

九州大学 工学部地球環境工学科
船舶海洋システム工学コース

システム設計工学（担当：木村）

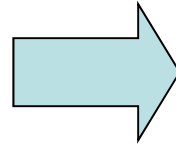
(2) 多重回帰・多項式近似

金曜2限(10:30～12:00)

場所： 船1講義室

【復習】 回帰分析

「身長」と「体重」
「数学」と「英語」の点数 など



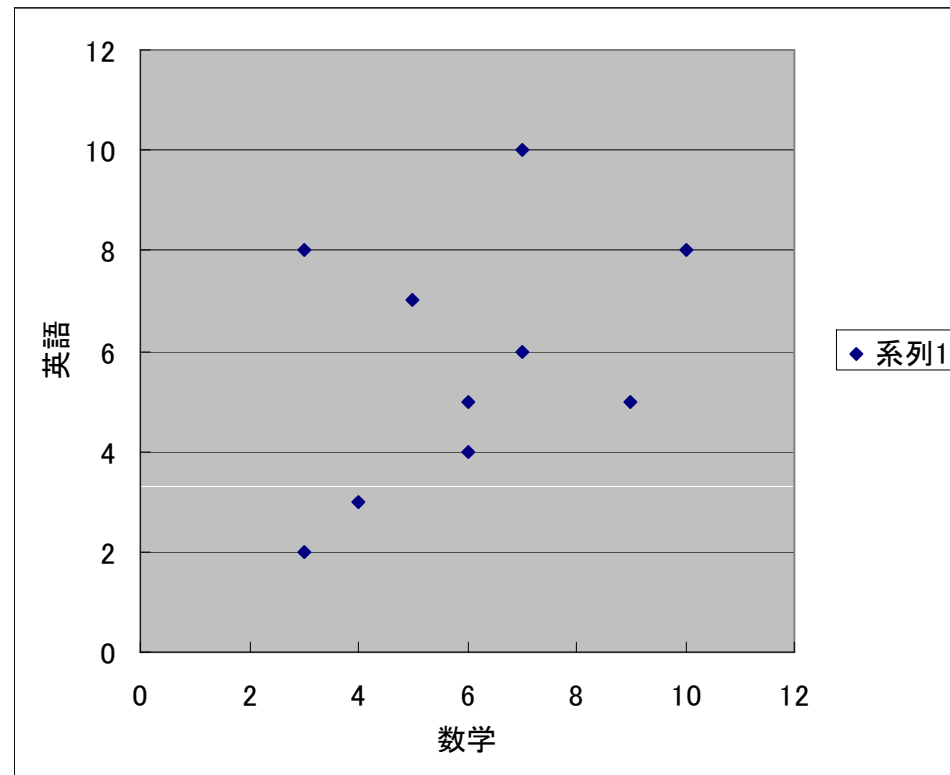
2変量についての関係を調べる

2変量データの例)

数学 x	英語 y
3	8
6	4
10	8
4	3
7	6
7	10
3	2
9	5
6	5
5	7

2変量データの表現方法:

散布図



【復習】 回帰分析

2変量の関係として直線をあてはめる

回帰直線

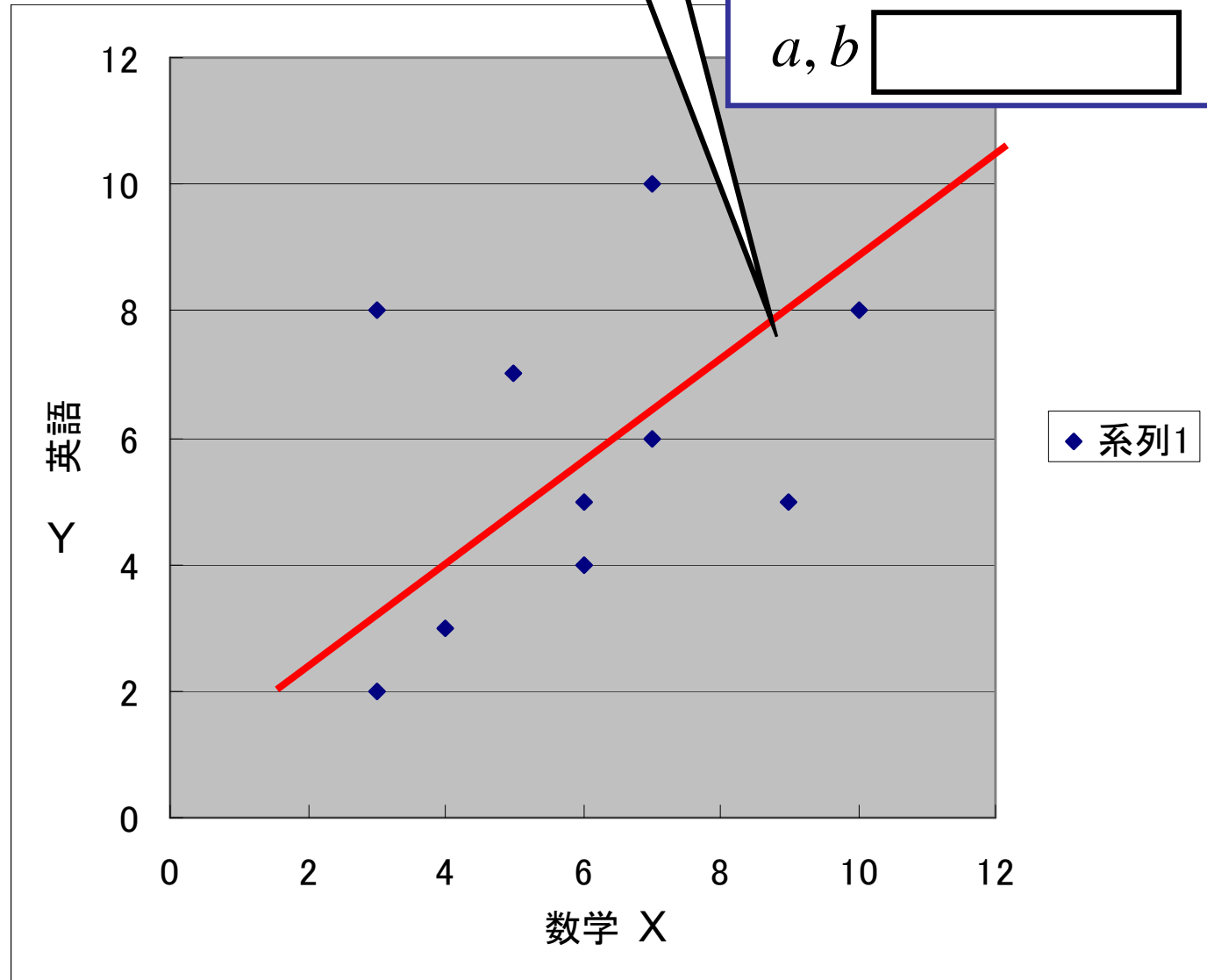
$y = ax + b$

x

y

a, b

数学 x	英語 y
3	8
6	4
10	8
4	3
7	6
7	10
3	2
9	5
6	5
5	7



【復習】 回帰分析

2変量の関係として直線をあてはめる

$$y = ax + b$$

x

回帰変数

y

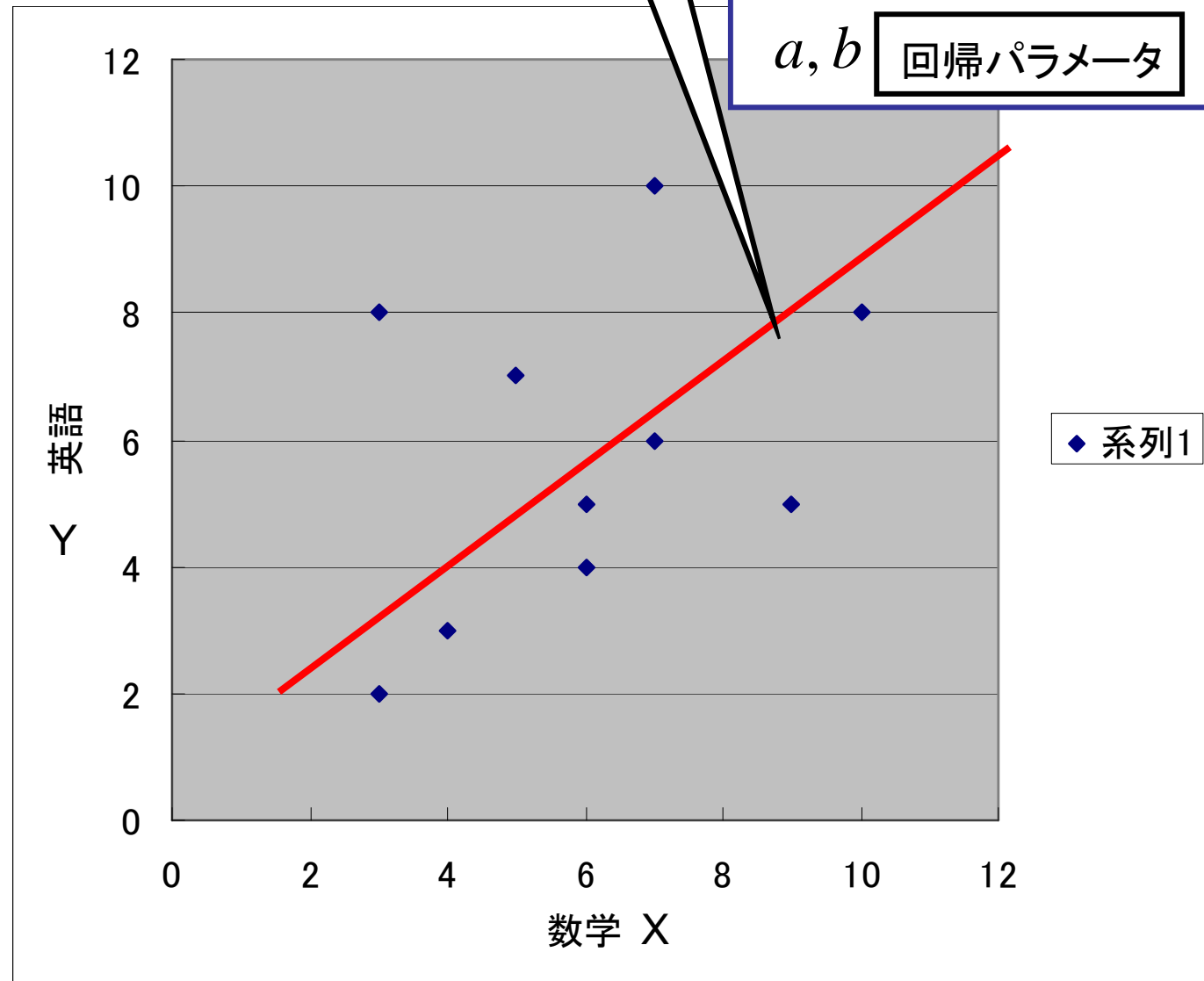
被回帰変数

a, b

回帰パラメータ

回帰直線

数学 x	英語 y
3	8
6	4
10	8
4	3
7	6
7	10
3	2
9	5
6	5
5	7



【復習】 回帰分析

回帰パラメータa,bの求め方

n 個のデータの組を $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$ と表す

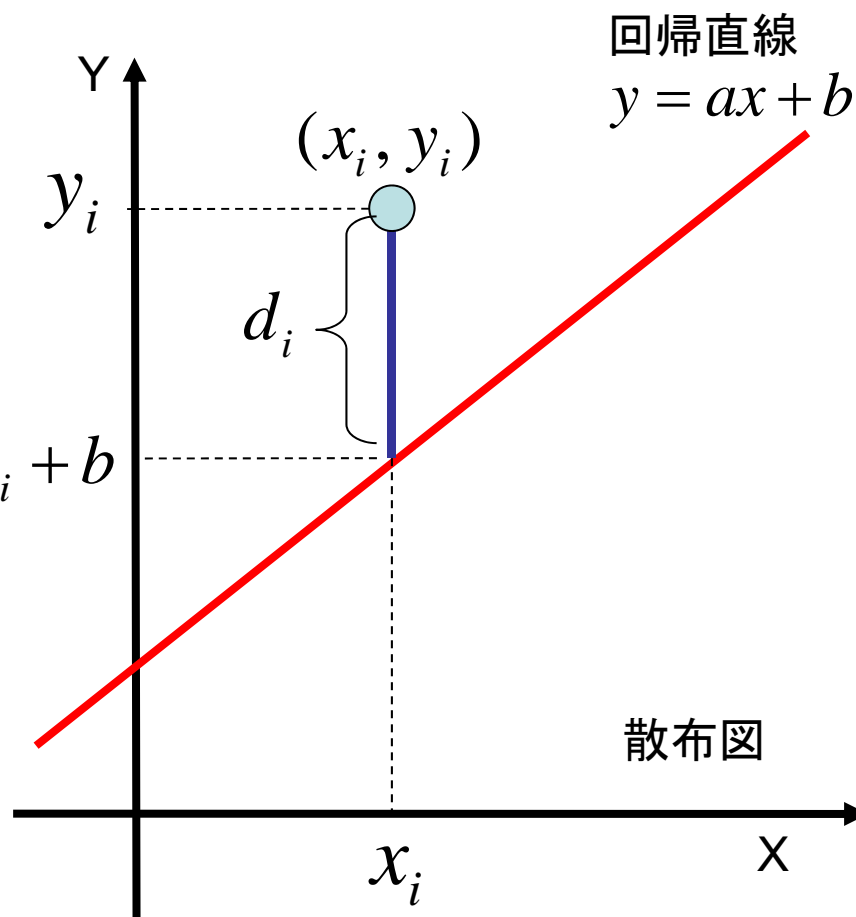
データの各点から同じ x_i の回帰直線までの距離を d_i とし、

この長さの2乗和 L を最小にするように

回帰パラメータ a, b を決める
(最小2乗法)

$$L = \sum_{i=1}^n d_i^2 =$$

回帰直線
 $y = ax + b$ y の x に対する回帰直線



【復習】 回帰分析

回帰パラメータa,bの求め方

n 個のデータの組を $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$ と表す

データの各点から同じ x_i の回帰直線までの距離を d_i とし、

この長さの2乗和 L を最小にするように

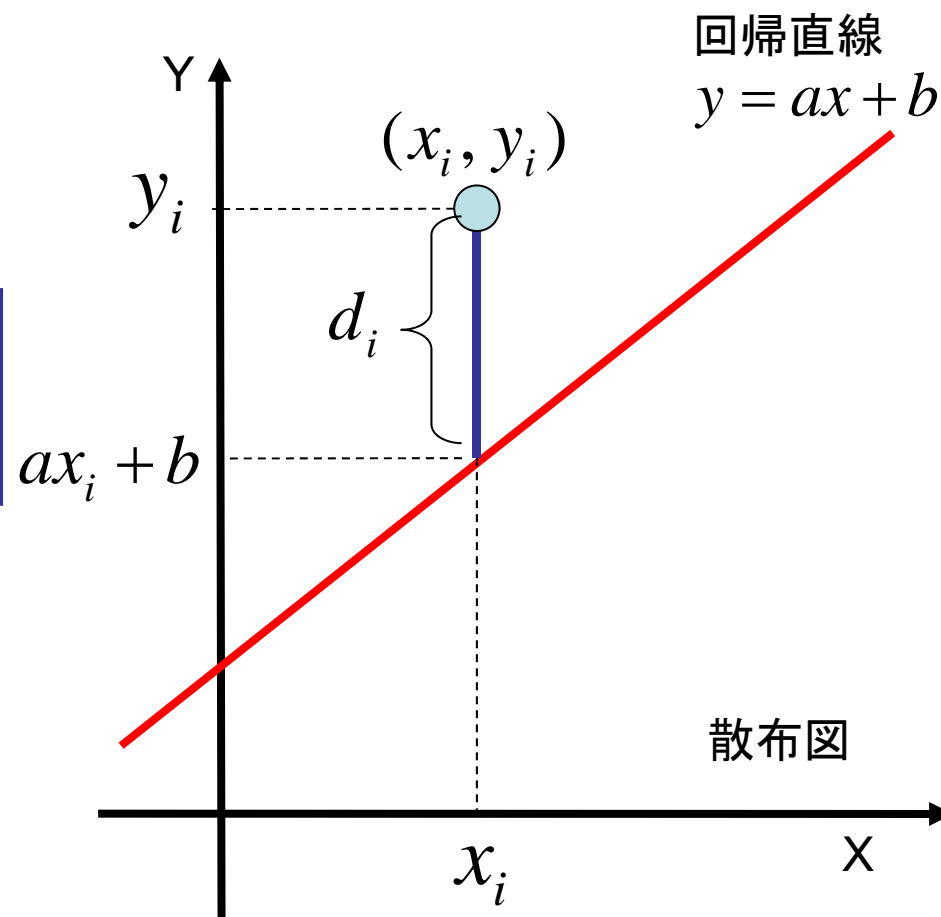
回帰パラメータ a, b を決める
(最小2乗法)

$$L = \sum_{i=1}^n d_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - (ax_i + b))^2$$

$$\frac{\partial L}{\partial a} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial b} = 0$$

の連立1次方程式を解いて a, b を求める

回帰直線
 $y = ax + b$ y の x に対する回帰直線



x の平均 $\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$ y の平均 $\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i$ とすると、

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

$$b = \bar{y} - a \bar{x} \quad \text{ここで、}$$

$$S_{xx} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \quad \text{x の分散}$$

$$S_{yy} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 \quad \text{y の分散}$$

$$S_{xy} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i y_i \right) - \bar{x} \bar{y}$$

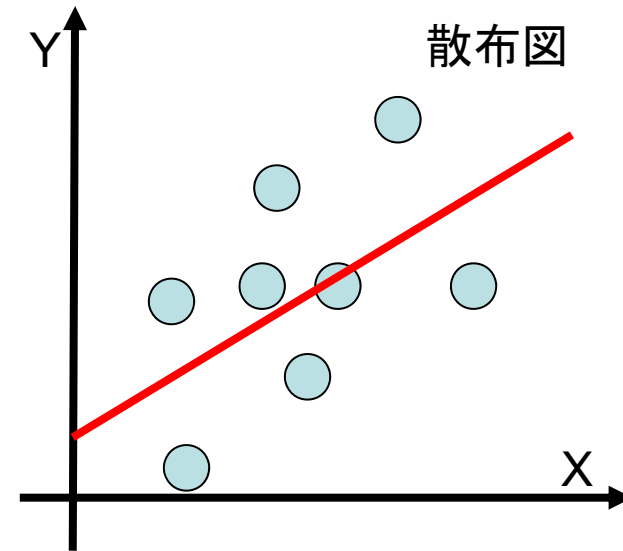
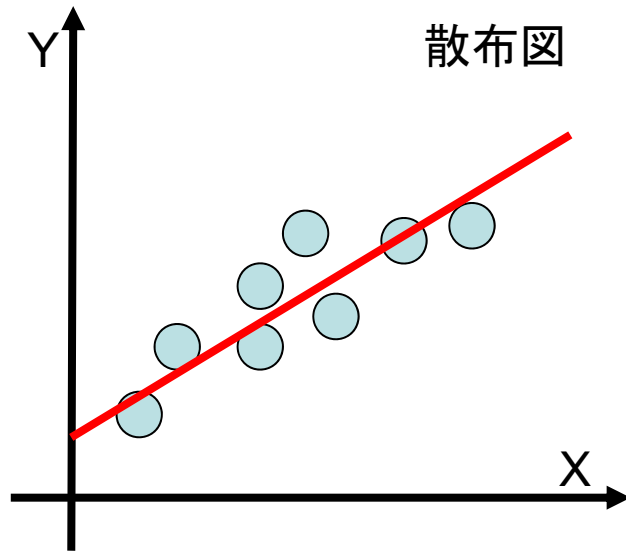
共分散
Covariance

とおくと、 $a = \frac{S_{xy}}{S_{xx}}$ となり、求める直線は $y - \bar{y} = \frac{S_{xy}}{S_{xx}} (x - \bar{x})$ すなわち

点 (\bar{x}, \bar{y}) を通り、傾き $\frac{S_{xy}}{S_{xx}}$ の直線である

相関係数

回帰直線のまわりに密集しているデータの度合い



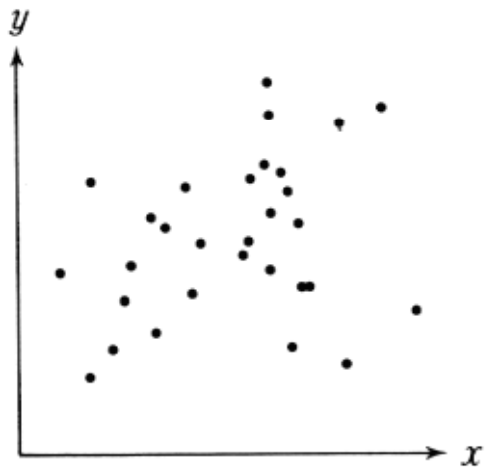
ピアソンの標本相関係数

$$r = \frac{S_{xy}}{\sqrt{S_{xx}} \sqrt{S_{yy}}}$$

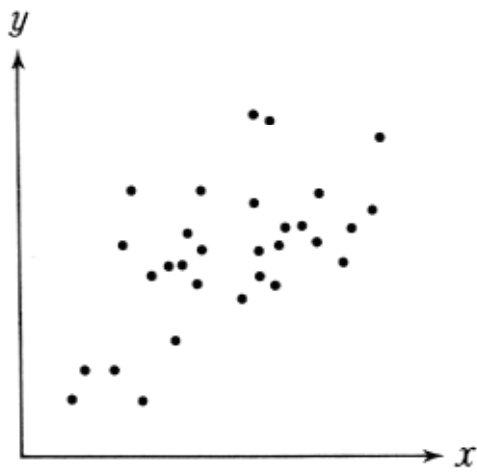
Labels for the formula:
- S_{xy} : 共分散 (Covariance)
- $\sqrt{S_{xx}}$: x の標準偏差 (Standard deviation of x)
- $\sqrt{S_{yy}}$: y の標準偏差 (Standard deviation of y)

この係数 r は $-1 \leq r \leq 1$ であり、散らばりが少ないとき、 $|r|$ は 1 に近い値をとる。

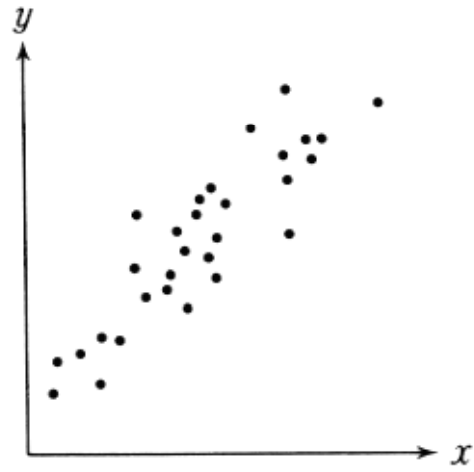
- $r > 0$ のとき 回帰直線の傾きが正 (x, y の間に正の相関)
- $r < 0$ のとき 回帰直線の傾きが負 (x, y の間に負の相関)



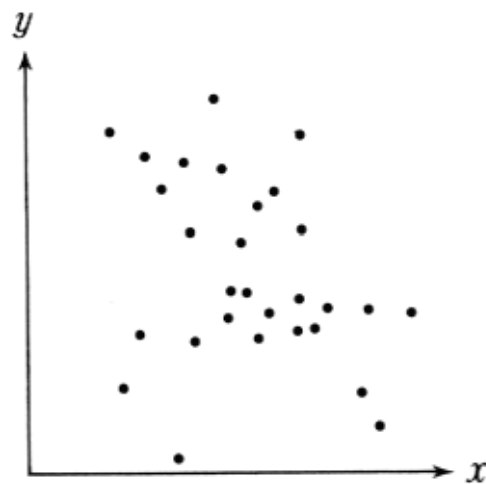
$r=0.3$



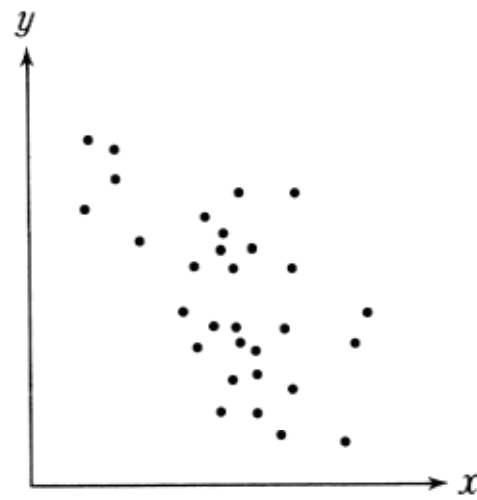
$r=0.6$



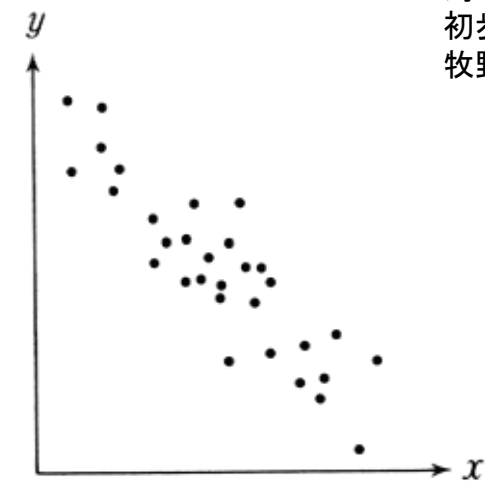
$r=0.9$



$r=-0.3$



$r=-0.6$



$r=-0.9$

【参考文献】

馬場 裕 著

初歩からの統計学

牧野書店

多重回帰

観測値 y を変数 x_1, x_2, \dots, x_K を用いて以下の式で説明する:

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots + b_K x_K + e$$

確率変動・誤差

このとき、 n 個の観測値 $(y_1, x_{11}, x_{12}, \dots, x_{1K}), (y_2, x_{21}, x_{22}, \dots, x_{2K}), (y_n, x_{n1}, x_{n2}, \dots, x_{nK})$ によって係数 $b_0, b_1, b_2, \dots, b_K$ の最小2乗推定量を求める。ここで、

目的変数 行列	y_1	説明変数 行列	1	x_{11}	x_{12}	\dots	x_{1K}	$\mathbf{b} =$ 回帰係数 行列	b_0	誤差変数 行列	e_1				
	y_2		1	x_{21}	x_{22}	\dots	x_{2K}					b_1	e_2		
	\vdots		\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots							\vdots	\vdots
	y_n		1	x_{n1}	x_{n2}	\dots	x_{nK}								

と表すと、

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{b} + \mathbf{e}$$

線形表現

誤差変数行列 \mathbf{e} の平方和 $\|\mathbf{e}\|^2$ を最小にする \mathbf{b} を求める

→ 回帰推定(最小2乗法) 回帰モデル

データから回帰モデルを得て何がうれしいか？ 回帰モデルによる推定

未知の説明変数(回帰変数)の値が $(x_{q1}, x_{q2}, \dots, x_{qK})$ で与えられたときの

目的変数(被回帰変数)の値 y_q をデータから**推定**できる！



それでは、
回帰係数行列 $\mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_K \end{bmatrix}$ をデータからどのように求めるか？

データから回帰モデルを得て何がうれしいか？ 回帰モデルによる推定

未知の説明変数(回帰変数)の値が $(x_{q1}, x_{q2}, \dots, x_{qK})$ で与えられたときの

目的変数(被回帰変数)の値 y_q をデータから**推定**できる！

$$y_q = b_0 + b_1 x_{q1} + b_2 x_{q2} + \dots + b_K x_{qK}$$

推定値

誤差eの項はゼロで計算

それでは、
回帰係数行列 $\mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_K \end{bmatrix}$

をデータからどのように求めるか？

誤差ベクトル \mathbf{e} の平方和 $\|\mathbf{e}\|^2$ を最小にする \mathbf{b} を最尤推定値 $\hat{\mathbf{b}}$ と表すと、

単純回帰の場合と同様に、回帰係数の各要素で誤差ベクトルの平方和を偏微分し、これらが全てゼロとした連立方程式を立てて解くことにより、回帰係数ベクトルは以下の式で計算される：




ただし $\mathbf{X}^{\text{Trans}}$ は \mathbf{X} の転置行列を表す。

$\|\mathbf{e}\|^2$ の最小値 S_e を残差平方和といい、



±σ の範囲内に
68.27%の
データが存在

で与えられる。  $\sigma = \sqrt{\frac{S_e}{n}}$ より、回帰で推定する場合の精度が分かる

誤差ベクトル \mathbf{e} の平方和 $\|\mathbf{e}\|^2$ を最小にする \mathbf{b} を最尤推定値 $\hat{\mathbf{b}}$ と表すと、

単純回帰の場合と同様に、回帰係数の各要素で誤差ベクトルの平方和を偏微分し、これらが全てゼロとした連立方程式を立てて解くことにより、回帰係数ベクトルは以下の式で計算される:

$$\hat{\mathbf{b}} = \left(\mathbf{X}^{\text{Trans}} \mathbf{X} \right)^{-1} \mathbf{X}^{\text{Trans}} \mathbf{y}$$

ただし $\mathbf{X}^{\text{Trans}}$ は \mathbf{X} の転置行列を表す。

\mathbf{X} の擬似逆行列 \mathbf{X}^+


pseudo-inverse matrix

ただし \mathbf{X} は m 行 n 列、 $m > n$

$\|\mathbf{e}\|^2$ の最小値 S_e を残差平方和といい、

$$S_e = \mathbf{y}^{\text{Trans}} \left\{ \mathbf{I} - \mathbf{X} \left(\mathbf{X}^{\text{Trans}} \mathbf{X} \right)^{-1} \mathbf{X}^{\text{Trans}} \right\} \mathbf{y}$$

± σ の範囲内に
68.27%の
データが存在

で与えられる。  $\sigma = \sqrt{\frac{S_e}{n}}$ より、回帰で推定する場合の精度が分かる

誤差ベクトル \mathbf{e} の平方和 $\|\mathbf{e}\|^2$ を最小にする $\hat{\mathbf{b}}$ の導出

$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{b} + \mathbf{e}$ より $\|\mathbf{e}\|^2 = (\mathbf{X}\mathbf{b} - \mathbf{y})^{Trans} (\mathbf{X}\mathbf{b} - \mathbf{y})$ ← \mathbf{b} の2次関数なので
微分してゼロの \mathbf{b} を求める

$$\frac{\|\mathbf{e}\|^2}{\partial \mathbf{b}} = 2\mathbf{X}^{Trans} \mathbf{X}\mathbf{b} - 2\mathbf{X}^{Trans} \mathbf{y} = 0 \quad \leftarrow \mathbf{b} \text{ について解く}$$

$$\hat{\mathbf{b}} \quad \leftarrow \quad \mathbf{b} = (\mathbf{X}^{Trans} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^{Trans} \mathbf{y}$$

【復習】 転置行列とは？

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{bmatrix}^{Trans} = \begin{bmatrix} \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 5 & 6 & 7 & 8 \\ 9 & 10 & 11 & 12 \end{bmatrix}^{Trans} = \begin{bmatrix} \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{X}^{Trans} \mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1K} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2K} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nK} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^n x_{i1} & \sum_{i=1}^n x_{i2} & \cdots & \sum_{i=1}^n x_{ik} \\ \sum_{i=1}^n x_{i1} & \sum_{i=1}^n x_{i1}^2 & \sum_{i=1}^n x_{i1} x_{i2} & \cdots & \sum_{i=1}^n x_{i1} x_{ik} \\ \sum_{i=1}^n x_{i2} & \sum_{i=1}^n x_{i1} x_{i2} & \sum_{i=1}^n x_{i2}^2 & \cdots & \sum_{i=1}^n x_{i2} x_{ik} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=1}^n x_{ik} & \sum_{i=1}^n x_{i1} x_{ik} & \sum_{i=1}^n x_{i2} x_{ik} & \cdots & \sum_{i=1}^n x_{ik}^2 \end{bmatrix}$$

【復習】 転置行列とは？

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{bmatrix}^{Trans} = \begin{bmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 2 & 5 & 8 \\ 3 & 6 & 9 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 5 & 6 & 7 & 8 \\ 9 & 10 & 11 & 12 \end{bmatrix}^{Trans} = \begin{bmatrix} 1 & 5 & 9 \\ 2 & 6 & 10 \\ 3 & 7 & 11 \\ 4 & 8 & 12 \end{bmatrix}$$

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

$$= \begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^n x_{i1} & \sum_{i=1}^n x_{i2} & \cdots & \sum_{i=1}^n x_{ik} \\ \sum_{i=1}^n x_{i1} & \sum_{i=1}^n x_{i1}^2 & \sum_{i=1}^n x_{i1}x_{i2} & \cdots & \sum_{i=1}^n x_{i1}x_{ik} \\ \sum_{i=1}^n x_{i2} & \sum_{i=1}^n x_{i1}x_{i2} & \sum_{i=1}^n x_{i2}^2 & \cdots & \sum_{i=1}^n x_{i2}x_{ik} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=1}^n x_{ik} & \sum_{i=1}^n x_{i1}x_{ik} & \sum_{i=1}^n x_{i2}x_{ik} & \cdots & \sum_{i=1}^n x_{ik}^2 \end{bmatrix}$$

分散・共分散行列
に關係

多重共線性

観測値 y を変数 x_1, x_2, \dots, x_K を用いて以下の式で説明している:

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots + b_K x_K + e$$

← 確率変動・誤差

もし、例えば変数 $x_1 = x_2$ だったら、回帰係数ベクトル \mathbf{b} は一意には定まらない

→ 計算が不安定になり、無意味な解が出やすい

多重共線性

観測値 y を変数 x_1, x_2, \dots, x_K を用いて以下の式で説明している:

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots + b_K x_K + e$$

← 確率変動・誤差

もし、例えば変数 $x_1 = x_2$ だったら、回帰係数ベクトル \mathbf{b} は一意には定まらない

→ 計算が不安定になり、無意味な解が出やすい

一般に、以下の関係式

$$a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_K x_K = 0$$

に近い関係があるとき、データは強い**多重共線関係**にあるという。

(ただし a は任意の定数) このような場合、冗長な変数を取り除いてからモデル化

多重共線性の判定: の固有値の最大値と最小値の比率が
1000を超える場合、多重共線性ありと判断

多重共線性

観測値 y を変数 x_1, x_2, \dots, x_K を用いて以下の式で説明している:

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots + b_K x_K + e$$

← 確率変動・誤差

もし、例えば変数 $x_1 = x_2$ だったら、回帰係数ベクトル \mathbf{b} は一意には定まらない

→ 計算が不安定になり、無意味な解が出やすい

一般に、以下の関係式

$$a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_K x_K = 0$$

に近い関係があるとき、データは強い**多重共線関係**にあるという。

(ただし a は任意の定数) このような場合、冗長な変数を取り除いてからモデル化

多重共線性の判定: **分散共分散行列** の固有値の最大値と最小値の比率が 1000を超える場合、多重共線性ありと判断

多重共線性

観測値 y を変数 x_1, x_2, \dots, x_K を用いて以下の式で説明している:

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots + b_K x_K + e$$

← 確率変動・誤差

もし、例えば変数 $x_1 = x_2$ だったら、回帰係数ベクトル \mathbf{b} は一意には定まらない

→ 計算が不安定になり、無意味な解が出やすい

一般に、以下の関係式

$$a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_K x_K = 0$$

に近い関係があるとき、データは強い**多重共線関係**にあるという。

(ただし a は任意の定数) このような場合、冗長な変数を取り除いてからモデル化

多重共線性の判定: **分散共分散行列** の固有値の最大値と最小値の比率が 1000を超える場合、多重共線性ありと判断

補足: **分散共分散行列** とは?

2変数 x_i, x_j についての共分散を全ての組合せで計算して行列として表したもの。

($i=j$ の場合、対角要素に相当し、単なる分散になる)

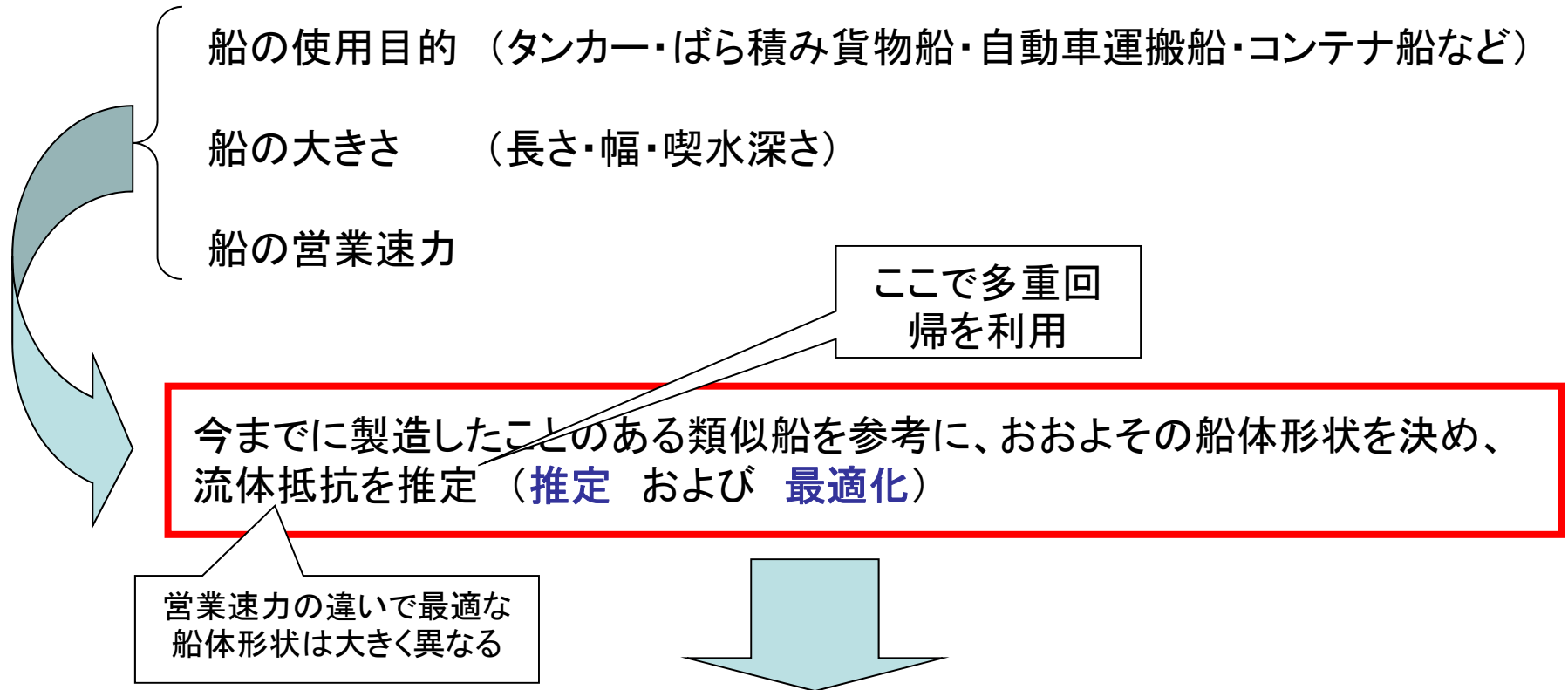
分散・共分散行列

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_{i1} - \bar{x}_1)^2 & \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_{i1} - \bar{x}_1)(x_{i2} - \bar{x}_2) & \cdots & \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_{i1} - \bar{x}_1)(x_{ik} - \bar{x}_k) \\ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_{i1} - \bar{x}_1)(x_{i2} - \bar{x}_2) & \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_{i2} - \bar{x}_2)^2 & \cdots & \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_{i2} - \bar{x}_2)(x_{ik} - \bar{x}_k) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_{i1} - \bar{x}_1)(x_{ik} - \bar{x}_k) & \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_{i2} - \bar{x}_2)(x_{ik} - \bar{x}_k) & \cdots & \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_{ik} - \bar{x}_k)^2 \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{n} \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n x_{i1}^2 & \sum_{i=1}^n x_{i2} x_{i1} & \cdots & \sum_{i=1}^n x_{ik} x_{i1} \\ \sum_{i=1}^n x_{i1} x_{i2} & \sum_{i=1}^n x_{i2}^2 & \cdots & \sum_{i=1}^n x_{ik} x_{i2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=1}^n x_{i1} x_{ik} & \sum_{i=1}^n x_{i2} x_{ik} & \cdots & \sum_{i=1}^n x_{ik}^2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \bar{x}_1^2 & \bar{x}_2 \bar{x}_1 & \cdots & \bar{x}_k \bar{x}_1 \\ \bar{x}_1 \bar{x}_2 & \bar{x}_2^2 & \cdots & \bar{x}_k \bar{x}_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \bar{x}_1 \bar{x}_k & \bar{x}_2 \bar{x}_k & \cdots & \bar{x}_k^2 \end{bmatrix}$$

$\mathbf{X}^{Trans} \mathbf{X}$ と見比べよ

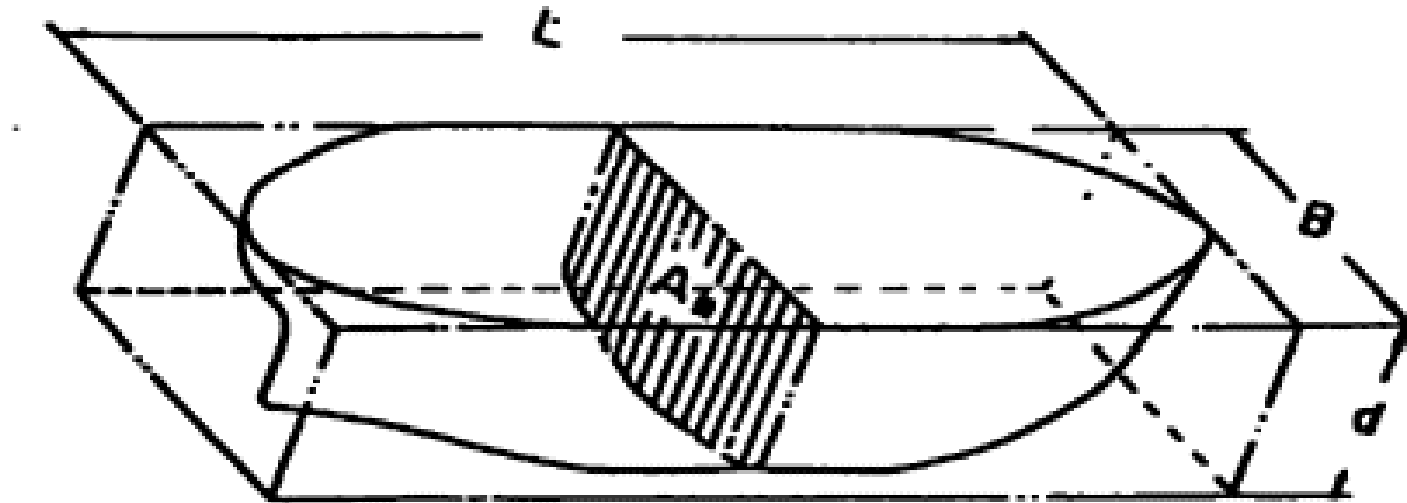
船舶基本設計における多重回帰の応用



- ・営業速力を出すのに必要な馬力を求め、エンジンを選定、
- ・貨物室の容積を決定、
- ・その他もろもろ...

詳細な船体形状を用いて流体シミュレーションを行ったり、
模型実験を行って推定した流体抵抗になることを確認するのはずっと後

(1) 方形係数 (Block coefficient)、CB この係数は、船体の水線下の容積のやせている割合を示すもので、船の排水容積と、これと長さ、幅、喫水の等しい直方体の容積との比で表わされる。



CBの値の小さい船をやせ型船、CBの大きい船を肥大船と言う。

CBの概略値は、

貨物船では0.62~0.84

旅客船では0.50~0.60

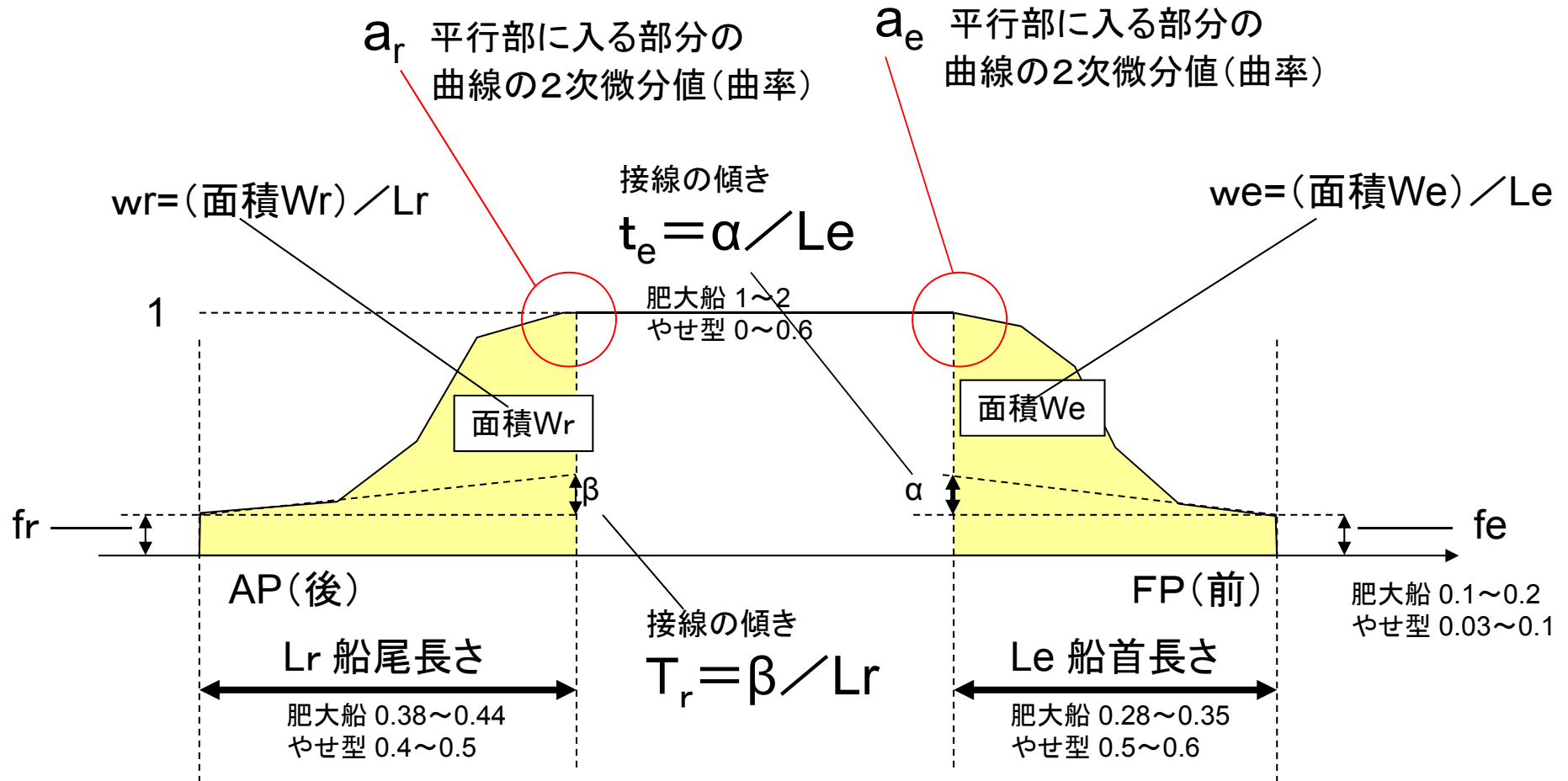
漁船では0.55~0.75

(日本財団電子図書館より引用)

船の要目：形状

CPカーブ 船の喫水部を輪切りにした断面積の曲線
 最大部の断面積を1とする

パラメータ12個



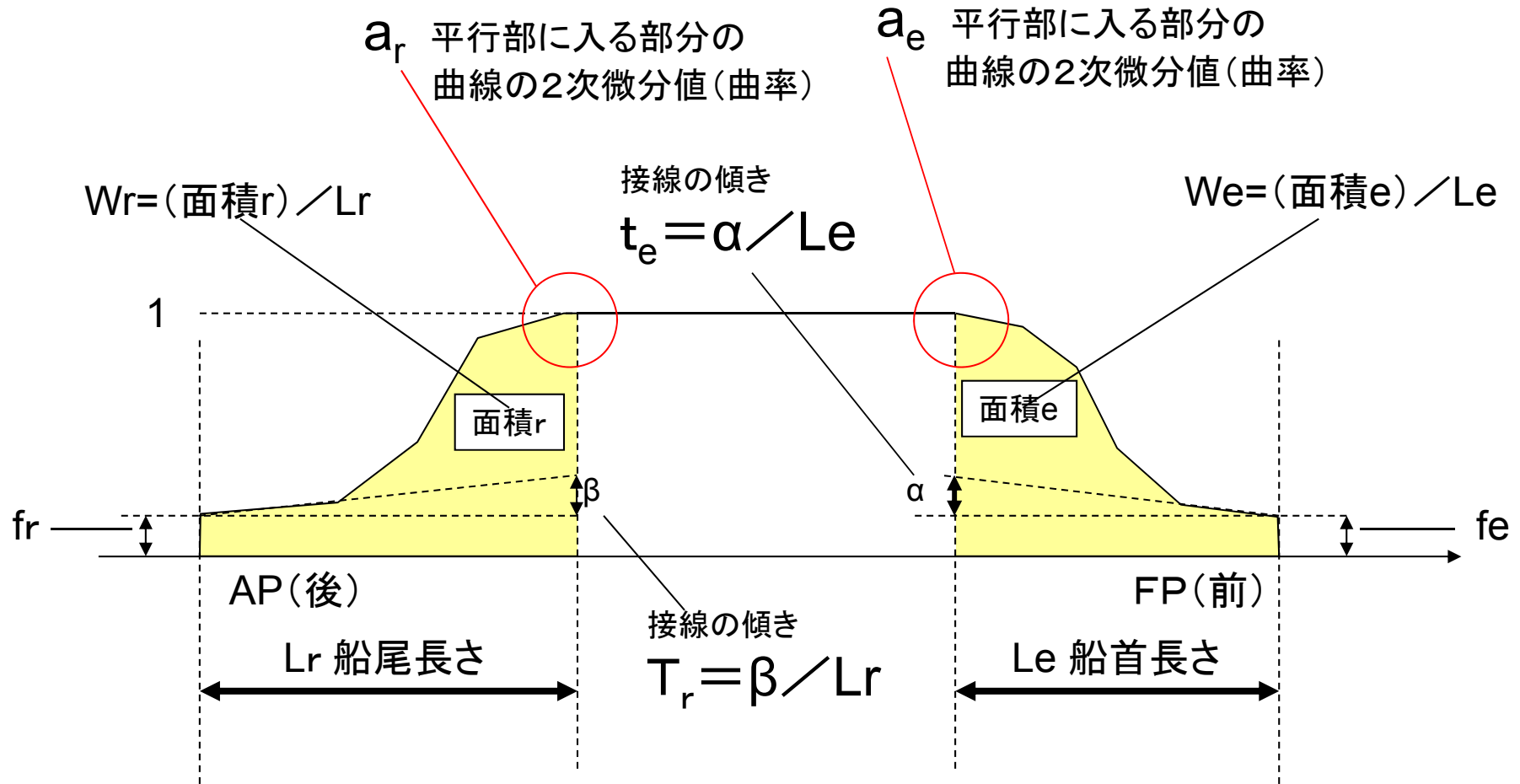
肥大度

{	$H_r / B = L_r (1 - w_r) L_{pp} / B$	肥大船 0.65~0.9 やせ型 0.7~1.4
	$H_e / B = L_e (1 - w_e) L_{pp} / B$	肥大船 0.3~0.9 やせ型 0.7~1.9

船の要目：形状

CWカーブ 船の喫水部を輪切りにした線分の長さを表す
 最大部の幅を1とする

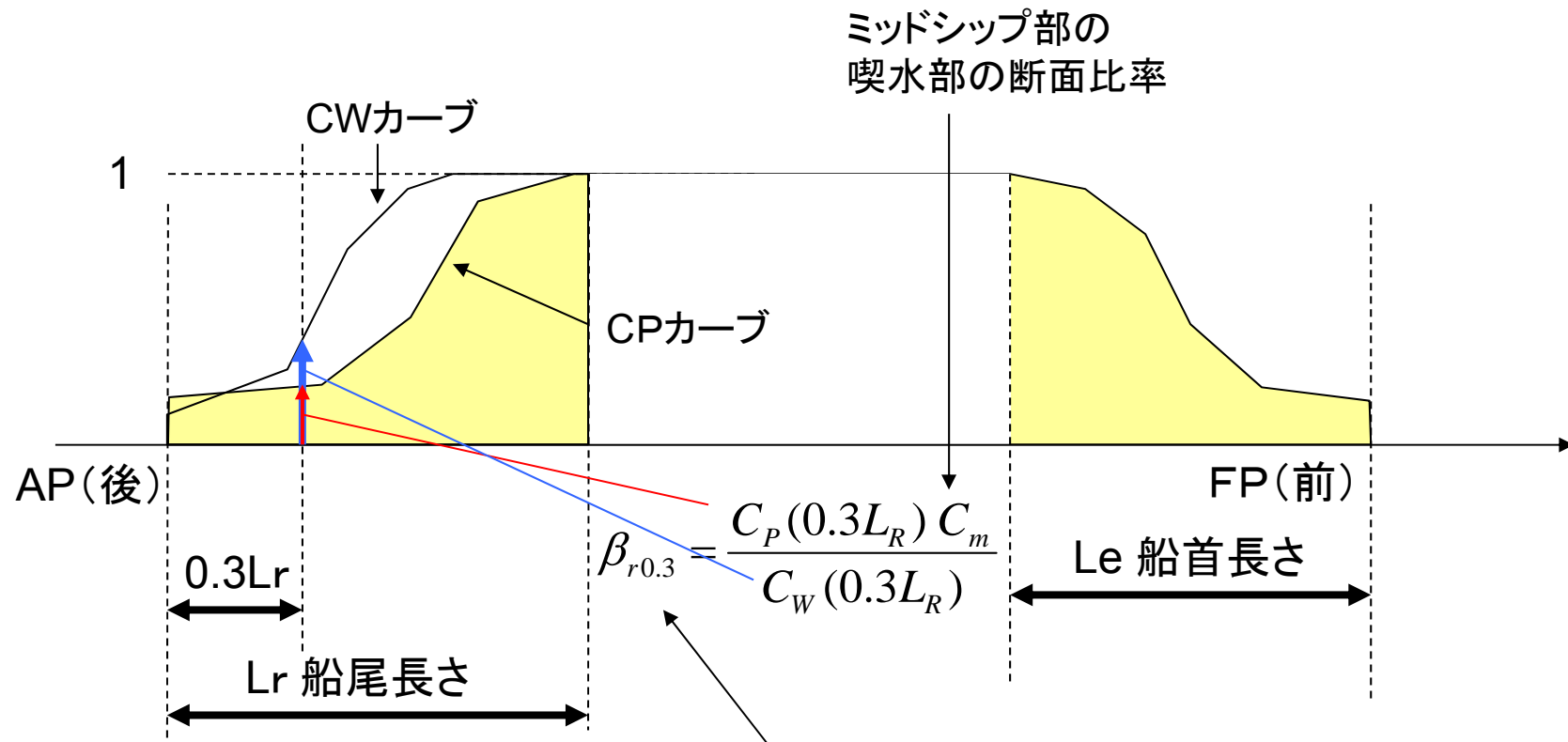
パラメータ12個



肥大度

$$\begin{cases} Hr / B = L_r (1 - W_r) L_{pp} / B \\ He / B = L_e (1 - W_e) L_{pp} / B \end{cases}$$

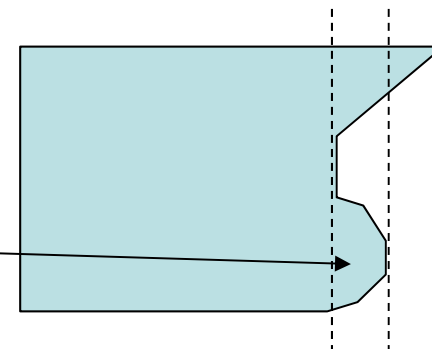
船の要目：形状 CPカーブとCWカーブの両方に関連



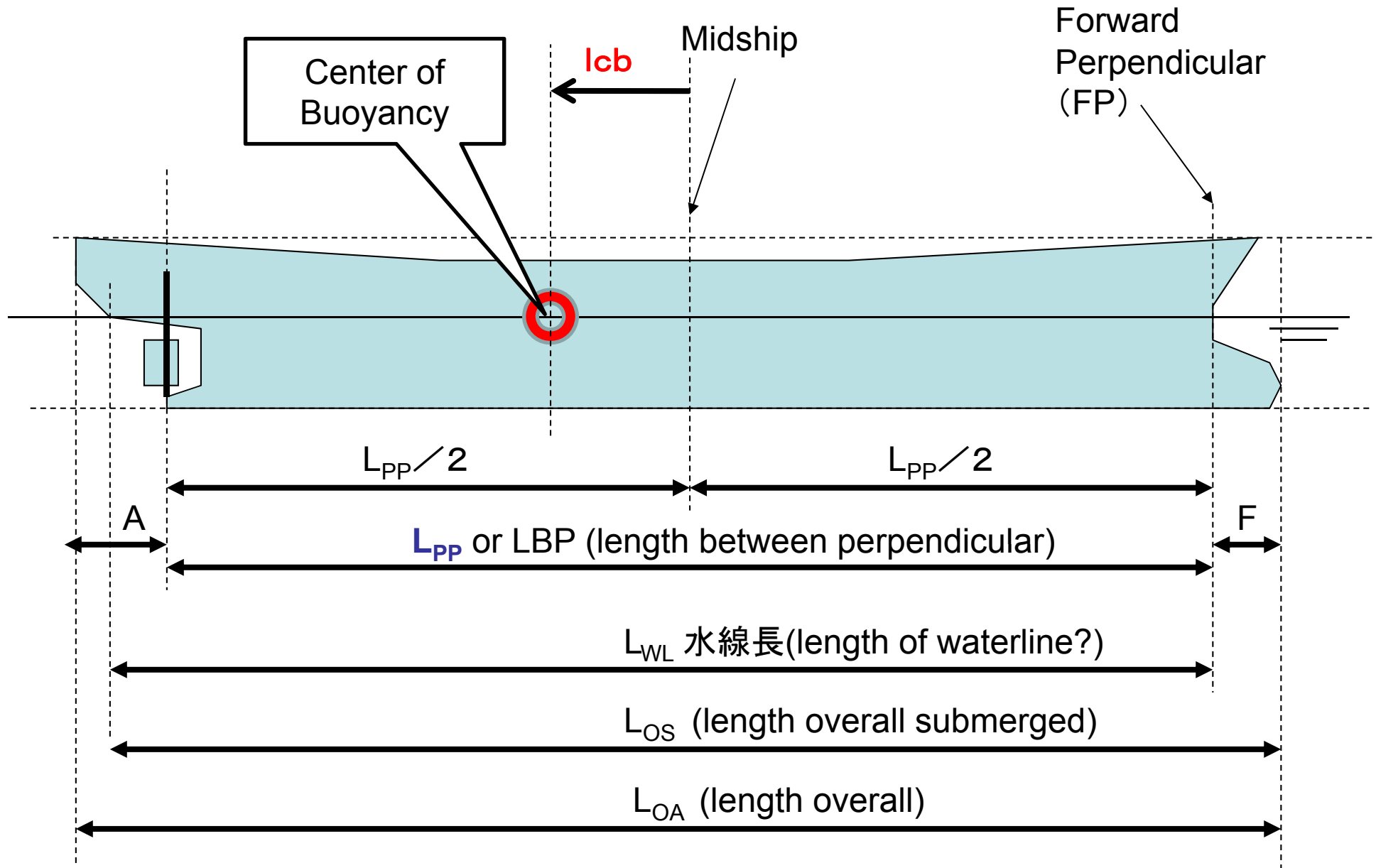
この指標は、後で推進性能を推定するときに
Cwカーブを使わない場合に代用する。

Cp、CWカーブ自体は5次式で表現し、データ点をフィッティング

Percent_Lpp バルバスバウ長さ
Percent_d バルバスバウ深さ



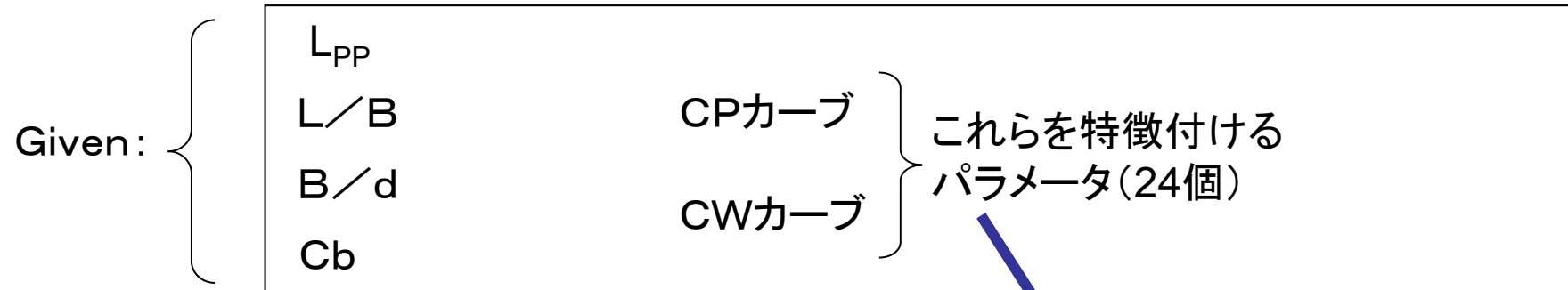
Important Parameters of ship hull (9)



Overhang = A/F

問題の定式化

船体形状を表すパラメータ集合



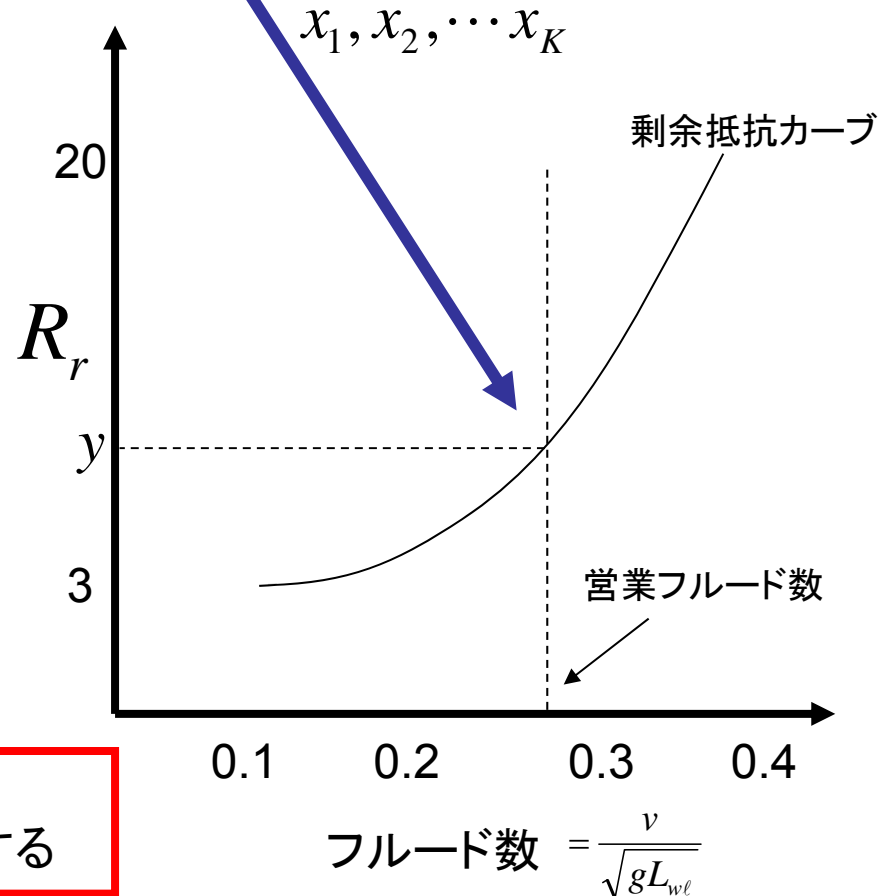
船の抵抗 $R_t = R_f + R_r$

摩擦抵抗 剰余抵抗

これを使う

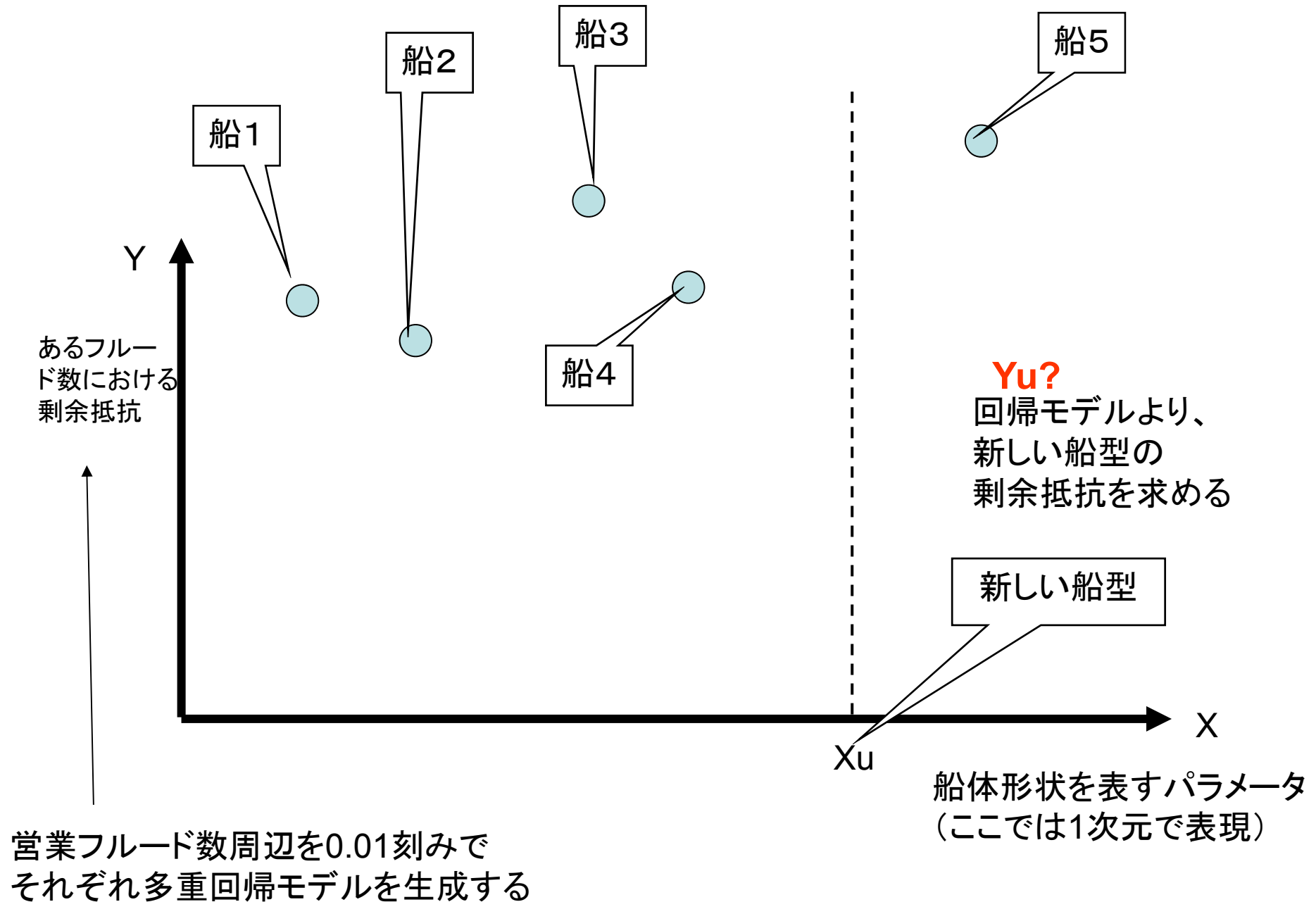
$$= (1 + K)R_f + R_W$$

形状影響係数 造波抵抗

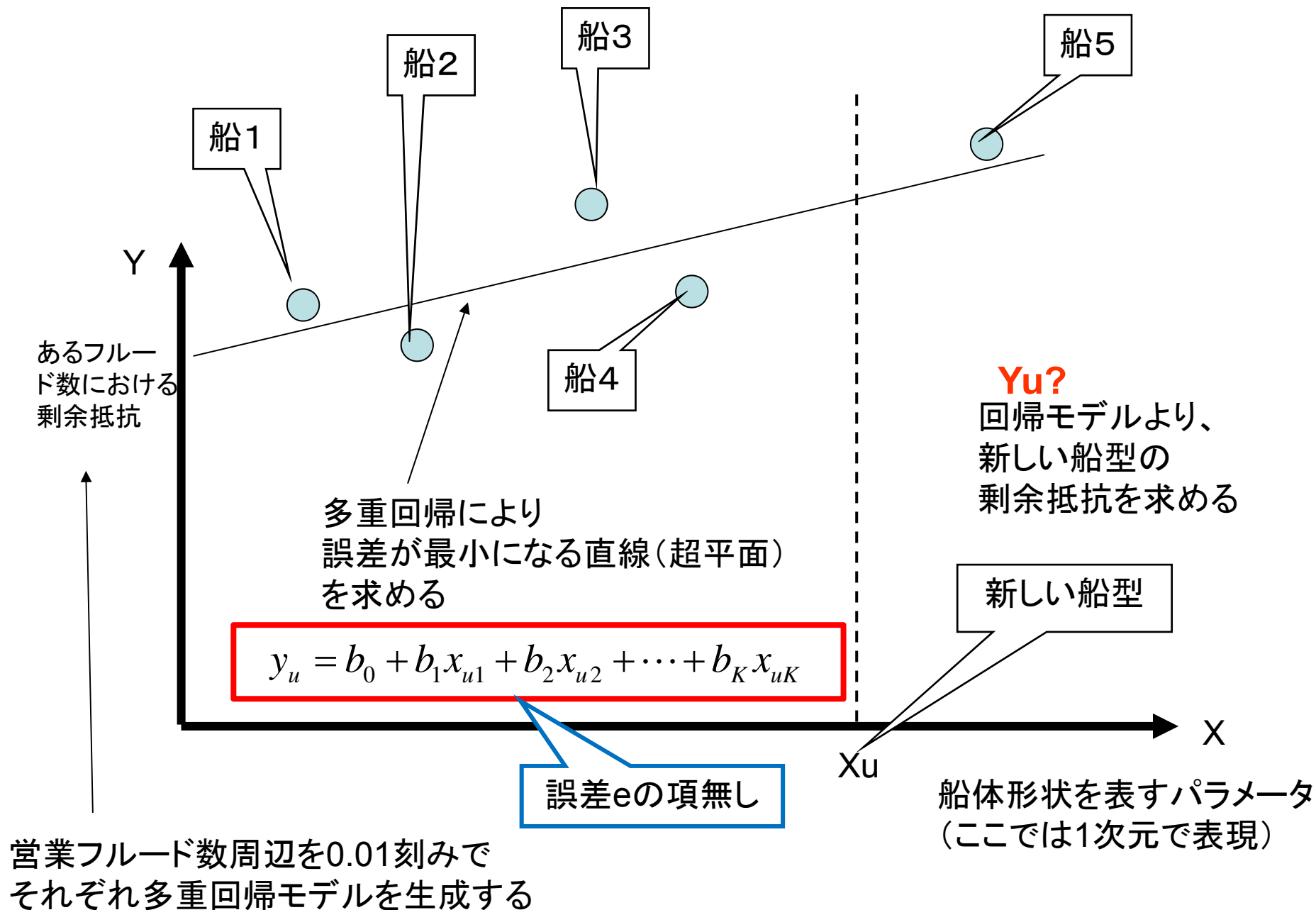


60隻分の実験データから、
新しい船型についての剰余抵抗曲線を推定する

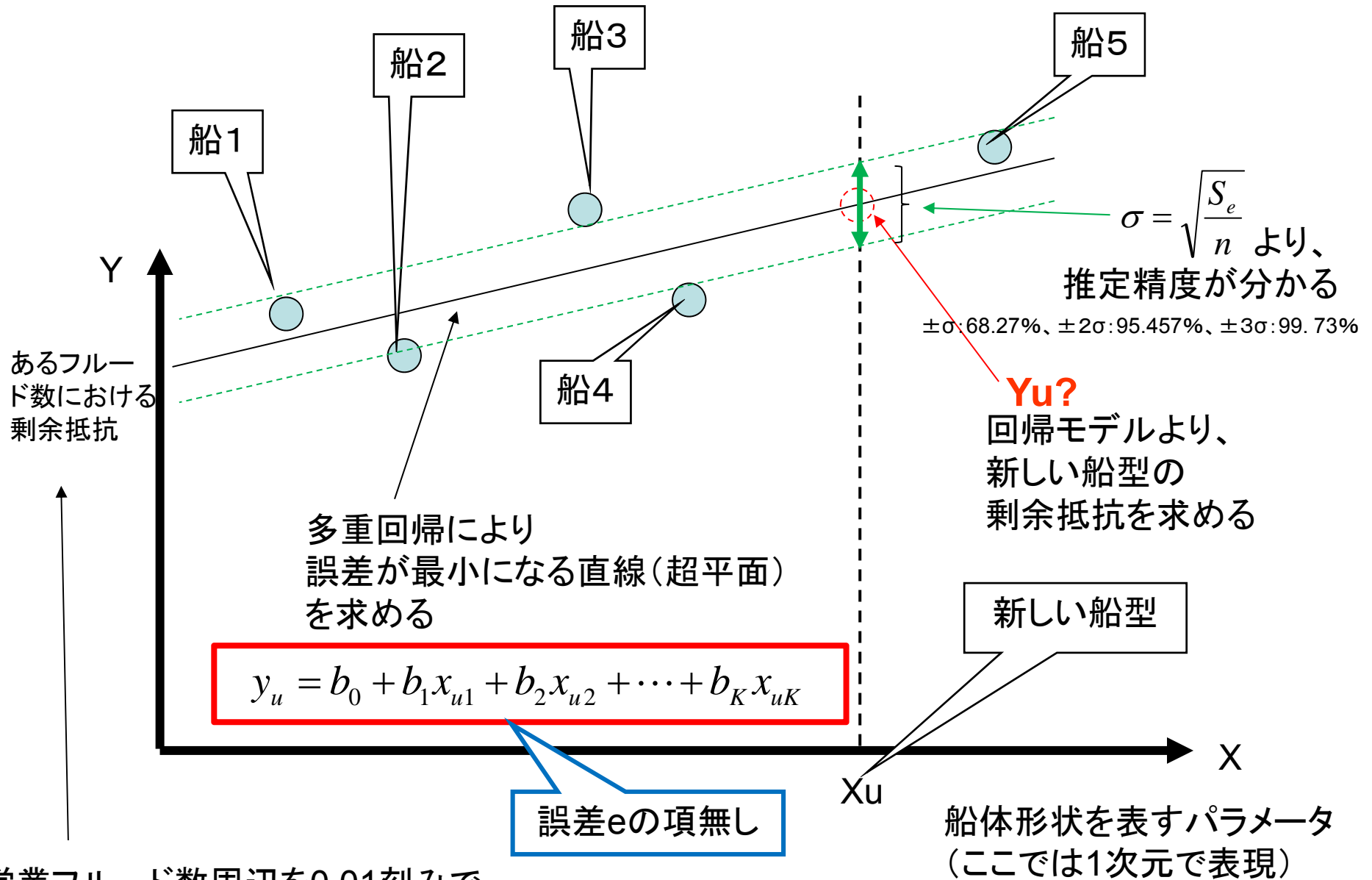
多重回帰を利用した新船型の剰余抵抗値の推定



多重回帰を利用した新船型の剰余抵抗値の推定



多重回帰を利用した新船型の剰余抵抗値の推定



営業フルード数周辺を0.01刻みでそれぞれ多重回帰モデルを生成する

痩せ型船型における推定のシミュレーション

20REF	0281	S5306
0212	42RORO	S3595
0266	0076	47RORO
1200PC	0225	HSS-3
0265	0226	HSS-4
0177	0193	0181
0178	HSS-2	0194
CONT4S	0119	0207
0092	0214	0208
0269	0203	0204
0121RE	S5327S	0268
0260RE	S5502	PMAX
0175	0082	OPMX
0275	HSS-1	
0096RE	0104	
0149RE	P0262	
0179	0278	
0180	0280	
0112	0289	
0113	52PCC	
0221	S3568	
0100RE	S5020	

用いた船のデータ(Lppの小さい順57隻分)
n=57

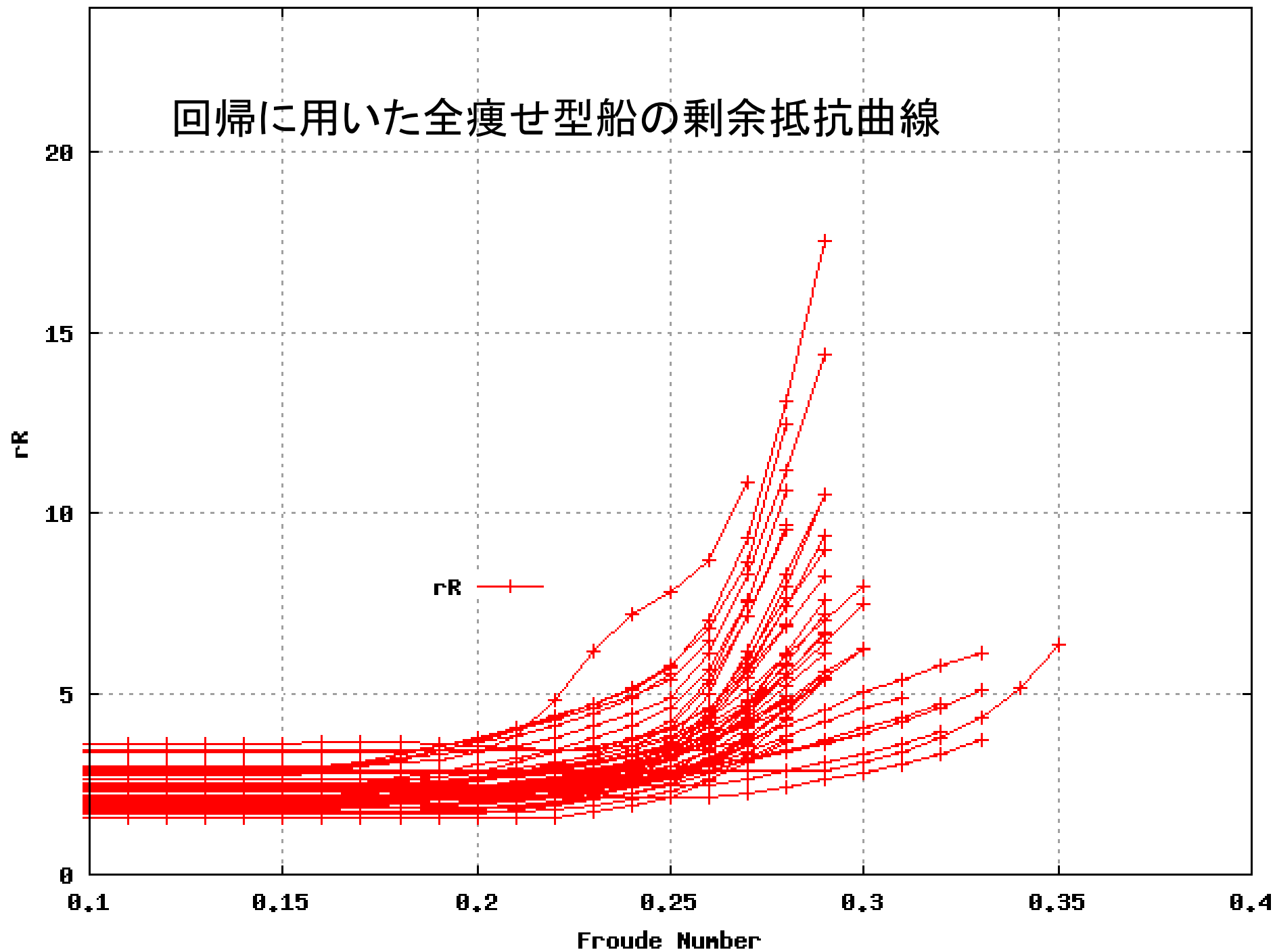
L/B
B/d
Cb
Cm
Cw
lcb
Percent_Lpp
Percent_d
BetaGamma0.3
CPLr
CPfr
CPWr
CPtr
CPar
CPLe
CPfe
CPWe
CPte
CPae

回帰モデルに用いた
パラメータ19個
K=19

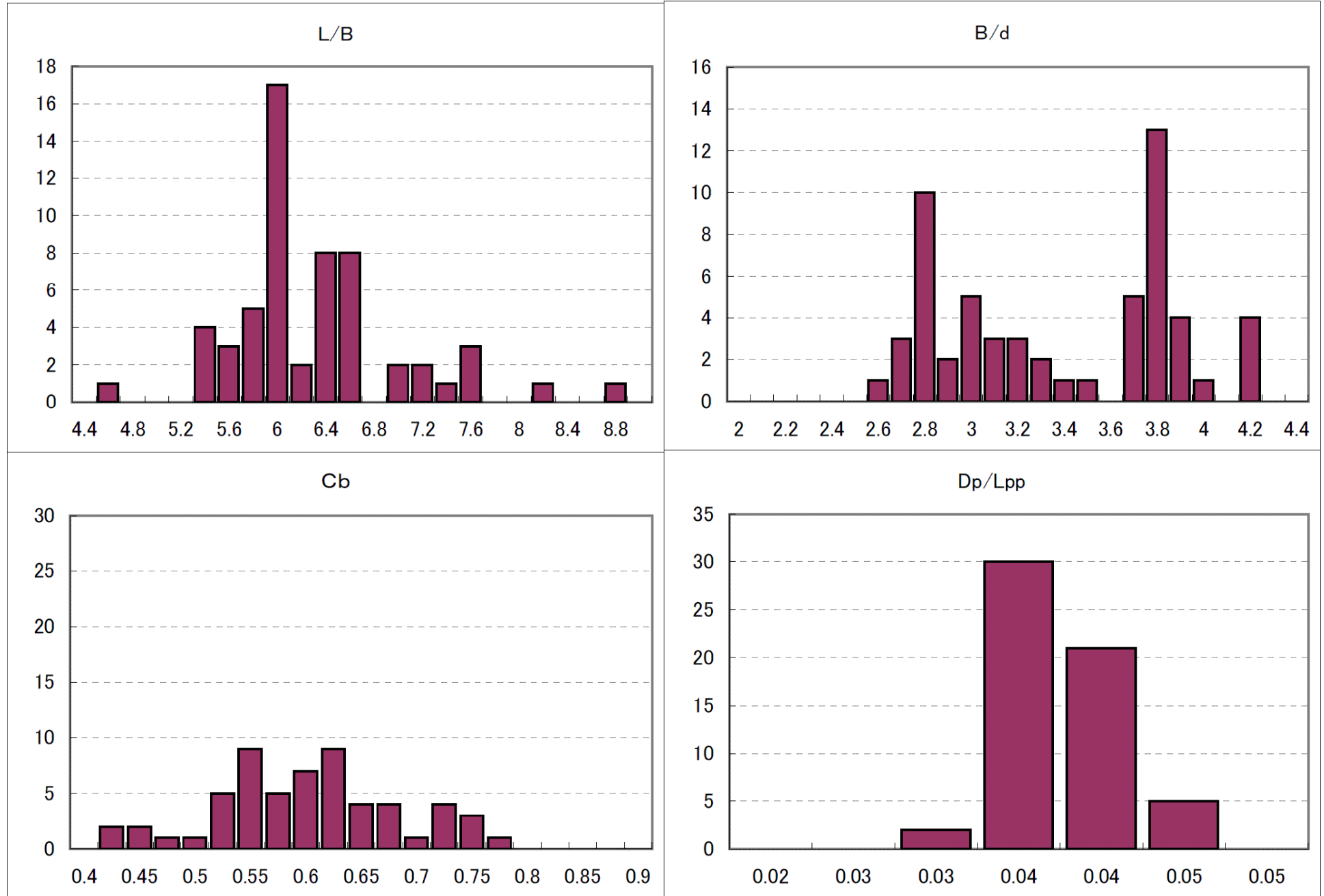
性能を推定する未知船型
0176

ServiceFn	0.234
L/B	6.28319
B/d	2.7561
Cb	0.7094
Cp	0.7203
Cm	0.9849
Cw	0.8435
Cv	0.84102
lcb	-0.4582

回帰に用いた全瘦せ型船の剰余抵抗曲線

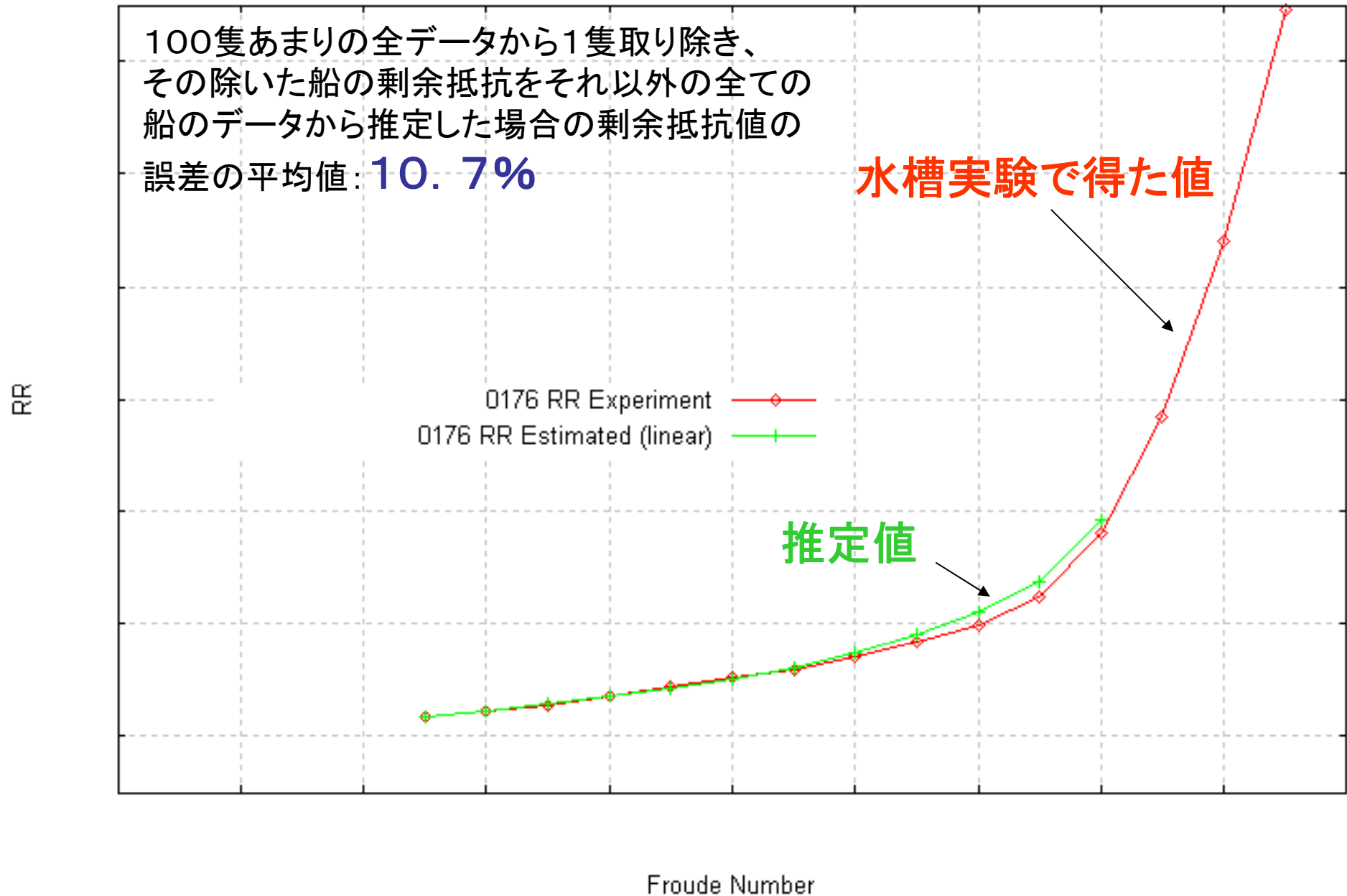


回帰に用いたデータの各変数のヒストグラム



剰余抵抗 (RR) の推定結果

100隻あまりの全データから1隻取り除き、
その除いた船の剰余抵抗をそれ以外の全ての
船のデータから推定した場合の剰余抵抗値の
誤差の平均値: **10.7%**



推定精度を上げる... (古典的な) 造波抵抗理論式の利用

造波抵抗係数 r_w

造波抵抗 (kg) R_w

ρ : 流体の密度 ($\text{kg} \cdot \text{s}^2 / \text{m}^4$)

S : 浸水表面積 (m^2)

v : 船の速力 (m/s)

$$r_w = \frac{R_w}{\frac{1}{2} \rho S v^2}$$

$K_0 = \frac{g}{V^2}$

重力加速度 g

V : 船の速力 (knots)

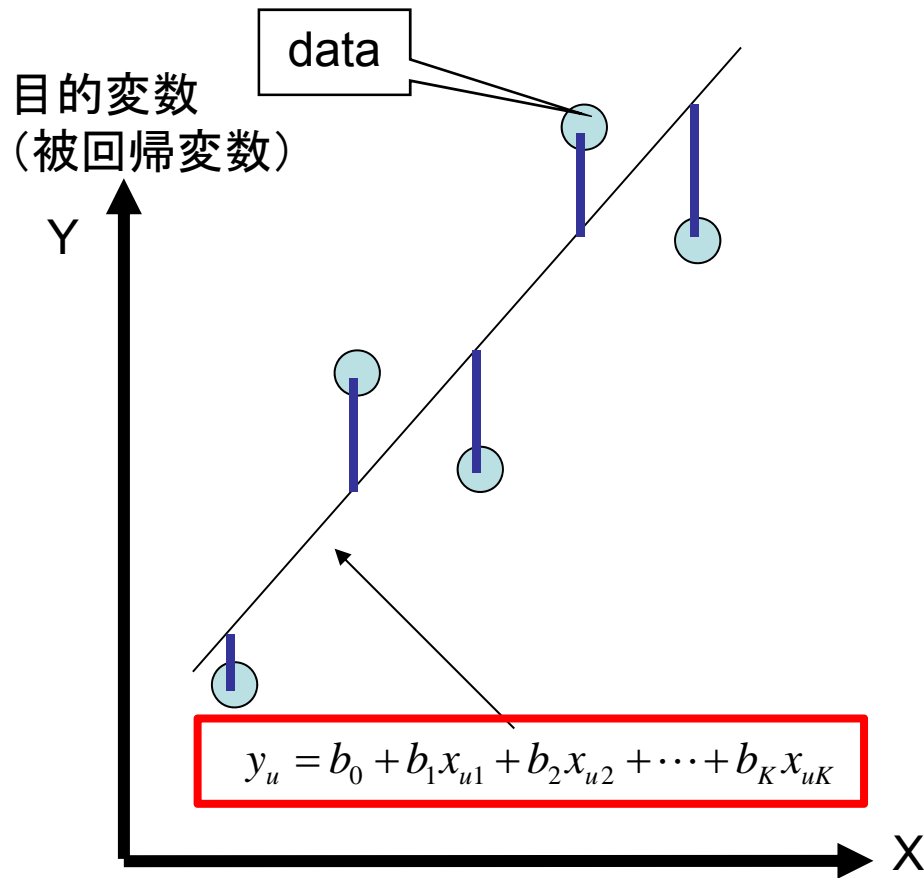
$$\approx \frac{2C_m^2}{\pi} \left(\frac{1}{C_b} \frac{B}{L} \frac{B}{d} \right)^{\frac{2}{3}} \underbrace{(1 - \exp(-K_0 d))^2}_{\text{フルード数毎に回帰するので単なる係数と見なせる}} \underbrace{(B_{00} f_0 f_0 + \dots + B_{nn} f_n f_n)}_{\text{プリズマティックカーブの形状を表す点列の値に依存}}$$

非線形関数による値の変換

データから線形多重回帰

統計解析による実用船型の造波抵抗推定法に関する研究: 多賀野 寛
 関西造船協会誌 第147号pp.43—52 (昭和48年3月)

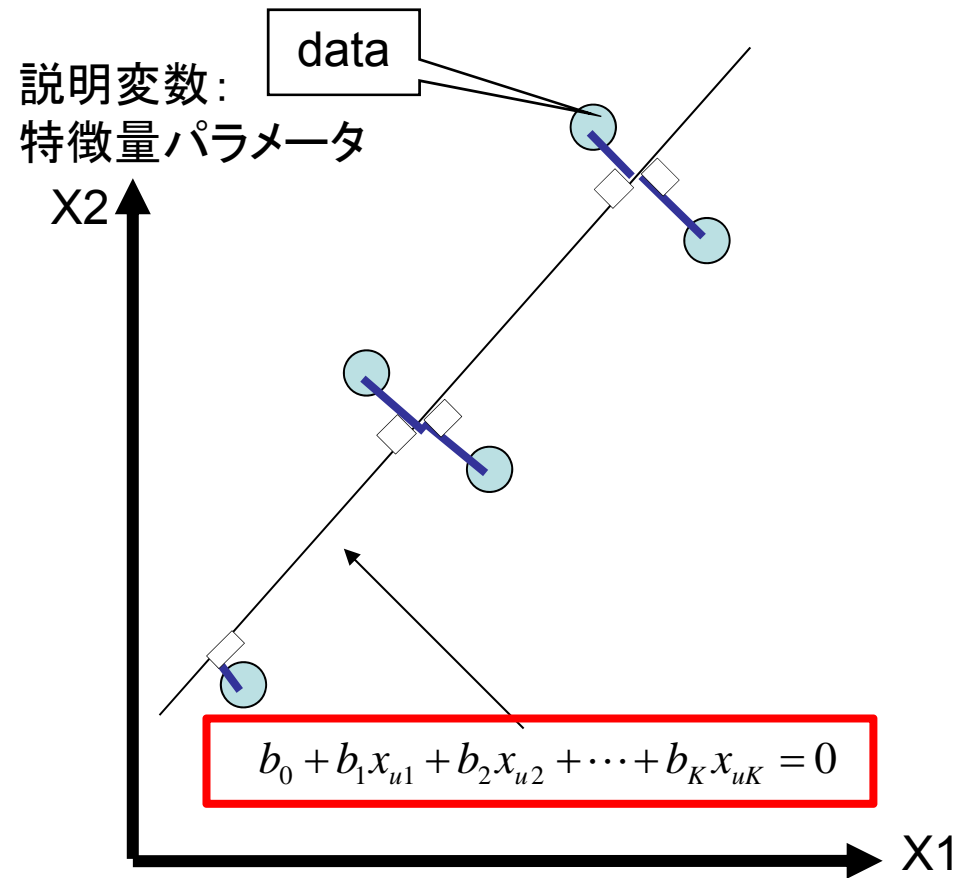
参考: 「多重回帰」と「平面のあてはめ」の違い



説明変数: 特徴量パラメータ
(回帰変数)

多重回帰

ある変数 y との誤差のみ最小化



説明変数: 特徴量パラメータ

(超)平面のあてはめ ≡ **主成分分析**
全変数間のばらつきに注目

互いに直交するばらつき最大方向 = **主成分**

【3次元の点群データに平面をあてはめる計算例】

N 個の点群データの座標を (x_i, y_i, z_i) ただし $i=1,2,\dots,N$ とする。これらとの2乗距離が最小となる平面 $ax + by + cz + d = 0$ の係数 a, b, c, d を求める。

データの各座標軸毎の平均を $\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$, $\bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i$, $\bar{z} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N z_i$ と表すと、

上記の平面はデータの重心 $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$ を通る。

ここで、点 (x_0, y_0, z_0) を通る平面の方程式は

$$a(x - x_0) + b(y - y_0) + c(z - z_0) = 0 \quad \text{ただし}(a, b, c)\text{は法線ベクトル より}$$

よって $x_0 = \bar{x}$, $y_0 = \bar{y}$, $z_0 = \bar{z}$ として計算すると $d = -a\bar{x} - b\bar{y} - c\bar{z}$ を得る。

次に

点と平面の距離の公式:
平面 $ax + by + cz + d = 0$
と点 (x_0, y_0, z_0) との距離は $\frac{|ax_0 + by_0 + cz_0 + d|}{\sqrt{a^2 + b^2 + c^2}}$

この式の2乗を全データで合計した値を最小化する係数 a, b, c, d を求めれば良いが、分母と分子に係数があり計算困難

平面の方程式は一般に $ax + by + cz + d = 0$ と表されるが、任意性がある。そこで

$a^2 + b^2 + c^2 - 1 = 0$ の等式制約を加えると上の点と平面の距離の式の分母が1になり
最大化関数が単なる2次式になる。

等式制約の極値問題はラグランジェの未定乗数法で解くのがお約束

データ x_i, y_i, z_i について、

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_1 - \bar{x} & y_1 - \bar{y} & z_1 - \bar{z} \\ x_2 - \bar{x} & y_2 - \bar{y} & z_2 - \bar{z} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_n - \bar{x} & y_n - \bar{y} & z_n - \bar{z} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{a} = \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix}, \quad \mathbf{e} = \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{bmatrix}$$

全データについての
点と平面の距離の2乗

と表すと、 $\|\mathbf{e}\|^2 = [\mathbf{Xa}]^T \mathbf{Xa}$

このとき、ラグランジュ関数Lは $L = [\mathbf{Xa}]^T \mathbf{Xa} + \lambda(\|\mathbf{a}\|^2 - 1)$

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{a}} = 2\mathbf{X}^T \mathbf{Xa} - 2\lambda \mathbf{a} = 0$$

これは固有値方程式の形式

未定乗数

等式制約

$$a^2 + b^2 + c^2 - 1 = 0$$

$$\frac{\partial L}{\partial \lambda} = \|\mathbf{a}\|^2 - 1 = 0$$

よって行列 $\mathbf{a} = \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix}$ は行列 $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ の固有ベクトルより得る

行列 $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ は半正値対称行列で、固有値はすべてゼロ以上の実数

nで除すると
分散・共分散行列

3D点群データへの
平面あてはめは、
主成分分析の計算
と等価

3x3行列の固有ベクトルなので答えが3つ出てくるが、この式は分散・共分散行列を使った主成分分析と同じ。主成分分析では固有値(=データの分散)の大きいものに対応する固有ベクトルを主成分として選択していくことから、この場合平面の法線ベクトル(a,b,c)としてふさわしいのは $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ の最小固有値に対応する固有ベクトルである。(固有ベクトルの2乗ノルムを1にするのは簡単)

主成分分析(PCA)

= データの分散が最大になる方向に座標軸を設定し直す

3次元空間上のデータ x_i, y_i, z_i について、

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_1 - \bar{x} & y_1 - \bar{y} & z_1 - \bar{z} \\ x_2 - \bar{x} & y_2 - \bar{y} & z_2 - \bar{z} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_n - \bar{x} & y_n - \bar{y} & z_n - \bar{z} \end{bmatrix} \quad \text{と表すと、分散・共分散行列} = \frac{1}{n} \mathbf{X}^T \mathbf{X}$$

分散・共分散行列 の固有値 = 対応する固有ベクトル方向へのデータの分散

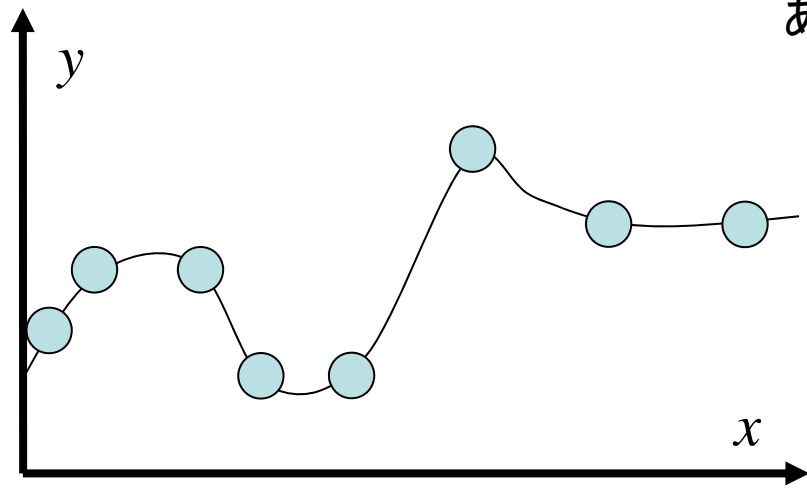
分散・共分散行列の固有値を**大きい順に並べ**、それらに**対応する固有ベクトル**を順に **第1主成分、第2主成分、...**と呼び、データがk次元空間であれば主成分はk個

ゼロに近い固有値 = 固有値に対応する主成分(固有ベクトル)方向へのデータのばらつきが無い = データが縮退



多重共線性の判定へ利用

多項式回帰(1変数関数の関数近似)



ある(未知の)関数 $y = f(x)$ に従って n 個のデータ $(x_1, y_1), (x_2, y_2) \cdots (x_n, y_n)$ が得られたとする。

上記の n 個の点列から、以下の**多項式関数表現**によりもとの関数 $y = f(x)$ の再構成を試みる:

$$\hat{f}(x) = C_0 + C_1x + C_2x^2 + \cdots + C_kx^k$$

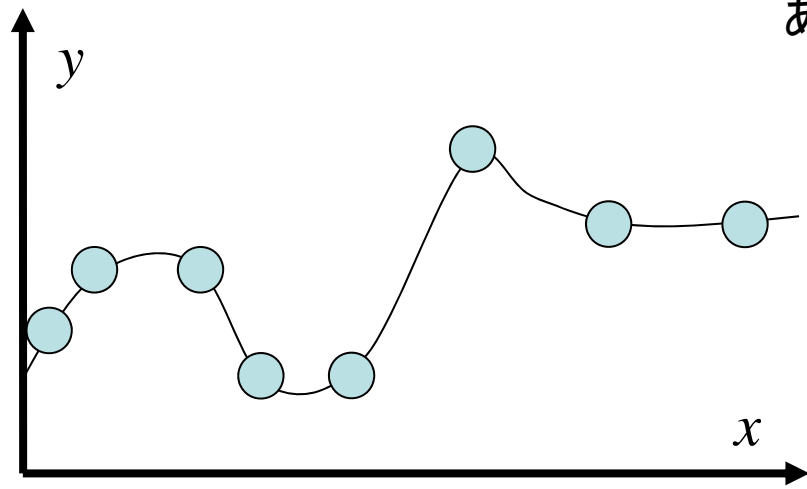
ただしデータの個数 n は未知数の個数 $k+1$ に対し $n \geq k+1$ であるとする。

このとき、以下の誤差関数

$$\text{Error} = \sum_{i=1}^n \left(\hat{f}(x_i) - y_i \right)^2$$

を最小化する曲線によって近似する。

多項式回帰(1変数関数の関数近似)



ある(未知の)関数 $y = f(x)$ に従って n 個のデータ $(x_1, y_1), (x_2, y_2) \cdots (x_n, y_n)$ が得られたとする。

上記の n 個の点列から、以下の**多項式関数表現**によりもとの関数 $y = f(x)$ の再構成を試みる:

$$\hat{f}(x) = C_0 + C_1x + C_2x^2 + \cdots + C_kx^k$$

ただしデータの個数 n は未知数の個数 $k+1$ に対し $n \geq k+1$ であるとする。

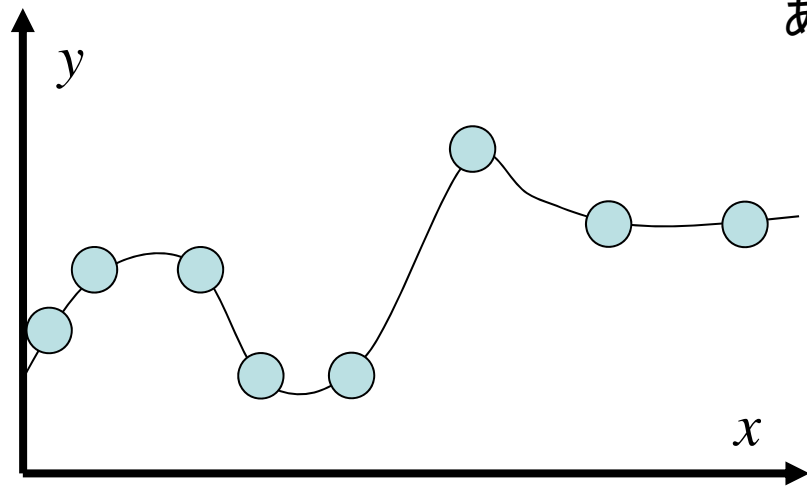
このとき、以下の誤差関数

$$\text{Error} = \sum_{i=1}^n \left(\hat{f}(x_i) - y_i \right)^2 \quad \text{を最小化する曲線によって近似する。}$$

この誤差関数は2次なので、これを最小化するパラメータ群 $C_0, C_1, C_2, \dots, C_k$ は、誤差関数を各パラメータで偏微分した式を0とした方程式を解くことで容易に得る。すなわち、



多項式回帰(1変数関数の関数近似)



ある(未知の)関数 $y = f(x)$ に従って n 個のデータ $(x_1, y_1), (x_2, y_2) \cdots (x_n, y_n)$ が得られたとする。

上記の n 個の点列から、以下の**多項式関数表現**によりもとの関数 $y = f(x)$ の再構成を試みる:

$$\hat{f}(x) = C_0 + C_1x + C_2x^2 + \cdots + C_kx^k$$

ただしデータの個数 n は未知数の個数 $k+1$ に対し $n \geq k+1$ であるとする。

このとき、以下の誤差関数

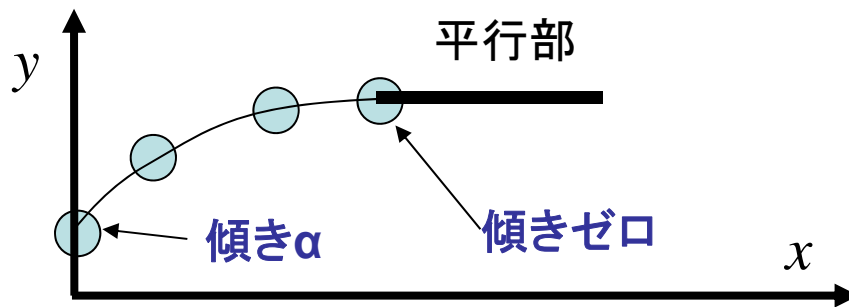
$$\text{Error} = \sum_{i=1}^n \left(\hat{f}(x_i) - y_i \right)^2 \quad \text{を最小化する曲線によって近似する。}$$

この誤差関数は2次なので、これを最小化するパラメータ群 $C_0, C_1, C_2, \dots, C_k$ は、誤差関数を各パラメータで偏微分した式を0とした方程式を解くことで容易に得る。すなわち、

$$x = x_1, \quad x^2 = x_2, \quad \dots, \quad x^k = x_k \quad \text{と置き換えれば、多重回帰と同じ}$$

多項式回帰(1変数関数の関数近似)

【例: CPカーブ】



特定の点 $x_1^*, x_2^*, \dots, x_j^*$ における曲線の傾きを拘束条件として加える場合

x_1^* での傾き x_j^* での傾き

$$\left[\frac{d}{dx} \hat{f}(x) \right]_{x=x_1^*} = a_1, \quad \dots, \quad \left[\frac{d}{dx} \hat{f}(x) \right]_{x=x_j^*} = a_j$$

拘束条件 = jコ分の等式
が加わる

誤差関数 $\text{Error} = \sum_{i=1}^n (\hat{f}(x_i) - y_i)^2$ を最小化し、かつ上記のjコ分の等式を満たす

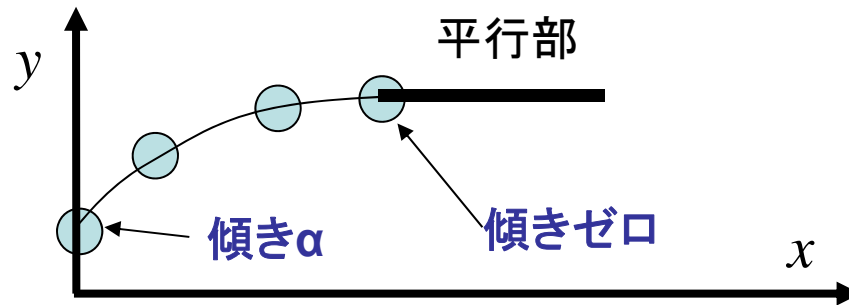
多項式 $\hat{f}(x) = C_0 + C_1x + C_2x^2 + \dots + C_kx^k$ のパラメータ $C_0, C_1, C_2, \dots, C_k$

を求める問題に帰着される。



多項式回帰(1変数関数の関数近似)

【例: CPカーブ】



特定の点 $x_1^*, x_2^*, \dots, x_j^*$ における曲線の傾きを拘束条件として加える場合

x_1^* での傾き x_j^* での傾き

$$\left[\frac{d}{dx} \hat{f}(x) \right]_{x=x_1^*} = a_1, \quad \dots, \quad \left[\frac{d}{dx} \hat{f}(x) \right]_{x=x_j^*} = a_j$$

拘束条件 = jコ分の等式
が加わる

誤差関数 $\text{Error} = \sum_{i=1}^n (\hat{f}(x_i) - y_i)^2$ を最小化し、かつ上記の j コ分の等式を満たす

多項式 $\hat{f}(x) = C_0 + C_1x + C_2x^2 + \dots + C_kx^k$ のパラメータ $C_0, C_1, C_2, \dots, C_k$

を求める問題に帰着される。

等式制約付き関数最小化問題

【等式制約付き関数最大・最小化】

目的関数 $f(\mathbf{x})$ ただし $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_n]$

を制約条件 $h_i(\mathbf{x}) = 0$ ただし $i = 1, 2, \dots, m$ (等式制約条件)

のもとで最小化する問題。

による解法

ラグランジュの未定乗数

ラグランジュ関数 $L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i h_i(\mathbf{x})$ を導入する。

この関数が $\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*$ において局所的最小点となるための必要条件が

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x_j} L(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) = \frac{\partial}{\partial x_j} f(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \frac{\partial}{\partial x_j} h_i(\mathbf{x}^*) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial \lambda_j} L(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) = h_j(\mathbf{x}^*) = 0 \end{cases}$$

であることを利用し、この連立方程式を解いて
最小点 \mathbf{x}^* を求める

【等式制約付き関数最大・最小化】

目的関数 $f(\mathbf{x})$ ただし $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_n]$

を制約条件 $h_i(\mathbf{x}) = 0$ ただし $i = 1, 2, \dots, m$ (等式制約条件)

のもとで最小化する問題。

ラグランジュの未定乗数法 による解法

ラグランジュの未定乗数

ラグランジュ関数 $L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i h_i(\mathbf{x})$ を導入する。

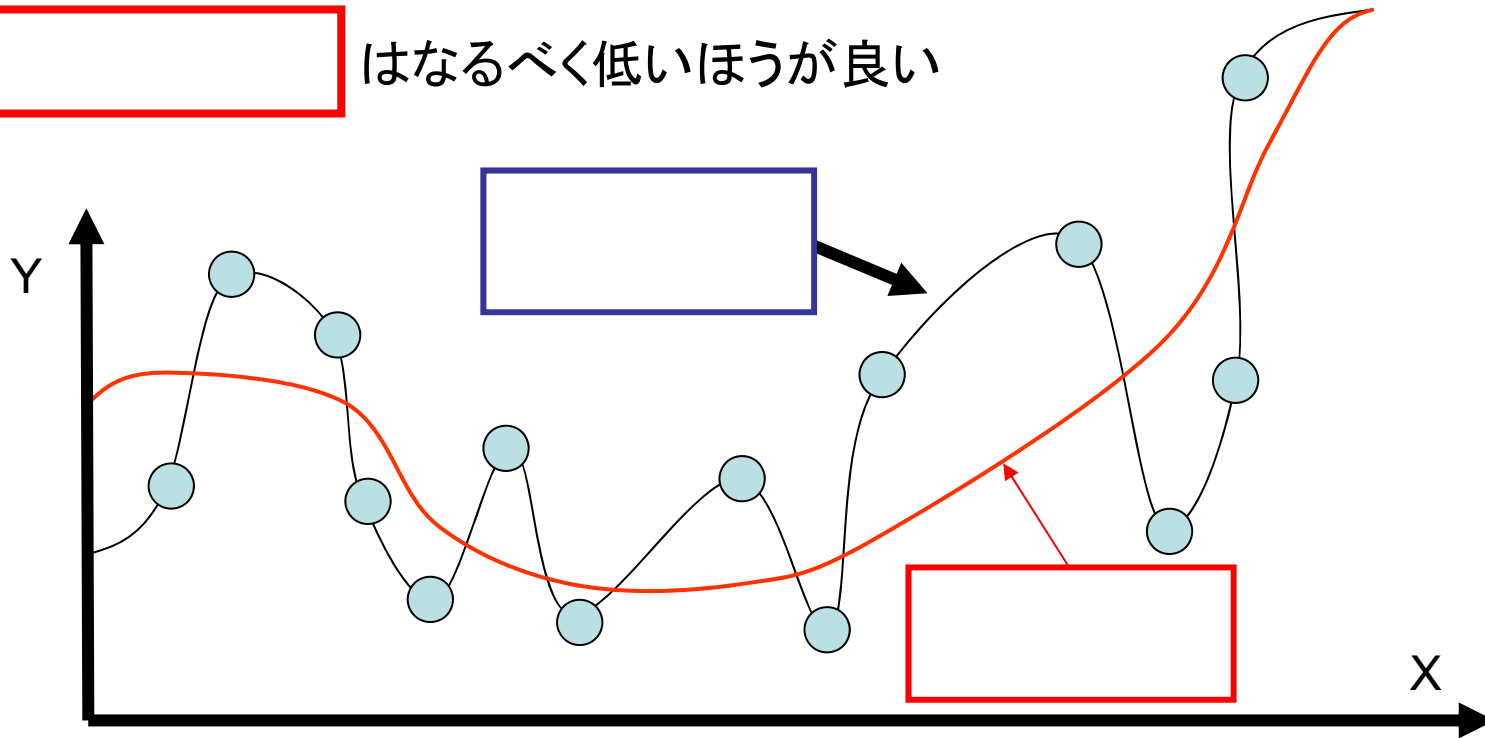
この関数が $\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*$ において局所的最小点となるための必要条件が

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x_j} L(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) = \frac{\partial}{\partial x_j} f(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \frac{\partial}{\partial x_j} h_i(\mathbf{x}^*) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial \lambda_j} L(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) = h_j(\mathbf{x}^*) = 0 \end{cases}$$

であることを利用し、この連立方程式を解いて
最小点 \mathbf{x}^* を求める

多項式回帰における注意事項

(1) はなるべく低いほうが良い



(2) は避ける

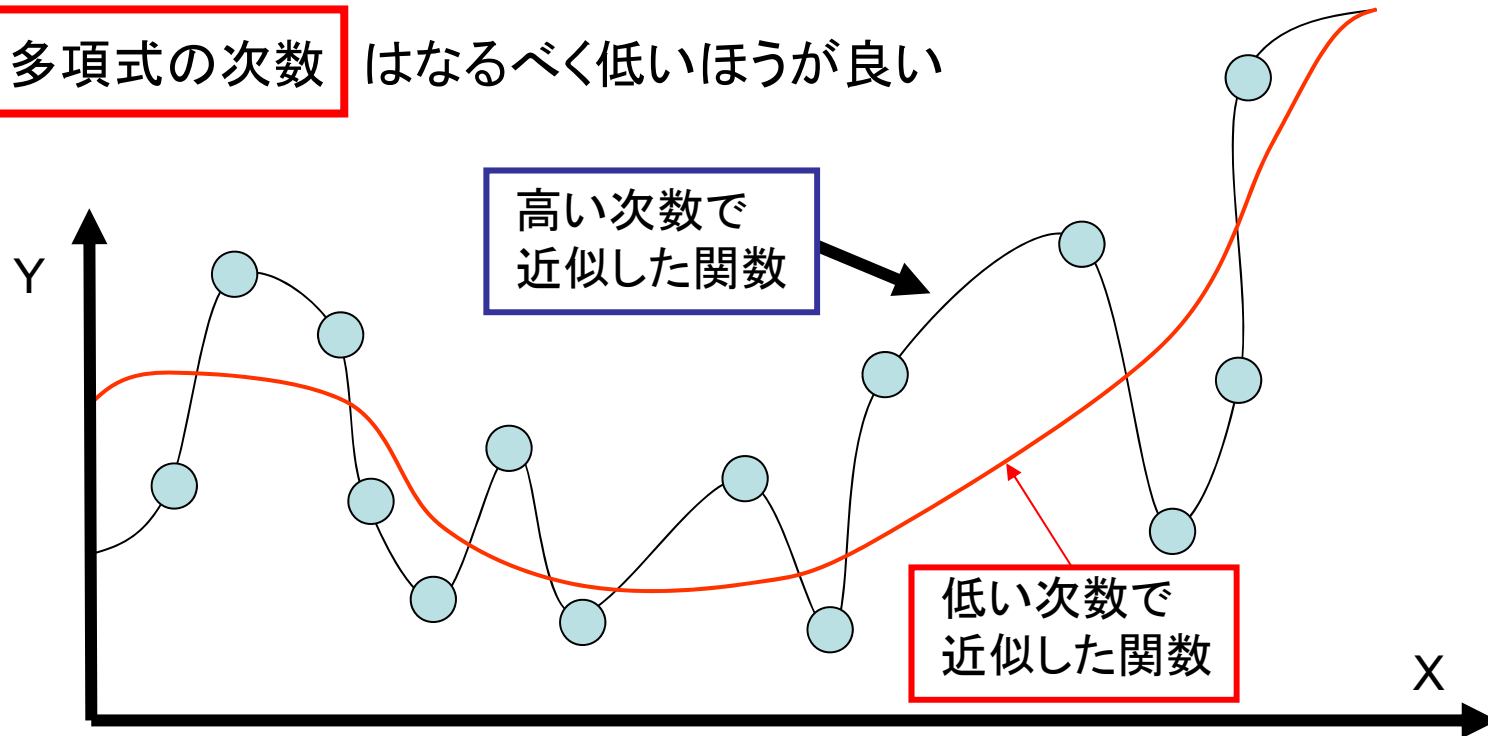
観測値の範囲の外側では回帰モデルは意味を持たない

(3) は広く取るべき

x の範囲が狭いと高次の単項式 x^2, x^3, \dots の従属関係が高くなり、すなわち が発生し、推定された係数の安定性が悪くなる。

多項式回帰における注意事項

- (1) **多項式の次数** はなるべく低いほうが良い



- (2) **多項式による外挿** は避ける

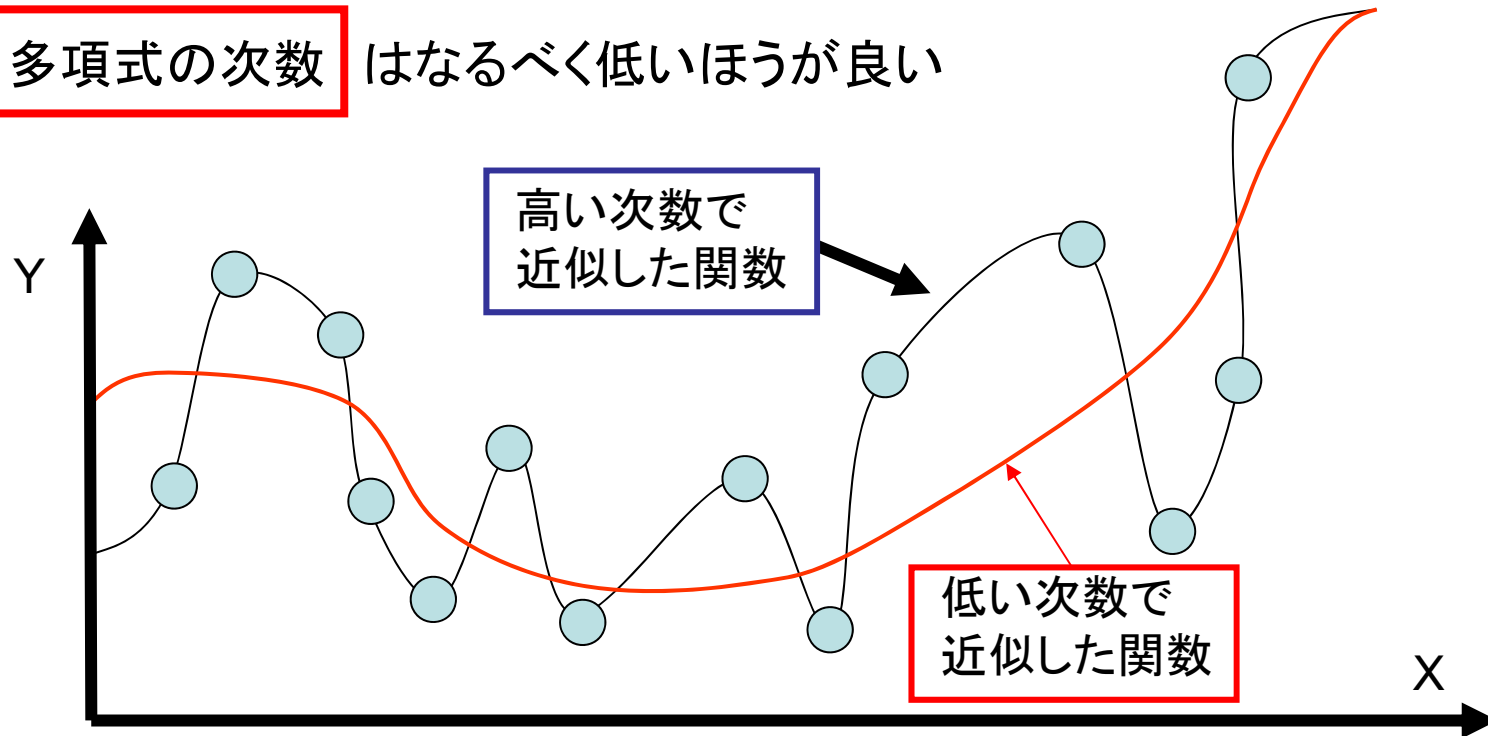
観測値の範囲の外側では回帰モデルは意味を持たない

- (3) **説明変数 x の範囲** は広く取るべき

x の範囲が狭いと高次の単項式 x^2, x^3, \dots の従属関係が高くなり、すなわち が発生し、推定された係数の安定性が悪くなる。

多項式回帰における注意事項

(1) **多項式の次数** はなるべく低いほうが良い



(2) **多項式による外挿** は避ける

観測値の範囲の外側では回帰モデルは意味を持たない

(3) **説明変数 x の範囲** は広く取るべき

x の範囲が狭いと高次の単項式 x^2, x^3, \dots の従属関係が高くなり、すなわち **多重共線性** が発生し、推定された係数の安定性が悪くなる。

まとめ

観測値 y を変数 x_1, x_2, \dots, x_K を用いて以下の式で説明する:

【多重回帰】

n 個の観測値

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots + b_K x_K + e$$

目的変数ベクトル $\mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$

説明変数行列 $\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1K} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2K} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nK} \end{bmatrix}$

回帰係数ベクトル $\mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_K \end{bmatrix}$

誤差変数ベクトル $\mathbf{e} = \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{bmatrix}$ と表すと、

$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{b} + \mathbf{e}$ 誤差ベクトル \mathbf{e} の平方和 $\|\mathbf{e}\|^2$ を最小にする $\hat{\mathbf{b}}$ は以下で与えられる:

多重共線性に注意して回帰変数を選択

$$\hat{\mathbf{b}} = (\mathbf{X}^{\text{Trans}} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^{\text{Trans}} \mathbf{y}$$

【多項式回帰】 平面上の点列 $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$ を通る曲線を多項式

$$\hat{f}(x) = C_0 + C_1 x + C_2 x^2 + \dots + C_k x^k \quad \text{で表す}$$

$x = x_1, x^2 = x_2, \dots, x^k = x_k$ と置き換えて多重回帰で解く ← 次数は小さく

特定の点 $x_1^*, x_2^*, \dots, x_j^*$ における曲線の傾きを拘束条件として加える場合
→ ラグランジュの未定乗数法で解く

自動車の燃費について以下のようなデータがある。

「クラウン」から「ギャランΣ」までのデータを利用して車種「ルーチェ」の10モード走行性能 y を予測するには、どのような計算をしたら良いか？ **表の数値を使って行列 X, Y を作成し、それらを使って具体的な計算方法を説明せよ。**

車名	x1	x2	x3	X4	x5	x6	y
クラウン	1.360	4.778	2.4251	125	17.5	8.8	8.7
マークII	1.245	4.100	2.4082	125	17.5	8.8	9.5
カムリ	1.070	3.214	2.3575	120	17.6	8.7	10.6
ソアラ	1.235	4.100	2.3052	125	17.5	8.8	9.2
セドリック	1.420	4.625	2.4251	130	17.5	9.5	8.9
ローレル	1.175	3.889	2.3660	125	17.0	9.1	9.2
スカイライン	1.175	4.111	2.3198	125	17.0	9.1	9.2
レパード	1.220	3.900	2.2899	125	17.0	9.1	9.4
カペラ	1.030	3.450	2.3829	120	17.0	8.6	10.2
ギャランΣ	1.180	3.665	2.3645	110	16.7	8.5	10.6
ルーチェ	1.150	3.909	2.3829	120	17.0	8.6	?

x1:車体重量(1000kg), x2:減速比, x3:幅×高さ(m²), x4:最大出力(ps),
x5:最大トルク(kgm), x6:圧縮比, y:10モード走行(km/ℓ)

【システム設計工学演習問題】 2016.10.21 学籍番号

氏名

まず 推定対象のルーチェ以外のデータを用いて 以下の行列 X と y を生成する:

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 1.360 & 4.778 & 2.4251 & 125 & 17.5 & 8.8 \\ 1 & 1.245 & 4.100 & 2.4082 & 125 & 17.5 & 8.8 \\ 1 & 1.070 & 3.214 & 2.3575 & 120 & 17.6 & 8.7 \\ 1 & 1.235 & 4.100 & 2.3052 & 125 & 17.5 & 8.8 \\ 1 & 1.420 & 4.625 & 2.4251 & 130 & 17.5 & 9.5 \\ 1 & 1.175 & 3.889 & 2.3660 & 125 & 17.0 & 9.1 \\ 1 & 1.175 & 4.111 & 2.3198 & 125 & 17.0 & 9.1 \\ 1 & 1.220 & 3.900 & 2.2899 & 125 & 17.0 & 9.1 \\ 1 & 1.030 & 3.450 & 2.3829 & 120 & 17.0 & 8.6 \\ 1 & 1.180 & 3.665 & 2.3645 & 110 & 16.7 & 8.5 \end{bmatrix} \quad y = \begin{bmatrix} 8.7 \\ 9.5 \\ 10.6 \\ 9.2 \\ 8.9 \\ 9.2 \\ 9.2 \\ 9.4 \\ 10.2 \\ 10.6 \end{bmatrix}$$

この行列 X と y を用いて回帰パラメータ b を以下の式で計算する:

$$b = (X^{\text{Trans}} X)^{-1} X^{\text{Trans}} y$$

ここで求めた行列 b の各要素を $b_0 \sim b_6$ のように表す: \longrightarrow

$$b = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \\ b_5 \\ b_6 \end{bmatrix}$$

1列目の要素として必ず1を入れる

次に、上で求めた回帰式へ推定対象のルーチェの説明変数の値を以下のように代入して 推定 する:

ルーチェの
 y の推定値: $y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_4 x_4 + b_5 x_5 + b_6 x_6$

ここは「回帰」ではなく「推定」
 なので誤差 e の項は考えない

$$= b_0 + b_1 \times 1.150 + b_2 \times 3.909 + b_3 \times 2.3829 + b_4 \times 120 + b_5 \times 17.0 + b_6 \times 8.6$$

【参考】 Excel2003で逆行列を求める方法

Microsoft Excel - TransitionInv.xls

ファイル(F) 編集(E) 表示(V) 挿入(I) 書式(O) ツール(T) データ(D) ウィンドウ(W) ヘルプ(H) Adobe PDF(B) 質問を入力してください

MS Pゴシック 11 B I U

A34 {=MINVERSE(A23:I31)}

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
16	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0			
17	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0			
18	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0			
19	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0			
20	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0			
21	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1			
22													
23	0.5	-0.5	0	0	0	0	0	0	0	0			
24	0	0.5	0	0	0	0	0	0	0	0			
25	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
26	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
27	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
28	0	0	0	0	0	0	-0.5	0	0	0			
29	0	0	0	0	0	0	0.5	-0.5	0	0			
30	0	0	0	0	0	0	0	0.5	-0.5	0			
31	0	0	0	0	0	0	0	0	0.5	-0.5			
32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
33													
34	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2			
35	0	2	2	2	2	2	2	2	2	2			
36	0	0	2	2	2	2	2	2	2	2			
37	0	0	0	2	2	2	2	2	2	2			
38	0	0	0	0	2	2	2	2	2	2			
39	0	0	0	0	0	2	2	2	2	2			
40	0	0	0	0	0	0	2	2	2	2			
41	0	0	0	0	0	0	0	2	2	2			
42	0	0	0	0	0	0	0	0	2	2			
43													
44													
45													

Sheet1 / Sheet2 / Sheet3

コマンド 合計=90

