Metoda najmniejszych kwadratów

Niyaz Lapkouski gr. 5 (sr. 18:30)

Punkt 1

Niech mamy nadokreślony układ równań zapisany za pomocą macierzy $A : Ax = b$. Chcemy zaproksymowac rozwiązanie metodą najmniejszych kwadratów używając macierzy pseudoodwrotnej.

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

Implementacja:

In [2]:
```
def ols_pseudoinverse(A, b):
    return np.linalg.inv(A.T @ A) @ A.T @ b
```

Punkt 2

Skorzystamy z rozkładu QR dla A:

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

Dla rozkładu QR $A = QR$. Podstawmy:

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

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

Q jest macierzą ortonormalną -> $Q^T Q = I$:

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

Pamiętamy $(AB)^{-1} = B^{-1} A^{-1}$, więc $A^+ = R^{-1} (R^T)^{-1} R^T Q^T$

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

Zatem rozwiązanie: $x = A^+ b = R^{-1} Q^T b$

In [3]:
```
def ols_qr(A, b):
    Q, R = la.qr(A, mode='reduced')
    return np.linalg.inv(R) @ Q.T @ b
```

Punkt 4

Rozważmy wielomian 7-go stopnia

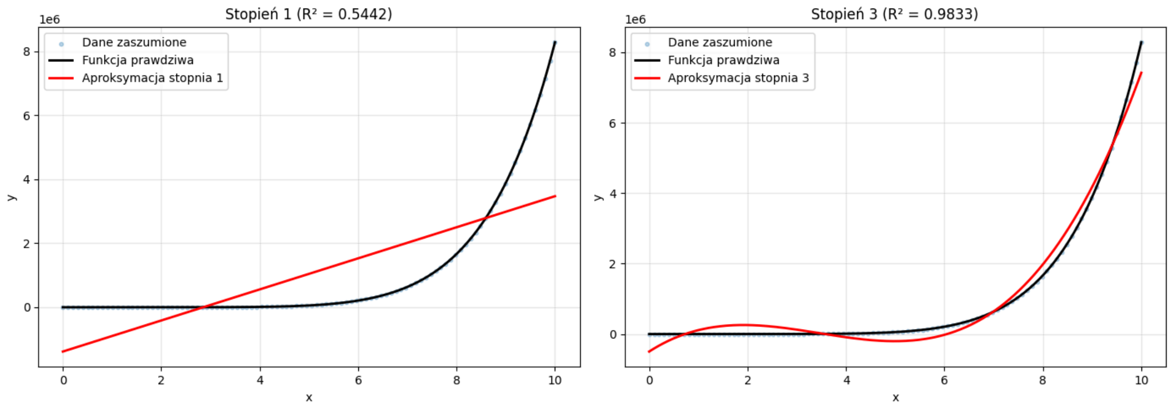
$$f(x) = x^7 - 2x^6 + 3x^5 - 2x^4 + 5x^3 - 2x^2 + 3x + 10$$

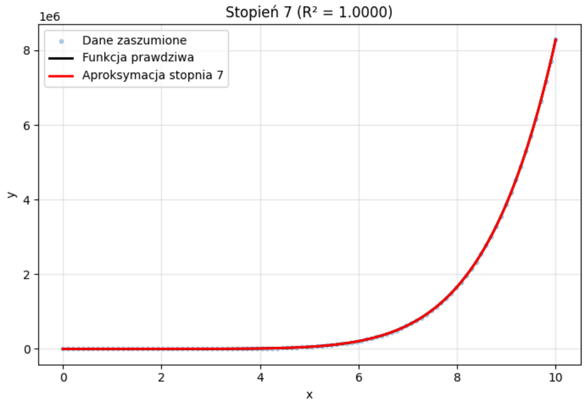
i dopasujmy różne stopnie aproksymacji (1, 3, 7).

In [4]:
```
x_data = np.linspace(0, 10, 100)

def true_function(x):
    return x**7 - 2*x**6 + 3*x**5 - 2*x**4 + 5*x**3 - 2*x**2 + 3*x + 10

y_true = true_function(x_data)
noise = np.random.normal(5, 50, 100)
y_noisy = y_true + noise

degrees = [1, 3, 7]
results_poly = {}

for deg in degrees:
    A = np.vander(x_data, deg + 1)

    coeffs_pinv = ols_pseudoinverse(A, y_noisy)
    coeffs_qr = ols_qr(A, y_noisy)

    y_pred_pinv = A @ coeffs_pinv
    y_pred_qr = A @ coeffs_qr

    sse_pinv = np.sum((y_noisy - y_pred_pinv)**2)
    mse_pinv = mean_squared_error(y_noisy, y_pred_pinv)
    mae_pinv = mean_absolute_error(y_noisy, y_pred_pinv)
    r2_pinv = r2_score(y_noisy, y_pred_pinv)

    sse_qr = np.sum((y_noisy - y_pred_qr)**2)
    mse_qr = mean_squared_error(y_noisy, y_pred_qr)
    mae_qr = mean_absolute_error(y_noisy, y_pred_qr)
    r2_qr = r2_score(y_noisy, y_pred_qr)

    results_poly[deg] = {
        'coeffs_pinv': coeffs_pinv,
        'coeffs_qr': coeffs_qr,
        'y_pred_pinv': y_pred_pinv,
        'y_pred_qr': y_pred_qr,
        'sse_pinv': sse_pinv,
        'mse_pinv': mse_pinv,
        'mae_pinv': mae_pinv,
        'r2_pinv': r2_pinv,
        'sse_qr': sse_qr,
        'mse_qr': mse_qr,
        'mae_qr': mae_qr,
        'r2_qr': r2_qr
    }

    print(f"Stopień {deg}:")
    print(f"Metoda Pseudoodwrotna:")
    print(f"  SSE:  {sse_pinv:.2f}")
    print(f"  MSE:  {mse_pinv:.4f}")
    print(f"  MAE:  {mae_pinv:.4f}")
    print(f"  R²:   {r2_pinv:.4f}")

    print(f"Metoda QR:")
    print(f"  SSE:  {sse_qr:.2f}")
    print(f"  MSE:  {mse_qr:.4f}")
    print(f"  MAE:  {mae_qr:.4f}")
    print(f"  R²:   {r2_qr:.4f}")
```

```
    print(f"Różnica współczynników: {np.linalg.norm(coeffs_pinv - coeffs_
    print(f"Różnica predykcji:      {np.linalg.norm(y_pred_pinv - y_pred_
```

```
Stopień 1:
Metoda Pseudoodwrotna:
  SSE:  167961147336644.69
  MSE:  1679611473366.4468
  MAE:  1007254.5616
  R²:   0.5442
Metoda QR:
  SSE:  167961147336644.72
  MSE:  1679611473366.4473
  MAE:  1007254.5616
  R²:   0.5442
Różnica współczynników: 2.15e-09
Różnica predykcji:      1.38e-08
Stopień 3:
Metoda Pseudoodwrotna:
  SSE:  6169640865608.04
  MSE:  61696408656.0804
  MAE:  208918.4479
  R²:   0.9833
Metoda QR:
  SSE:  6169640865608.06
  MSE:  61696408656.0806
  MAE:  208918.4479
  R²:   0.9833
Różnica współczynników: 9.21e-08
Różnica predykcji:      1.16e-06
Stopień 7:
Metoda Pseudoodwrotna:
  SSE:  207372.08
  MSE:  2073.7208
  MAE:  36.6919
  R²:   1.0000
Metoda QR:
  SSE:  207371.97
  MSE:  2073.7197
  MAE:  36.6933
  R²:   1.0000
Różnica współczynników: 5.72e-04
Różnica predykcji:      3.29e-01
```





Porównanie metryk

Stopień	SSE	MSE	MAE	R^2
1	167961147336644	1679611473366.446	1007254.5616	0.5442
3	6169640865608.04	61696408656.0804	208918.4479	0.9833
7	207372.08	2073.7208	36.6919	1.0000

Jak widzimy, wielomian stopnia 1 (liniowy) nie jest w stanie uchwycić nieliniowego charakteru danych, co skutkuje słabym dopasowaniem. Wielomian stopnia 3 ma większą elastyczność, ale nadal brakuje mu wystarczającej liczby stopni swobody, aby dokładnie odwzorować funkcję 7. stopnia. Wielomian stopnia 7 osiąga najlepsze dopasowanie, ponieważ jego stopień odpowiada stopniowi funkcji generującej dane. Porównanie metody pseudoodwrotnej i rozkładu QR wykazało, że obie dają praktycznie identyczne wyniki - różnice w współczynnikach i predykcjach są rzędu błędu numerycznego.

Punkt 5

Predykcja wagi ryby na podstawie jej wymiarów

Używamy zbioru danych Fish Dataset. Celem jest predykcja wagi ryby (y) na podstawie jej wymiarów liniowych:

Cechy wejściowe:

- `Length1` - długość pionowa (cm)
- `Length2` - długość ukośna (cm)
- `Length3` - długość poprzeczna (cm)
- `Height` - wysokość (cm)
- `Width` - szerokość (cm)

Model liniowy:

$$\text{Weight} = \beta_0 + \beta_1 \cdot \text{Length1} + \beta_2 \cdot \text{Length2} + \beta_3 \cdot \text{Length3} + \beta_4 \cdot \text{Height} + \beta_5 \cdot \text{W}$$

Znajdziemy optymalne współczynniki β metodą najmniejszych kwadratów (pseudoodwrotna i QR), a następnie ocenimy jakość modelu na zbiorze testowym.

In [6]:
```
df = pd.read_csv('Fish.csv')

print("Pierwsze wiersze danych:") # brief EDA
print(df.head())
print(f"Rozmiar zbioru: {df.shape}")
print("Statystyki:")
print(df.describe())

X = df[['Length1', 'Length2', 'Length3', 'Height', 'Width']].values
y = df['Weight'].values

X_with_bias = np.column_stack([np.ones(len(X)), X])

X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X_with_bias, y, test_

print(f"Treningowy: {X_train.shape[0]}")
print(f"Testowy: {X_test.shape[0]}")
```

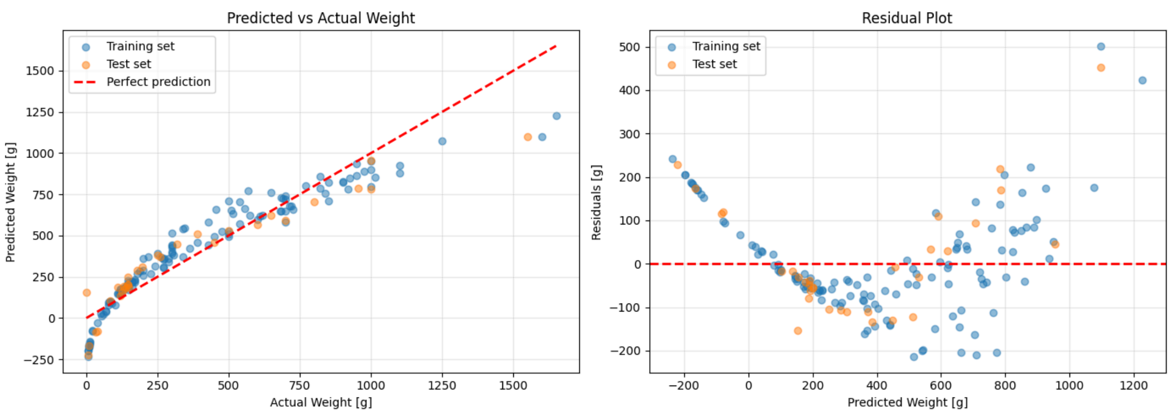
```
Pierwsze wiersze danych:
  Species  Weight  Length1  Length2  Length3   Height   Width
0   Bream   242.0     23.2     25.4     30.0  11.5200  4.0200
1   Bream   290.0     24.0     26.3     31.2  12.4800  4.3056
2   Bream   340.0     23.9     26.5     31.1  12.3778  4.6961
3   Bream   363.0     26.3     29.0     33.5  12.7300  4.4555
4   Bream   430.0     26.5     29.0     34.0  12.4440  5.1340
Rozmiar zbioru: (159, 7)
Statystyki:
            Weight     Length1     Length2     Length3      Height         W
idth
count   159.000000  159.000000  159.000000  159.000000  159.000000  159.00
0000
mean    398.326415   26.247170   28.415723   31.227044    8.970994    4.41
7486
std     357.978317    9.996441   10.716328   11.610246    4.286208    1.68
5804
min       0.000000    7.500000    8.400000    8.800000    1.728400    1.04
7600
25%     120.000000   19.050000   21.000000   23.150000    5.944800    3.38
5650
50%     273.000000   25.200000   27.300000   29.400000    7.786000    4.24
8500
75%     650.000000   32.700000   35.500000   39.650000   12.365900    5.58
4500
max    1650.000000   59.000000   63.400000   68.000000   18.957000    8.14
2000
Treningowy: 127
Testowy: 32
```

In [7]:
```
coeffs_fish_pinv = ols_pseudoinverse(X_train, y_train)
coeffs_fish_qr = ols_qr(X_train, y_train)

print("Współczynniki modelu (pseudoodwrotna):")
print(f"  Wyraz wolny: {coeffs_fish_pinv[0]:.4f}")
for i, name in enumerate(['Length1', 'Length2', 'Length3', 'Height', 'Wid
    print(f"  {name}: {coeffs_fish_pinv[i+1]:.4f}")
```

```
y_pred_train = X_train @ coeffs_fish_pinv
y_pred_test = X_test @ coeffs_fish_pinv

print("Metryki – zbiór treningowy:")
print(f"  MSE: {mean_squared_error(y_train, y_pred_train):.2f}")
print(f"  RMSE: {np.sqrt(mean_squared_error(y_train, y_pred_train)):.2f}"
print(f"  MAE: {mean_absolute_error(y_train, y_pred_train):.2f}")
print(f"  R²: {r2_score(y_train, y_pred_train):.4f}")

print("Metryki – zbiór testowy:")
print(f"  MSE: {mean_squared_error(y_test, y_pred_test):.2f}")
print(f"  RMSE: {np.sqrt(mean_squared_error(y_test, y_pred_test)):.2f}")
print(f"  MAE: {mean_absolute_error(y_test, y_pred_test):.2f}")
print(f"  R²: {r2_score(y_test, y_pred_test):.4f}")

print(f"Różnica metod: {np.linalg.norm(coeffs_fish_pinv - coeffs_fish_qr)
```

```
Współczynniki modelu (pseudoodwrotna):
  Wyraz wolny: -484.8536
  Length1: 56.9059
  Length2: -4.6347
  Length3: -28.5448
  Height: 24.2558
  Width: 43.6835
Metryki – zbiór treningowy:
  MSE: 14198.82
  RMSE: 119.16
  MAE: 90.10
  R²: 0.8862
Metryki – zbiór testowy:
  MSE: 17504.95
  RMSE: 132.31
  MAE: 101.51
  R²: 0.8704
Różnica metod: 8.79e-11
```

Wizualizacja



Punkt 6

Analiza liniowej zależności wagi od każdego z atrybutów osobno

Sprawdzamy, jak dobrze pojedyncze cechy (Length1, Length2, Length3, Height, Width) przewidują wagę ryby w modelu liniowym:

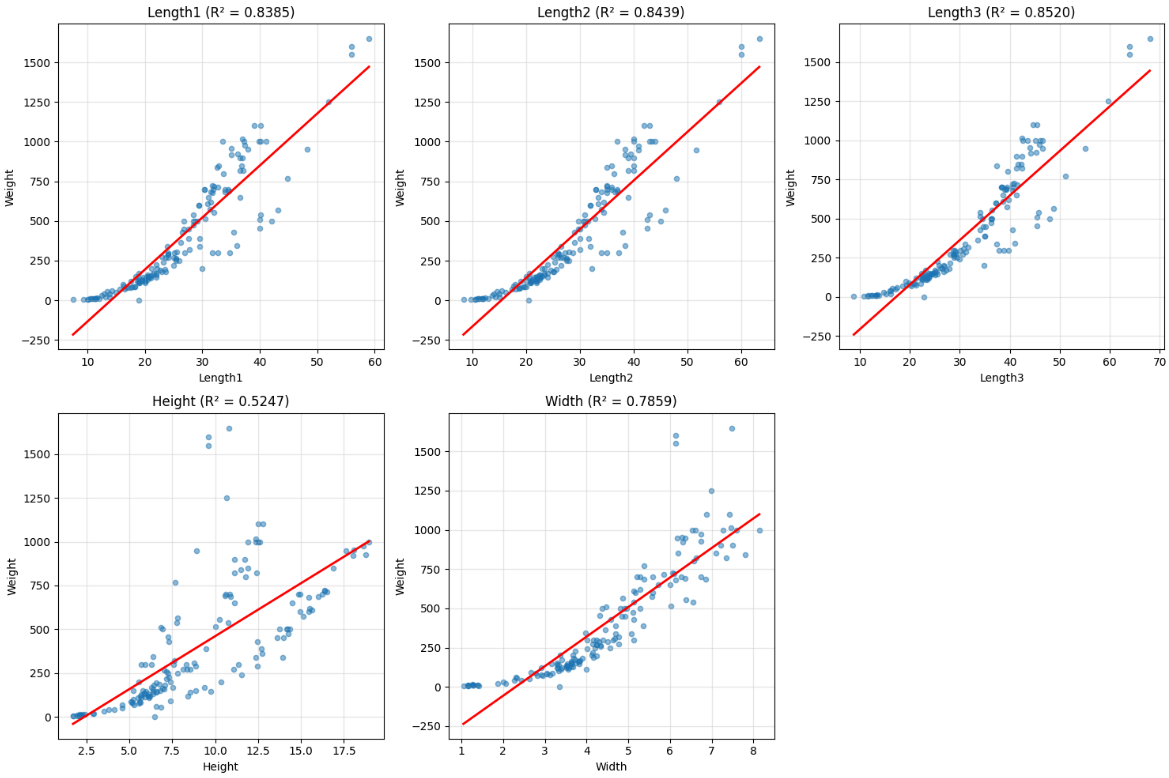
$$\text{Weight} = \beta_0 + \beta_1 \cdot \text{Feature}_i$$

Dla każdej cechy:

1. Dopasowujemy prostą regresji
2. Obliczamy współczynnik R^2 (jakość dopasowania)
3. Wizualizujemy zależność

Jeśli zależność jest nieliniowa, to model liniowy będzie słaby. W takim przypadku zaproponujemy alternatywną formułę z cechami wielomianowymi.

In [9]:
```
features = ['Length1', 'Length2', 'Length3', 'Height', 'Width']
X_features = df[features].values

fig, axes = plt.subplots(2, 3, figsize=(15, 10))
axes = axes.flatten()

for idx, feature in enumerate(features):
    X_single = np.column_stack([np.ones(len(X_features)), X_features[:, i
    coeffs_single = ols_pseudoinverse(X_single, y)
    y_pred_single = X_single @ coeffs_single

    r2_single = r2_score(y, y_pred_single)

    axes[idx].scatter(X_features[:, idx], y, alpha=0.5, s=20)

    x_sorted = np.sort(X_features[:, idx])
    X_sorted = np.column_stack([np.ones(len(x_sorted)), x_sorted])
    y_line = X_sorted @ coeffs_single
    axes[idx].plot(x_sorted, y_line, 'r-', linewidth=2)

    axes[idx].set_xlabel(feature)
    axes[idx].set_ylabel('Weight')
    axes[idx].set_title(f'{feature} (R² = {r2_single:.4f})')
    axes[idx].grid(alpha=0.3)

axes[5].axis('off')
plt.tight_layout()
plt.show()
```



Obserwacje:

- Zależność nie jest liniowa dla wszystkich cech
- Waga rośnie nieliniowo wraz z wymiarami (waga ~ objętość ~ długość^3)
- Alternatywna formuła: użycie potęg cech lub ich iloczynów

In [10]:
```
poly = PolynomialFeatures(degree=2, include_bias=True)
X_poly = poly.fit_transform(X_features)

print(f"Liczba cech oryginalnych: {X_features.shape[1]}")
print(f"Liczba cech po transformacji: {X_poly.shape[1]}")
print(f"Nazwy cech: {poly.get_feature_names_out(features)}")

X_poly_train, X_poly_test, y_poly_train, y_poly_test = train_test_split(
    X_poly, y, test_size=0.2, random_state=1
)

coeffs_poly = ols_pseudoinverse(X_poly_train, y_poly_train)
print(coeffs_poly)

y_poly_pred_train = X_poly_train @ coeffs_poly
y_poly_pred_test = X_poly_test @ coeffs_poly

print("Model nieliniowy - Metryki treningowe:")
print(f"  MSE: {mean_squared_error(y_poly_train, y_poly_pred_train):.2f}"
print(f"  RMSE: {np.sqrt(mean_squared_error(y_poly_train, y_poly_pred_tra
print(f"  MAE: {mean_absolute_error(y_poly_train, y_poly_pred_train):.2f}
print(f"  R²: {r2_score(y_poly_train, y_poly_pred_train):.4f}")

print("Model nieliniowy - Metryki testowe:")
print(f"  MSE: {mean_squared_error(y_poly_test, y_poly_pred_test):.2f}")
print(f"  RMSE: {np.sqrt(mean_squared_error(y_poly_test, y_poly_pred_test
print(f"  MAE: {mean_absolute_error(y_poly_test, y_poly_pred_test):.2f}")
print(f"  R²: {r2_score(y_poly_test, y_poly_pred_test):.4f}")
```

```
Liczba cech oryginalnych: 5
Liczba cech po transformacji: 21
Nazwy cech: ['1' 'Length1' 'Length2' 'Length3' 'Height' 'Width' 'Length1^
2'
 'Length1 Length2' 'Length1 Length3' 'Length1 Height' 'Length1 Width'
 'Length2^2' 'Length2 Length3' 'Length2 Height' 'Length2 Width'
 'Length3^2' 'Length3 Height' 'Length3 Width' 'Height^2' 'Height Width'
 'Width^2']
[190.63534659 -63.19495619   5.19142327  22.5035039  -13.90824029
  59.84923143 -82.52310167 104.31540329  44.03088352 -32.96949475
  81.15571985 -40.33296723 -15.52880274  22.3678617  -36.35132793
 -10.14401216   9.63954536 -42.32598109  -9.28834968  32.7242678
  -9.38518924]
Model nieliniowy - Metryki treningowe:
  MSE: 2035.04
  RMSE: 45.11
  MAE: 30.94
  R²: 0.9837
Model nieliniowy - Metryki testowe:
  MSE: 3305.73
  RMSE: 57.50
  MAE: 40.16
  R²: 0.9755
```

Punkt 7

Porównanie modelu liniowego i wielomianowego.

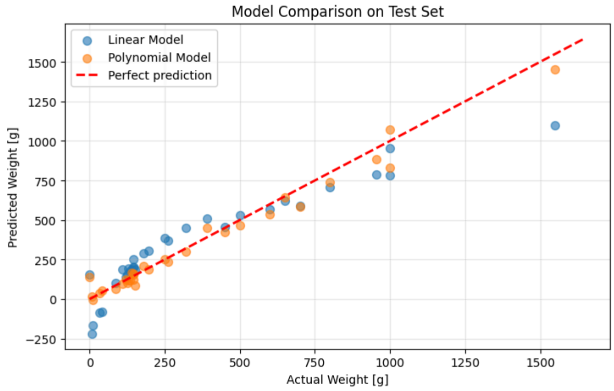
Porównujemy wydajność dwóch podejść:

1. Model liniowy (Punkt 5): $\text{Weight} = \beta_0 + \sum_{i=1}^{5} \beta_i \cdot x_i$
    - 6 współczynników (bias + 5 cech)
2. Model wielomianowy (Punkt 6): stopień 2
    - 21 współczynników (bias + cechy liniowe + kwadratowe + interakcje)
    - Lepiej modeluje nieliniową zależność wagi od wymiarów (waga ~ objętość)

Oczekujemy, że model wielomianowy osiągnie lepsze wyniki ze względu na uwzględnienie terminów kwadratowych i interakcji między cechami.

Comparison of Models

Model	MSE	RMSE	MAE	R^2
Linear Model - Train	14198.82	119.16	90.10	0.8862
Linear Model - Test	17504.95	132.31	101.51	0.8704
Polynomial Model - Train	2035.04	45.11	30.94	0.9837
Polynomial Model - Test	3305.73	57.50	40.16	0.9755



Wnioski Końcowe:

1. Obie metody (pseudoodwrotna i QR) dają prawie identyczne wyniki (QR jest numerycznie stabilniejsza)
2. Model nieliniowy lepiej odzwierciedla fizyczną zależność (waga ~ objętość ~ długość × wysokość × szerokość), co znacząco poprawia dokładność (widzimy wyższy R^2)
3. Dla wielomianów ważny jest dobór odpowiedniego stopnia (unikanie przeuczenia i niedouczenia)
4. Metryki na zbiorze testowym są kluczowe dla oceny generalizacji