Univerzita Palackého v Olomouci

Korelace

Chemometrie I (ACH/CHEX1)

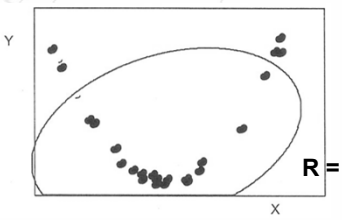
1

Univerzita Palackého v Olomouci

Úvod

- Korelace a korelační analýza se zabývá mírou závislosti náhodných dat. Korelační analýza popisuje lineární vztahy mezi veličinami.
- Mírou vyjádření "těsnosti lineární vazby" mezi proměnnými je korelační koeficient. Nelze jej však považovat za obecnou míru linearity a je třeba jej interpretovat v kontextu rozptylového regresního grafu, tj. y = f(x).
- Druhy korelačních koeficientů:
  - párový korelační koeficient, a to parametrický neboli Personův (R) a neparametrický neboli Spearmanův (ρ),
  - parciální korelační koeficient,
  - vícerozměrný (vícenásobný) korelační koeficient.
- **Př. nekorelovaných dat (R = 0,1930), která nejsou nezávislá.**

Nízká hodnota korelačního koeficientu neznamená jejich nezávislost, pouze to, že mezi nimi není lineární závislost.



R = 0,1930

2

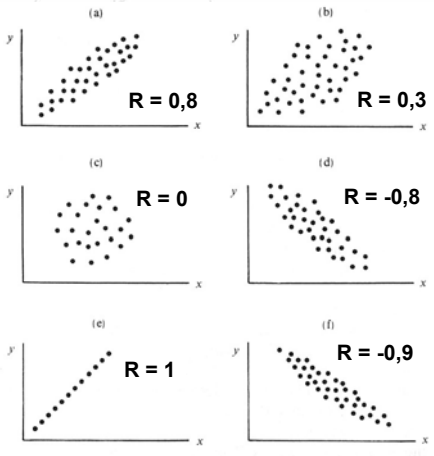
Univerzita Palackého v Olomouci

Párový korelační koeficient

- **Pearsonův párový korelační koeficient *R*:**

$$R = \frac{\sum (x_i - \bar{x}) \cdot (y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum (x_i - \bar{x})^2 \cdot \sum (y_i - \bar{y})^2}}$$

  - Může nabývat hodnot od -1 do +1.
  - Je-li R ≈ 0, proměnné jsou lineárně nekorelované.
  - Je-li R blízko ± 0,5, slabá korelace (lineární závislost).
  - Je-li R ≈ +1, vysoká přímá lineární závislost.
  - Je-li R ≈ -1, vysoká nepřímá lineární závislost.
- Párový korelační koeficient se používá v jednoduché LR pro vyjádření korelace mezi x a y. Dále se používají ve vícerozměrné LR a to pro vyjádření korelace mezi:
  1. jednotlivými závisle proměnnými x_i a nezávisle proměnnou y, tedy např.: x_2 a y, či x_3 a y,
  2. vzájemně mezi závislými proměnnými, např.: x_1 a x_2, či x_1 a x_3.



3

Univerzita Palackého v Olomouci

Párový korelační koeficient

- **Koeficient determinace R^2** popisuje stupeň příčinné závislosti mezi x a y, nabývá hodnot od 0 do +1.
  - Např. pro R = 0,7 je R^2 = 0,49 a to znamená, že pouze 49 % variability mezi proměnnými x a y se dá vysvětlit jejich lineárním vztahem.
- **Test významnosti korelačního koeficientu:**

H_0: R = 0 **(1.) H_1: R ≠ 0** **(2.) H_1: R > 0** **(3.) H_1: R < 0**

$$t = \frac{|R|\sqrt{n-2}}{\sqrt{1-R^2}}$$

  - testační statistiku *t* porovnáváme s t_{krit}. Oblast zamítnutí H_0 je:

(1.) $t > t_{krit(1-\frac{\alpha}{2},n-2)}$ **(2.)** $|t| > t_{krit(1-\alpha,n-2)}$ **(3.)** $t < -t_{krit(1-\alpha,n-2)}$

4

Univerzita Palackého v Olomouci

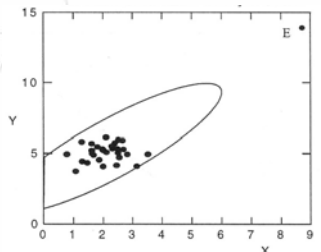
Párový korelační koeficient

- **Spearmanův korelační koeficient** ρ – pořadový korelační koeficient, je robustní. Jeho vztah k Pearsonovu korelačnímu koeficientu je analogií vztahu mediánu k aritmetickému průměru.

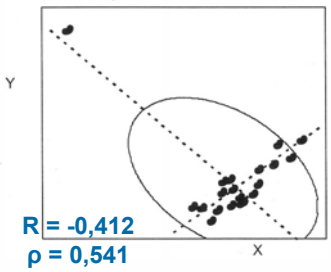
$$\rho = 1 - \frac{6}{n(n^2-1)} \sum_{i=1}^{n} (P_{1i} - P_{2i})^2$$

P_{1i}, P_{2i} jsou pořadová čísla jednotlivých hodnot

- Spearmanův korelační koeficient není ovlivněn výskytem extrémních bodů, které naopak ovlivňují hodnotu Pearsonova *R*. Při korelační analýze nestačí pouze vypočítat *R* a testovat jeho významnost. Je třeba posuzovat i rozptylový regresní graf.
- Je vhodné sledovat rozdíl mezi *R* a *ρ*. Velký rozdíl naznačuje přítomnost extrémního bodu či extrémních bodů.



R = 0,863, ρ = 0,197



R = -0,412
ρ = 0,541

5

Univerzita Palackého v Olomouci

Další korelační koeficienty

- Parciální korelační koeficient:
  - Popisuje vztah mezi dvěma proměnnými (např. x_i a x_j) při zkonstatnění dalších proměnných.
  - Vyjadřuje tedy vzájemnou korelaci s vyloučením vlivu všech ostatních proměnných, tj. nezkreslenou vlivem závislostí mezi ostatními proměnnými.
  - Má smysl jen v případě více než 2 proměnných.
  - Vzorec pro parciálního korelačního koeficientu (1. řádu) v případě 3 proměnných:

$$R_{1,2(3)} = \frac{R_{12} - R_{13}R_{23}}{\sqrt{(1 - R_{13}^2)(1 - R_{23}^2)}}$$

$R_{1,2(3)}$ je parciální korelační koeficient mezi proměnnými 1 a 2, je-li proměnná 3 konstantní
R_{ij} jsou párové korelační koeficient mezi proměnnými *i* a *j*

- Vícenásobný korelační koeficient:
  - Vyjadřuje míru lineární závislosti zvolené proměnné na všech ostatních dohromady.
  - Tyto koeficienty jsou vyšší než největší odpovídající párový koeficient a vždy rostou s počtem proměnných, i když jsou párové korelace nevýznamné a obvykle nadhodnocují skutečnost.
  - Používá se u vícerozměrné (vícenásobné) lineární regrese.

6