Raport: Metoda Najmniejszych Kwadratów i Regresja

Autor: (Dzmitry, Nikitsin, Gr6) Link do repo z całym opracowaniem

1. Wprowadzenie Teoretyczne (Zadanie 1)

Celem metody najmniejszych kwadratów jest znalezienie takiego wektora parametrów $\mathbf{x}$, który minimalizuje błąd dopasowania modelu do danych. Błąd ten definiujemy jako **sumę kwadratów różnic** między wartościami rzeczywistymi $\mathbf{b}$ a przewidywanymi $A\mathbf{x}$.

Funkcja kosztu (błędu):

$$L(\mathbf{x}) = ||\mathbf{b} - A\mathbf{x}||^2 = (\mathbf{b} - A\mathbf{x})^T(\mathbf{b} - A\mathbf{x})$$

Minimalizacja tej funkcji prowadzi do rozwiązania układu równań normalnych:

$$A^T A\mathbf{x} = A^T\mathbf{b}$$

Ostateczny wzór na wektor parametrów $\mathbf{x}$ przy użyciu macierzy pseudoodwrotnej Moore'a-Penrose'a (A^+):

$$\mathbf{x} = (A^T A)^{-1} A^T\mathbf{b}$$

Kod implementujący to rozwiązanie znajduje się w załączonym skrypcie (funkcja `solve_LSQ_with_MoorePenrose_matrix`).

2. Rozwiązanie OLS za pomocą rozkładu QR (Zadanie 2)

W tym zadaniu wykorzystano rozkład QR macierzy A w celu poprawy stabilności numerycznej obliczeń.

Wyprowadzenie wzoru:

Z definicji macierzy pseudoodwrotnej:

$$A^+ = (A^T A)^{-1} A^T$$

Stosujemy rozkład $A = QR$, gdzie:

- Q jest macierzą ortonormalną ($Q^T Q = I$).
- R jest macierzą górnotrójkątną kwadratową (odwracalną).

Podstawiamy $A = QR$ do wzoru na A^+:

$$A^+ = ((QR)^T(QR))^{-1}(QR)^T = (R^T Q^T QR)^{-1} R^T Q^T = (R^T I R)^{-1} R^T Q^T =$$

$$= (R^T R)^{-1} R^T Q^T = R^{-1} (R^T)^{-1} R^T Q^T = R^{-1} I Q^T$$

Ostateczny wzór:

$$A^+ = R^{-1} Q^T$$

Zatem rozwiązanie $x = A^+ b$ przyjmuje postać:

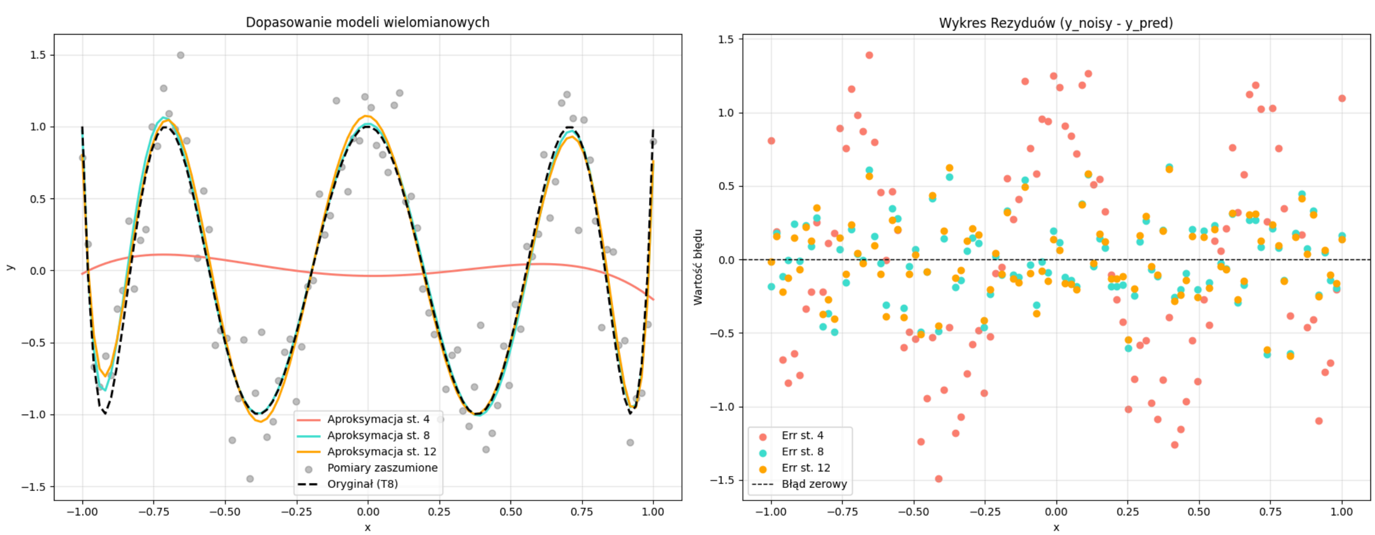
$$x = R^{-1} Q^T b$$

Implementacja znajduje się w funkcji `solve_LSQ_with_QR` .

3. Aproksymacja Wielomianowa (Zadanie 4)

Przeprowadzono eksperyment polegający na aproksymacji zaszumionej funkcji (Wielomian Czebyszewa 8. stopnia) za pomocą wielomianów stopnia 4, 8 i 12.

Wyniki eksperymentu:



Stopień Wielomianu	SSE	MSE	RMSE	MAE
4 (Underfitting)	57.1466	0.5715	0.7560	0.6628
8 (Optymalny)	7.4177	0.0742	0.2724	0.2187
12 (Overfitting)	7.1671	0.0717	0.2677	0.2189

Wnioski:

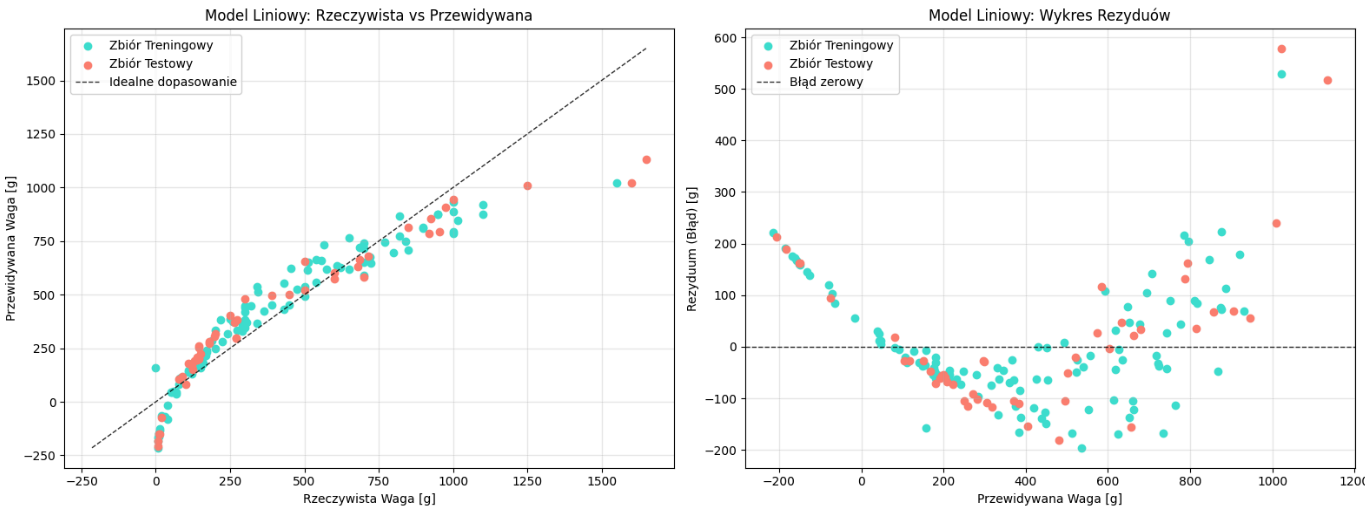
1. **Niedopasowanie (Stopień 4):** Model jest zbyt prosty, co widać po wysokich błędach i nielosowym rozkładzie rezyduów (czerwone punkty na wykresie błędów tworzą wzór).
2. **Optimum (Stopień 8):** Błąd drastycznie spada (MSE z 0.57 na 0.07). Rezydua (błękitne punkty) są losowo rozrzucone wokół zera, co świadczy o poprawnym modelu.

3. **Przeuczenie (Stopień 12):** Dalsze zwiększanie stopnia nie przynosi istotnej poprawy wyników, a zwiększa ryzyko dopasowania do szumu.

4. Regresja Liniowa dla danych Fish Market (Zadanie 5)

Celem było przewidzenie wagi ryby (`Weight`) na podstawie jej wymiarów (`Length1` , `Length2` , `Length3` , `Height` , `Width`) przy użyciu modelu liniowego.

Wyniki:



Metryki:

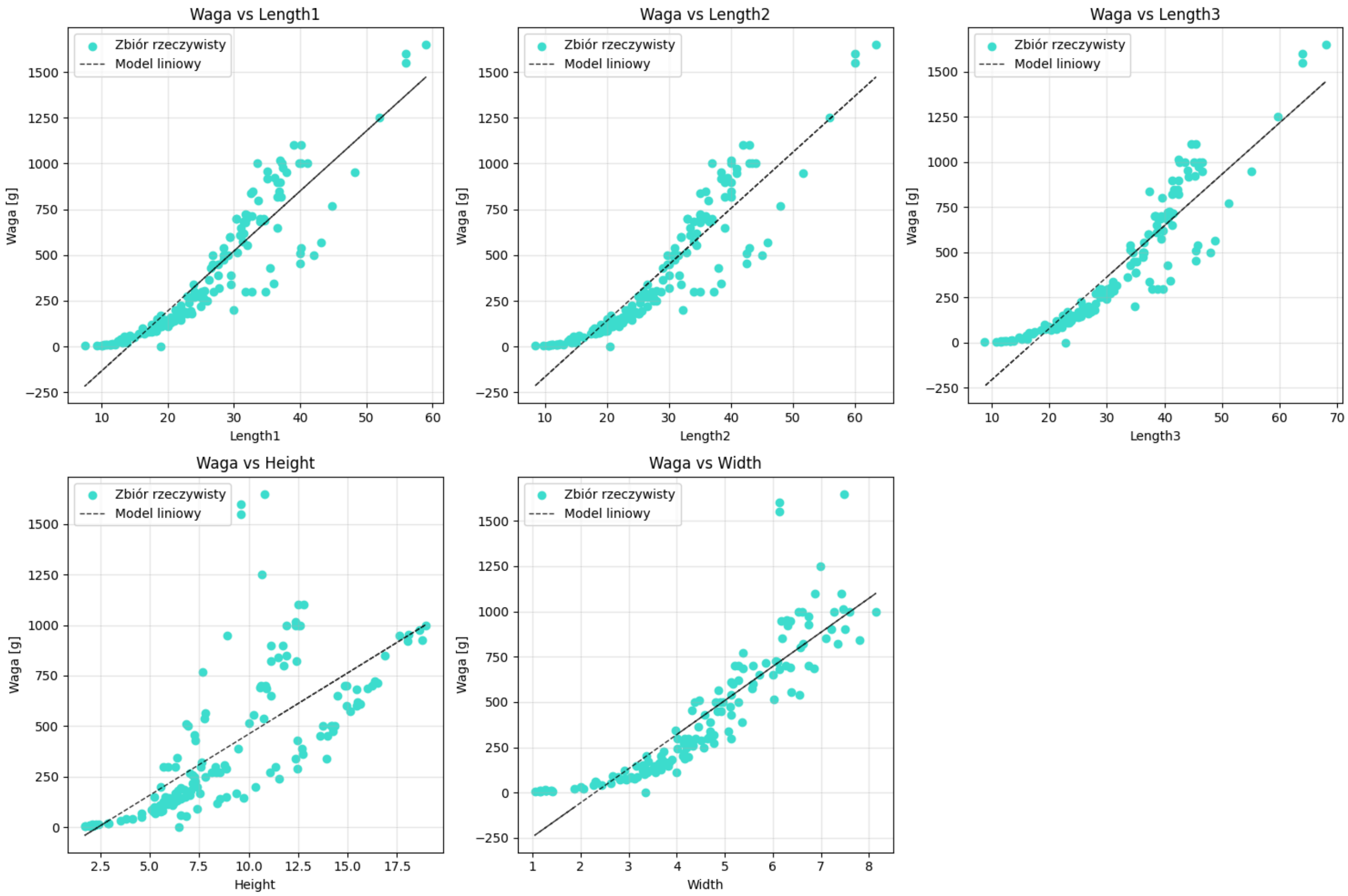
- **RMSE (Train):** 111.46 g
- **RMSE (Test):** 151.35 g

Wnioski: Model liniowy wykazuje **duże niedopasowanie (underfitting)**.

- Wykres "Rzeczywistość vs Predykcja" pokazuje, że dla małych ryb model przewiduje wagi ujemne (niemożliwe fizycznie), a dla dużych ryb systematycznie zaniża wagę.
- Wykres rezyduów układa się w kształt paraboli ("U-shape"), co sugeruje, że relacja między wymiarami a wagą nie jest liniowa.

5. Analiza Cech (Zadanie 6 - część 1)

Analiza wizualna zależności między wagą a poszczególnymi wymiarami potwierdziła nieliniowy charakter danych.

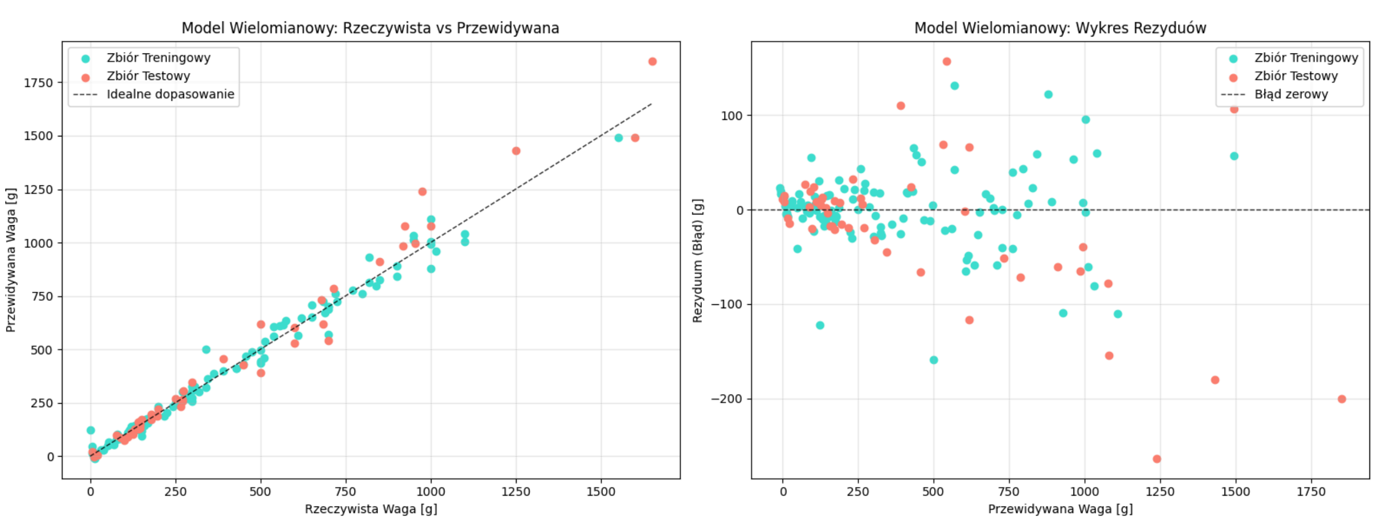


Waga ryby (objętość) zależy od sześcianu lub iloczynu jej wymiarów, a nie od ich prostej sumy. Dlatego zaproponowano użycie **Regresji Wielomianowej stopnia 2**, która uwzględnia interakcje (np. $L_n \times W$) oraz kwadraty cech.

6. Regresja Wielomianowa (Zadanie 6 - część 2)

Zastosowano transformację `PolynomialFeatures(degree=2)` i ponownie wytrenowano model.

Wyniki:



Wnioski:

- Model wielomianowy znacznie lepiej odwzorowuje dane.
- Wykres rezyduów stracił paraboliczny kształt i stał się bardziej losowy (szum biały).

7. Podsumowanie i Porównanie Modeli (Zadanie 7)

Poniżej zestawiono wyniki obu modeli (Liniowego i Wielomianowego) na zbiorze testowym.

Tabela Porównawcza (Zbiór Testowy):

Metryka	Model Liniowy	Model Wielomianowy (st. 2)	Zmiana
SSE	1 099 574.45	274 999.67	↓ Znaczna poprawa
MSE	22 907.80	5 729.16	↓ Znaczna poprawa
RMSE	151.35 g	75.69 g	↓ **Błąd mniejszy o połowę**
MAE	106.24 g	48.55 g	↓ Ponad 2x mniejszy błąd

Wnioski Końcowe:

1. **Skuteczność:** Model wielomianowy okazał się zdecydowanie lepszy. Zredukował średni błąd (MAE) z ~106g do ~48g. Jest to dowód na to, że waga ryby zależy nieliniowo od jej wymiarów.
2. **Diagnostyka:**
   - Model Liniowy cierpiał na **niedouczenie** (wysoki błąd zarówno na zbiorze treningowym, jak i testowym).
   - Model Wielomianowy wykazuje cechy **lekkiego przeuczenia** (błąd na zbiorze testowym RMSE=75 jest wyższy niż na treningowym RMSE=41). Wynika to z dużej liczby cech (21) przy stosunkowo małym zbiorze danych. Mimo to, jego zdolność predykcji na nowych danych jest znacznie wyższa niż modelu liniowego.

Dodatek: Kod Źródłowy

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import pandas as pd
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.preprocessing import PolynomialFeatures
from numpy.polynomial import Chebyshev

# Funkcje pomocnicze (Zadanie 1 i 2)
def pinvMP(A):
    A_T = A.T
    ATA = A_T @ A
    try:
        ATA_inv = np.linalg.inv(ATA)
    except np.linalg.LinAlgError:
        raise ValueError("Macierz A^T A jest nieodwracalna")
```

```python
    A_pinv = ATA_inv @ A_T
    return A_pinv

def solve_LSQ_with_MoorePenrose_matrix(A, b):
    A_pseudo_inv = pinvMP(A)
    x = A_pseudo_inv @ b
    return x

def solve_LSQ_with_QR(A, b):
    Q, R = np.linalg.qr(A, mode='reduced')
    R_inv = np.linalg.inv(R)
    A_pinv = R_inv @ Q.T
    x = A_pinv @ b
    return x

# Generowanie danych (Zadanie 4)
def generate_chebyshev_data(n_samples=100, noise_std=0.3):
    cheb_poly = Chebyshev([0] * 8 + [1])
    p_true = cheb_poly.convert(kind=np.polynomial.Polynomial)
    x = np.linspace(-1, 1, n_samples)
    y_ideal = p_true(x)
    np.random.seed(13)
    noise = np.random.normal(0, noise_std, size=len(x))
    y_noisy = y_ideal + noise
    return x, y_ideal, y_noisy

def create_vandermonde_matrix(x, degree):
    return np.vander(x, degree + 1, increasing=True)

def calculate_metrics(y_true, y_pred):
    residuals = y_true - y_pred
    sse = np.sum(residuals ** 2)
    mse = np.mean(residuals ** 2)
    rmse = np.sqrt(mse)
    mae = np.mean(np.abs(residuals))
    return {"SSE": sse, "MSE": mse, "RMSE": rmse, "MAE": mae}

# Eksperyment wielomianowy (Zadanie 4)
x_samples, y_true, y_data = generate_chebyshev_data(n_samples=100, noise_std=0.3)
# ... (kod rysujący wykresy i liczący metryki dla st. 4, 8, 12) ...

# Regresja dla Fish Market (Zadanie 5 i 6)
df = pd.read_csv("data/Fish.csv")
X = df[df.columns[2:]]
Y = df[df.columns[1]]

# Model Liniowy
X_train, X_test, Y_train, Y_test = train_test_split(X, Y, test_size=0.3, random_state=13)
A_train = np.c_[np.ones(len(X_train)), X_train]
A_test = np.c_[np.ones(len(X_test)), X_test]
w_lin = solve_LSQ_with_MoorePenrose_matrix(A_train, Y_train)
# ... (predykcja i metryki) ...

# Model Wielomianowy (Zadanie 6)
poly = PolynomialFeatures(degree=2, include_bias=True)
X_train_poly = poly.fit_transform(X_train)
X_test_poly = poly.transform(X_test)
w_poly = solve_LSQ_with_MoorePenrose_matrix(X_train_poly, Y_train)
# ... (predykcja i metryki) ...
```