

MA012 Statistika II

6. Korelační analýza: korelace a koeficient determinace, pořadové korelační koeficienty

Ondřej Pokora (pokora@math.muni.cz)

Ústav matematiky a statistiky, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Brno

(podzim 2015)



Motivační příklady

Příklad 1

Byly sledovány výdaje (V) 7 domácností (v tisících Kč za 3 měsíce) za potraviny a nápoje v závislosti na počtu členů domácnosti (C) a na čistém příjmu (P) domácnosti (v tisících Kč za 3 měsíce).

V	40	30	40	10	60	40	50
C	4	2	4	1	5	3	4
P	100	80	120	30	150	120	130

Zkoumejte závislosti (asociovanost) veličin.

Příklad 2

20 dětí různého věku se podrobilo pedagogicko-psychologickému výzkumu, v rámci něhož mj. odpovídaly na tytéž otázky testu a byly váženy.

Překvapivý výsledek přinesl korelační koeficient mezi hmotností dětí a počtem bodů dosažených v testu, jehož hodnota vyšla 0,968. Znamená to, že obezita má pozitivní vliv na schopnost učení? Prozkoumejte závislosti (asociovanost) veličin.

Funkce pro výběrové korelační koeficienty v R

Pearsonův	r_{YZ}	<code>rcorr (X) *</code> <code>cor (X, Y)</code> <code>cor.test (X, Y)</code> <code>cor (X)</code>
parciální	$r_{YZ \cdot X}$	<code>pcor (X) *</code> <code>pcor.test (X, Y) *</code>
semiparciální	$r_{Y(Z \cdot X)}$	<code>spcor (X) *</code> <code>spcor.test (X, Y) *</code>
mnohonásobný	$r_{Y \cdot X}$	R^2 ve výsledku LRM funkcí <code>lm</code>

* `library (Hmisc)`, * `library (ppcor)`

Testy významnosti korelačních koeficientů

Věta 1

Za platnosti $\rho_{YZ \cdot X} = 0$ je

$$T = r_{YZ \cdot X} \sqrt{\frac{n - p - 2}{1 - r_{YZ \cdot X}^2}} \sim t(n - p - 2);$$

koeficient parciální korelace je tedy na hladině α významný, pokud

$$|T| \geq t_{1-\alpha/2}(n - p - 2).$$

Věta 2 (analogie celkového F-testu v lineárním regresním modelu)

Za platnosti $\rho_{Y \cdot X} = 0$ je

$$F = \frac{n - p - 1}{p} \cdot \frac{r_{Y \cdot X}^2}{1 - r_{Y \cdot X}^2} \sim F(p, n - p - 1);$$

koeficient mnohonásobné korelace je tedy na hladině α významný, pokud

$$F \geq F_{1-\alpha}(p, n - p - 1).$$

Testování významnosti semiparciálních korelačních koeficientů se provádí podobně, pomocí statistiky s F -rozdělením, avšak s jinými stupni volnosti.

Výpočty korelačních koeficientů podle definice

Pearsonův $r_{YZ} = r_{ZY} = r(Y, Z) = r(Z, Y)$ `cor (Y, Z)`

parciální $r_{YZ \cdot X} = r_{Z Y \cdot X} = r(Y - \hat{Y}, Z - \hat{Z})$ `cor (rY, rZ)`

semiparciální $r_{Y(Z \cdot X)} = r(Y, Z - \hat{Z})$ `cor (Y, rZ)`

semiparciální $r_{Z(Y \cdot X)} = r(Z, Y - \hat{Y})$ `cor (Z, rY)`

mnohonásobný $r_{Y \cdot X} = r(Y, \hat{Y})$ `cor (Y, Yhat)`

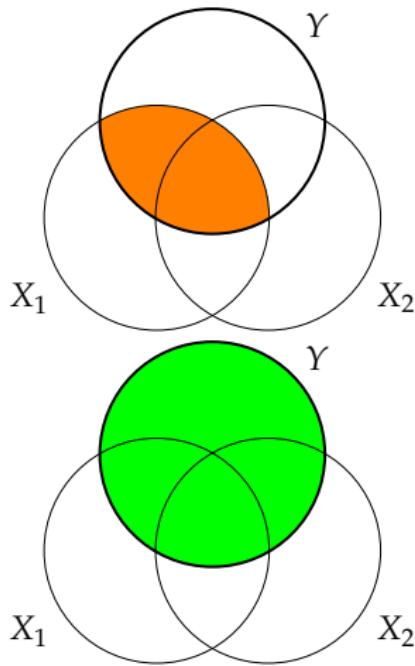
Odhady a rezidua přitom získáme vyřešením lineárních regresních modelů:

$$Y = \beta_0 + \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} \implies \hat{Y}, \quad Z = \alpha_0 + \mathbf{X}\boldsymbol{\alpha} \implies \hat{Z}$$

Symbolický zápis v R:

```
modelY <- lm (Y ~ X1 + ... + Xp)
modelZ <- lm (Z ~ X1 + ... + Xp)
rY <- modelY$residuals
rZ <- modelZ$residuals
Yhat <- modelY$fitted.values
```

Koeficient determinace a Pearsonova korelace



- veličinu Y modelujeme veličou X_1
- Pearsonův korelační koeficient r_{YX_1} popisuje míru závislosti mezi veličinami Y a X_1
- koeficient determinace $R^2_{Y \cdot X_1}$ v LRM

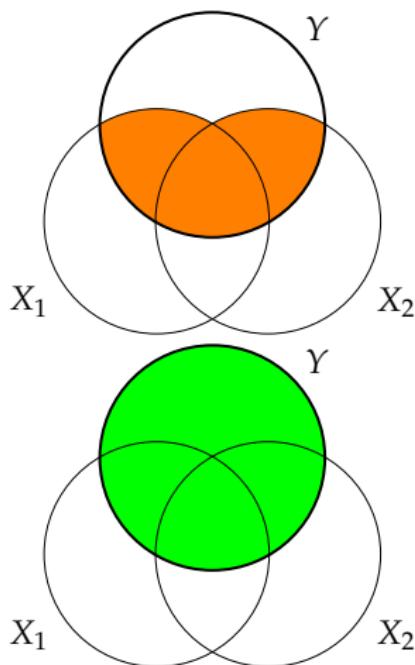
$$Y \sim X_1$$

popisuje, jakou část celkové variability veličiny Y lze vysvětlit veličinou X_1

⇒ kvadrát Pearsonova korelačního koeficientu popisuje, jakou část celkové variability veličiny Y lze vysvětlit veličinou X_1 ,

$$r^2_{YX_1} = \frac{R^2_{YX_1}}{1} = R^2_{YX_1}$$

Koeficient determinace a mnohonásobná korelace



- veličinu Y modelujeme veličinami X_1, X_2
- koeficient mnohonásobné korelace $r_{Y \cdot X_1 X_2}$ popisuje míru závislosti mezi Y a nejlepší lineární kombinací \hat{Y} veličin X_1, X_2
- koeficient determinace $R^2_{Y \cdot X_1 X_2}$ v LRM

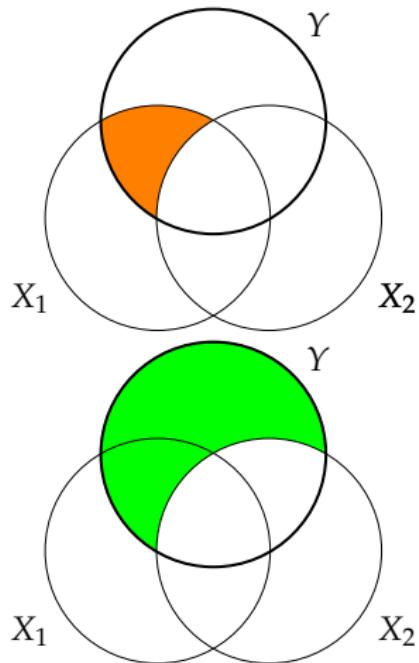
$$Y \sim X_1 + X_2$$

popisuje, jakou část celkové variability veličiny Y lze vysvětlit veličinami X_1, X_2

⇒ kvadrát koeficientu mnohonásobné korelace popisuje, jakou část celkové variability veličiny Y lze vysvětlit veličinami X_1, X_2 ,

$$r^2_{Y \cdot X_1 X_2} = \frac{R^2_{Y \cdot X_1 X_2}}{1} = R^2_{Y \cdot X_1 X_2}$$

Koeficient determinace a parciální korelace

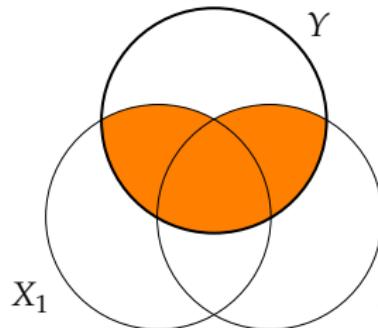


- veličinu Y modelujeme veličinou X_1 , přičemž vyloučujeme vliv veličiny X_2 na obě tyto veličiny zároveň
 - koeficient parciální korelace $r_{YX_1 \cdot X_2}$ popisuje míru závislosti mezi Y a X_1 při vyloučení vlivu X_2 na obě tyto veličiny zároveň
- ⇒ kvadrát koeficientu parciální korelace popisuje, jakou část variability veličiny Y nezávislé na veličině X_2 lze vysvětlit samotnou veličinou X_1 ,

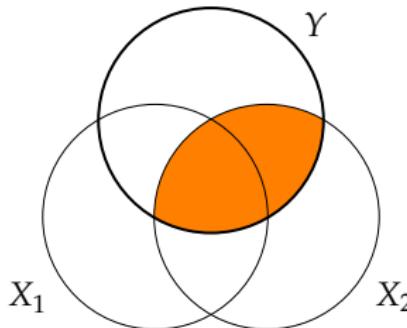
$$r_{YX_1 \cdot X_2}^2 = \frac{\text{variabilita } Y \text{ v oranžové oblasti}}{\text{variabilita } Y \text{ v zelené oblasti}}$$

Koeficient determinace a parciální korelace

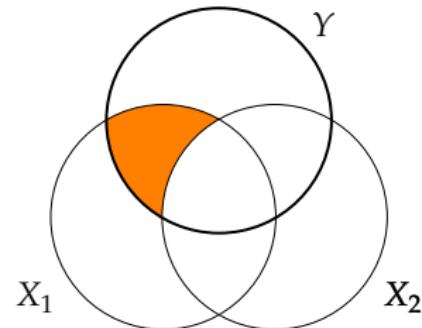
$$R^2_{Y \cdot X_1 X_2}$$



$$Y \sim X_2: R^2_{Y \cdot X_2}$$



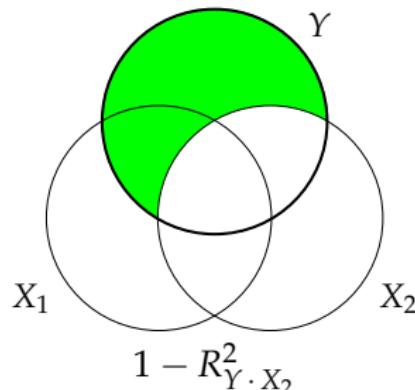
$$R^2_{Y \cdot X_1 X_2} - R^2_{Y \cdot X_2}$$



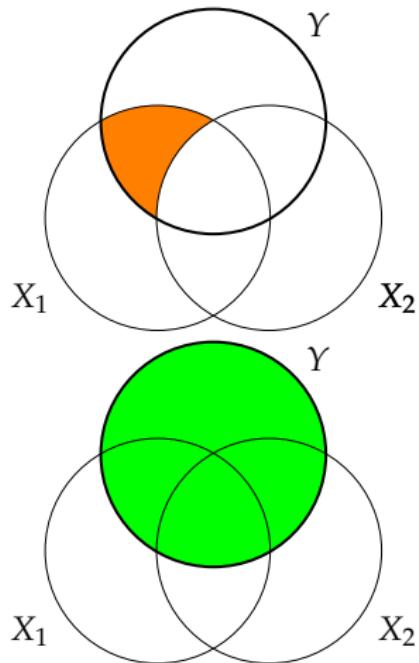
$$r^2_{Y \cdot X_1 \cdot X_2} = \frac{R^2_{Y \cdot X_1 X_2} - R^2_{Y \cdot X_2}}{1 - R^2_{Y \cdot X_2}}$$

Všimněte si, že $Y \sim X_2$ je podmodel $Y \sim X_1 + X_2$.

Koeficient determinace $R^2_{Y \cdot X_2}$ v $Y \sim X_2$ popisuje, jakou část celkové variability Y lze vysvětlit pomocí X_2 .



Koeficient determinace a semiparciální korelace



- veličinu Y modelujeme veličinou X_1 , přičemž vyloučujeme vliv veličiny X_2 na veličinu X_1
 - koeficient parciální korelace $r_{Y \cdot X_1 \cdot X_2}$ popisuje míru závislosti mezi Y a X_1 při vyloučení vlivu X_2 na veličinu X_1
- ⇒ kvadrát koeficientu parciální korelace popisuje, jakou část celkové variability veličiny Y lze vysvětlit samotnou veličinou X_1 ,

$$\begin{aligned} r_{Y \cdot (X_1 X_2)}^2 &= \\ &= \frac{R_{Y \cdot X_1 X_2}^2 - R_{Y \cdot X_2}^2}{1} = R_{Y \cdot X_1 X_2}^2 - R_{Y \cdot X_2}^2 \end{aligned}$$

Souvislost koeficientů korelace a determinace

Věta 3

Kvadrát koeficientu mnohonásobné korelace je rovný koeficientu determinace,

$$r_{Y \cdot \mathbf{X}}^2 = R_{Y \cdot \mathbf{X}}^2, \quad r_{Y \cdot Z \mathbf{X}}^2 = R_{Y \cdot Z \mathbf{X}}^2.$$

Věta 4

Pro kvadrát výběrového parciálního korelačního koeficientu platí

$$r_{YZ \cdot \mathbf{X}}^2 = r_{ZY \cdot \mathbf{X}}^2 = \frac{R_{Y \cdot Z \mathbf{X}}^2 - R_{Y \cdot \mathbf{X}}^2}{1 - R_{Y \cdot \mathbf{X}}^2} = \frac{R_{Z \cdot Y \mathbf{X}}^2 - R_{Z \cdot \mathbf{X}}^2}{1 - R_{Z \cdot \mathbf{X}}^2}.$$

Věta 5

Pro kvadrát výběrového semiparciálního korelačního koeficientu platí

$$r_{Y(Z \cdot \mathbf{X})}^2 = R_{Y \cdot Z \mathbf{X}}^2 - R_{Y \cdot \mathbf{X}}^2, \quad r_{Z(Y \cdot \mathbf{X})}^2 = R_{Z \cdot Y \mathbf{X}}^2 - R_{Z \cdot \mathbf{X}}^2.$$

$R_{Y \cdot \mathbf{X}}^2$, resp. $R_{Y \cdot Z \mathbf{X}}^2$, je koeficient determinace R^2 v lineárním regresním modelu $\mathbf{Y} \sim \mathbf{X}$, resp. $\mathbf{Y} \leftarrow \mathbf{Z} + \mathbf{X}$. Přitom $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_p)$ může být vektor veličin.

Vlastnosti korelačních koeficientů

Korelační koeficienty nabývají hodnot z intervalu $[-1; 1]$:

$$-1 \leq r_{YZ} \leq 1, \quad -1 \leq r_{YZ \cdot x} \leq 1, \quad -1 \leq r_{Y(Z \cdot x)} \leq 1.$$

Výjimkou je koeficient mnohonásobné korelace, který je navíc nezáporný:

$$0 \leq r_{Y \cdot x} \leq 1.$$

Pro libovolnou lineární kombinaci Y^* veličin X_1, \dots, X_p platí:

$$|r_{YY^*}| \leq r_{Y \cdot x}, \quad \text{spec.} \quad |r_{YX_j}| \leq r_{Y \cdot x}.$$

Pro Pearsonův, parciální a semiparciální korelační koeficient platí:

$$|r_{Y(X_1 \cdot x_2)}| \leq |r_{YX_1 \cdot x_2}|, \quad |r_{Y(X_1 \cdot x_2)}| \leq |r_{YX_1}|.$$

Přitom $r_{Y(X_1 \cdot x_2)} = r_{YX_1}$, pokud Y lze modelovat pomocí X_1 nezávisle na X_2 .

Platnost uvedených nerovností mezi korelačními koeficienty ověřte porovnáním odpovídajících schémat variability a vyjádření pomocné koeficientů determinace.

Příklad 1: mnohonásobná korelace $r_{V \cdot CP}$

Vycházíme z nejbohatšího modelu $V \sim C + P$.

```
# 1. jako korelace s nejlepším lineárním odhadem  
m <- lm (V ~ C + P, data = tabulka)  
v <- summary (m)  
cor (V, m$fitted.values)  
  
# 2. jako r.squared v lineárním regresním modelu  
sqrt (v$r.squared)
```

0.9826827

$$r_{V \cdot CP} = 0,983, \quad r^2_{V \cdot CP} = 0,966$$

Koefficient mnohonásobné korelace mezi veličinou V a skupinou veličin C, P je 0,983. Jedná se o (v absolutní hodnotě) největší koreaci, jaké lze na základě lineárního modelu pro V s veličinami C, P na daných datech dosáhnout.

Pomocí modelu mnohonásobné linární regrese jsme tedy na základě našich dat schopni vysvětlit 96,6 % variability veličiny V (výdaje domácností) pomocí veličin C (počet členů domácnosti) a P (čisté příjmy domácnosti).

Příklad 1: parciální korelace $r_{PV \cdot C}$, $r_{VP \cdot C}$

Výběrový parciální korelační koeficient počítáme jako Pearsonovu korelaci mezi rezidui dvojice lineárních regresních modelů $P \sim C$ a $V \sim C$.

```
# 1. jako korelace mezi dvema rezidui
m1 <- lm (P ~ C, data = tabulka)
m2 <- lm (V ~ C, data = tabulka)
v1 <- summary (m1)
v2 <- summary (m2)
cor (m1$residuals, m2$residuals)
```

0.8311677

Příklad 1: parciální korelace $r_{PV \cdot C}$, $r_{VP \cdot C}$

Alternativně lze výpočet (až na znaménko) provést pomocí koeficientů determinace dvojice lineárních regresních modelů $P \sim C + V$ a $P \sim C$ nebo dvojice modelů $V \sim C + P$ a $V \sim C$.

```
# 2. pomocí r.squared v lineárních regresních modelech
m01 <- lm (P ~ C + V, data = tabulka)
v01 <- summary (m01)
sqrt ( (v01$r.squared - v1$r.squared) / (1 - v1$r.squared) )

m02 <- lm (V ~ C + P, data = tabulka)
v02 <- summary (m02)
sqrt ( (v02$r.squared - v2$r.squared) / (1 - v2$r.squared) )

0.8311677
```

Příklad 1: semiparciální korelace $r_P(V \cdot C)$

Semiparciální korelace lze spočítat jako Pearsonovu korelacii mezi P a rezidui modelu $V \sim C$ nebo pomocí koeficientů determinace dvojice lineárních regresních modelů $P \sim V + C$ a $P \sim C$.

```
# 1. jako korelace mezi veličinou a reziduem druhé veličiny
m2 <- lm (V ~ C, data = tabulka)
cor (P, m2$residuals)

# 2. pomocí r.squared v lineárních regresních modelech
m01 <- lm (P ~ V + C, data = tabulka)
v01 <- summary (m01)
m1 <- lm (P ~ C, data = tabulka)
v1 <- summary (m1)
sqrt (v01$r.squared - v1$r.squared)
```

0.3236838

Příklad 1: semiparciální korelace $r_{V(P \cdot C)}$

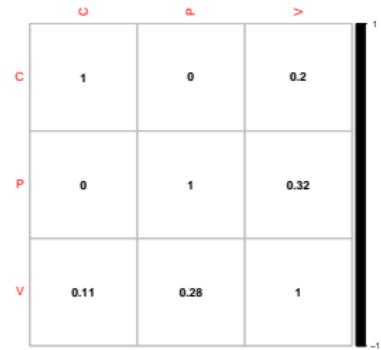
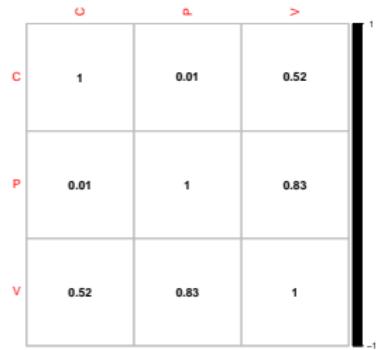
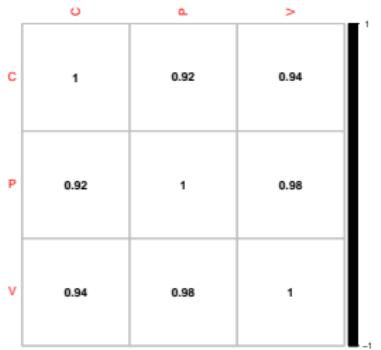
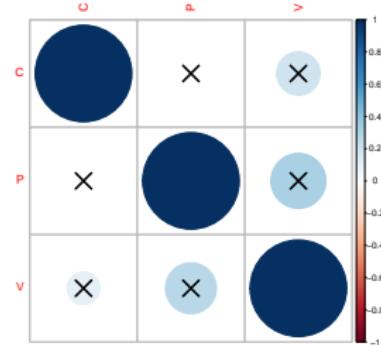
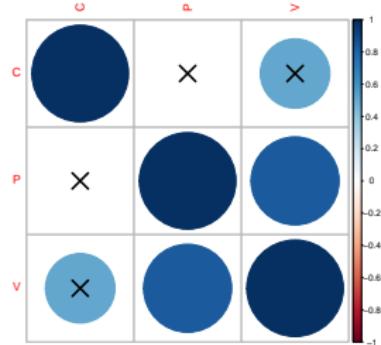
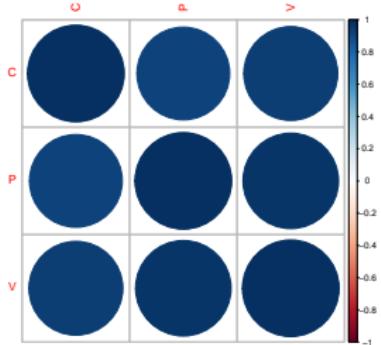
Podobně, jako Pearsonovu korelacii V a rezidui modelu $P \sim C$ nebo pomocí koeficientů determinace dvojice lineárních regresních modelů $V \sim P + C$ a $V \sim C$.

```
# 1. jako korelace mezi veličinou a reziduem druhé veličiny
m1 <- lm (P ~ C, data = tabulka)
cor (V, m1$residuals)
```

```
# 2. pomocí r.squared v lineárních regresních modelech
m02 <- lm (V ~ P + C, data = tabulka)
v02 <- summary (m02)
m2 <- lm (V ~ C, data = tabulka)
v2 <- summary (m2)
sqrt (v02$r.squared - v2$r.squared)
```

0.2769893

Příklad 1: Korelogramy



Příklad 2: mnohonásobná lineární regrese

model mnohonásobné lineární regrese: $Body = \beta_0 + \beta_1 Hmotnost + \beta_2 Vek$

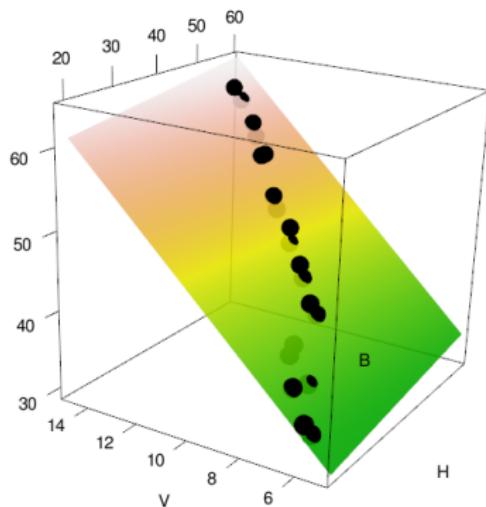
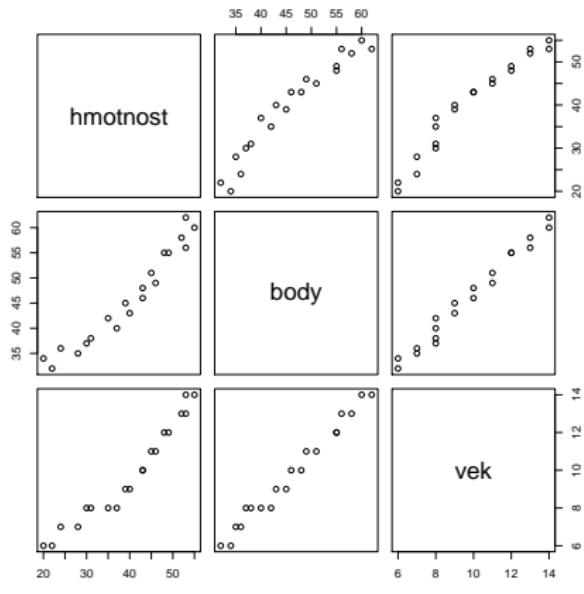
```
model <- lm (body ~ hmotnost + vek, data = tabulka)
summary (model)
```

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)
(Intercept)	11.06490	1.23693	8.945	7.72e-08 ***
hmotnost	0.09466	0.12090	0.783	0.444
vek	3.19203	0.51058	6.252	8.77e-06 ***

Residual standard error: 1.377 on 17 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.9806, Adjusted R-squared: 0.9784
F-statistic: 430.4 on 2 and 17 DF, p-value: 2.753e-15

MNČ-odhadý: $\beta_1 = 0,095 > 0$, $\beta_2 = 3,192 > 0 ***$, $R^2 = 0,981$, $F*$

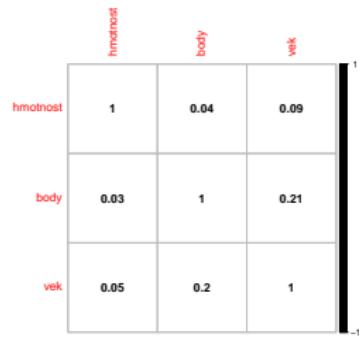
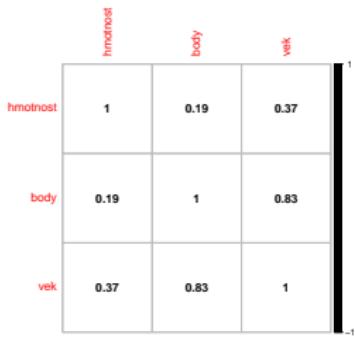
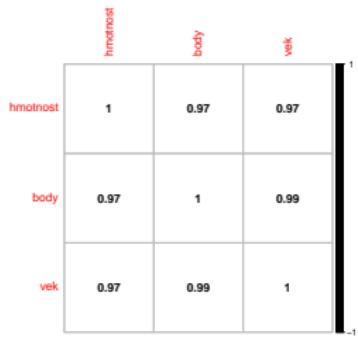
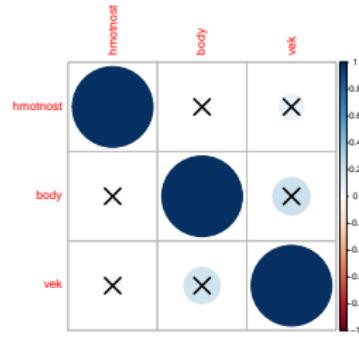
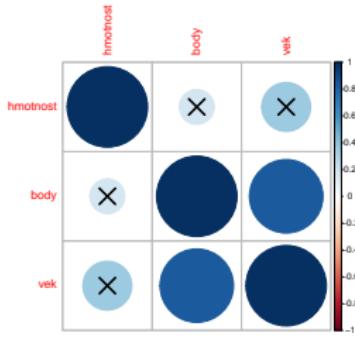
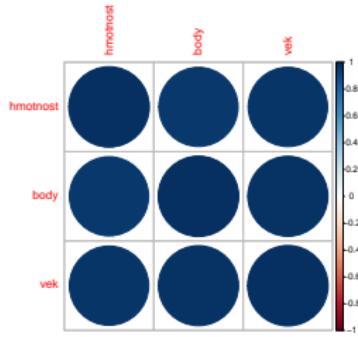
Příklad 2: scatter-plot a regresní rovina



rovnice regresní roviny:

$$Body = 11,065 + 0,095 \text{ Hmotnost} + 3,192 \text{ Vek}$$

Příklad 2: korelogramy



Spearmanův pořadový korelační koeficient

Neparametrickou analogií korelačního koeficientu r je Spearmanův pořadový korelační koeficient r_S . Je definován jako Pearsonův korelační koeficient mezi (průměrnými) pořadími v uspořádaných náhodných výběrech. Používáme jej zejména v situacích, kdy náhodné výběry mají výrazně nenormální rozdělení pravděpodobnosti.

Označme R_1, \dots, R_n , resp. S_1, \dots, S_n pořadí X_i a Y_i v uspořádaných výběrech

$$X_{(1)} \leq \cdots \leq X_{(n)}, \quad \text{resp.} \quad Y_{(1)} \leq \cdots \leq Y_{(n)}.$$

Definice 6 (Spearmanův korelační koeficient)

$$r_S = r(R, S) = 1 - 6 \frac{\sum_{i=1}^n d_i^2}{n(n^2 - 1)} \in [-1; 1],$$

kde $d_i = R_i - S_i$ jsou rozdíly pořadí v X-ovém a Y-ovém náhodném výběru.

V R je výpočet r_S implementován ve funkci `cor (X, Y, method="spearman")`

Test významnosti Spearanova r_S

Test významnosti r_S , tedy test hypotézy o nulovosti r_S , lze provádět pomocí některé z následujících testovacích statistik.

Věta 7 (Test významnosti Spearanova korelačního koeficientu)

Hypotézu $H_0 : r_S = 0$ na hladině významnosti α ,

pokud $|T| \geq t_{1-\alpha/2}(n - 2)$

pro $T = r_S \sqrt{\frac{n-2}{1-r_S^2}}$

nebo pokud $|Z| \geq u_{1-\alpha/2}$

pro $Z = \sqrt{\frac{n-3}{1,06}} \cdot \frac{1}{2} \ln \frac{1+r_S}{1-r_S}$.

V R je test implementován ve funkci `cor.test (X, Y, method="spearman")`

Kendallův korelační koeficient

Na principu pořadí, konkrétně souhlasného či nesouhlasného pořadí párů, je založen i další pořadový korelační koeficient, tzv. Kendallovo τ ,

Definice 8 (Kendallův korelační koeficient)

$$\tau = \frac{n_+ - n_-}{\sqrt{n_0 - n_X} \sqrt{n_0 - n_Y}} \in [-1; 1],$$

- $n_0 = \frac{1}{2}n(n-1) =$ počet všech párů,
- $n_+ =$ počet konkordantních párů,
- $n_- =$ počet diskordantních párů,
- $n_X = \sum_i \frac{1}{2}u_i(u_i - 1),$ resp. $n_Y = \sum_j \frac{1}{2}v_j(v_j - 1),$
kde $u_i,$ resp. $v_j,$ jsou počty opakování hodnot v X -ovém, resp. Y -ovém výběru.

Páry (X_i, Y_i) a (X_j, Y_j) nazýváme

- **konkordantní**, pokud jsou pořadí jejich elementů souhlasná, tzn.
 $X_i < X_j \& Y_i < Y_j$, anebo $X_i > X_j \& Y_i > Y_j$
- **diskordantní**, pokud jsou pořadí jejich elementů nesouhlasná, tzn.
 $X_i < X_j \& Y_i > Y_j$, anebo $X_i > X_j \& Y_i < Y_j$

Test významnosti Kendallova τ

Výpočet Kendallova τ v R: `cor (X, Y, method="kendall")`

Asymptotický test významnosti τ je v případě neopakovaných hodnot v náhodných výběrech založen na asymptotické normalitě τ , s $E\tau = 0$, za platnosti nulové hypotézy $H_0 : \tau = 0$.

Věta 9 (Asymptotický test významnosti Kendallova τ)

Hypotézu $H_0 : \tau = 0$ zamítáme na asymptotické hladině α , pokud

$$\sqrt{\frac{9n(n-1)}{2(2n+5)}} |\tau| \geq u_{1-\alpha/2}.$$

Pro malé rozsahy n a v případě výskytu opakovaných hodnot v některém náhodném výběru se používají korigované τ -statistiky.

Test významnosti Kendallova τ v R: `cor.test (X, Y, method="kendall")`

Příklad 1: výpočet Spearmanova $r_s(C, V)$

V	40	30	40	10	60	40	50	
C	4	2	4	1	5	3	4	
P	100	80	120	30	150	120	130	
								průměry
R = pořadí V	4	2	4	1	7	4	6	4
S = pořadí C	5	2	5	1	7	3	5	4
T = pořadí P	3	2	4,5	1	7	4,5	6	4
								součty
R·S	20	4	20	1	49	12	30	136
S·T	15	4	22,5	1	49	13,5	30	135
R·T	12	4	18	1	49	18	36	138
R^2	16	4	16	1	49	16	36	138
S^2	25	4	25	1	49	9	25	138
T^2	9	4	20,25	1	49	20,25	36	139,5

$$r_s(C, V) = r(R, S) = \frac{\sum_{i=1}^n (R_i S_i) - n \bar{R} \bar{S}}{\sqrt{\sum_{i=1}^n R_i^2 - n \bar{R}^2} \sqrt{\sum_{j=1}^n S_j^2 - n \bar{S}^2}} = \frac{136 - 7 \cdot 4^2}{138 - 7 \cdot 4^2} = 0,923$$

Příklad 1: Spearmanův $r_S(C, V)$ v R

```
R <- rank (V)
S <- rank (C)
cor (R, S)

cor (C, V, method = "spearman")
cor.test (C, V, method = "spearman")

  Spearmans rank correlation rho

data: C and V
S = 4.3077, p-value = 0.003023
alternative hypothesis: true rho is not equal to 0
sample estimates:
      rho
0.9230769
```

Příklad 1: Kendallovo $\tau(C, V)$ v R

```
cor (C, V, method = "kendall")
cor.test (C, V, method = "kendall")

Kendalls rank correlation tau

data: C and V
z = 2.6146, p-value = 0.008933
alternative hypothesis: true tau is not equal to 0
sample estimates:
      tau
0.8888889
```

Příklad 1: výpočet Kendallova $\tau(C, V)$

i, j	1	2	3	4	5	6	7
V	40	30	40	10	60	40	50
C	4	2	4	1	5	3	4
P	100	80	120	30	150	120	130

Je celkem 21 párů, z toho 16 je konkordančních, žádný diskordanční (konkordanční jsou všechny páry kromě párů na pozicích $i-j$: 1–3, 1–6, 1–7, 3–6, 3–7).

- $n_0 = \frac{1}{2}7 \cdot 6 = 21$,
- $n_+ = 16$
- $n_- = 0$
- $n_C = \frac{1}{2}3 \cdot 2 = 3$, $n_V = \frac{1}{2}3 \cdot 2 = 3$

$$\tau(C, V) = \frac{n_+ - n_-}{\sqrt{n_0 - n_C} \sqrt{n_0 - n_V}} = \frac{16 - 0}{\sqrt{21 - 3} \sqrt{21 - 3}} = 0,889$$

Korelační analýza: shrnutí

- Pearsonův korelační koeficient: definice, výpočet, vlastnosti, interpretace
- Mnohonásobná lineární regrese: zápis, řešení modelu, geometrický význam
- Koeficienty mnohonásobné, parciální a semiparciální korelace: definice, interpretace (vysvětlování závislostí mezi sledovanými náhodnými veličinami)
- Struktura korelační matice, korelogram, scatter-plot
- Souvislost korelačních koeficientů a koeficientů determinace v LRM (vysvětlení variability)
- Pořadové korelační koeficienty – Spearmanův a Kendallův: definice, konkordantní a diskordantní páry
- Význam a interpretace výsledků testů významnosti korelačních koeficientů