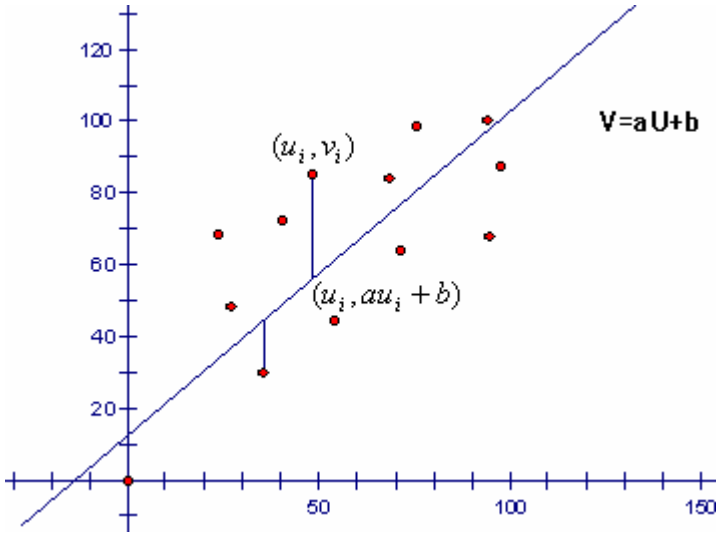
相關係數－最小平方法

目的：欲探討兩組資料序對間之關係程度，例如數學成績好，是否物理的成績也會比較好。讀書所花的時間愈多，是否成績也會比較好。社團參加的時數愈多，是否成績也會比較差。

散佈圖：將各資料序對畫在以資料項目爲橫座標及縱座標的座標平面上，標出點的位置，以便觀察各資料序對分佈狀況，及兩資料項目間關係的程度。此圖即稱爲散佈圖。

方法：希望在散佈圖中找出一條直線，以代表兩資料項目之線性關係，且此直線是最適合的，散佈圖中各點至此直線之鉛直距離平方和爲最小，此方法稱爲最小平方法。此時該條直線稱爲最適合直線（最佳近似直線），亦稱爲迴歸直線。



有n筆原始資料序對(x_i, y_i)，$1 \le i \le n$，其資料項目分別稱爲 X 與 Y，且 X 的平均數$\bar{x}$，標準差s_x；Y 的平均數$\bar{y}$，標準差s_y。

今將 X 以s_x爲單位予以標準化得各資料項分別爲$u_i = \dfrac{x_i - \bar{x}}{s_x}$，$1 \le i \le n$，且$\sum_{i=1}^{n} u_i$

$$= \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i - \bar{x}}{s_x} = \frac{1}{s_x} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x}) = \frac{1}{s_x} [\sum_{i=1}^{n} x_i - \sum_{i=1}^{n} \bar{x}] = \frac{1}{s_x} (n\bar{x} - n\bar{x}) = 0$$

將 Y 以s_y爲單位予以標準化得各資料項分別爲$v_i = \dfrac{y_i - \bar{y}}{s_y}$，$1 \le i \le n$，且$\sum_{i=1}^{n} v_i =$

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{y_i - \bar{y}}{s_y} = \frac{1}{s_y} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y}) = \frac{1}{s_y} [\sum_{i=1}^{n} y_i - \sum_{i=1}^{n} \bar{y}] = \frac{1}{s_y} (n\bar{y} - n\bar{y}) = 0$$

今欲求(u_i, v_i)與$(u_i, au_i + b)$鉛直距離平方和$\sum_{i=1}^{n}[v_i - (au_i + b)]^2$，並使其值爲最小，那時$a$與$b$各爲多少？找出了$a$與$b$，則最佳近似直線$v = au + b$（或$y = ax + b$）也就決定了。

$$\sum_{i=1}^{n}[v_i - (au_i + b)]^2$$

$$= \sum_{i=1}^{n}[{v_i}^2 - 2v_i(au_i + b) + (au_i + b)^2]$$

$$= \sum_{i=1}^{n}{v_i}^2 - 2\sum_{i=1}^{n}v_i(au_i + b) + \sum_{i=1}^{n}(au_i + b)^2$$

$$= \sum_{i=1}^{n}{v_i}^2 - 2a\sum_{i=1}^{n}u_iv_i - 2b\sum_{i=1}^{n}v_i + a^2\sum_{i=1}^{n}{u_i}^2 + 2ab\sum_{i=1}^{n}u_i + \sum_{i=1}^{n}b^2$$

$$= \sum_{i=1}^{n}{v_i}^2 + nb^2 + a^2\sum_{i=1}^{n}{u_i}^2 - 2a\sum_{i=1}^{n}u_iv_i$$

$$= \sum_{i=1}^{n}{v_i}^2 + nb^2 + \sum_{i=1}^{n}{u_i}^2[a^2 - 2\frac{\sum_{i=1}^{n}u_iv_i}{\sum_{i=1}^{n}{u_i}^2}a + (\frac{\sum_{i=1}^{n}u_iv_i}{\sum_{i=1}^{n}{u_i}^2})^2] - \frac{(\sum_{i=1}^{n}u_iv_i)^2}{\sum_{i=1}^{n}{u_i}^2}$$

$$= \sum_{i=1}^{n}{v_i}^2 + nb^2 + \sum_{i=1}^{n}{u_i}^2(a^2 - \frac{\sum_{i=1}^{n}u_iv_i}{\sum_{i=1}^{n}{u_i}^2})^2 - \frac{(\sum_{i=1}^{n}u_iv_i)^2}{\sum_{i=1}^{n}{u_i}^2}$$

故當$a = \frac{\sum_{i=1}^{n}u_iv_i}{\sum_{i=1}^{n}{u_i}^2}$且$b = 0$時，$\sum_{i=1}^{n}[v_i - (au_i + b)]^2$有最小值。

$$a = \frac{\sum_{i=1}^{n}u_iv_i}{\sum_{i=1}^{n}{u_i}^2}$$

$$= \frac{\sum_{i=1}^{n}(\frac{x_i - \bar{x}}{s_x})(\frac{y_i - \bar{y}}{s_y})}{\sum_{i=1}^{n}(\frac{x_i - \bar{x}}{s_x})^2}$$

$$= \frac{s_x}{s_y} \times \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y})}{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2}$$

$$= \frac{\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2}{n}}}{\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y})^2}{n}}} \times \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y})}{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2}$$

$$= \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y})^2}}$$

故直線 $v = au + b$ 即爲 $v = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y})^2}}u$

若定義 $s_{xy} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y})$，則 $a = \frac{s_{xy}}{s_x s_y}$，則直線 $v = au + b$ 即爲 $v = \frac{s_{xy}}{s_x s_y}u$。

$\frac{s_{xy}}{s_x s_y}$ 即爲迴歸直線之斜率，代表意義爲：X 變動一標準單位，Y 變動多少標準單位，可將其視爲 Y 對 X 的變動關係，故定義其爲 Y 與 X 的相關係數，相關係數 $r = \frac{s_{xy}}{s_x s_y} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y})^2}}$。

迴歸直線可表示爲

$\frac{Y-\bar{y}}{s_y} = \frac{s_{xy}}{s_x s_y}(\frac{X-\bar{x}}{s_x})$ 或

$Y-\bar{y} = \frac{s_{xy}}{s_x^2}(X-\bar{x})$ 或

$Y-\bar{y} = r \times \frac{s_y}{s_x}(X-\bar{x})$