}_m\mathbf{p}_m^T = \begin{bmatrix} \left(x_{11(m)}t_{1m}+\ldots+x_{n1(m)}t_{nm}\right)p_{1m} & \cdots & \left(x_{11(m)}t_{1m}+\ldots+x_{n1(m)}t_{nm}\right)p_{km} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \left(x_{1k(m)}t_{1m}+\ldots+x_{nk(m)}t_{nm}\right)p_{1m} & \cdots & \left(x_{1k(m)}t_{1m}+\ldots+x_{nk(m)}t_{nm}\right)p_{km} \end{bmatrix}$$

$$tr(\mathbf{X}_m^T\mathbf{t}_m\mathbf{p}_m^T) = tr\begin{bmatrix} \left(x_{11(m)}t_{1m}+\ldots+x_{n1(m)}t_{nm}\right)p_{1m} & \cdots & \left(x_{11(m)}t_{1m}+\ldots+x_{n1(m)}t_{nm}\right)p_{km} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \left(x_{1k(m)}t_{1m}+\ldots+x_{nk(m)}t_{nm}\right)p_{1m} & \cdots & \left(x_{1k(m)}t_{1m}+\ldots+x_{nk(m)}t_{nm}\right)p_{km} \end{bmatrix}$$

$$tr(\mathbf{X}_m^T\mathbf{t}_m\mathbf{p}_m^T) = \left(x_{11(m)}t_{1m}+\ldots+x_{n1(m)}t_{nm}\right)p_{1m}+\ldots+\left(x_{1k(m)}t_{1m}+\ldots+x_{nk(m)}t_{nm}\right)p_{km}$$

Kemudian dengan menurunkan $tr(\mathbf{X}_m^T\mathbf{t}_m\mathbf{p}_m^T)$ terhadap $\mathbf{p}_m$, maka

$$\frac{\partial tr\left(\mathbf{X}_m^T\mathbf{t}_m\mathbf{p}_m^T\right)}{\partial \mathbf{p}_m} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial tr\left(\mathbf{X}_m^T\mathbf{t}_m\mathbf{p}_m^T\right)}{\partial p_{1m}} \\ \vdots \\ \dfrac{\partial tr\left(\mathbf{X}_m^T\mathbf{t}_m\mathbf{p}_m^T\right)}{\partial p_{km}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \left(x_{11(m)}t_{1m}+\ldots+x_{n1(m)}t_{nm}\right) \\ \vdots \\ \left(x_{1k(m)}t_{1m}+\ldots+x_{nk(m)}t_{nm}\right) \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} x_{11(m)} & \cdots & x_{n1(m)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{1k(m)} & \cdots & x_{nk(m)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{1m} \\ \vdots \\ t_{nm} \end{bmatrix}$$

$$= \mathbf{X}_m^T\mathbf{t}_m$$

Terbukti $\dfrac{\partial tr\left(-2\mathbf{X}_m^T\mathbf{t}_m\mathbf{p}_m^T\right)}{\partial \mathbf{p}_m} = -2\mathbf{X}_m^T\mathbf{t}_m$

L.4.3.2 Pembuktian untuk $\dfrac{\partial tr\left(\mathbf{p}_m\mathbf{t}_m^T\mathbf{t}_m\mathbf{p}_m^T\right)}{\partial \mathbf{p}_m}|_{p_{1m},\ldots,p_{km}} = 2\mathbf{p}_m\mathbf{t}_m^T\mathbf{t}_m$

$$\mathbf{p}_m\mathbf{t}_m^T\mathbf{t}_m\mathbf{p}_m^T = \begin{bmatrix} p_{1m} \\ \vdots \\ p_{km} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{1m} & \cdots & t_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{1m} \\ \vdots \\ t_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_{1m} & \cdots & p_{km} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{p}_m\mathbf{t}_m^T\mathbf{t}_m\mathbf{p}_m^T = \begin{bmatrix} \left(p_{1m}{}^2t_{1m}{}^2 + \ldots + p_{1m}{}^2t_{nm}{}^2\right) & \cdots & \left(p_{1m}p_{km}t_{1m}{}^2 + \ldots + p_{1m}p_{km}t_{nm}{}^2\right) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \left(p_{1m}p_{km}t_{1m}{}^2 + \ldots + p_{1m}p_{km}t_{nm}{}^2\right) & \cdots & \left(p_{km}{}^2t_{1m}{}^2 + \ldots + p_{km}{}^2t_{nm}{}^2\right) \end{bmatrix}$$

$$tr\left(\mathbf{p}_m\mathbf{t}_m^T\mathbf{t}_m\mathbf{p}_m^T\right) = \left(p_{1m}{}^2t_{1m}{}^2 + \ldots + p_{1m}{}^2t_{nm}{}^2\right) + \ldots + \left(p_{km}{}^2t_{1m}{}^2 + \ldots + p_{km}{}^2t_{nm}{}^2\right)$$

Kemudian dengan menurunkan $tr\left(\mathbf{p}_m\mathbf{t}_m^T\mathbf{t}_m\mathbf{p}_m^T\right)$ terhadap $\mathbf{p}_m$, maka

$$\frac{\partial tr\left(\mathbf{p}_m\mathbf{t}_m^T\mathbf{t}_m\mathbf{p}_m^T\right)}{\partial \mathbf{p}_m}\Big|_{p_{1m},\ldots,p_{km}} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial tr\left(\mathbf{p}_m\mathbf{t}_m^T\mathbf{t}_m\mathbf{p}_m^T\right)}{\partial p_{1m}} \\ \vdots \\ \dfrac{\partial tr\left(\mathbf{p}_m\mathbf{t}_m^T\mathbf{t}_m\mathbf{p}_m^T\right)}{\partial p_{km}} \end{bmatrix} = 2\begin{bmatrix} p_{1m}\left(t_{1m}{}^2 + \ldots + t_{nm}{}^2\right) \\ \vdots \\ p_{km}\left(t_{1m}{}^2 + \ldots + t_{nm}{}^2\right) \end{bmatrix}$$

$$\frac{\partial tr\left(\mathbf{p}_m\mathbf{t}_m^T\mathbf{t}_m\mathbf{p}_m^T\right)}{\partial \mathbf{p}_m}\Big|_{p_{1m},\ldots,p_{km}} = \begin{bmatrix} p_{1m} \\ \vdots \\ p_{km} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{1m} & \cdots & t_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{1m} \\ \vdots \\ t_{nm} \end{bmatrix}$$
$$= 2\mathbf{p}_m\mathbf{t}_m^T\mathbf{t}_m$$

Terbukti $\dfrac{\partial tr\left(\mathbf{p}_m\mathbf{t}_m^T\mathbf{t}_m\mathbf{p}_m^T\right)}{\partial \mathbf{p}_m}\Big|_{p_{1m},\ldots,p_{km}} = 2\mathbf{p}_m\mathbf{t}_m^T\mathbf{t}_m$

Jadi, dengan terbuktinya

$$\frac{\partial tr\left(\mathbf{X}_m^T\mathbf{X}_m - 2\mathbf{X}_m^T\mathbf{t}_m\mathbf{p}_m^T + \mathbf{p}_m\mathbf{t}_m^T\mathbf{t}_m\mathbf{p}_m^T\right)}{\partial \mathbf{p}_m} = 2\mathbf{X}_m^T\mathbf{t}_m + 2\mathbf{p}_m\mathbf{t}_m^T\mathbf{t}_m = 0,$$

maka akan diperoleh

$$\mathbf{p}_m = \frac{\mathbf{X}_m^T\mathbf{t}_m}{\mathbf{t}_m^T\mathbf{t}_m}$$

Terbukti

Jadi, terbukti $\mathbf{p}_j = \dfrac{\mathbf{X}_j^T\mathbf{t}_j}{\mathbf{t}_j^T\mathbf{t}_j}$, $j = 1,\ldots,m$

Dengan terbuktinya $\mathbf{p}_j = \dfrac{\mathbf{X}_j^T \mathbf{t}_j}{\mathbf{t}_j^T \mathbf{t}_j}$ dan berdasarkan persamaan (3.2.1) yaitu

$\tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{T}\mathbf{P}^T + \mathbf{E}$ maka akan terbukti $\mathbf{P} = \left(\mathbf{T}^T\mathbf{T}\right)^{-1} \tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{T}$

Bukti:

$$S\left(\mathbf{p}_1,...,\mathbf{p}_m\right) = tr\left(\mathbf{E}^T\mathbf{E}\right)$$
$$S\left(\mathbf{p}_1,...,\mathbf{p}_m\right) = tr\left(\tilde{\mathbf{X}} - \mathbf{T}\mathbf{P}^T\right)^T\left(\tilde{\mathbf{X}} - \mathbf{T}\mathbf{P}^T\right)$$
$$S\left(\mathbf{p}_1,...,\mathbf{p}_m\right) = tr\left(\tilde{\mathbf{X}}^T\tilde{\mathbf{X}} - \tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{T}\mathbf{P}^T - \mathbf{P}\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{X}} + \mathbf{P}\mathbf{T}^T\mathbf{T}\mathbf{P}^T\right)$$
$$S\left(\mathbf{p}_1,...,\mathbf{p}_m\right) = tr\left(\tilde{\mathbf{X}}^T\tilde{\mathbf{X}} - 2\tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{T}\mathbf{P}^T + \mathbf{P}\mathbf{T}^T\mathbf{T}\mathbf{P}^T\right)$$

Akan dibuktikan $\dfrac{\partial S}{\partial \mathbf{P}}\Big|_{\mathbf{p}_1,...,\mathbf{p}_m} = -2\tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{T} + 2\mathbf{P}\mathbf{T}^T\mathbf{T} = \mathbf{0}$ sehingga diperoleh

$\mathbf{P} = \left(\mathbf{T}^T\mathbf{T}\right)^{-1} \tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{T}$. Pembuktian dibagi menjadi 2 bagian yaitu pembuktian untuk

$\dfrac{\partial tr\left(\tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{T}\mathbf{P}^T\right)}{\partial \mathbf{P}}\Big|_{\mathbf{p}_1,...,\mathbf{p}_m} = \tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{T}$ dan pembuktian untuk $\dfrac{\partial tr\left(\mathbf{P}\mathbf{T}^T\mathbf{T}\mathbf{P}^T\right)}{\partial \mathbf{P}}\Big|_{\mathbf{p}_1,...,\mathbf{p}_m} = 2\mathbf{P}\mathbf{T}^T\mathbf{T}$.

L.4.4.1 Pembuktian untuk

$$\frac{\partial tr\left(\tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{T}\mathbf{P}^T\right)}{\partial \mathbf{P}}\Big|_{\mathbf{p}_1,...,\mathbf{p}_m} = \tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{T}$$

$$\tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{T}\mathbf{P}^T = \begin{bmatrix} \tilde{x}_{11} & \cdots & \tilde{x}_{n1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \tilde{x}_{1k} & \cdots & \tilde{x}_{nk} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{11} & \cdots & t_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ t_{n1} & \cdots & t_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_{11} & \cdots & p_{k1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{1m} & \cdots & p_{km} \end{bmatrix}$$

$$\tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{T}\mathbf{P}^T = \begin{bmatrix} \left[\left(\tilde{x}_{11}t_{11} + ... + \tilde{x}_{n1}t_{n1}\right)p_{11} + ... + \left(\tilde{x}_{11}t_{1m} + ... + \tilde{x}_{n1}t_{nm}\right)p_{1m}\right] & \cdots & \left[\left(\tilde{x}_{11}t_{11} + ... + \tilde{x}_{n1}t_{n1}\right)p_{k1} + ... + \left(\tilde{x}_{11}t_{1m} + ... + \tilde{x}_{n1}t_{nm}\right)p_{km}\right] \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \left[\left(\tilde{x}_{1k}t_{11} + ... + \tilde{x}_{nk}t_{n1}\right)p_{11} + ... + \left(\tilde{x}_{1k}t_{1m} + ... + \tilde{x}_{nk}t_{nm}\right)p_{1m}\right] & \cdots & \left[\left(\tilde{x}_{1k}t_{11} + ... + \tilde{x}_{nk}t_{n1}\right)p_{k1} + ... + \left(\tilde{x}_{1k}t_{1m} + ... + \tilde{x}_{nk}t_{nm}\right)p_{km}\right] \end{bmatrix}$$

$$tr\left(\tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{T}\mathbf{P}^T\right) = [\left(\tilde{x}_{11}t_{11} + ... + \tilde{x}_{n1}t_{n1}\right)p_{11} + ... + \left(\tilde{x}_{11}t_{1m} + ... + \tilde{x}_{n1}t_{nm}\right)p_{1m}] + ... + [\left(\tilde{x}_{1k}t_{11} + ... + \tilde{x}_{nk}t_{n1}\right)p_{k1} + ... + \left(\tilde{x}_{1k}t_{1m} + ... + \tilde{x}_{nk}t_{nm}\right)p_{km}]$$

$$\frac{\partial tr\left(\tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{TP}^T\right)}{\partial \mathbf{p}_1} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial tr\left(\tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{TP}^T\right)}{\partial p_{11}} \\ \vdots \\ \dfrac{\partial tr\left(\tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{TP}^T\right)}{\partial p_{k1}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \left(\tilde{x}_{11}t_{11} + \ldots + \tilde{x}_{n1}t_{n1}\right) \\ \vdots \\ \left(\tilde{x}_{1k}t_{11} + \ldots + \tilde{x}_{nk}t_{n1}\right) \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^{n} \tilde{x}_{il}t_{i1}$$

$$\frac{\partial tr\left(\tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{TP}^T\right)}{\partial \mathbf{p}_1} = \tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{t}_1$$

$$\vdots$$

$$\frac{\partial tr\left(\tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{TP}^T\right)}{\partial \mathbf{p}_m} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial tr\left(\tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{TP}^T\right)}{\partial p_{1k}} \\ \vdots \\ \dfrac{\partial tr\left(\tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{TP}^T\right)}{\partial p_{km}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \left(\tilde{x}_{11}t_{1m} + \ldots + \tilde{x}_{n1}t_{nm}\right) \\ \vdots \\ \left(\tilde{x}_{1k}t_{1m} + \ldots + \tilde{x}_{nk}t_{nm}\right) \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^{n} \tilde{x}_{il}t_{im}$$

$$\frac{\partial tr\left(\tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{TP}^T\right)}{\partial \mathbf{p}_m} = \tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{t}_m$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial tr\left(\tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{TP}^T\right)}{\partial \mathbf{P}}\Big|_{\mathbf{p}_1,\ldots,\mathbf{p}_m} &= \begin{bmatrix} \dfrac{\partial tr\left(\tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{TP}^T\right)}{\partial \mathbf{p}_1} & \cdots & \dfrac{\partial tr\left(\tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{TP}^T\right)}{\partial \mathbf{p}_m} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \left(\tilde{x}_{11}t_{11} + \ldots + \tilde{x}_{n1}t_{n1}\right) & \cdots & \left(\tilde{x}_{11}t_{1m} + \ldots + \tilde{x}_{n1}t_{nm}\right) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \left(\tilde{x}_{1k}t_{11} + \ldots + \tilde{x}_{nk}t_{n1}\right) & \cdots & \left(\tilde{x}_{1k}t_{1m} + \ldots + \tilde{x}_{nk}t_{nm}\right) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{x}_{11} & \cdots & \tilde{x}_{n1} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \tilde{x}_{1k} & \cdots & \tilde{x}_{nk} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{11} & \cdots & t_{1m} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ t_{n1} & \cdots & t_{nm} \end{bmatrix} \\ &= \tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{T} \end{aligned}$$

Jadi, terbukti $\dfrac{\partial tr\left(\tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{TP}^T\right)}{\partial \mathbf{P}}\Big|_{\mathbf{p}_1,\ldots,\mathbf{p}_m} = \tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{T}$

L.4.4.2 Pembuktian untuk $\dfrac{\partial tr\left(\mathbf{PT}^T\mathbf{TP}^T\right)}{\partial \mathbf{P}}\Big|_{\mathbf{p}_1,\ldots,\mathbf{p}_m} = 2\mathbf{PT}^T\mathbf{T}^T\mathbf{TP}^T$

$$\mathbf{PT}^T\mathbf{TP}^T = \begin{bmatrix} p_{11} & \cdots & p_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{k1} & \cdots & p_{km} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{11} & \cdots & t_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ t_{n1} & \cdots & t_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{11} & \cdots & t_{n1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ t_{1m} & \cdots & t_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_{11} & \cdots & p_{k1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{1m} & \cdots & p_{km} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \left[\left(p_{11}t_{11}+\ldots+p_{1m}t_{1m}\right)^2+\ldots+\left(p_{11}t_{n1}+\ldots+p_{1m}t_{nm}\right)^2\right] & \cdots & \left[\left(p_{11}t_{11}+p_{1m}t_{1m}\right)\left(p_{k1}t_{11}+\ldots+p_{km}t_{1m}\right)+\ldots+\left(p_{11}t_{n1}+\ldots+p_{1m}t_{nm}\right)\left(p_{k1}t_{n1}+\ldots+p_{km}t_{nm}\right)\right] \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \left[\left(p_{11}t_{11}+p_{1m}t_{1m}\right)\left(p_{k1}t_{11}+\ldots+p_{km}t_{1m}\right)+\ldots+\left(p_{11}t_{n1}+\ldots+p_{1m}t_{nm}\right)\left(p_{k1}t_{n1}+\ldots+p_{km}t_{nm}\right)\right] & \cdots & \left[\left(p_{k1}t_{11}+\ldots+p_{km}t_{1m}\right)^2+\ldots+\left(p_{k1}t_{n1}+\ldots+p_{km}t_{nm}\right)^2\right] \end{bmatrix}$$

$$tr\left(\mathbf{PT}^T\mathbf{TP}^T\right) = \left[\left(p_{11}t_{11}+\ldots+p_{1m}t_{1m}\right)^2+\ldots+\left(p_{11}t_{n1}+\ldots+p_{1m}t_{nm}\right)^2\right]+\ldots+\left[\left(p_{k1}t_{11}+\ldots+p_{km}t_{1m}\right)^2+\ldots+\left(p_{k1}t_{n1}+\ldots+p_{km}t_{nm}\right)^2\right]$$

$$\frac{\partial tr\left(\mathbf{P}\mathbf{T}^T\mathbf{T}\mathbf{P}^T\right)}{\partial \mathbf{p}_1} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial tr\left(\mathbf{P}\mathbf{T}^T\mathbf{T}\mathbf{P}^T\right)}{\partial p_{11}} \\ \vdots \\ \dfrac{\partial tr\left(\mathbf{P}\mathbf{T}^T\mathbf{T}\mathbf{P}^T\right)}{\partial p_{k1}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2\left(p_{11}t_{11}+\ldots+p_{1m}t_{1m}\right)t_{11}+\ldots+2\left(p_{11}t_{n1}+\ldots+p_{1m}t_{nm}\right)t_{n1} \\ \vdots \\ 2\left(p_{k1}t_{11}+\ldots+p_{km}t_{1m}\right)t_{11}+\ldots+2\left(p_{k1}t_{n1}+\ldots+p_{km}t_{nm}\right)t_{n1} \end{bmatrix}$$

$$= 2\begin{bmatrix} p_{11} & \cdots & p_{1m} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ p_{k1} & \cdots & p_{km} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} t_{11} & \cdots & t_{n1} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{1m} & \cdots & t_{nm} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} t_{11} \\ \vdots \\ t_{n1} \end{bmatrix}$$

$$= 2\mathbf{P}\mathbf{T}^T\mathbf{t}_1$$

$\vdots$

$$\frac{\partial tr\left(\mathbf{P}\mathbf{T}^T\mathbf{T}\mathbf{P}^T\right)}{\partial \mathbf{p}_m} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial tr\left(\mathbf{P}\mathbf{T}^T\mathbf{T}\mathbf{P}^T\right)}{\partial p_{1m}} \\ \vdots \\ \dfrac{\partial tr\left(\mathbf{P}\mathbf{T}^T\mathbf{T}\mathbf{P}^T\right)}{\partial p_{km}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2\left(p_{11}t_{11}+\ldots+p_{1m}t_{1m}\right)t_{1m}+\ldots+2\left(p_{11}t_{n1}+\ldots+p_{1m}t_{nm}\right)t_{nm} \\ \vdots \\ 2\left(p_{k1}t_{11}+\ldots+p_{km}t_{1m}\right)t_{1m}+\ldots+2\left(p_{k1}t_{n1}+\ldots+p_{km}t_{nm}\right)t_{nm} \end{bmatrix}$$

$$= 2\begin{bmatrix} p_{11} & \cdots & p_{1m} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ p_{k1} & \cdots & p_{km} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} t_{11} & \cdots & t_{n1} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{1m} & \cdots & t_{nm} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} t_{1m} \\ \vdots \\ t_{nm} \end{bmatrix}$$

$$= 2\mathbf{P}\mathbf{T}^T\mathbf{t}_m$$

$$\frac{\partial tr\left(\mathbf{P}\mathbf{T}^T\mathbf{T}\mathbf{P}^T\right)}{\partial \mathbf{P}}\Big|_{\mathbf{p}_1,\ldots,\mathbf{p}_m} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial tr\left(\mathbf{P}\mathbf{T}^T\mathbf{T}\mathbf{P}^T\right)}{\partial \mathbf{p}_1} & \cdots & \dfrac{\partial tr\left(\mathbf{P}\mathbf{T}^T\mathbf{T}\mathbf{P}^T\right)}{\partial \mathbf{p}_m} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 2\left(p_{11}t_{11}+\ldots+p_{1m}t_{1m}\right)t_{11}+\ldots+2\left(p_{11}t_{n1}+\ldots+p_{1m}t_{nm}\right)t_{n1} & & 2\left(p_{11}t_{11}+\ldots+p_{1m}t_{1m}\right)t_{1m}+\ldots+2\left(p_{11}t_{n1}+\ldots+p_{1m}t_{nm}\right)t_{nm} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ 2\left(p_{k1}t_{11}+\ldots+p_{km}t_{1m}\right)t_{11}+\ldots+2\left(p_{k1}t_{n1}+\ldots+p_{km}t_{nm}\right)t_{n1} & & 2\left(p_{k1}t_{11}+\ldots+p_{km}t_{1m}\right)t_{1m}+\ldots+2\left(p_{k1}t_{n1}+\ldots+p_{km}t_{nm}\right)t_{nm} \end{bmatrix}$$

$$= 2\mathbf{P}\mathbf{T}^T\mathbf{T}$$

Jadi, terbukti $\dfrac{\partial tr\left(\mathbf{P}\mathbf{T}^T\mathbf{T}\mathbf{P}^T\right)}{\partial \mathbf{P}}\Big|_{\mathbf{p}_1,\ldots,\mathbf{p}_m} = 2\mathbf{P}\mathbf{T}^T\mathbf{T}$

Dengan demikian $\dfrac{\partial S}{\partial \mathbf{P}}\Big|_{\mathbf{p}_1,\ldots,\mathbf{p}_m} = -2\tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{T} + 2\mathbf{P}\mathbf{T}^T\mathbf{T} = \mathbf{0}$ sehingga diperoleh

$$\mathbf{P} = \left(\mathbf{T}^T\mathbf{T}\right)^{-1}\tilde{\mathbf{X}}^T\mathbf{T}$$

Terbukti .

LAMPIRAN 5

Bukti $\hat{c}_j = \left(\mathbf{t}_j^T \mathbf{t}_j\right)^{-1} \mathbf{t}_j^T \mathbf{y}_j$, j = 1,…,m Dengan Metode OLS

L.5.1 Pembuktian $\hat{c}_1 = \dfrac{\mathbf{t}_1^T \mathbf{y}_1}{\mathbf{t}_1^T \mathbf{t}_1}$

Dengan meminimumkan SSE, didefinisikan

$$S(c_1) = \sum_{i=1}^{n} f_{i1}^{\ 2}$$

$$S(c_1) = \sum_{i=1}^{n} \left(\tilde{y}_i - t_{i1} c_1\right)^2$$

Persamaan ini diminimumkan terhadap c_1 untuk mendapat taksiran dari parameter regresi.

$$\frac{\partial S}{\partial c_1} | \hat{c}_1 = -2\sum_{i=1}^{n} \left(\tilde{y}_i - t_{i1}\hat{c}_1\right) t_{i1}$$

$$\sum_{i=1}^{n} \tilde{y}_i t_j = \sum_{i=1}^{n} t_{i1}\hat{c}_1 t_{i1}$$

Dalam notasi matriks dapat ditulis sebagai berikut :

$$S(c_1) = \sum_{i=1}^{n} f_{i1}^{\ 2} = \mathbf{f}_1^T \mathbf{f}_1$$

$$S(c_1) = \left(\mathbf{y}_1 - \mathbf{t}_1 c_1\right)^T \left(\mathbf{y}_1 - \mathbf{t}_1 c_1\right)$$

$$S(c_1) = \mathbf{y}_1^T \mathbf{y}_1 - \mathbf{y}_1^T \mathbf{t}_1 c_1 - c_1^T \mathbf{t}_1^T \mathbf{y}_1 + c_1^T \mathbf{t}_1^T \mathbf{t}_1 c_1$$

$$S(c_1) = \mathbf{y}_1^T \mathbf{y}_1 - 2c_1^T \mathbf{t}_1^T \mathbf{y}_1 + c_1^T \mathbf{t}_1^T \mathbf{t}_1 c_1$$

Sehingga estimator *least squares* ini harus memenuhi

$$\frac{\partial S}{\partial c_1} | \hat{c}_1 = -2\mathbf{t}_1^T \mathbf{y}_1 + 2\mathbf{t}_1^T \mathbf{t}_1 \hat{c}_1 = 0$$

$$\mathbf{t}_1^T \mathbf{y}_1 = \mathbf{t}_1^T \mathbf{t}_1 \hat{c}_1$$

$$\hat{c}_1 = \left(\mathbf{t}_1^T \mathbf{t}_1\right)^{-1} \mathbf{t}_1^T \mathbf{y}_1$$

$$\hat{c}_1 = \frac{\mathbf{t}_1^T \mathbf{y}_1}{\mathbf{t}_1^T \mathbf{t}_1}$$

Berikut ini akan dibuktikan $\frac{\partial S}{\partial c_1} \mid \hat{c}_1 = -2\mathbf{t}_1^T \mathbf{y}_1 + 2\mathbf{t}_1^T \mathbf{t}_1 \hat{c}_1 = 0$ sedemikian sehingga

$\hat{c}_1 = \frac{\mathbf{t}_1^T \mathbf{y}_1}{\mathbf{t}_1^T \mathbf{t}_1}$

L.5.1.1 Pembuktian untuk $\frac{\partial\left(-2c_1^T \mathbf{t}_1^T \mathbf{y}_1\right)}{\partial c_1} \mid \hat{c}_1 = -2\mathbf{t}_1^T \mathbf{y}_1$

$$c_1^T \mathbf{t}_1^T \mathbf{y}_1 = c_1^T \begin{bmatrix} t_{11} & \cdots & t_{n1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{y}_1 \\ \vdots \\ \tilde{y}_n \end{bmatrix}$$

$$c_1^T \mathbf{t}_1^T \mathbf{y}_1 = [c_1 t_{11} \ldots c_1 t_{n1}] \begin{bmatrix} \tilde{y}_1 \\ \vdots \\ \tilde{y}_n \end{bmatrix}$$

$$c_1^T \mathbf{t}_1^T \mathbf{y}_1 = [c_1 t_{11} y_1 + \ldots + c_1 t_{n1} y_n]$$

$$\frac{\partial\left(c_1^T \mathbf{t}_1^T \mathbf{y}_1\right)}{c_1} \Big|_{\hat{c}_1} = [t_{11}\tilde{y}_1 + \ldots + t_{n1}\tilde{y}_n] = \begin{bmatrix} t_{11} & \cdots & t_{n1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{y}_1 \\ \vdots \\ \tilde{y}_n \end{bmatrix} = \mathbf{t}_1^T \mathbf{y}_1$$

sehingga $\frac{\partial\left(-2c_1^T \mathbf{t}_1^T \mathbf{y}_1\right)}{\partial c_1} \mid \hat{c}_1 = -2\mathbf{t}_1^T \mathbf{y}_1$

Terbukti

L.5.1.2 Pembuktian $\frac{\partial\left(c_1^T \mathbf{t}_1^T \mathbf{t}_1 c_1\right)}{\partial c_1} \mid \hat{c}_1 = 2\mathbf{t}_1^T \mathbf{t}_1 c_1$

$$c_1^T \mathbf{t}_1^T \mathbf{t}_1 c_1 = c_1^T \begin{bmatrix} t_{11} & \cdots & t_{n1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{11} \\ \vdots \\ t_{n1} \end{bmatrix} c_1$$

$$c_1^T \mathbf{t}_1^T \mathbf{t}_1 c_1 = [c_1 t_{11} ... c_1 t_{n1}] \begin{bmatrix} t_{11} c_1 \\ \vdots \\ t_{n1} c_1 \end{bmatrix}$$

$$c_1^T \mathbf{t}_1^T \mathbf{t}_1 c_1 = [c_1^2 t_{11}^2 + ... + c_1^2 t_{n1}^2]$$

$$\frac{\partial \left(c_1^T \mathbf{t}_1^T \mathbf{t}_1 c_1 \right)}{c_1} | \hat{c}_1 = 2[\hat{c}_1 t_{11}^2 + ... + \hat{c}_1 t_{n1}^2] = 2[t_{11}^2 + ... + t_{n1}^2] \hat{c}_1$$

$$= 2 \begin{bmatrix} t_{11} & \cdots & t_{n1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{11} \\ \vdots \\ t_{n1} \end{bmatrix} \hat{c}_1 = 2\mathbf{t}_1^T \mathbf{t}_1 c_1$$

Terbukti

Karena 5.1.1 dan 5.1.2 telah terbukti, maka estimator *least squares* ini harus memenuhi

$$\frac{\partial S}{\partial c_1} | \hat{c}_1 = -2\mathbf{t}_1^T \mathbf{y}_1 + 2\mathbf{t}_1^T \mathbf{t}_1 \hat{c}_1 = 0$$

$$\mathbf{t}_1^T \mathbf{y}_1 = \mathbf{t}_1^T \mathbf{t}_1 \hat{c}_1$$

$$\hat{c}_1 = \left(\mathbf{t}_1^T \mathbf{t}_1 \right)^{-1} \mathbf{t}_1^T \mathbf{y}_1$$

$$\hat{c}_1 = \frac{\mathbf{t}_1^T \mathbf{y}_1}{\mathbf{t}_1^T \mathbf{t}_1}$$

Terbukti taksiran parameter c_1 adalah $\hat{c}_1 = \frac{\mathbf{t}_1^T \mathbf{y}_1}{\mathbf{t}_1^T \mathbf{t}_1}$.

L.5.2 Pembuktian $\hat{c}_2 = \frac{\mathbf{t}_2^T \mathbf{y}_2}{\mathbf{t}_2^T \mathbf{t}_2}$

Dengan meminimumkan SSE, didefinisikan

$$S(c_2) = \sum_{i=1}^{n} f_{i2}^2$$

$$S(c_2) = \sum_{i=1}^{n} \left(y_{i(2)} - t_{i2} c_2 \right)^2$$

Persamaan ini diminimumkan terhadap c_2 untuk mendapat taksiran dari parameter regresi.

$$\frac{\partial S}{\partial c_2} \mid \hat{c}_2 = -2\sum_{i=1}^{n}\left(y_{i(2)} - t_{i2}\hat{c}_2\right)t_{i2}$$

$$\sum_{i=1}^{n} y_{i(2)}t_{i2} = \sum_{i=1}^{n} t_{i2}\hat{c}_2 t_{i2}$$

Dalam notasi matriks dapat ditulis sebagai berikut :

$$S(c_2) = \sum_{i=1}^{n} f_{i2}^{\ 2} = \mathbf{f}_2^{\ T}\mathbf{f}_2$$

$$S(c_2) = \left(\mathbf{y}_2 - \mathbf{t}_2 c_2\right)^T \left(\mathbf{y}_2 - \mathbf{t}_2 c_2\right)$$

$$S(c_2) = \mathbf{y}_2^T\mathbf{y}_2 - \mathbf{y}_2^T\mathbf{t}_2 c_2 - c_2^T\mathbf{t}_2^T\mathbf{y}_2 + c_2^T\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2 c_2$$

$$S(c_2) = \mathbf{y}_2^T\mathbf{y}_2 - 2c_2^T\mathbf{t}_2^T\mathbf{y}_2 + c_2^T\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2 c_2$$

Sehingga estimator *least squares* ini harus memenuhi

$$\frac{\partial S}{\partial c_2} \mid \hat{c}_2 = -2\mathbf{t}_2^T\mathbf{y}_2 + 2\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2\hat{c}_2 = 0$$

$$\mathbf{t}_2^T\mathbf{y}_2 = \mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2\hat{c}_2$$

$$\hat{c}_2 = \left(\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2\right)^{-1}\mathbf{t}_2^T\mathbf{y}_2$$

$$\hat{c}_2 = \frac{\mathbf{t}_2^T\mathbf{y}_2}{\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2}$$

Berikut ini akan dibuktikan $\frac{\partial S}{\partial c_2} \mid \hat{c}_2 = -2\mathbf{t}_2^T\mathbf{y}_2 + 2\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2\hat{c}_2 = 0$ sedemikian sehingga

$$\hat{c}_2 = \frac{\mathbf{t}_2^T\mathbf{y}_2}{\mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_2}$$

L.5.2.1 Pembuktian untuk $\frac{\partial\left(-2c_2^T\mathbf{t}_2^T\mathbf{y}_2\right)}{\partial c_2} \mid \hat{c}_2 = -2\mathbf{t}_2^T\mathbf{y}_2$

$$c_2^T\mathbf{t}_2^T\mathbf{y}_2 = c_{_2}^T\left[t_{12} \quad \cdots \quad t_{n2}\right]\begin{bmatrix} y_{1(2)} \\ \vdots \\ y_{n(2)} \end{bmatrix}$$

$$c_2^T\mathbf{t}_2^T\mathbf{y}_2 = [c_2 t_{12} ... c_1 t_{n2}]\begin{bmatrix} y_{1(2)} \\ \vdots \\ y_{n(2)} \end{bmatrix}$$

$$c_2^T\mathbf{t}_2^T\mathbf{y}_2 = [c_2 t_{12} y_{1(2)} + ... + c_2 t_{n2} y_{n(2)}]$$

$$\frac{\partial\left(c_2^T \mathbf{t}_2^T \mathbf{y}_2\right)}{c_2}\Big|_{\hat{c}_2} = [t_{12} y_{1(2)} + \ldots + t_{n2} y_{n(2)}] = \begin{bmatrix} t_{12} & \cdots & t_{n2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_{1(2)} \\ \vdots \\ y_{n(2)} \end{bmatrix} = \mathbf{t}_2^T \mathbf{y}_2$$

sehingga $\dfrac{\partial\left(-2c_2^T \mathbf{t}_2^T \mathbf{y}_2\right)}{\partial c_2} \mid \hat{c}_2 = -2\mathbf{t}_2^T \mathbf{y}_2$

Terbukti

L.5.2.2 Pembuktian $\dfrac{\partial\left(c_2^T \mathbf{t}_2^T \mathbf{t}_2 c_2\right)}{\partial c_2} \mid \hat{c}_2 = 2\mathbf{t}_2^T \mathbf{t}_2 \hat{c}_2$

$$c_2^T \mathbf{t}_2^T \mathbf{t}_2 c_2 = c_2^T \begin{bmatrix} t_{12} & \cdots & t_{n2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{12} \\ \vdots \\ t_{n2} \end{bmatrix} c_2$$

$$c_2^T \mathbf{t}_2^T \mathbf{t}_2 c_2 = \begin{bmatrix} c_2 t_{12} & \cdots & c_2 t_{n2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{12} c_2 \\ \vdots \\ t_{n2} c_2 \end{bmatrix}$$

$$c_2^T \mathbf{t}_2^T \mathbf{t}_2 c_2 = [c_2{}^2 t_{12}{}^2 + \ldots + c_2{}^2 t_{n2}{}^2]$$

$$\frac{\partial\left(c_2^T \mathbf{t}_2^T \mathbf{t}_2 c_2\right)}{c_2} \mid \hat{c}_2 = 2[\hat{c}_2 t_{12}{}^2 + \ldots + \hat{c}_2 t_{n2}{}^2] = 2[t_{12}{}^2 + \ldots + t_{n2}{}^2]\hat{c}_2$$

$$= 2\begin{bmatrix} t_{12} & \cdots & t_{n2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{12} \\ \vdots \\ t_{n2} \end{bmatrix} \hat{c}_2 = 2\mathbf{t}_2^T \mathbf{t}_2 \hat{c}_2$$

Terbukti

Karena 5.2.1 dan 5.2.2 telah terbukti, maka estimator *least squares* ini harus memenuhi

$$\frac{\partial S}{\partial c_2} \mid \hat{c}_2 = -2\mathbf{t}_2^T \mathbf{y}_2 + 2\mathbf{t}_2^T \mathbf{t}_2 \hat{c}_2 = 0$$

$$\mathbf{t}_2^T \mathbf{y}_2 = \mathbf{t}_2^T \mathbf{t}_2 \hat{c}_2$$

$$\hat{c}_2 = \left(\mathbf{t}_2^T \mathbf{t}_2\right)^{-1} \mathbf{t}_2^T \mathbf{y}_2$$

$$\hat{c}_2 = \frac{\mathbf{t}_2^T \mathbf{y}_2}{\mathbf{t}_2^T \mathbf{t}_2}$$

Terbukti taksiran parameter c_2 adalah $\hat{c}_2 = \frac{\mathbf{t}_2^T \mathbf{y}_2}{\mathbf{t}_2^T \mathbf{t}_2}$.

Dengan cara yang similar, maka terbukti $\hat{c}_d = \frac{\mathbf{t}_d^T \mathbf{y}_d}{\mathbf{t}_d^T \mathbf{t}_d}$ dimana d = 3,…,m-1.

Berikut ini akan dibuktikan $\hat{c}_m = \frac{\mathbf{t}_m^T \mathbf{y}_m}{\mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m}$

L.5.3 Pembuktian $\hat{c}_m = \frac{\mathbf{t}_m^T \mathbf{y}_m}{\mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m}$

Dengan meminimumkan SSE, didefinisikan

$$S(c_m) = \sum_{i=1}^{n} f_{im}{}^2$$

$$S(c_m) = \sum_{i=1}^{n} \left(y_{i(m)} - t_{im} c_m \right)^2$$

Persamaan ini diminimumkan terhadap c_m untuk mendapat taksiran dari parameter regresi.

$$\frac{\partial S}{\partial c_m} | \hat{c}_m = -2 \sum_{i=1}^{n} (y_{i(m)} - t_{im} \hat{c}_m) t_{im}$$

$$\sum_{i=1}^{n} y_{i(m)} t_{im} = \sum_{i=1}^{n} t_{im} \hat{c}_m t_{im}$$

Dalam notasi matriks dapat ditulis sebagai berikut :

$$S(c_m) = \sum_{i=1}^{n} f_{im}{}^2 = \mathbf{f}_m^T \mathbf{f}_m$$

$$S(c_m) = \left(\mathbf{y}_m - \mathbf{t}_m c_m \right)^T \left(\mathbf{y}_m - \mathbf{t}_m c_m \right)$$

$$S(c_m) = \mathbf{y}_m^T \mathbf{y}_m - \mathbf{y}_m^T \mathbf{t}_m c_m - c_m^T \mathbf{t}_m^T \mathbf{y}_m + c_m^T \mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m c_m$$

$$S(c_m) = \mathbf{y}_m^T \mathbf{y}_m - 2 c_m^T \mathbf{t}_m^T \mathbf{y}_m + c_m^T \mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m c_m$$

Sehingga estimator *least squares* ini harus memenuhi

$$\frac{\partial S}{\partial c_m} | \hat{c}_m = -2 \mathbf{t}_m^T \mathbf{y}_m + 2 \mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m \hat{c}_m = 0$$

$$\mathbf{t}_m^T \mathbf{y}_m = \mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m \hat{c}_m$$

$$\hat{c}_m = \left(\mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m \right)^{-1} \mathbf{t}_m^T \mathbf{y}_m$$

$$\hat{c}_m = \frac{\mathbf{t}_m^T \mathbf{y}_m}{\mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m}$$

Berikut ini akan dibuktikan $\frac{\partial S}{\partial c_m} | \hat{c}_m = -2\mathbf{t}_m^T \mathbf{y}_m + 2\mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m \hat{c}_m = 0$ sedemikian sehingga

$\hat{c}_m = \frac{\mathbf{t}_m^T \mathbf{y}_m}{\mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m}$

L.5.3.1 Pembuktian untuk $\frac{\partial\left(-2c_m^T \mathbf{t}_m^T \mathbf{y}_m\right)}{\partial c_m} | \hat{c}_m = -2\mathbf{t}_m^T \mathbf{y}_m$

$$c_m^T \mathbf{t}_m^T \mathbf{y}_m = c_m^T \left[t_{1m} \quad \cdots \quad t_{nm}\right] \begin{bmatrix} y_{1(m)} \\ \vdots \\ y_{n(m)} \end{bmatrix}$$

$$c_m^T \mathbf{t}_m^T \mathbf{y}_m = [c_m t_{1m} ... c_m t_{nm}] \begin{bmatrix} y_{1(m)} \\ \vdots \\ y_{n(m)} \end{bmatrix}$$

$$c_m^T \mathbf{t}_m^T \mathbf{y}_m = [c_m t_{1m} y_{1(m)} + ... + c_m t_{nm} y_{n(m)}]$$

$$\frac{\partial\left(c_m^T \mathbf{t}_m^T \mathbf{y}_m\right)}{c_m} |_{\hat{c}_m} = [t_{1m} y_{1(m)} + ... + t_{nm} y_{n(m)}] = \left[t_{1m} \quad \cdots \quad t_{nm}\right] \begin{bmatrix} y_{1(m)} \\ \vdots \\ y_{n(m)} \end{bmatrix} = \mathbf{t}_m^T \mathbf{y}_m$$

sehingga $\frac{\partial\left(-2c_m^T \mathbf{t}_m^T \mathbf{y}_m\right)}{\partial c_m} | \hat{c}_m = -2\mathbf{t}_m^T \mathbf{y}_m$

Terbukti

L.5.3.2 Pembuktian $\frac{\partial\left(c_m^T \mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m c_m\right)}{\partial c_m} | \hat{c}_m = 2\mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m c_m$

$$c_m^T \mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m c_m = c_m^T \left[t_{1m} \quad \cdots \quad t_{nm}\right] \begin{bmatrix} t_{1m} \\ \vdots \\ t_{nm} \end{bmatrix} c_m$$

$$c_m^T \mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m c_m = \left[c_m t_{1m} \quad \cdots \quad c_m t_{nm}\right] \begin{bmatrix} t_{1m} c_m \\ \vdots \\ t_{nm} c_m \end{bmatrix}$$

$$c_m^T \mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m c_m = [c_m{}^2 t_{1m}{}^2 + ... + c_m{}^2 t_{nm}{}^2]$$

$$\frac{\partial\left(c_m^T \mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m c_m\right)}{c_m} \,|\, \hat{c}_m = 2[\hat{c}_m t_{1m}{}^2 + ... + \hat{c}_m t_{nm}{}^2] = 2[t_{1m}{}^2 + ... + t_{nm}{}^2]\hat{c}_m$$

$$= 2\begin{bmatrix} t_{1m} & \cdots & t_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{1m} \\ \vdots \\ t_{nm} \end{bmatrix} \hat{c}_m = 2\mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m c_m$$

Terbukti

Karena 5.3.1 dan 5.3.2 telah terbukti, maka estimator *least squares* ini harus memenuhi

$$\frac{\partial S}{\partial c_m} \,|\, \hat{c}_m = -2\mathbf{t}_m^T \mathbf{y}_m + 2\mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m \hat{c}_m = 0$$

$$\mathbf{t}_m^T \mathbf{y}_m = \mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m \hat{c}_m$$

$$\hat{c}_m = \left(\mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m\right)^{-1} \mathbf{t}_m^T \mathbf{y}_m$$

$$\hat{c}_m = \frac{\mathbf{t}_m^T \mathbf{y}_m}{\mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m}$$

Terbukti taksiran parameter c_m adalah $\hat{c}_m = \frac{\mathbf{t}_m^T \mathbf{y}_m}{\mathbf{t}_m^T \mathbf{t}_m}$.

Dengan demikian, secara umum dapat dibuktikan $\hat{c}_j = \frac{\mathbf{t}_j^T \mathbf{y}_j}{\mathbf{t}_j^T \mathbf{t}_j}$ dimana $j = 1,\ldots,m$. Dengan meminimumkan SSE, didefinisikan

$$S(c_j) = \sum_{i=1}^{n} f_{ij}{}^2$$

$$S(c_j) = \sum_{i=1}^{n} \left(y_{i(j)} - t_{ij} c_j\right)^2$$

Persamaan ini diminimumkan terhadap c_j untuk mendapat taksiran dari parameter regresi.

$$\frac{\partial S}{\partial c_j} \,|\, \hat{c}_j = -2\sum_{i=1}^{n} \left(y_{i(j)} - t_{ij}\hat{c}_j\right) t_{ij}$$

$$\sum_{i=1}^{n} y_{i(j)} t_{ij} = \sum_{i=1}^{n} t_{ij} \hat{c}_j t_{ij}$$

Dalam notasi matriks dapat ditulis sebagai berikut :

$$S(c_j) = \sum_{i=1}^{n} f_{ij}^{2} = \mathbf{f}_j^{T}\mathbf{f}_j$$

$$S(c_j) = \left(\mathbf{y}_j - \mathbf{t}_j c_j\right)^T \left(\mathbf{y}_j - \mathbf{t}_j c_j\right)$$

$$S(c_j) = \mathbf{y}_j^T \mathbf{y}_j - \mathbf{y}_j^T \mathbf{t}_j c_j - c_j^T \mathbf{t}_j^T \mathbf{y}_j + c_j^T \mathbf{t}_j^T \mathbf{t}_j c_j$$

$$S(c_j) = \mathbf{y}_j^T \mathbf{y}_j - 2c_j^T \mathbf{t}_j^T \mathbf{y}_j + c_j^T \mathbf{t}_j^T \mathbf{t}_j c_j$$

Sehingga estimator *least squares* ini harus memenuhi

$$\frac{\partial S}{\partial c_j} \mid \hat{c}_j = -2\mathbf{t}_j^T \mathbf{y}_j + 2\mathbf{t}_j^T \mathbf{t}_j \hat{c}_j = 0$$

$$\mathbf{t}_j^T \mathbf{y}_j = \mathbf{t}_j^T \mathbf{t}_j \hat{c}_j$$

$$\hat{c}_j = \left(\mathbf{t}_j^T \mathbf{t}_j\right)^{-1} \mathbf{t}_j^T \mathbf{y}_j$$

$$\hat{c}_j = \frac{\mathbf{t}_j^T \mathbf{y}_j}{\mathbf{t}_j^T \mathbf{t}_j}$$

Berikut ini akan dibuktikan $\frac{\partial S}{\partial c_j} \mid \hat{c}_j = -2\mathbf{t}_j^T \mathbf{y}_j + 2\mathbf{t}_j^T \mathbf{t}_j \hat{c}_j = 0$ sedemikian sehingga

$$\hat{c}_j = \frac{\mathbf{t}_j^T \mathbf{y}_j}{\mathbf{t}_j^T \mathbf{t}_j}$$

Pembuktian untuk $\frac{\partial\left(-2c_j^T \mathbf{t}_j^T \mathbf{y}_j\right)}{\partial c_j} \mid \hat{c}_j = -2\mathbf{t}_j^T \mathbf{y}_j$

$$c_j^T \mathbf{t}_j^T \mathbf{y}_j = c_j^T \begin{bmatrix} t_{1j} & \cdots & t_{nj} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_{1(j)} \\ \vdots \\ y_{n(j)} \end{bmatrix}$$

$$c_j^T \mathbf{t}_j^T \mathbf{y}_j = \begin{bmatrix} c_j t_{1j} & \cdots & c_j t_{nj} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_{1(j)} \\ \vdots \\ y_{n(j)} \end{bmatrix}$$

$$c_j^T \mathbf{t}_j^T \mathbf{y}_j = [c_j t_{1j} y_{1(j)} + \ldots + c_j t_{nj} y_{n(j)}]$$

$$\frac{\partial\left(c_j^T \mathbf{t}_j^T \mathbf{y}_j\right)}{c_j} |_{\hat{c}_j} = [t_{1j} y_{1(j)} + \ldots + t_{nj} y_{n(j)}] = \begin{bmatrix} t_{1j} & \cdots & t_{nj} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_{1(j)} \\ \vdots \\ y_{n(j)} \end{bmatrix} = \mathbf{t}_j^T \mathbf{y}_j$$

sehingga $\frac{\partial\left(-2c_j^T \mathbf{t}_j^T \mathbf{y}_j\right)}{\partial c_j} \mid \hat{c}_j = -2\mathbf{t}_j^T \mathbf{y}_j$

Terbukti

Pembuktian $\frac{\partial\left(c_j^T\mathbf{t}_j^T\mathbf{t}_jc_j\right)}{\partial c_j}|\,\hat{c}_j = 2\mathbf{t}_j^T\mathbf{t}_jc_j$

$$c_j^T\mathbf{t}_j^T\mathbf{t}_jc_j = c_j^T\begin{bmatrix} t_{1j} & \cdots & t_{nj}\end{bmatrix}\begin{bmatrix} t_{1j} \\ \vdots \\ t_{nj}\end{bmatrix}c_j$$

$$c_j^T\mathbf{t}_j^T\mathbf{t}_jc_j = \begin{bmatrix} c_jt_{1j} & \cdots & c_jt_{nj}\end{bmatrix}\begin{bmatrix} t_{1j}c_j \\ \vdots \\ t_{nj}c_j\end{bmatrix}$$

$$c_j^T\mathbf{t}_j^T\mathbf{t}_jc_j = [c_j{}^2t_{1j}{}^2 + \ldots + c_j{}^2t_{nj}{}^2]$$

$$\frac{\partial\left(c_j^T\mathbf{t}_j^T\mathbf{t}_jc_j\right)}{c_j}|\,\hat{c}_j = 2[\hat{c}_jt_{1j}{}^2 + \ldots + \hat{c}_jt_{nj}{}^2] = 2[t_{1j}{}^2 + \ldots + t_{nj}{}^2]\hat{c}_j$$

$$= 2\begin{bmatrix} t_{1j} & \cdots & t_{nj}\end{bmatrix}\begin{bmatrix} t_{1j} \\ \vdots \\ t_{nj}\end{bmatrix}\hat{c}_j = 2\mathbf{t}_j^T\mathbf{t}_jc_j$$

Terbukti

$$\frac{\partial S}{\partial c_j}|\,\hat{c}_j = -2\mathbf{t}_j^T\mathbf{y}_j + 2\mathbf{t}_j^T\mathbf{t}_j\hat{c}_j = 0$$

$$\mathbf{t}_j^T\mathbf{y}_j = \mathbf{t}_j^T\mathbf{t}_j\hat{c}_j$$

$$\hat{c}_j = \left(\mathbf{t}_j^T\mathbf{t}_j\right)^{-1}\mathbf{t}_j^T\mathbf{y}_j$$

$$\hat{c}_j = \frac{\mathbf{t}_j^T\mathbf{y}_j}{\mathbf{t}_j^T\mathbf{t}_j}$$

Terbukti taksiran parameter $c_j \backslash$ adalah $\hat{c}_j = \frac{\mathbf{t}_j^T\mathbf{y}_j}{\mathbf{t}_j^T\mathbf{t}_j}$.

Karena telah terbukti $\hat{c}_j = \frac{\mathbf{t}_j^T\mathbf{y}_j}{\mathbf{t}_j^T\mathbf{t}_j}$, j = 1,…,*m*, akan dibuktikan $\hat{\mathbf{c}} = \left(\mathbf{T}^T\mathbf{T}\right)^{-1}\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}}$

Bukti :

Dengan meminimumkan SSE, didefinisikan

$$S(c_1,...,c_m) = \sum_{i=1}^{n} f_j^{\,2} = \sum_{i=1}^{n} (\tilde{y}_i - \hat{\tilde{y}}_i)^2$$

$$S(c_1,...,c_m) = \sum_{i=1}^{n} \left(\tilde{y}_i - \mathbf{t}_j \hat{\mathbf{c}}_j\right)^2$$

Dalam notasi matriks dapat ditulis sebagai berikut :

$$S(\hat{\mathbf{c}}) = \sum_{i=1}^{n} F_i^2 = \mathbf{F}^T\mathbf{F}$$

$$S(\hat{\mathbf{c}}) = \left(\tilde{\mathbf{y}} - \mathbf{T}\hat{\mathbf{c}}\right)^T \left(\tilde{\mathbf{y}} - \mathbf{T}\hat{\mathbf{c}}\right)$$

$$S(\hat{\mathbf{c}}) = \tilde{\mathbf{y}}^T\tilde{\mathbf{y}} - \tilde{\mathbf{y}}^T\mathbf{T}\hat{\mathbf{c}} - \hat{\mathbf{c}}^T\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{c}}^T\mathbf{T}^T\mathbf{T}\hat{\mathbf{c}}$$

$$S(\hat{\mathbf{c}}) = \tilde{\mathbf{y}}^T\tilde{\mathbf{y}} - 2\hat{\mathbf{c}}^T\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{c}}^T\mathbf{T}^T\mathbf{T}\hat{\mathbf{c}}$$

Sehingga estimator *least squares* ini harus memenuhi

$$\frac{\partial S}{\partial \mathbf{c}} \mid \hat{\mathbf{c}} = -2\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}} + 2\mathbf{T}^T\mathbf{T}\hat{\mathbf{c}} = 0$$

$$\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}} = \mathbf{T}^T\mathbf{T}\hat{\mathbf{c}}$$

$$\hat{\mathbf{c}} = \left(\mathbf{T}^T\mathbf{T}\right)^{-1}\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}}$$

$$\hat{\mathbf{c}} = \frac{\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}}}{\mathbf{T}^T\mathbf{T}}$$

Berikut ini akan dibuktikan $\frac{\partial S}{\partial \mathbf{c}} \mid \hat{\mathbf{c}} = -2\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}} + 2\mathbf{T}^T\mathbf{T}\hat{\mathbf{c}} = 0$ sedemikian sehingga $\hat{\mathbf{c}} = \left(\mathbf{T}^T\mathbf{T}\right)^{-1}\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}}$

Pembuktian $\frac{\partial\left(\mathbf{c}^T\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}}\right)}{\partial \mathbf{c}} \mid \hat{\mathbf{c}} = 2\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}}$

$$\mathbf{c}^T\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}} = \begin{bmatrix} c_1 & \cdots & c_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{11} & ... & t_{n1} \\ \vdots & ... & \vdots \\ t_{1m} & ... & t_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{y}_1 \\ \vdots \\ \tilde{y}_n \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{c}^T\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}} = \left[\left(c_1t_{11} + ... + c_mt_{1m}\right)...\left(c_1t_{n1} + ... + c_mt_{nm}\right)\right] \begin{bmatrix} \tilde{y}_1 \\ \vdots \\ \tilde{y}_n \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{c}^T\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}} = \left[\left(c_1t_{11} + ... + c_mt_{1m}\right)\tilde{y}_1...\left(c_1t_{n1} + ... + c_mt_{nm}\right)\tilde{y}_n\right]$$

Kemudian dengan menurunkan terhadap **c**,menjadi

$$\frac{\partial S\left(\mathbf{c}^T\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}}\right)}{\partial \mathbf{c}}|_{\hat{\mathbf{c}}}=\begin{bmatrix}\frac{\partial S\left(\mathbf{c}^T\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}}\right)}{\partial c_1}|\,\hat{c}_1\\ \vdots \\ \frac{\partial S\left(\mathbf{c}^T\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}}\right)}{\partial c_m}|\,\hat{c}_m\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}t_{11}\tilde{y}_1+\ldots+t_{n1}\tilde{y}_n\\ \vdots \\ t_{1m}\tilde{y}_1+\ldots+t_{nm}\tilde{y}_n\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}t_{11} & \cdots & t_{n1}\\ \vdots & \cdots & \vdots\\ t_{1m} & \cdots & t_{nm}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\tilde{y}_1\\ \vdots\\ \tilde{y}_n\end{bmatrix}$$

$$=\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}}$$

$$\therefore \frac{\partial S\left(-2\mathbf{c}^T\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}}\right)}{\partial \mathbf{c}}|_{\hat{\mathbf{c}}}=-2\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}}$$

Pembuktian $\frac{\partial\left(\mathbf{c}^T\mathbf{T}^T\mathbf{T}\mathbf{c}\right)}{\partial \mathbf{c}}|\,\hat{\mathbf{c}}=2\mathbf{T}^T\mathbf{T}\mathbf{c}$

$$\mathbf{c}^T\mathbf{T}^T\mathbf{T}\mathbf{c}=\begin{bmatrix}c_1 & \ldots & c_m\end{bmatrix}\begin{bmatrix}t_{11} & \ldots & t_{n1}\\ \vdots & \ldots & \vdots\\ t_{1m} & \ldots & t_{nm}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}t_{11} & \ldots & t_{1m}\\ \vdots & \ldots & \vdots\\ t_{n1} & \ldots & t_{nm}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c_1\\ \vdots\\ c_m\end{bmatrix}$$

$$\mathbf{c}^T\mathbf{T}^T\mathbf{T}\mathbf{c}=\left[\left(c_1t_{11}+\ldots+c_mt_{1m}\right)\ldots\left(c_1t_{n1}+\ldots+c_mt_{nm}\right)\right].\mathbf{T}\mathbf{c}$$

$$\mathbf{c}^T\mathbf{T}^T\mathbf{T}\mathbf{c}=\begin{bmatrix}\left\{\left(c_1t_{11}+\ldots+c_mt_{1m}\right)t_{11}+\ldots+\left(c_1t_{n1}+\ldots+c_mt_{nm}\right)t_{n1}\right\}\ldots\\ \left\{\left(c_1t_{11}+\ldots+c_mt_{1m}\right)t_{1m}+\ldots+\left(c_1t_{n1}+\ldots+c_mt_{nm}\right)t_{nm}\right\}\end{bmatrix}.\mathbf{c}$$

$$\mathbf{c}^T\mathbf{T}^T\mathbf{T}\mathbf{c}=\left[\left\{\left(c_1t_{11}+\ldots+c_mt_{1m}\right)t_{11}+\ldots+\left(c_1t_{n1}+\ldots+c_mt_{nm}\right)t_{n1}\right\}c_1\right]+\ldots+$$
$$\left[\left\{\left(c_1t_{11}+\ldots+c_mt_{1m}\right)t_{1m}+\ldots+\left(c_1t_{n1}+\ldots+c_mt_{nm}\right)t_{nm}\right\}c_m\right]$$

$$\mathbf{c}^T\mathbf{T}^T\mathbf{T}\mathbf{c} = \left[\left\{\left(c_1 t_{11}{}^2 + \ldots + c_m t_{11} t_{1m}\right) + \ldots + \left(c_1 t_{n1}{}^2 + \ldots + c_m t_{nm} t_{n1}\right)\right\} c_1\right] + \ldots +$$
$$\left[\left\{\left(c_1 t_{11} t_{1m} + \ldots + c_m t_{1m}{}^2\right) + \ldots + \left(c_1 t_{n1} t_{nm} + \ldots + c_m t_{nm}{}^2\right)\right\} c_m\right]$$
$$\mathbf{c}^T\mathbf{T}^T\mathbf{T}\mathbf{c} = \left[\left\{\left(c_1{}^2 t_{11}{}^2 + \ldots + c_1 c_m t_{11} t_{1m}\right) + \ldots + \left(c_1{}^2 t_{n1}{}^2 + \ldots + c_1 c_m t_{nm} t_{n1}\right)\right\}\right] + \ldots +$$
$$\left[\left\{\left(c_1 t_{11} t_{1m} + \ldots + c_m{}^2 t_{1m}{}^2\right) + \ldots + \left(c_1 c_m t_{n1} t_{nm} + \ldots + c_m{}^2 t_{nm}{}^2\right)\right\}\right]$$

$$\frac{\partial S\left(\mathbf{c}^T\mathbf{T}^T\mathbf{T}\mathbf{c}\right)}{\partial \mathbf{c}}\Big|_{\hat{\mathbf{c}}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial S\left(\mathbf{c}^T\mathbf{T}^T\mathbf{T}\mathbf{c}\right)}{\partial c_1}\Big|_{\hat{c}_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial S\left(\mathbf{c}^T\mathbf{T}^T\mathbf{T}\mathbf{c}\right)}{\partial c_m}\Big|_{\hat{c}_m} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2\hat{c}_1 t_{11}{}^2 + \ldots + 2\hat{c}_1 t_{n1}{}^2 + \ldots + 2\hat{c}_1 \hat{c}_m t_{11} t_{1m} + \ldots + 2\hat{c}_m t_{nm} t_{n1} \\ \vdots \\ 2\hat{c}_1 t_{11} t_{1m} + \ldots + 2\hat{c}_1 t_{nm} t_{n1} + \ldots + 2\hat{c}_m t_{1m}{}^2 + \ldots + 2\hat{c}_m t_{nm}{}^2 \end{bmatrix}$$

$$= 2\begin{bmatrix} t_{11} & \cdots & t_{n1} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{1m} & \cdots & t_{nm} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} t_{11} & \cdots & t_{1m} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{n1} & \cdots & t_{nm} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \hat{c}_1 \\ \vdots \\ \hat{c}_m \end{bmatrix}$$
$$= 2\mathbf{T}^T\mathbf{T}\mathbf{c}$$

$$\therefore \frac{\partial S\left(\mathbf{c}^T\mathbf{T}^T\mathbf{T}\mathbf{c}\right)}{\partial c_m}\Big|_{\hat{\mathbf{c}}} = 2\mathbf{T}^T\mathbf{T}\mathbf{c}$$

Sehingga estimator *least squares* ini harus memenuhi

$$\frac{\partial S}{\partial \mathbf{c}} \,|\, \hat{\mathbf{c}} = -2\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}} + 2\mathbf{T}^T\mathbf{T}\hat{\mathbf{c}} = 0$$
$$\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}} = \mathbf{T}^T\mathbf{T}\hat{\mathbf{c}}$$
$$\hat{\mathbf{c}} = \left(\mathbf{T}^T\mathbf{T}\right)^{-1}\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}}$$

Terbukti taksiran parameter $\mathbf{c}$ adalah. $\hat{\mathbf{c}} = \left(\mathbf{T}^T\mathbf{T}\right)^{-1}\mathbf{T}^T\tilde{\mathbf{y}}$

LAMPIRAN 6

Bukti $\mathbf{w}_j = \dfrac{\mathbf{X}_j^T \mathbf{y}_j}{\| \mathbf{X}_j^T \mathbf{y}_j \|}$, j = 1,…,m Mengenai Bobot PLSR

L.6.1 Pembuktian $\mathbf{w}_2 = \dfrac{\mathbf{X}_2^T \mathbf{y}_2}{\| \mathbf{X}_2^T \mathbf{y}_2 \|}$

Berdasarkan subbab 3.1.2, jika matriks $\mathbf{X}_2$ bukan matriks nol dan vektor $\mathbf{y}_2$ bukan vektor nol, maka dibutuhkan vektor komponen kedua, dimana $\mathbf{X}_2$ dan $\mathbf{y}_2$ digunakan sebagai inisiasi dalam pembentukan vektor komponen dan loading kedua.

Selanjutnya, $\mathbf{X}_2$ dan $\mathbf{y}_2$ dapat ditulis sebagai

$$\begin{aligned}\mathbf{X}_2 &= \mathbf{X}_1 - \tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 \\ &= \begin{bmatrix} \tilde{x}_{11} - \tilde{\tilde{x}}_{11} & \cdots & \tilde{x}_{1k} - \tilde{\tilde{x}}_{1k} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{x}_{n1} - \tilde{\tilde{x}}_{n1} & \cdots & \tilde{x}_{1k} - \tilde{\tilde{x}}_{1k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{11(2)} & \cdots & x_{1k(2)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n1(2)} & \cdots & x_{nk(2)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_{1(2)} & \cdots & \mathbf{x}_{k(2)} \end{bmatrix}\end{aligned}$$

dan

$$\begin{aligned}\mathbf{y}_2 &= \mathbf{y}_1 - \hat{\mathbf{y}}_1 \\ &= \begin{bmatrix} \tilde{y}_1 - t_{11}\hat{c}_1 \\ \vdots \\ \tilde{y}_n - t_{n1}\hat{c}_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_{1(2)} \\ \vdots \\ y_{n(2)} \end{bmatrix}\end{aligned}$$

misal $\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 = \begin{bmatrix} t_{11}p_{11} & \cdots & t_{11}p_{k1} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{n1}p_{11} & \cdots & t_{n1}p_{k1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{x}}_{11(1)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{1k(1)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{\tilde{x}}_{n1(1)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{nk(1)} \end{bmatrix}$ dan $\hat{\mathbf{y}}_1 = \begin{bmatrix} t_{11}\hat{c}_1 \\ \vdots \\ t_{n1}\hat{c}_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{y}_{1(1)} \\ \vdots \\ \hat{y}_{n(1)} \end{bmatrix}$

$\mathbf{X}_2$ dan $\mathbf{y}_2$ merupakan residual yang terbentuk dari hasil pembentukan $\mathbf{t}_1$ yang digunakan untuk membentuk $\mathbf{t}_2$.

$\mathbf{t}_2$ dibentuk dengan memperhatikan kovariansi setiap prediktor pada $\mathbf{X}_2$ dengan respon $\mathbf{y}_2$

$$\mathbf{w}_2 = \frac{\sum_{l=1}^{k} \operatorname{cov}\left(x_{l(2)}, y_{(2)}\right)}{\sqrt{\sum_{l=1}^{k} \operatorname{cov}\left(x_{l(2)}, y_{(2)}\right)^2}} = \frac{\sum_{l=1}^{k} \left(\frac{\sum_{i=1}^{n} \left(\tilde{x}_{il} - \tilde{\tilde{x}}_{il(1)} \right)\left(\tilde{y}_i - \hat{y}_{i(1)} \right)}{n-1} \right)}{\sqrt{\sum_{l=1}^{k} \left(\frac{\sum_{i=1}^{n} \left(\tilde{x}_{il} - \tilde{\tilde{x}}_{il(1)} \right)\left(\tilde{y}_i - \hat{y}_{i(1)} \right)}{n-1} \right)^2}}$$

$$= \frac{\frac{1}{n-1} \sum_{l=1}^{k} \sum_{i=1}^{n} \left(\tilde{x}_{il} - \tilde{\tilde{x}}_{il(1)} \right)\left(\tilde{y}_i - \hat{y}_{i(1)} \right)}{\frac{1}{n-1} \sqrt{\sum_{l=1}^{k} \left(\sum_{i=1}^{n} \left(\tilde{x}_{il} - \tilde{\tilde{x}}_{il(1)} \right)\left(\tilde{y}_i - \hat{y}_{i(1)} \right) \right)^2}}$$

$$= \frac{\sum_{l=1}^{k} \sum_{i=1}^{n} \left(\tilde{x}_{il} - \tilde{\tilde{x}}_{il(1)} \right)\left(\tilde{y}_i - \hat{y}_{i(1)} \right)}{\sqrt{\sum_{l=1}^{k} \left(\sum_{i=1}^{n} \left(\tilde{x}_{il} - \tilde{\tilde{x}}_{il(1)} \right)\left(\tilde{y}_i - \hat{y}_{i(1)} \right) \right)^2}}$$

$$= \frac{\left(\sum_{i=1}^{n} \left(\tilde{x}_{i1}\tilde{y}_i - \tilde{x}_{i1}\hat{y}_{i(1)} - \tilde{\tilde{x}}_{i1(1)}\tilde{y}_i + \tilde{\tilde{x}}_{i1(1)}\hat{y}_{i(1)} \right) \right) + \ldots + \left(\sum_{i=1}^{n} \left(\tilde{x}_{i1}\tilde{y}_i - \tilde{x}_{i1}\hat{y}_{i(1)} - \tilde{\tilde{x}}_{i1(1)}\tilde{y}_i + \tilde{\tilde{x}}_{ik(1}\hat{y}_{i(1)} \right) \right)}{\sqrt{\left(\sum_{i=1}^{n} \left(\tilde{x}_{i1}\tilde{y}_i - \tilde{x}_{i1}\hat{y}_{i(1)} - \tilde{\tilde{x}}_{i1(1)}\tilde{y}_i + \tilde{\tilde{x}}_{i1(1)}\hat{y}_{i(1)} \right) \right)^2 + \ldots + \left(\sum_{i=1}^{n} \left(\tilde{x}_{i1}\tilde{y}_i - \tilde{x}_{i1}\hat{y}_{i(1)} - \tilde{\tilde{x}}_{i1(1)}\tilde{y}_i + \tilde{\tilde{x}}_{ik(1}\hat{y}_{i(1)} \right) \right)^2}}$$

$$= \frac{\left(\tilde{\mathbf{x}}_1^T\tilde{\mathbf{y}} - \tilde{\mathbf{x}}_1^T\hat{\mathbf{y}}_1 - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{1(1)}^T\tilde{\mathbf{y}} + \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{1(1)}\hat{\mathbf{y}}_1 \right) + \ldots + \left(\tilde{\mathbf{x}}_k^T\tilde{\mathbf{y}} - \tilde{\mathbf{x}}_k^T\hat{\mathbf{y}}_1 - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{k(1)}^T\tilde{\mathbf{y}} + \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{k(1)}\hat{\mathbf{y}}_1 \right)}{\sqrt{\left(\tilde{\mathbf{x}}_1^T\tilde{\mathbf{y}} - \tilde{\mathbf{x}}_1^T\hat{\mathbf{y}}_1 - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{1(1)}^T\tilde{\mathbf{y}} + \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{1(1)}\hat{\mathbf{y}}_1 \right)^2 + \ldots + \left(\tilde{\mathbf{x}}_k^T\tilde{\mathbf{y}} - \tilde{\mathbf{x}}_k^T\hat{\mathbf{y}}_1 - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{k(1)}^T\tilde{\mathbf{y}} + \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{k(1)}\hat{\mathbf{y}}_1 \right)^2}}$$

$$= \frac{\mathbf{x}_{1(2)}^T\mathbf{y}_2 + \ldots \mathbf{x}_{k(2)}^T\mathbf{y}_2}{\sqrt{\left(\mathbf{x}_{1(2)}^T\mathbf{y}_2 \right)^2 + \ldots + \left(\mathbf{x}_{k(2)}^T\mathbf{y}_2 \right)^2}}$$

$$= \frac{\mathbf{X}_2^T\mathbf{y}_2}{\| \mathbf{X}_2^T\mathbf{y}_2 \|}$$

$$\mathbf{w}_2 = \frac{\mathbf{X}_2^T\mathbf{y}_2}{\| \mathbf{X}_2^T\mathbf{y}_2 \|}$$

Terbukti

Dengan cara yang sama, akan terbukti pula $\mathbf{w}_d = \frac{\mathbf{X}_d^T\mathbf{y}_d}{\| \mathbf{X}_d^T\mathbf{y}_d \|}$, d = 3,…,m-1

Berikut ini akan dibuktikan $\mathbf{w}_m = \frac{\mathbf{X}_m^T\mathbf{y}_m}{\| \mathbf{X}_m^T\mathbf{y}_m \|}$

L.6.2 Pembuktian $\mathbf{w}_m = \dfrac{\mathbf{X}_m^T \mathbf{y}_m}{\| \mathbf{X}_m^T \mathbf{y}_m \|}$

Berdasarkan subbab 3.2.2, jika matriks $\mathbf{X}_m$ bukan matriks nol dan vektor $\mathbf{y}_m$ bukan vektor nol, maka dibutuhkan vektor komponen ke-*m*, dimana $\mathbf{X}_m$ dan $\mathbf{y}_m$ digunakan sebagai inisiasi dalam pembentukan vektor komponen dan loading ke-*m*.

Selanjutnya, $\mathbf{X}_m$ dan $\mathbf{y}_m$ dapat diuraikan menjadi

$$\mathbf{X}_m = \begin{bmatrix} \tilde{x}_{11} - \ldots - t_{1(m-1)} p_{1(m-1)} & \cdots & \tilde{x}_{1k} - \ldots - t_{1(m-1)} p_{k(m-1)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{x}_{n1} - \ldots - t_{n(m-1)} p_{1(m-1)} & \cdots & \tilde{x}_{nk} - \ldots - t_{n(m-1)} p_{k(m-1)} \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{y}_m = \mathbf{y}_{m-1} - \hat{\mathbf{y}}_{m-1}$$

$$\mathbf{y}_m = \mathbf{y}_{m-1} - \mathbf{t}_{m-1}\hat{c}_{m-1}$$

$$= \begin{bmatrix} y_{1(m-1)} - t_{1(m-1)}\hat{c}_{m-1} \\ \vdots \\ y_{n(m-1)} - t_{n(m-1)}\hat{c}_{m-1} \end{bmatrix}$$

misal

$$\mathbf{X}_m = \begin{bmatrix} \tilde{x}_{11} - \ldots - t_{1(m-1)} p_{1(m-1)} & \cdots & \tilde{x}_{1k} - \ldots - t_{1(m-1)} p_{k(m-1)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{x}_{n1} - \ldots - t_{n(m-1)} p_{1(m-1)} & \cdots & \tilde{x}_{nk} - \ldots - t_{n(m-1)} p_{k(m-1)} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} x_{11(m)} & \cdots & x_{1k(m)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n1(m)} & \cdots & x_{nk(m)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_{1(m)} & \cdots & \mathbf{x}_{k(m)} \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{y}_m = \begin{bmatrix} y_{1(m-1)} - t_{1(m-1)}\hat{c}_{m-1} \\ \vdots \\ y_{n(m-1)} - t_{n(m-1)}\hat{c}_{m-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_{1(m)} \\ \vdots \\ y_{n(m)} \end{bmatrix},$$

$$\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_{m-1} = \begin{bmatrix} t_{1(m-1)} p_{1(m-1)} & \cdots & t_{1(m-1)} p_{k(m-1)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ t_{n(m-1)} p_{1(m-1)} & \cdots & t_{n(m-1)} p_{k(m-1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{x}}_{11(m-1)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{1k(m-1)} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \tilde{\tilde{x}}_{n1(m-1)} & \cdots & \tilde{\tilde{x}}_{nk(m-1)} \end{bmatrix}$$

dan

$$\hat{\mathbf{y}}_{m-1} = \begin{bmatrix} t_{1(m-1)}\hat{c}_{m-1} \\ \vdots \\ t_{n(m-1)}\hat{c}_{m-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{y}_{1(m-1)} \\ \vdots \\ \hat{y}_{n(m-1)} \end{bmatrix}$$

$\mathbf{t}_m$ dibentuk dengan memperhatikan kovariansi sampel setiap variabel prediktor pada $\mathbf{X}_m$ dengan respon $\mathbf{y}_m$

$$\mathbf{w}_m = \frac{\sum_{l=1}^{k} \operatorname{cov}\left(x_{l(m)}, y_{(m)}\right)}{\sqrt{\sum_{l=1}^{k} \operatorname{cov}\left(x_{l(m)}, y_{(m)}\right)^2}}$$

$$= \frac{\sum_{l=1}^{k}\left(\frac{\sum_{i=1}^{n}\left(\tilde{x}_{il} - \ldots - \tilde{\tilde{x}}_{il(m-1)}\right)\left(\tilde{y}_i - \ldots - \hat{y}_{i(m-1)}\right)}{n-1}\right)}{\sqrt{\sum_{l=1}^{k}\left(\frac{\sum_{i=1}^{n}\left(\tilde{x}_{il} - \ldots - \tilde{\tilde{x}}_{il(m-1)}\right)\left(\tilde{y}_i - \ldots - \hat{y}_{i(m-1)}\right)}{n-1}\right)^2}}$$

$$= \frac{\frac{1}{n-1}\sum_{l=1}^{k}\sum_{i=1}^{n}\left(\tilde{x}_{il} - \ldots - \tilde{\tilde{x}}_{il(m-1)}\right)\left(\tilde{y}_i - \ldots - \hat{y}_{i(m-1)}\right)}{\frac{1}{n-1}\sqrt{\sum_{l=1}^{k}\left(\sum_{i=1}^{n}\left(\tilde{x}_{il} - \ldots - \tilde{\tilde{x}}_{il(m-1)}\right)\left(\tilde{y}_i - \ldots - \hat{y}_{i(m-1)}\right)\right)^2}}$$

$$= \frac{\sum_{l=1}^{k}\sum_{i=1}^{n}\left(\tilde{x}_{il} - \ldots - \tilde{\tilde{x}}_{il(m-1)}\right)\left(\tilde{y}_i - \ldots - \hat{y}_{i(m-1)}\right)}{\sqrt{\sum_{l=1}^{k}\left(\sum_{i=1}^{n}\left(\tilde{x}_{il} - \ldots - \tilde{\tilde{x}}_{il(m-1)}\right)\left(\tilde{y}_i - \ldots - \hat{y}_{i(m-1)}\right)\right)^2}}$$

$$= \frac{\left(\sum_{i=1}^{n}\left(\tilde{x}_{i1}\tilde{y}_i - \ldots - \tilde{x}_{i1}\hat{y}_{i(m-1)} - \ldots - \tilde{\tilde{x}}_{i1(m-1)}\tilde{y}_i + \ldots + \tilde{\tilde{x}}_{i1(m-1)}\hat{y}_{i(m-1)}\right)\right) + \ldots + \left(\sum_{i=1}^{n}\left(\tilde{x}_{i1}\tilde{y}_i - \ldots - \tilde{x}_{i1}\hat{y}_{i(m-1)} - \ldots - \tilde{\tilde{x}}_{i1(m-1)}\tilde{y}_i + .. + \tilde{\tilde{x}}_{ik(m-1)}\hat{y}_{i(m-1)}\right)\right)}{\sqrt{\left(\sum_{i=1}^{n}\left(\tilde{x}_{i1}\tilde{y}_i - \ldots - \tilde{x}_{i1}\hat{y}_{i(m-1)} - \ldots - \tilde{\tilde{x}}_{i1(m-1)}\tilde{y}_i + \ldots + \tilde{\tilde{x}}_{i1(m-1)}\hat{y}_{i(m-1)}\right)\right)^2 + \ldots + \left(\sum_{i=1}^{n}\left(\tilde{x}_{i1}\tilde{y}_i - \ldots - \tilde{x}_{i1}\hat{y}_{i(m-1)} - \ldots - \tilde{\tilde{x}}_{i1(m-1)}\tilde{y}_i + .. + \tilde{\tilde{x}}_{ik(m-1)}\hat{y}_{i(m-1)}\right)\right)^2}}$$

$$= \frac{\left(\tilde{\mathbf{x}}_1^T\tilde{\mathbf{y}} - \ldots - \tilde{\mathbf{x}}_1^T\hat{\mathbf{y}}_{m-1} - \ldots - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{1(m-1)}^T\tilde{\mathbf{y}} + \ldots + \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{1(m-1)}\hat{\mathbf{y}}_{m-1}\right) + \ldots + \left(\tilde{\mathbf{x}}_k^T\tilde{\mathbf{y}} - \ldots - \tilde{\mathbf{x}}_k^T\hat{\mathbf{y}}_{m-1} - \ldots - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{k(m-1)}^T\tilde{\mathbf{y}} + \ldots + \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{k(m-1)}\hat{\mathbf{y}}_{m-1}\right)}{\sqrt{\left(\tilde{\mathbf{x}}_1^T\tilde{\mathbf{y}} - \ldots - \tilde{\mathbf{x}}_1^T\hat{\mathbf{y}}_{m-1} - \ldots - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{1(m-1)}^T\tilde{\mathbf{y}} + \ldots + \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{1(m-1)}\hat{\mathbf{y}}_{m-1}\right)^2 + \ldots + \left(\tilde{\mathbf{x}}_k^T\tilde{\mathbf{y}} - \ldots - \tilde{\mathbf{x}}_k^T\hat{\mathbf{y}}_{m-1} - \ldots - \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{k(m-1)}^T\tilde{\mathbf{y}} + \ldots + \tilde{\tilde{\mathbf{x}}}_{k(m-1)}\hat{\mathbf{y}}_{m-1}\right)^2}}$$

$$= \frac{\mathbf{x}_{1(m)}^T\mathbf{y}_m + \ldots + \mathbf{x}_{k(m)}^T\mathbf{y}_m}{\sqrt{\left(\mathbf{x}_{1(m)}^T\mathbf{y}_m\right)^2 + \ldots + \left(\mathbf{x}_{k(m)}^T\mathbf{y}_m\right)^2}}$$

$$= \frac{\mathbf{X}_m^T\mathbf{y}_m}{\|\mathbf{X}_m^T\mathbf{y}_m\|}$$

Jadi dengan terbuktinya $\mathbf{w}_1 = \frac{\mathbf{X}_1^T\mathbf{y}_1}{\|\mathbf{X}_1^T\mathbf{y}_1\|}$ (ada pada bab 3.2), $\mathbf{w}_2 = \frac{\mathbf{X}_2^T\mathbf{y}_2}{\|\mathbf{X}_2^T\mathbf{y}_2\|}$

dan $\mathbf{w}_m = \frac{\mathbf{X}_m^T\mathbf{y}_m}{\|\mathbf{X}_m^T\mathbf{y}_m\|}$, maka dapat disimpulkan dan terbukti

$$\mathbf{w}_j = \frac{\mathbf{X}_j^T\mathbf{y}_j}{\|\mathbf{X}_j^T\mathbf{y}_j\|}, \; j = 1,\ldots,m$$

LAMPIRAN 7

Diagram Alir Algoritma NIPALS

Secara garis besar algoritma NIPALS pada setiap iterasi atau transformasinya akan menghasilkan diagram alir sebagai berikut :

Pada awalnya prediktor yang dimiki adalah $\tilde{\mathbf{X}}$ (**X** *mean centered*)

$\tilde{\mathbf{X}}$ nya bermasalah sehingga ditransformasi menjadi suatu kombinasi linier dari komponen $\tilde{X}=TP^T$

$\downarrow$

PLS (NIPALS)

$\downarrow$

Transformasi 1 : $\tilde{\mathbf{X}}$ diubah menjadi $\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_1 = \mathbf{t}_1\mathbf{p}_1^T$ yang berarti $\tilde{\mathbf{X}}$ diperankan atau dijelaskan oleh vektor komponen pertama $\mathbf{t}_1$

$\downarrow$

Transformasi 2 : $\tilde{\mathbf{X}}$ diubah menjadi $\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_2 = \mathbf{t}_2\mathbf{p}_2^T$ yang berarti $\tilde{\mathbf{X}}$ diperankan atau dijelaskan oleh vektor komponen pertama $\mathbf{t}_1$ dan vektor komponen kedua $\mathbf{t}_2$

$\downarrow$

$\vdots$

$\downarrow$

Transformasi m : $\tilde{\mathbf{X}}$ diubah menjadi $\tilde{\tilde{\mathbf{X}}}_m = \mathbf{t}_m\mathbf{p}_m^T$ yang berarti $\tilde{\mathbf{X}}$ diperankan atau dijelaskan oleh vektor komponen pertama $\mathbf{t}_1$ hinggaa vektor komponen ke-*m* $\mathbf{t}_m$

Begitu pula dengan $\mathbf{y}$, pada awalnya variabel respon yang dimiliki adalah $\tilde{\mathbf{y}}$ (**y** *mean centered*).

Hasil dari transformasi 1 : $\tilde{\mathbf{y}}$ ditaksir dengan $\hat{\mathbf{y}}_1 = \mathbf{t}_1\hat{\mathbf{c}}_1$ yang berarti $\tilde{\mathbf{y}}$ juga diperankan oleh vektor komponen pertama $\mathbf{t}_1$

$$\downarrow$$

Hasil dari transformasi 2 : $\tilde{\mathbf{y}}$ ditaksir dengan $\hat{\mathbf{y}}_2 = \mathbf{t}_2\hat{\mathbf{c}}_2$ yang berarti $\tilde{\mathbf{y}}$ juga diperankan oleh vektor komponen pertama $\mathbf{t}_1$ dan vektor komponen kedua $\mathbf{t}_2$

$$\downarrow$$

$$\vdots$$

$$\downarrow$$

Hasil dari transformasi m : $\tilde{\mathbf{y}}$ ditaksir dengan $\hat{\mathbf{y}}_m = \mathbf{t}_m\hat{\mathbf{c}}_m$ yang berarti $\tilde{\mathbf{y}}$ juga diperankan oleh vektor komponen pertama $\mathbf{t}_1$ hingga vektor komponen ke-m $\mathbf{t}_m$

LAMPIRAN 8

Efek Multikolinieritas dan Jumlah Variabel Prediktor yang melebihi Jumlah Observasi

L.8.1 Efek multikolinieritas

Misalkan terdapat dua variabel prediktor X_1 dan X_2 dengan model

$$\mathbf{y} = \beta_1 \mathbf{x}_1 + \beta_2 \mathbf{x}_2 + \boldsymbol{\varepsilon}$$

apabila **X** dijadikan bentuk *unit length scale* misal **Z**, dimana

$$z_{il} = \frac{x_{il} - \bar{x}_l}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n} \left(x_{il} - \bar{x}_l \right)^2}}, \ l = 1, 2$$

maka $\mathbf{Z}^T\mathbf{Z}$ akan membentuk matriks korelasi dimana elemen-elemen yang berada selain pada diagonal utama merupakan koefisien korelasi (r_{lq}) antara variabel prediktor ke-l dan ke-q. Kemudian, misalkan $\mathbf{C} = \left(\mathbf{Z}^T\mathbf{Z}\right)^{-1}$, dimana

$$C_{ll} = \frac{1}{1 - r_{lq}^2} \text{ dan } C_{lq} = \frac{-r_{lq}}{1 - r_{lq}^2}, \ q = 1,2, \ l = 1,2$$

maka berdasarkan subbab 2.7.2 mengenai sifat-sifat penaksir *least squares*, variansi dari $\hat{\beta}_l$ adalah $C_{ll}\sigma^2$ dan kovariansi antara $\hat{\beta}_l, \hat{\beta}_q$ adalah $C_{lq}\sigma^2$. Apabila $|r_{lq}| \rightarrow 1$ (korelasi tinggi), maka var ($\hat{\beta}_l$)= $C_{ll}\sigma^2 \rightarrow \infty$ dan $\text{cov}\left(\hat{\beta}_l, \hat{\beta}_q\right) = C_{lq}\sigma^2 \rightarrow \pm\infty$ tergantung dari nilai $r_{lq} = 1$ atau $r_{lq} = -1$.

Saat terdapat lebih dari dua variabel prediktor, elemen diagonal pada **C** adalah

$$C_{ll} = \frac{1}{1 - R_l^2}, \ l = 1, \ldots, k .$$

dimana R_l^2 adalah proporsi variansi pada variabel prediktor ke-l yang berhubungan dengan variabel-variabel prediktor lainnya(O'brien, 2007). Jika terjadi korelasi yang kuat, R_l^2 akan mendekati satu. Karena $\text{var}\left(\hat{\beta}_l\right) = C_{ll}\sigma^2 = \frac{\sigma^2}{1-R_l^2}$, maka korelasi yang kuat menjelaskan bahwa variansi pada penaksir least squares pada parameter regresi β_l sangat besar. Begitu pula dengan kovariansi pada $\hat{\beta}_l, \hat{\beta}_q$, korelasi yang kuat juga menyebabkan kovariansinya besar.

Semakin besar nilai dari variansi $\hat{\beta}_l$, hasil pengujian parsial untuk parameter regresi menjadi tidak signifikan. Pengujian ini dapat dilakukan dengan pengujian hipotesis sebagai berikut (Montgomery, *et al.*, 2001)

$$H_0 : \beta_l = 0$$

$$H_1 : \beta_l \neq 0$$

dengan statistik uji

$$t_0 = \frac{\hat{\beta}_l}{se\left(\hat{\beta}_l\right)} = \frac{\hat{\beta}_l}{\sqrt{C_{ll}\hat{\sigma}^2}}$$

Bentuk σ^2 tidak diketahui nilai sebenarnya, sehingga σ^2 akan ditaksir melalui SS_{Res} (*Sum of Squares Residual*) yaitu

$$\begin{aligned} SS_{\text{Res}} &= \sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \hat{y}_i\right)^2 \\ &= \sum_{i=1}^{n} e_i^2 \\ &= \mathbf{e}'\mathbf{e} \end{aligned}$$

Substitusi $\mathbf{e} = \mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}$, sehingga

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

Karena $\mathbf{X}^T\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{X}^T\mathbf{y}$, maka $SS_{\text{Res}} = \mathbf{y}^T\mathbf{y} - \hat{\boldsymbol{\beta}}^T\mathbf{X}^T\mathbf{y}$

SS_{Res} mempunyai *n-k* derajat kebebasan karena terdapat *k* parameter yang diestimasi di dalam model regresi sehingga

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{SSres}{n-p} = \frac{\mathbf{y}^T\mathbf{y} - \hat{\boldsymbol{\beta}}^T\mathbf{X}^T\mathbf{y}}{n-p}$$

Jadi, $\hat{\sigma}^2$ merupakan penaksir *unbiased* untuk σ^2.

Aturan keputusan pada statistik uji tersebut yaitu H_0 ditolak jika $|t_0| >$ $t_{\alpha/_1, n, n-k-1}$ (tabel t) namun, apabila nilai dari variansi $\hat{\beta}_l$ besar bahkan hingga menuju tak hingga, nilai dari t_0 akan cenderung kecil sehingga dapat terjadi kondisi $|t_0| < t_{\alpha/_1, n, n-k-1}$ yang berarti H_0 tidak ditolak. Penolakan H_0 tersebut dapat disimpulkan variabel prediktor X_l tidak berkontribusi dalam model. Akan tetapi, misalkan variabel prediktor X_l tersebut dalam keadaan yang sebenarnya diketahui berperan penting dan berkontribusi dalam menjelaskan model, sehingga variabel prediktor tersebut tidak dapat dieliminasi dari model meskipun hasil pengujian parsial parameter regresi tidak signifikan karena nilai $|t_0| < t_{\alpha/_1, n, n-k-1}$, maka untuk mengatasi masalah tersebut dibutuhkan metode lain salah satunya *Partial Least Squares Regression* yang dijelaskan pada bab 3.

Multikolinieritas juga menyebabkan terjadinya kesalahan tipe II (probabilitas tidak menolak H_0 saat H_0 salah) akan meningkat. Hal tersebut dapat dilihat dari nilai t_0 nya, semakin besar korelasi antar variabel prediktor, standar error parameter regresi akan semakin besar dan t_0 akan semakin kecil sehingga kemungkinan kondisi H_0 tidak ditolak semakin besar dan semakin tidak signifikan karena kondisi yang diinginkan adalah menolak hipotesis yang salah.

Kemudian, saat $|r_{lq}| = 1$ (korelasi sempurna), $\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}$ (dalam hal ini $\left(\mathbf{Z}^T\mathbf{Z}\right)^{-1}$ tidak ada, maka $\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)$ singular atau $\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)$ matriks yang tidak *full rank*. Akan dibuktikan bahwa **X** juga matriks *full rank.*

Bukti :

X adalah matriks berukuran *n* x *k*,

karena $\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)$ *full rank*, maka berdsarkan subbab 2.1.3 mengenai *rank* matriks, *rank* $\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right) = min(k,k) = k.$

Misalkan **X** bukan matriks *full rank*, berarti *rank* (**X**) $\neq$ *min* (*n*,*k*).

Dengan kondisi tersebut, maka $\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)$ bukan matriks yang *full rank*.

Hal tersebut kontradiksi dengan yang diketahui bahwa $\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)$ adalah matriks yang *full rank*. Dengan demikian **X** adalah matriks *full rank*.

Untuk mengetahui lebih jelas bagaimana hubungan antara korelasi sempurna dengan **X** matriks yang tidak *full rank* (terdapat kombinasi linier), akan diberikan contoh berikut. Misalkan data menunjukkan bahwa terdapat kombinasi linier antara X_1 dengan X_2 yaitu $X_1 = 2X_2$, dimana X_1 dan X_2 dijadikan bentuk *unit length scale* Z_1 , Z_2 dan $y*$ yaitu

$$z_{i1} = \frac{\sum_{i=1}^{n}\left(x_{i1}-\overline{x}_1\right)^2}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(x_{i1}-\overline{x}_1\right)^2}},\; z_{i2} = \frac{\sum_{i=1}^{n}\left(2x_{i1}-2\overline{x}_1\right)^2}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(2x_{i2}-2\overline{x}_1\right)^2}} \text{ dan } y* = \frac{\sum_{i=1}^{n}\left(y_i-\overline{y}\right)^2}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(y_i-\overline{y}\right)^2}}$$

Telah dijelaskan sebelumnya, $\mathbf{Z}^T\mathbf{Z}$ merupakan matriks korelasi dan dapat ditulis

$$\mathbf{Z}^T\mathbf{Z} = \begin{bmatrix} \dfrac{\sum_{i=1}^{n}\left(x_{i1}-\overline{x}_1\right)^2}{\sum_{i=1}^{n}\left(x_{i1}-\overline{x}_1\right)^2} & \dfrac{\sum_{i=1}^{n}\left(x_{i1}-\overline{x}_1\right)\left(2x_{i1}-2\overline{x}_1\right)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(x_{i1}-\overline{x}_1\right)^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(2x_{i1}-2\overline{x}_1\right)^2}} \\ \dfrac{\sum_{i=1}^{n}\left(x_{i1}-\overline{x}_1\right)\left(2x_{i1}-2\overline{x}_1\right)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(x_{i1}-\overline{x}_1\right)^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(2x_{i1}-2\overline{x}_1\right)^2}} & \dfrac{\sum_{i=1}^{n}\left(2x_{i1}-2\overline{x}_1\right)^2}{\sum_{i=1}^{n}\left(2x_{i1}-2\overline{x}_1\right)^2} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} \\ r_{12} & r_{22} \end{bmatrix} = R$$

dan akan diperoleh juga

$$\mathbf{Z}^T\mathbf{y*} = \begin{bmatrix} \dfrac{\sum_{i=1}^{n}\left(x_{i1}-\overline{x}_1\right)\left(y_i-\overline{y}\right)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(x_{i1}-\overline{x}_1\right)^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(y_i-\overline{y}\right)^2}} \\ \dfrac{\sum_{i=1}^{n}\left(2x_{i1}-2\overline{x}_1\right)\left(y_i-\overline{y}\right)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(2x_{i1}-2\overline{x}_1\right)^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(y_i-\overline{y}\right)^2}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_{1y} \\ r_{2y} \end{bmatrix}$$

Seandainya digunakan metode OLS, maka taksiran dari parameter regresinya adalah

$$\hat{\mathbf{b}} = \left(\mathbf{Z}^T\mathbf{Z}\right)^{-1}\mathbf{Z}^T\mathbf{y}^*$$

$$\begin{bmatrix}\hat{b}_1\\ \hat{b}_2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \dfrac{1}{1-\left(\dfrac{\sum_{i=1}^{n}(x_{i1}-\bar{x}_1)(2x_{i1}-2\bar{x}_1)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_{i1}-\bar{x}_1)^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(2x_{i1}-2\bar{x}_1)^2}}\right)^2} & \dfrac{-\left(\dfrac{\sum_{i=1}^{n}(x_{i1}-\bar{x}_1)(2x_{i1}-2\bar{x}_1)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_{i1}-\bar{x}_1)^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(2x_{i1}-2\bar{x}_1)^2}}\right)}{1-\left(\dfrac{\sum_{i=1}^{n}(x_{i1}-\bar{x}_1)(2x_{i1}-2\bar{x}_1)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_{i1}-\bar{x}_1)^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(2x_{i1}-2\bar{x}_1)^2}}\right)^2} \\ \dfrac{-\left(\dfrac{\sum_{i=1}^{n}(x_{i1}-\bar{x}_1)(2x_{i1}-2\bar{x}_1)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_{i1}-\bar{x}_1)^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(2x_{i1}-2\bar{x}_1)^2}}\right)}{1-\left(\dfrac{\sum_{i=1}^{n}(x_{i1}-\bar{x}_1)(2x_{i1}-2\bar{x}_1)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_{i1}-\bar{x}_1)^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(2x_{i1}-2\bar{x}_1)^2}}\right)^2} & \dfrac{1}{1-\left(\dfrac{\sum_{i=1}^{n}(x_{i1}-\bar{x}_1)(2x_{i1}-2\bar{x}_1)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_{i1}-\bar{x}_1)^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(2x_{i1}-2\bar{x}_1)^2}}\right)^2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dfrac{\sum_{i=1}^{n}(x_{i1}-\bar{x}_1)(y_i-\bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_{i1}-\bar{x}_1)^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y})^2}} \\ \dfrac{\sum_{i=1}^{n}(2x_{i1}-2\bar{x}_1)(y_i-\bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(2x_{i1}-2\bar{x}_1)^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y})^2}} \end{bmatrix}$$

sehingga diperoleh

$$\hat{b}_1 = \frac{\dfrac{\sum_{i=1}^{n}(x_{i1}-\bar{x}_1)(y_i-\bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_{i1}-\bar{x}_1)^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y})^2}} - \dfrac{\sum_{i=1}^{n}(x_{i1}-\bar{x}_1)(2x_{i1}-2\bar{x}_1)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_{i1}-\bar{x}_1)^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(2x_{i1}-2\bar{x}_1)^2}}\,\dfrac{\sum_{i=1}^{n}(2x_{i1}-2\bar{x}_1)(y_i-\bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(2x_{i1}-2\bar{x}_1)^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y})^2}}}{1-\left(\dfrac{\sum_{i=1}^{n}(x_{i1}-\bar{x}_1)(2x_{i1}-2\bar{x}_1)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_{i1}-\bar{x}_1)^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(2x_{i1}-2\bar{x}_1)^2}}\right)^2}$$

$$= \frac{r_{1y} - r_{12}r_{2y}}{1 - r_{12}{}^2}$$

$$\hat{b}_2 = \frac{\dfrac{\sum_{i=1}^{n}(2x_{i1}-2\bar{x}_1)(y_i-\bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(2x_{i1}-2\bar{x}_1)^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y})^2}} - \dfrac{\sum_{i=1}^{n}(x_{i1}-\bar{x}_1)(2x_{i1}-2\bar{x}_1)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_{i1}-\bar{x}_1)^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(2x_{i1}-2\bar{x}_1)^2}}\,\dfrac{\sum_{i=1}^{n}(x_{i1}-\bar{x}_1)(y_i-\bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_{i1}-\bar{x}_1)^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y})^2}}}{1-\left(\dfrac{\sum_{i=1}^{n}(x_{i1}-\bar{x}_1)(2x_{i1}-2\bar{x}_1)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_{i1}-\bar{x}_1)^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(2x_{i1}-2\bar{x}_1)^2}}\right)^2}$$

$$= \frac{r_{2y} - r_{12}r_{1y}}{1 - r_{12}{}^2}$$

Apabila r_{12} dijabarkan, maka diperoleh r_{12} =1,

Pembilang r_{12}

$$\sum_{i=1}^{n}\left(x_{i1}-\overline{x}_1\right)\left(2x_{i1}-2\overline{x}_1\right)=2\sum_{i=1}^{n}\left(x_{i1}-\overline{x}_1\right)\left(x_{i1}-\overline{x}_1\right)$$
$$=2\sum_{i=1}^{n}\left(x_{i1}{}^2-2x_{i1}\overline{x}_1-\overline{x}_1\overline{x}_1\right)$$
$$=2\left(\sum_{i=1}^{n}x_{i1}{}^2-n\overline{x}_1{}^2\right)$$

Penyebut r_{12}

$$\sum_{i=1}^{n}\left(x_{i1}-\overline{x}_1\right)^2=\sum_{i=1}^{n}x_{i1}{}^2-n\overline{x}_1{}^2$$
$$\sum_{i=1}^{n}\left(2x_{i1}-2\overline{x}_1\right)^2=4\left(\sum_{i=1}^{n}x_{i1}{}^2-n\overline{x}_1{}^2\right)$$
$$\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(x_{i1}-\overline{x}_1\right)^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(2x_{i1}-2\overline{x}_1\right)^2}=\sqrt{\left(\sum_{i=1}^{n}X_{i1}^2-n\overline{x}_1{}^2\right)4\left(\sum_{i=1}^{n}x_{i1}{}^2-n\overline{x}_1{}^2\right)}$$
$$=2\left(\sum_{i=1}^{n}x_{i1}{}^2-n\overline{x}_1{}^2\right)$$

Jadi

$$\mathrm{r}_{12}=\frac{\sum_{i=1}^{n}\left(x_{i1}-\overline{x}_1\right)\left(2x_{i1}-2\overline{x}_1\right)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(x_{i1}-\overline{x}_1\right)^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(2x_{i1}-2\overline{x}_1\right)^2}}=\frac{2\left(\sum_{i=1}^{n}x_{i1}{}^2-n\overline{x}_1{}^2\right)}{2\left(\sum_{i=1}^{n}x_{i1}{}^2-n\overline{x}_1{}^2\right)}=1$$

terbukti

dengan kata lain, terjadi korelasi sempurna, dengan demikian penyebut dari $\hat{b}_1$ dan $\hat{b}_2$ akan bernilai nol. Kondisi tersebut mengakibatkan $\left(\mathbf{Z}^T\mathbf{Z}\right)^{-1}$ tidak ada karena C_{ll} dan C_{lq} tidak terdefinisi.

Selain itu, jika r_{2y} dijabarkan, maka diperoleh $r_{2y}=r_{1y}$

$$r_{2y}=\frac{\sum_{i=1}^{n}\left(2x_{i1}-2\overline{x}_1\right)\left(y_i-\overline{y}\right)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(2x_{i1}-2\overline{x}_1\right)^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(y_i-\overline{y}\right)^2}}$$

$$= \frac{2\sum_{i=1}^{n}\left(x_{i1}-\bar{x}_1\right)\left(y_i-\bar{y}\right)}{2\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(x_{i1}-\bar{x}_1\right)^2 . \sum_{i=1}^{n}\left(y_i-\bar{y}\right)^2}}$$

$$= \frac{\sum_{i=1}^{n}\left(x_{i1}-\bar{x}_1\right)\left(y_i-\bar{y}\right)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(x_{i1}-\bar{x}_1\right)^2 . \sum_{i=1}^{n}\left(y_i-\bar{y}\right)^2}}$$

$$= r_{1y}$$

sehingga $\hat{b}_1$ dan $\hat{b}_2$ tidak terdefinisi. Dengan demikian, nilai β_1 dan β_2 tidak dapat ditentukan hasilnya.

Jadi, saat terjadi kombinasi linier antara variabel prediktor satu dengan yang lain atau **X** matriks yang tidak *full rank*, sehingga terdapat korelasi sempurna antara variabel-variabel tersebut, maka dengan metode OLS, nilai β_1 dan β_2 tidak dapat ditentukan hasilnya.

Berikut ini akan diperlihatkan efek dari banyaknya variabel prediktor melebihi jumlah observasi.

L.8.2 Efek dari banyaknya variabel prediktor melebihi jumlah observasi

Sebelum membuktikan efek dari banyaknya variabel prediktor yang melebihi jumlah observasi pada sistem persamaan linier **y = Xβ,** dimana dalam menaksir parameternya menggunakan metode *Ordinary Least Squares* dan menghasilkan

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y} ,$$

akan diperlihatkan dahulu teorema dari Anton. H, 2000 yang menjamin bahwa sistem persamaan linier mempunyai suatu penyelesaian kuadrat yang unik atau tunggal.

8.2.1 Keunikan penyelesaian kuadrat terkecil

Sebelumnya, akan ditetapkan dahulu syarat-syarat dimana sistem persamaan linier mempunyai suatu penyelesaian kuadrat yang unik atau tunggal.

Teorema 8.2.1.a

Jika **X** adalah suatu matriks *n* x *k*, maka pernyataan berikut ini ekuivalen

a) **X** mempunyai vektor-vektor kolom yang bebas secara linier

b) $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$ dapat dibalik

Teorema berikut merupakan konsekuensi langsung dari teorema diatas

Teorema 8.2.1.b (keunikan penyelesaian kuadrat terkecil).

Jika **X** adalah suatu matriks *n* x *k* dengan vektor-vektor kolom yang bebas secara linier, maka untuk setiap matriks **y** yang berukuran *n* x 1, maka sistem persamaan linier **y=Xβ** mempunyai suatu penyelesaian kuadrat terkecil yang unik. Penyelesaian ini diberikan oleh

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y} \qquad (9.2.1)$$

Telah dijelaskan sebelumnya pada subbab 2.3.2 mengenai taksiran parameter regresi dengan metode *Least Square*s bahwa persaman (9.2.1) akan dipenuhi jika

1. **X** nya *full rank,*
2. tidak ada X_l yang merupakan kombinasi linier dari X lainnya *atau uncorrelated* ,
3. jumlah observasi harus melebihi jumlah variabel prediktor.

Berikut ini akan diperlihatkan apabila syarat tersebut tidak terpenuhi yaitu banyaknya variabel prediktor melebihi jumlah observasi.

Teorema 8.2.1.c

Jika **y=Xβ** adalah suatu sistem linier yang konsisten dengan *n* persamaan dan *k* peubah, dan jika **X** mempunyai rank *r*, maka penyelesaian dari sistem tersebut mengandung *n*-*r* parameter.

Berarti berdasarkan teorema ini, sistem persaman linier **y = Xβ** memiliki penyelesaian umum minimal dengan satu parameter (hal ini terjadi saat $r = n$ dan k-n = 1) sehingga akan ada kemungkinan penyelesaian umumnya lebih dari satu parameter atau lebih jauh lagi saat **y = Xβ** adalah sebarang sistem dimana jumlah peubah(dalah hal ini jumlah variabel prediktor) lebih banyak dari jumlah persamaan (jumlah observasi), maka vektor-vektor kolom **X** tidak bebas linier. Hal tersebut sesuai dengan teorema-teorema berikut :

Teorema 8.2.1.d

Anggap S=$\{\mathbf{x}_1,...,\mathbf{x}_k\}$ adalah himpunan vektor-vektor dalam **X** dengan n persamaan. Jika $k > n$, maka S tidak bebas secara linier".

Teorema 8.2.1.e

Jika **X** adalah suatu matriks n x k, maka pernyataan-pernyataan berikut ekuivalen.

a) **Xβ** = **0** hanya memiliki penyelesaian yang trivial.
b) Vektor-vektor kolom dari **X** bebas secara linier
c) **y = Xβ** paling banyak mempunyai satu penyelesaian untuk setiap matriks **y** yang berukuran n x 1

sedangkan berdasarkan teorema, **Teorema 8.2.1.a dan Teorema 8.2.1.b,** solusi yang diperoleh dari sistem persamaan linier **y = Xβ** adalah solusi yang tunggal.

Jadi, terbukti jika jumlah variabel prediktor lebih banyak dari jumlah observasi, sistem persaman linier **y = Xβ** memiliki tak hingga penyelesaian dengan kata lain solusinya (dalam hal ini solusi *least squares* yaitu **β**) tidak tunggal.

LAMPIRAN 9

Sintaks dan Output algoritma NIPALS pada Aplikasi Data

Berikut ini akan ditampilkan sintaks yang digunakan dalam bab 4 dan output yang dihasilkan dengan *software* mathlab 5.2.1.

L.9.1 Sintaks

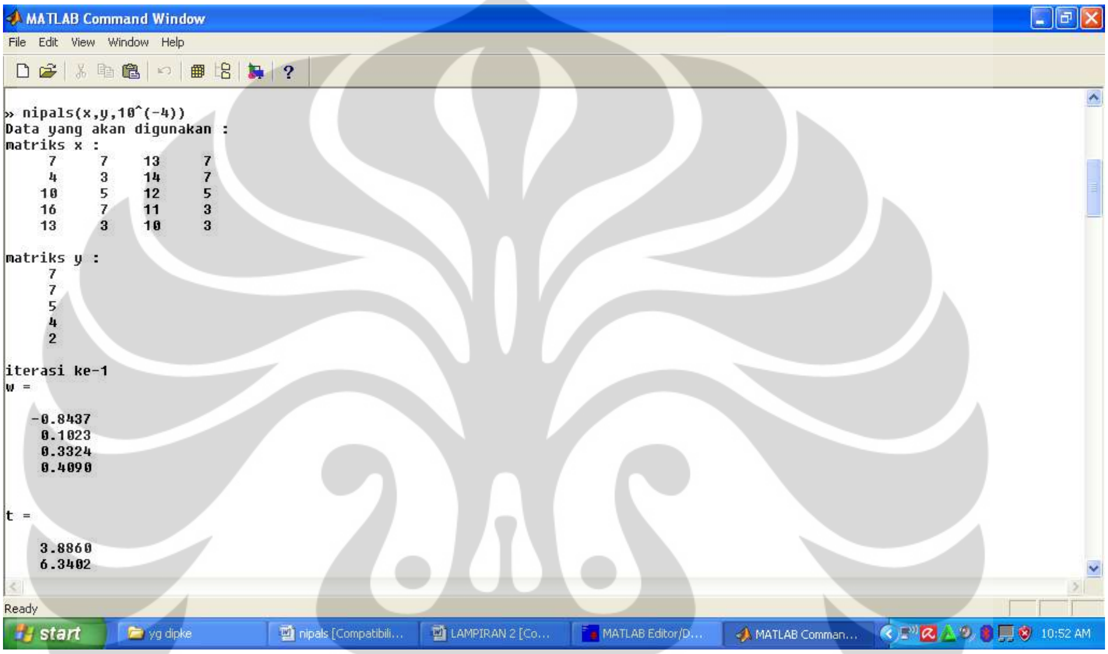
```
function [w, t, p, c,var_x, var_y]=nipals(x,y,tol)
fprintf('Data yang akan digunakan :\n');
disp('matriks x :');
disp(x);
disp('matriks y :');
disp(y);
%cari mean center y
[a b] = size(y);
ybar = sum(y)/a;
vybar = y;
for i = 1:a
    vybar(i,1)=vybar(i,1)-ybar;
end
%cari mean center dari x
[c d] = size(x);
xbar = zeros(d,d);
for i = 1:d
    xbar(i,i)=sum(x(:,i))/c;
end
e = ones(c,d);
xbar = e*xbar;
vxbar = x - xbar;
dx = diag(vxbar'*vxbar,0);
tr_x = sum(dx); %hitung trace x'x
%set initial value
y = vybar;
x = vxbar;
n = 1;
%proses iterasi nipal
while (max(max(x))>tol)
    fprintf('iterasi ke-%d',n);
    w = (x'*y)./norm(x'*y)
    t = x*w
    p = (x'*t)./(t'*t)
    c = (t'*y)./(t'*t)
    x = x - t*p'
    y = y - t*c
    var_x = ((t'*t)*(p'*p))/tr_x
    var_y = 1 - (((vybar - t*c)'*(vybar - t*c))/(vybar'*vybar))
    n = n + 1;
```

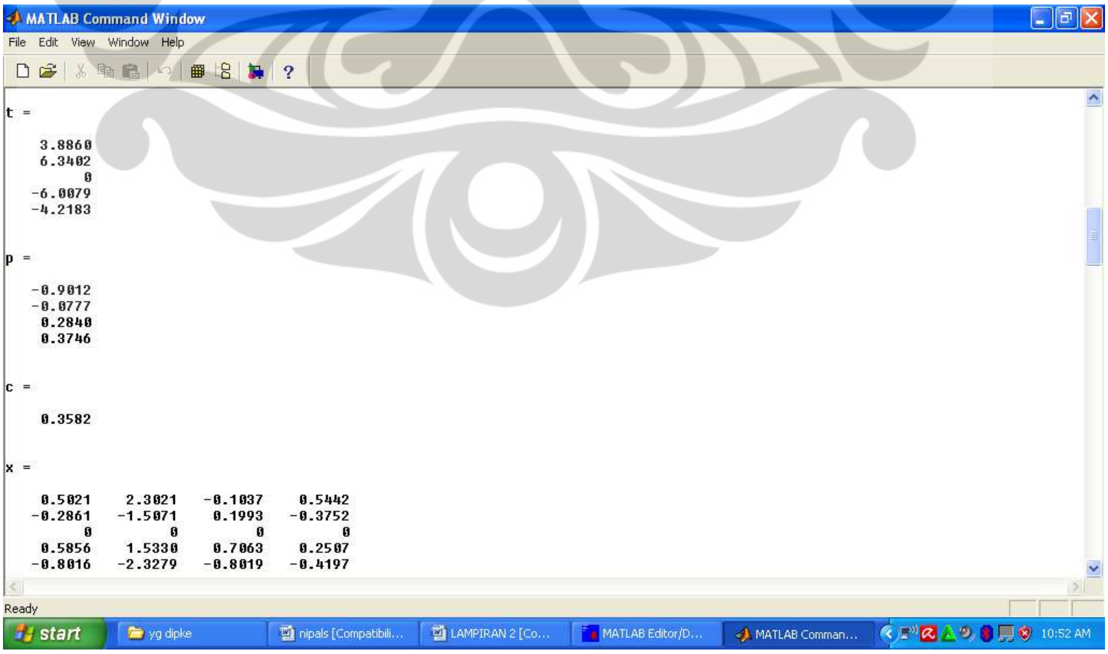
```
    pause;
end
```

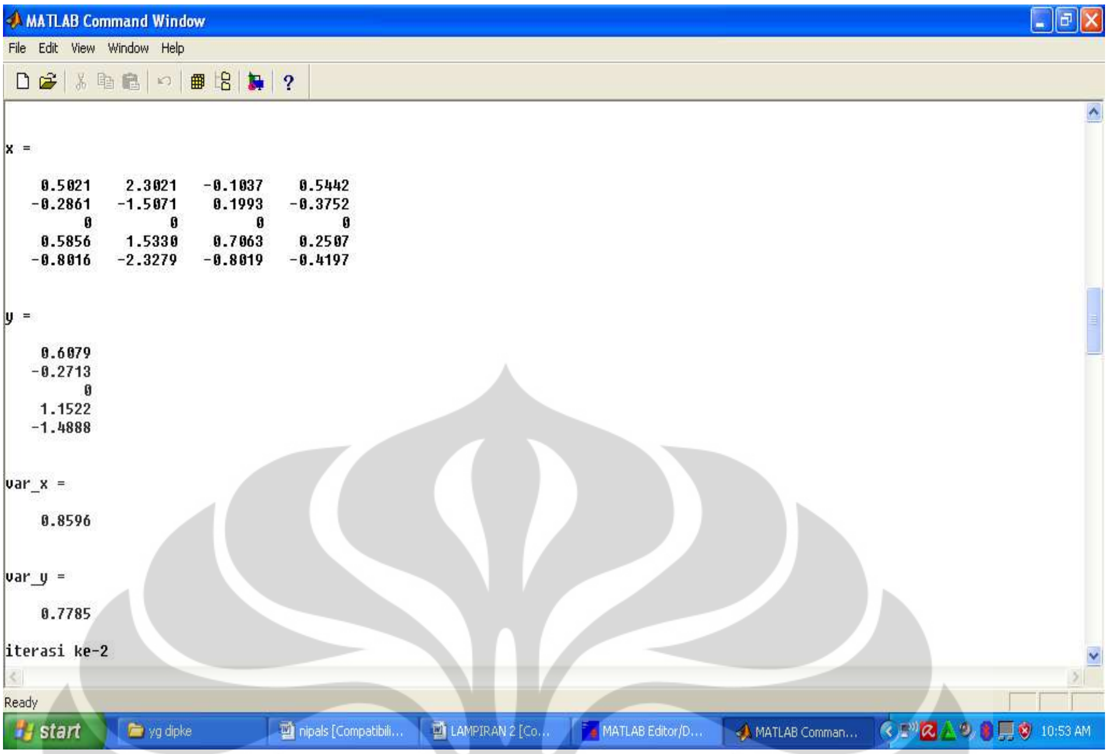
Berikut ini akan ditampilkan output dari sintaks yang digunakan dengan *software* matlab 5.3.1

L.9.2 Output

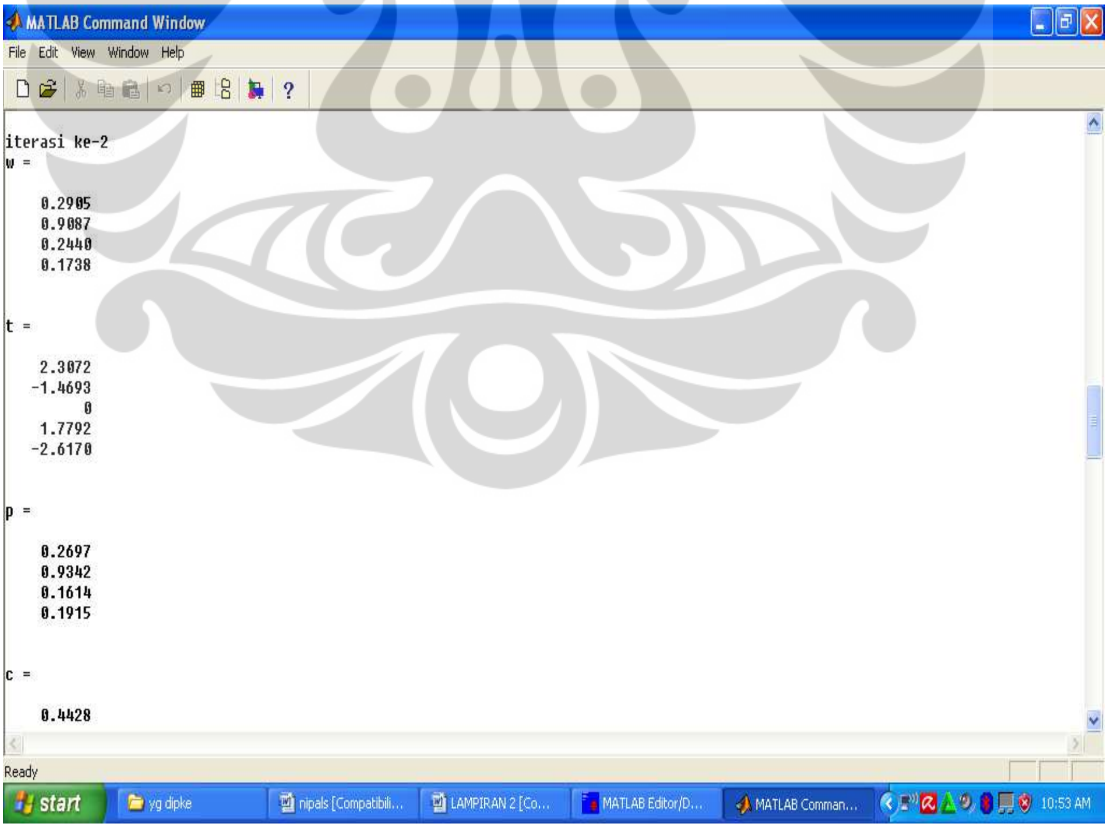
L.9.2.1 Output Sintaks pada L.9.1



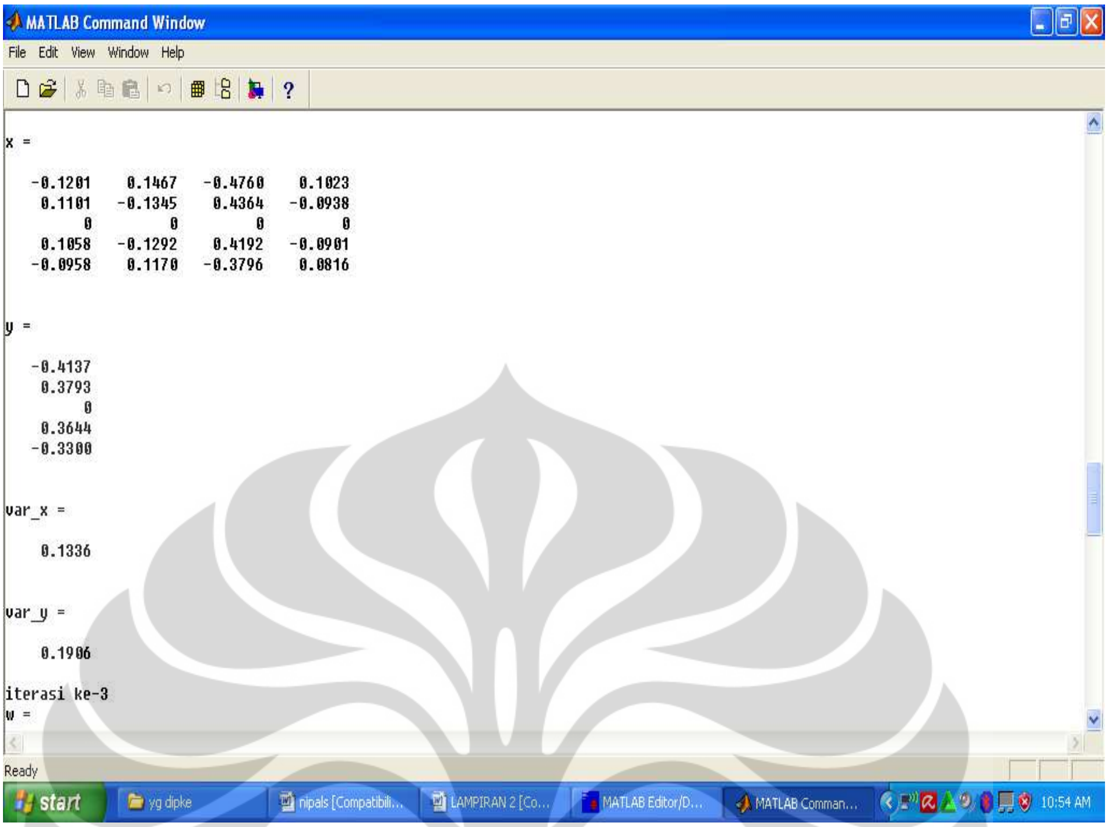




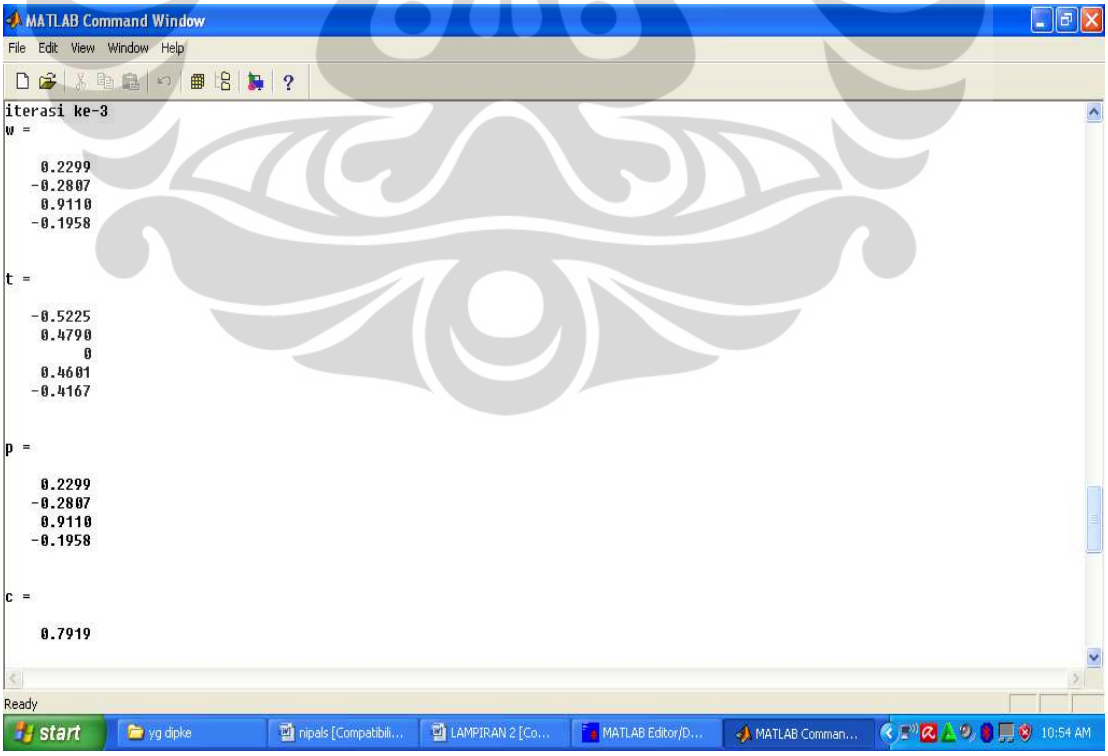

```
x =

    0.5021    2.3021   -0.1037    0.5442
   -0.2861   -1.5071    0.1993   -0.3752
         0         0         0         0
    0.5856    1.5330    0.7063    0.2507
   -0.8016   -2.3279   -0.8019   -0.4197


y =

    0.6079
   -0.2713
         0
    1.1522
   -1.4888


var_x =

    0.8596


var_y =

    0.7785

iterasi ke-2
```



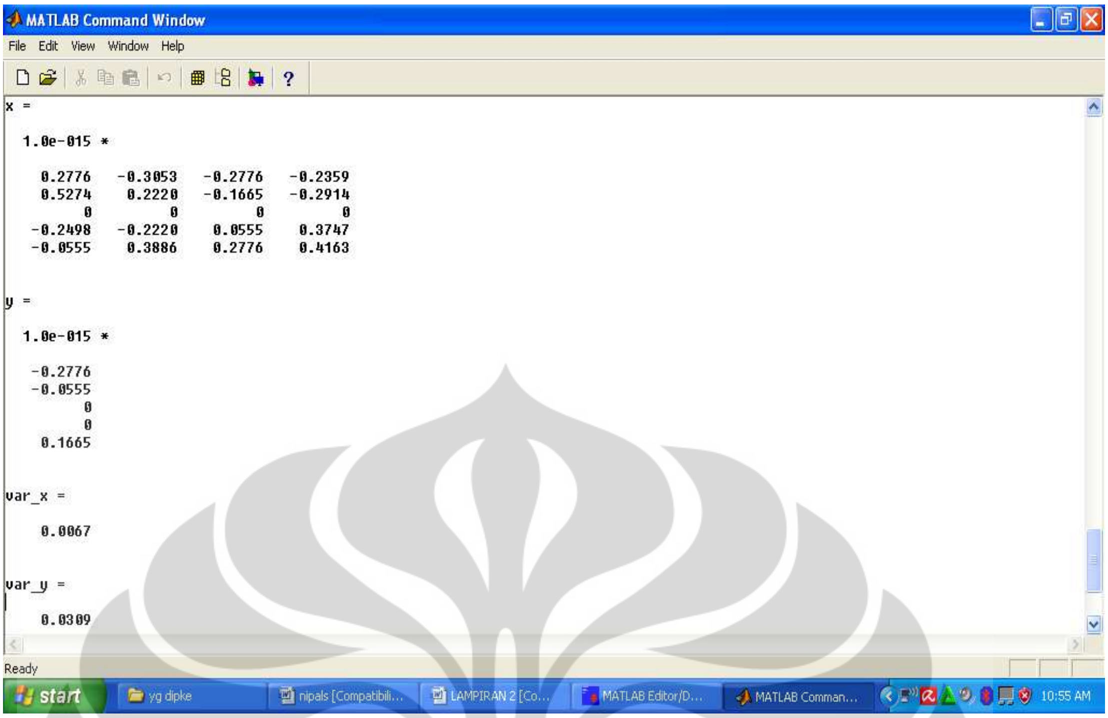

```
iterasi ke-2
w =

    0.2905
    0.9087
    0.2440
    0.1738


t =

    2.3072
   -1.4693
         0
    1.7792
   -2.6170


p =

    0.2697
    0.9342
    0.1614
    0.1915


c =

    0.4428
```


MATLAB Command Window

```
x =

   -0.1201    0.1467   -0.4760    0.1023
    0.1101   -0.1345    0.4364   -0.0938
         0         0         0         0
    0.1058   -0.1292    0.4192   -0.0901
   -0.0958    0.1170   -0.3796    0.0816


y =

   -0.4137
    0.3793
         0
    0.3644
   -0.3300


var_x =

    0.1336


var_y =

    0.1906

iterasi ke-3
w =
```

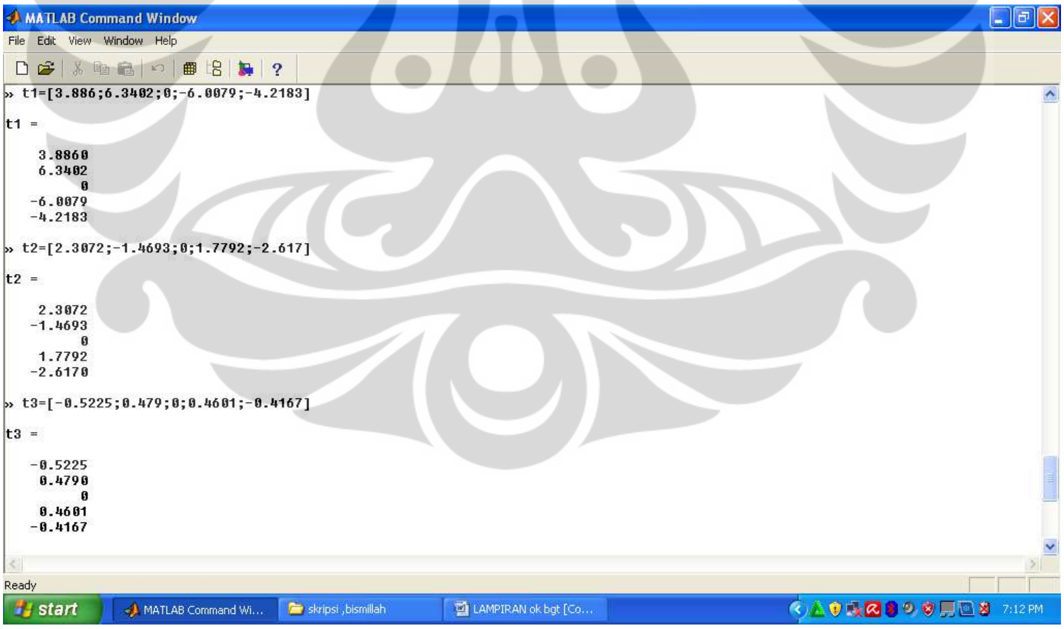

MATLAB Command Window

```
iterasi ke-3
w =

    0.2299
   -0.2807
    0.9110
   -0.1958


t =

   -0.5225
    0.4790
         0
    0.4601
   -0.4167


p =

    0.2299
   -0.2807
    0.9110
   -0.1958


c =

    0.7919
```

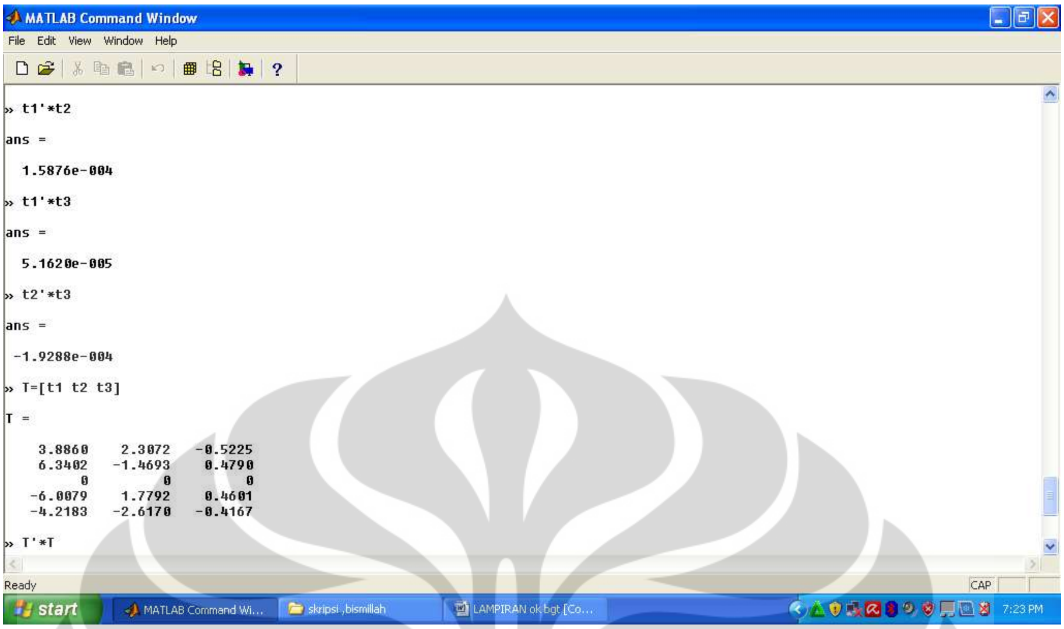


Karena telah terbentuk matriks nol, maka iterasi berjalan hingga iterasi ketiga.

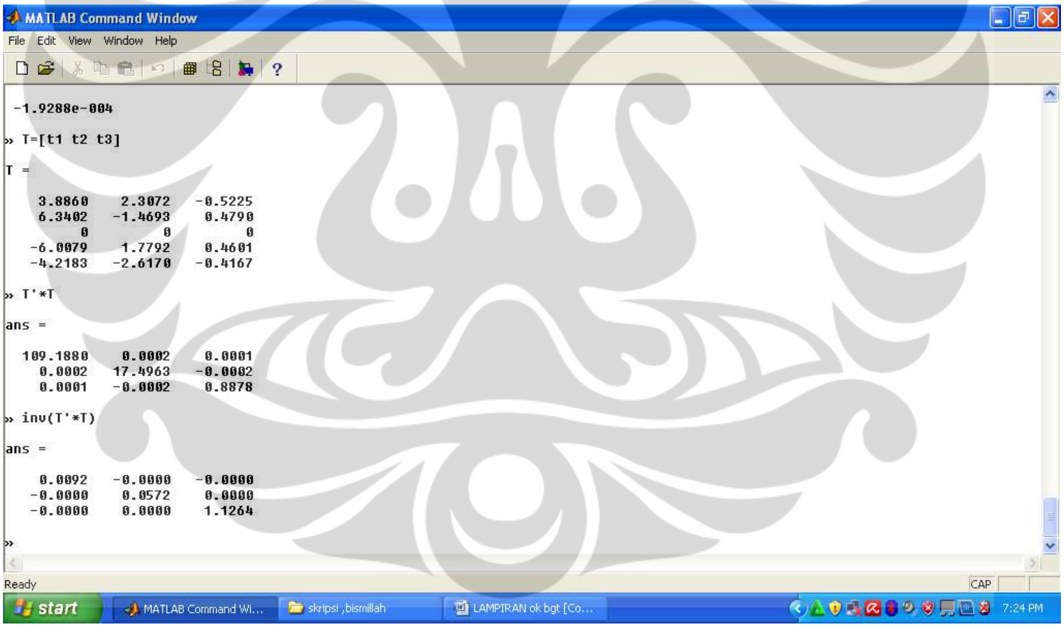
L.9.2.2 Output matriks komponen T ortogonal



$$\mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_2 = 0 \quad \mathbf{t}_1^T\mathbf{t}_3 = 0 \quad \mathbf{t}_2^T\mathbf{t}_3 = 0 \quad \mathbf{T}^T\mathbf{T} = \mathbf{I}$$

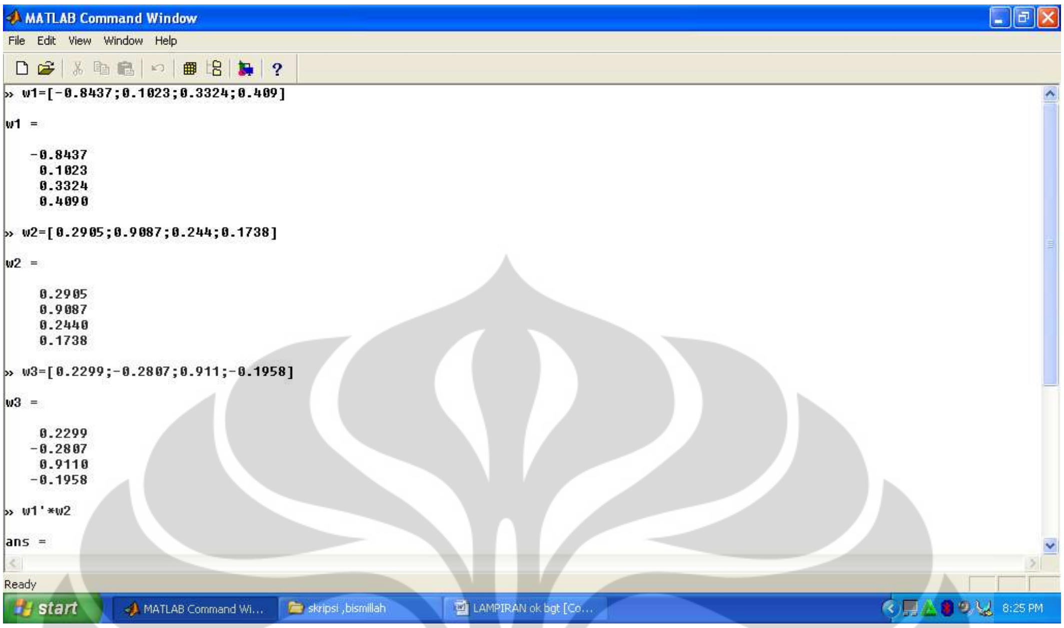


```
» t1'*t2

ans =

  1.5876e-004

» t1'*t3

ans =

  5.1620e-005

» t2'*t3

ans =

 -1.9288e-004

» T=[t1 t2 t3]

T =

    3.8860    2.3072   -0.5225
    6.3402   -1.4693    0.4790
         0         0         0
   -6.0079    1.7792    0.4601
   -4.2183   -2.6170   -0.4167

» T'*T
```

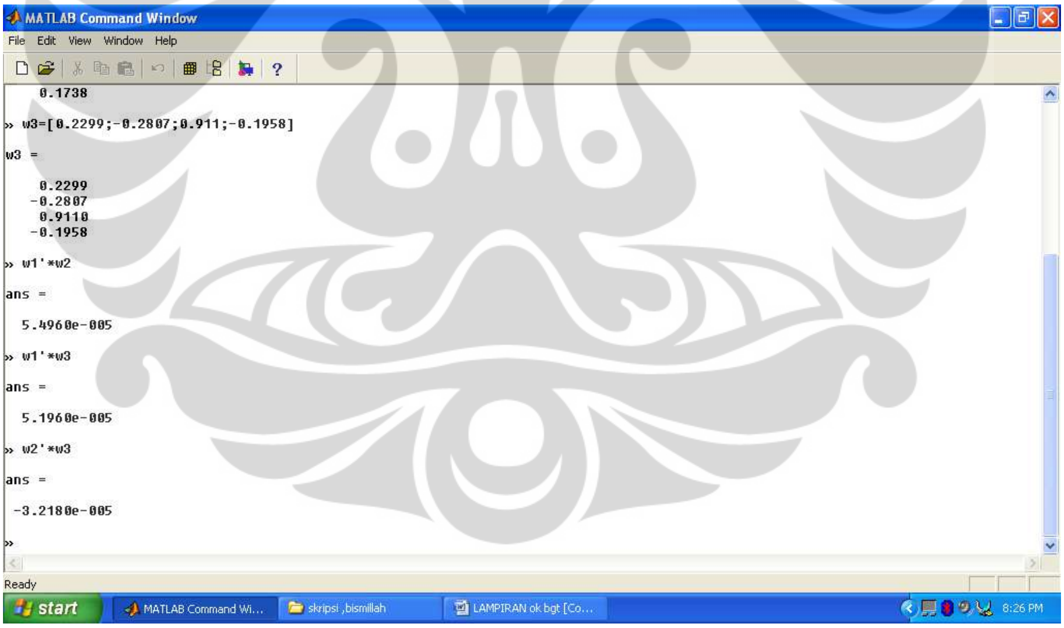


```
 -1.9288e-004

» T=[t1 t2 t3]

T =

    3.8860    2.3072   -0.5225
    6.3402   -1.4693    0.4790
         0         0         0
   -6.0079    1.7792    0.4601
   -4.2183   -2.6170   -0.4167

» T'*T

ans =

  109.1880    0.0002    0.0001
    0.0002   17.4963   -0.0002
    0.0001   -0.0002    0.8878

» inv(T'*T)

ans =

    0.0092   -0.0000   -0.0000
   -0.0000    0.0572    0.0000
   -0.0000    0.0000    1.1264

»
```

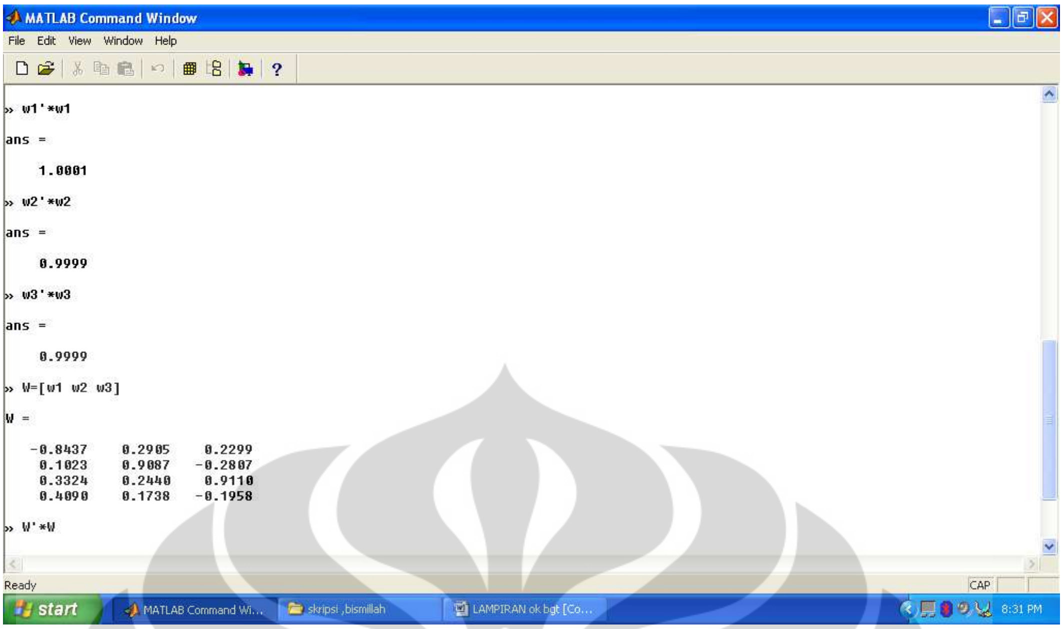
L.9.2.3 Output pembuktian W ortonormal



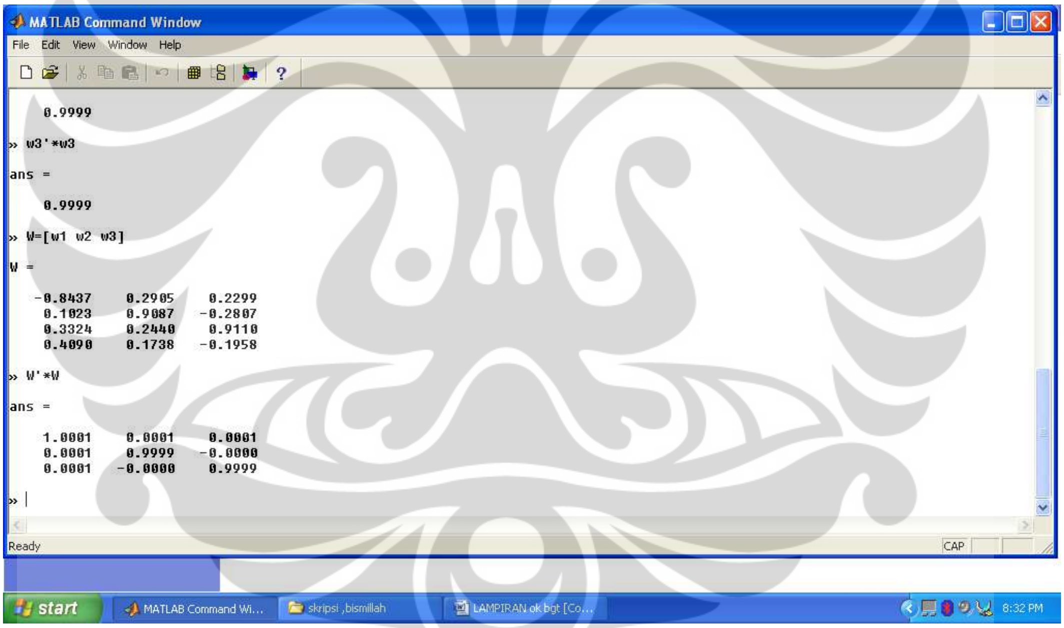
$\mathbf{w}_1^T\mathbf{w}_2 = 0$ $\mathbf{w}_1^T\mathbf{w}_3 = 0$ dan $\mathbf{w}_2^T\mathbf{w}_3 = 0$



$\mathbf{w}_1^T\mathbf{w}_1 = 1, \mathbf{w}_2^T\mathbf{w}_2 = 1$ dan $\mathbf{w}_3^T\mathbf{w}_3 = 1$

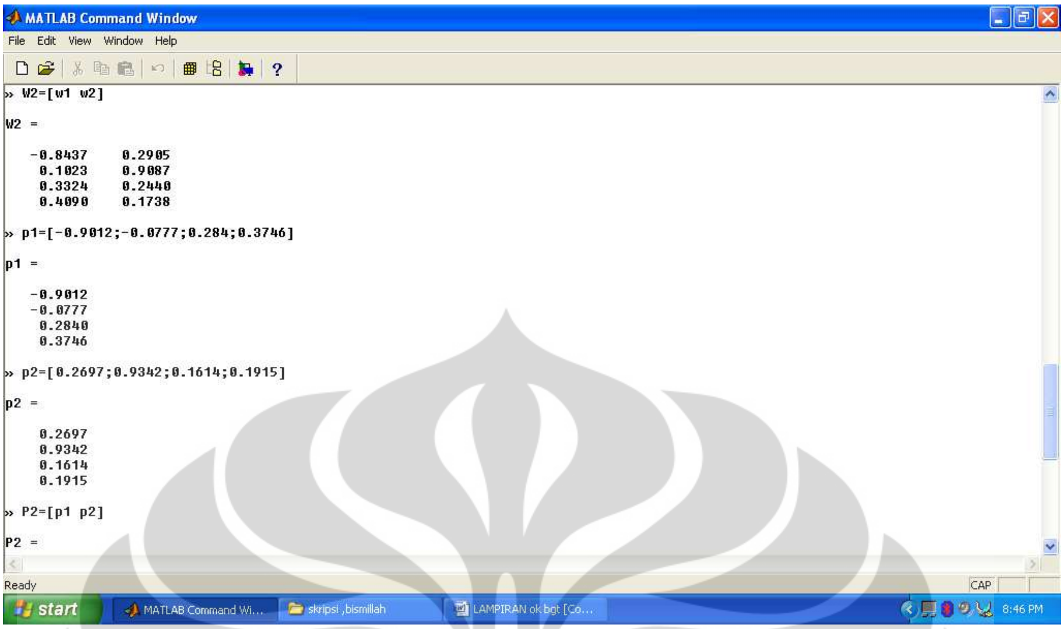


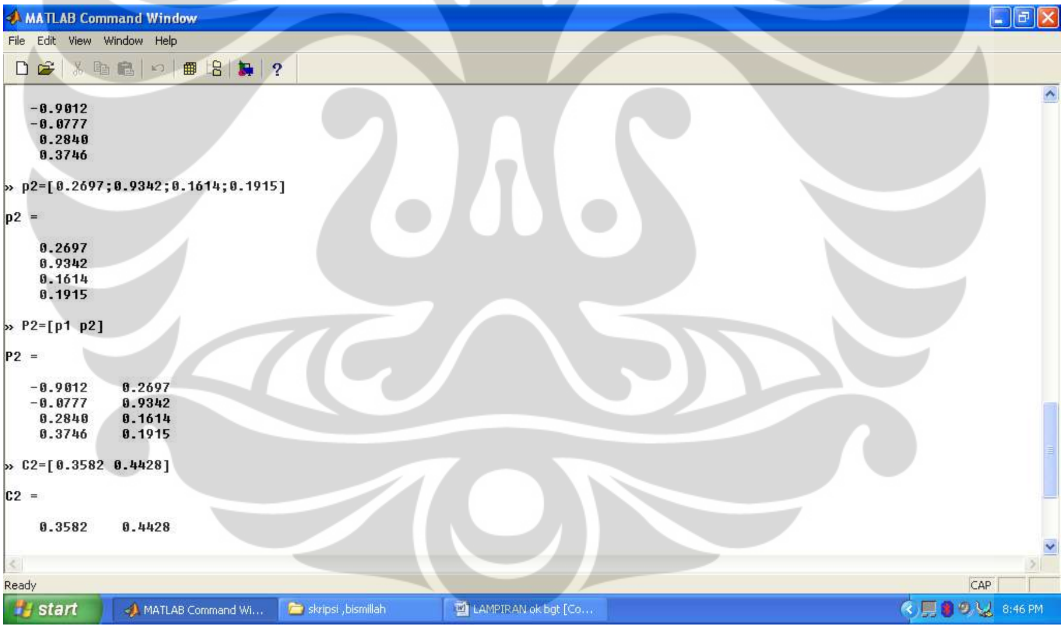
$$\mathbf{W}^T\mathbf{W} = \mathbf{I}$$

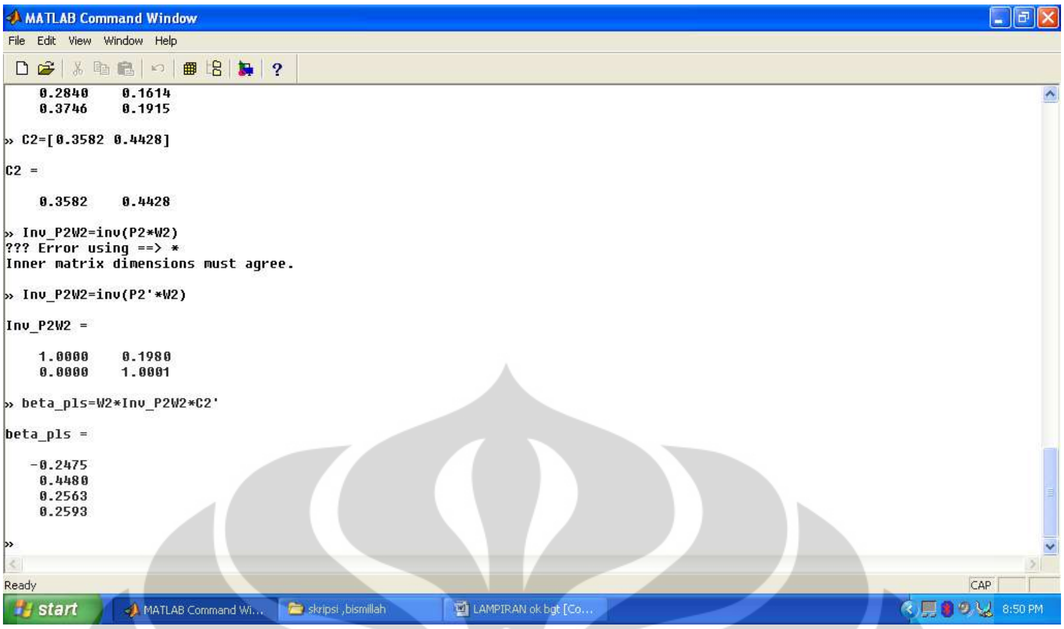


Dari output matlab tersebut, terbukti **T** ortogonal dan **W** ortonormal

L.9.2.4 Output beta_pls







```
MATLAB Command Window
File  Edit  View  Window  Help
    0.2840    0.1614
    0.3746    0.1915

» C2=[0.3582 0.4428]

C2 =

    0.3582    0.4428

» Inv_P2W2=inv(P2*W2)
??? Error using ==> *
Inner matrix dimensions must agree.

» Inv_P2W2=inv(P2'*W2)

Inv_P2W2 =

    1.0000    0.1980
    0.0000    1.0001

» beta_pls=W2*Inv_P2W2*C2'

beta_pls =

   -0.2475
    0.4480
    0.2563
    0.2593

»
Ready                                                    CAP
start   MATLAB Command Wi...   skripsi ,bismillah   LAMPIRAN ok bgt [Co...   8:50 PM
```