Національний Технічний Університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»
Навчально-Науковий Комплекс
«Інститут прикладного системного аналізу»

# Лабороторна робота № 3
## з дисципліни «Моделювання складних систем»

Виконали:
студенти гр. КА-41
Мельничук Валентин
Лочман Ярослава
Снігірьова Валерія

Прийняв:
професор кафедри ММСА,
д.т.н. Степашко В.С.

Київ 2018

# 1 Пошук моделі оптимальної складності

Метою роботи є пошук моделі оптимальної складності, причому наперед не відомо, яку саме підмножину всіх регресорів/аргументів містить така модель. Тому необхідно сконструювати і перевірити алгоритми для її пошуку.

## 1.1 Задання конфігурацій. Створення вибірок

### 1.1.1 Тест 1 (вибірка аналогічна вибірці з лабораторної роботи №2)

```
In [240]: config1 = ModelConfig(a=0, b=0.5)
          config1.compile(n=1000)
          config1.generate_noise_and_output()
          config1.show()
```

```
Regressors: m = 5
True parameters: θ = [ 3 -2  1  0  0]
y0 = (3) * x1 + (-2) * x2 + (1) * x3 + (0) * x4 + (0) * x5
Noise generation: σ = 0.3
Sample length: n = 1000
X[:10]:
[[0.41874236 0.12456156 0.28066172 0.15910143 0.46122701]
 [0.18105384 0.37716676 0.27709214 0.4888375  0.44187549]
 [0.39936274 0.38647222 0.15799907 0.23559202 0.17128673]
 [0.37188136 0.0734651  0.4625002  0.4584715  0.46049963]
 [0.16993313 0.00577501 0.10517818 0.41488992 0.02465976]
 [0.4015307  0.10460762 0.01333114 0.121193   0.45949378]
 [0.04337896 0.04571534 0.09617543 0.36648325 0.33861697]
 [0.43594373 0.13017585 0.14422878 0.09106459 0.30376701]
 [0.08004885 0.45564509 0.42793286 0.25046363 0.11175226]
 [0.24495675 0.28230842 0.13494233 0.00910952 0.08285733]]
y[:10]:
[ 1.54708203  0.37647857  0.09577151  1.52671753  0.3847499   0.94908614
  0.05493975  0.96470431 -0.44266497 -0.01847096]
```

### 1.1.2 Тест 2 (велика вибірка з великою кількістю регресорів)

```
In [275]: config2 = ModelConfig(m=15, s0=10, a=0, b=0.5, theta={'random': [1, 10]})
          config2.compile(n=1000)
          config2.generate_noise_and_output()
          config2.show(5)
```

```
Regressors: m = 15
True parameters: θ = [1.08631304 7.56699925 9.87829854 1.23698103 1.95130363 7.51601044
 3.30060728 9.37353548 8.89118059 5.43780306 0.         0.
 0.         0.         0.        ]
y0 = (1.0863130375942172) * x1 + (7.5669992531306685) * x2 + (9.878298535051083) * x3 +
(1.2369810327923685) * x4 + (1.9513036347108885) * x5 + (7.516010436428849) * x6 +
```

```
(3.3006072776149766) * x7 + (9.373535481004593) * x8 + (8.891180588599674) * x9 +
(5.437803059763569) * x10 + (0.0) * x11 + (0.0) * x12 + (0.0) * x13 + (0.0) * x14 + (0.0) * x15
Noise generation: σ = 0.3
Sample length: n = 1000
X[:10]:
[[0.1705477  0.11570771 0.04892584 0.13072365 0.16437218 0.31504024
  0.14840706 0.11924657 0.09960202 0.22359233 0.43944381 0.23732165
  0.19519143 0.10417676 0.37984204]
 [0.0331949  0.40150537 0.25136752 0.44019061 0.45945587 0.21892163
  0.1898278  0.05924368 0.29950877 0.17212511 0.13291328 0.27488848
  0.40227747 0.21418697 0.207846  ]
 [0.48098721 0.09015798 0.1225068  0.33779223 0.17132909 0.29822888
  0.29883653 0.19555494 0.17036849 0.38940055 0.25217936 0.22981511
  0.11896126 0.4501579  0.22419701]
 [0.40599318 0.38085013 0.26163438 0.35836486 0.24301073 0.25737834
  0.21272382 0.40589793 0.25593534 0.29699694 0.07434101 0.32349888
  0.30363923 0.37264665 0.36211302]
 [0.06235834 0.23418489 0.43466777 0.34663551 0.10996189 0.19710446
  0.30886481 0.09920457 0.13226504 0.43110287 0.08626634 0.31482844
  0.33328672 0.11005692 0.07750284]]
y[:10]:
[ 8.30431374 13.50238474 12.2071761  17.13535375 13.8499516 ]
```

#### 1.1.3 Тест 3 (власні задачі)

Вміст октану При дослідженні виробничого процесу нафтопереробному заводі вимірюється вміст октану в нафті залежно від кількості 3-х сировинних матеріалів та змінної, що характеризує умови виробництва. Вхідні змінні (5):

- Кількість матеріалу 1
- Кількість матеріалу 2
- Кількість матеріалу 3
- Кількісний показник умов виробництва
- Одиниця, відповідає вільному члену

Вихідна змінна:

- Вміст октану

```
In [242]: dataframe_path = 'data/octane-rating.csv'
          df = pd.read_csv(dataframe_path)
          config3 = ModelConfig(theta='unknown',
                                X=df.loc[:, 'One':'Condition'],
                                y=df['Octane number'])
          config3.show()
```

```
Regressors: m = 5
True parameters: θ = unknown
```

```
Sample length: n = 82
X[:10]:
[[ 1.      55.33     1.72    54.       1.66219]
 [ 1.      59.13     1.2     53.       1.58399]
 [ 1.      57.39     1.42    55.       1.61731]
 [ 1.      56.43     1.78    55.       1.66228]
 [ 1.      55.98     1.58    54.       1.63195]
 [ 1.      56.16     2.12    56.       1.68034]
 [ 1.      54.85     1.17    54.       1.58206]
 [ 1.      52.83     1.5     58.       1.54998]
 [ 1.      54.52     0.87    57.       1.5623 ]
 [ 1.      54.12     0.88    57.       1.57818]]
y[:10]:
[92.19 92.74 91.88 92.8  92.56 92.61 92.33 92.22 91.56 92.17]
```

Ціни на нерухомість  Вхідні змінні (36):

- Тип житла (номер)
- Дистанція від вулиці до фасаду в футах
- Розмір ділянки в квадратних футах
- Загальна якість матеріалів та обробки
- Загальний стан житла
- Рік початку будівництва
- Рік переробки
- Площа фанери в квадратних футах
- Площа підвалу 1 в квадратних футах
- Площа підвалу 2 в квадратних футах
- Площа підвалу (незробленого) в квадратних футах
- Загальна площа підвалу в квадратних футах
- Перший поверх, площа в квадратних футах
- Другий поверх, площа в квадратних футах
- Інші ділянки, площа в квадратних футах
- Житлова площа квадратних футів
- Підвал: кількість великих ванних кімнат
- Підвал: кількість маленьких ванних кімнат
- Вище рівня фундаменту: кількість великих ванних кімнат
- Вище рівня фундаменту: кількість маленьких ванних кімнат
- Кількість спалень вище рівня фундаменту
- Кількість кухонь вище рівня фундаменту
- Загальна кількість кімнат вище рівня фундаменту (не включає ванні кімнати)
- Кількість камінів
- Рік побудови гаража
- Розмір гаража відносно автомобіля
- Розмір гаража в квадратних футах
- Площа деревини в квадратних метрах
- площа відкритого веранди в квадратних футах
- Закрита площа під'їзду в квадратних футах

- три сезонних ганок площі в квадратних метрах
- площа екранної ганку в квадратних футах
- Площа басейну в квадратних футах
- Змішаний показник
- Місяць продажу (номер)
- Рік продажу

Вихідна змінна:

- Ціна на нерухомість в долларах

```
In [243]: dataframe_path = 'data/house-prices-cleaned.csv'
          df = pd.read_csv(dataframe_path)
          config3 = ModelConfig(theta='unknown',
                                X=df.loc[:, 'MSSubClass':'YrSold'],
                                y=df['SalePrice'])
          config3.show(1)
```

```
Regressors: m = 36
True parameters: θ = unknown
Sample length: n = 1460
X[:10]:
[[4.11087386e+00 4.18965474e+00 9.04204006e+00 7.00000000e+00
  5.00000000e+00 2.00300000e+03 2.00300000e+03 5.28320373e+00
  6.56103067e+00 0.00000000e+00 5.01727984e+00 6.75343792e+00
  6.75343792e+00 6.75110147e+00 0.00000000e+00 7.44483327e+00
  1.00000000e+00 0.00000000e+00 2.00000000e+00 1.00000000e+00
  3.00000000e+00 6.93147181e-01 8.00000000e+00 0.00000000e+00
  2.00300000e+03 2.00000000e+00 5.48000000e+02 0.00000000e+00
  4.12713439e+00 0.00000000e+00 0.00000000e+00 0.00000000e+00
  0.00000000e+00 0.00000000e+00 2.00000000e+00 2.00800000e+03]]
y[:10]:
[12.24769912]
```

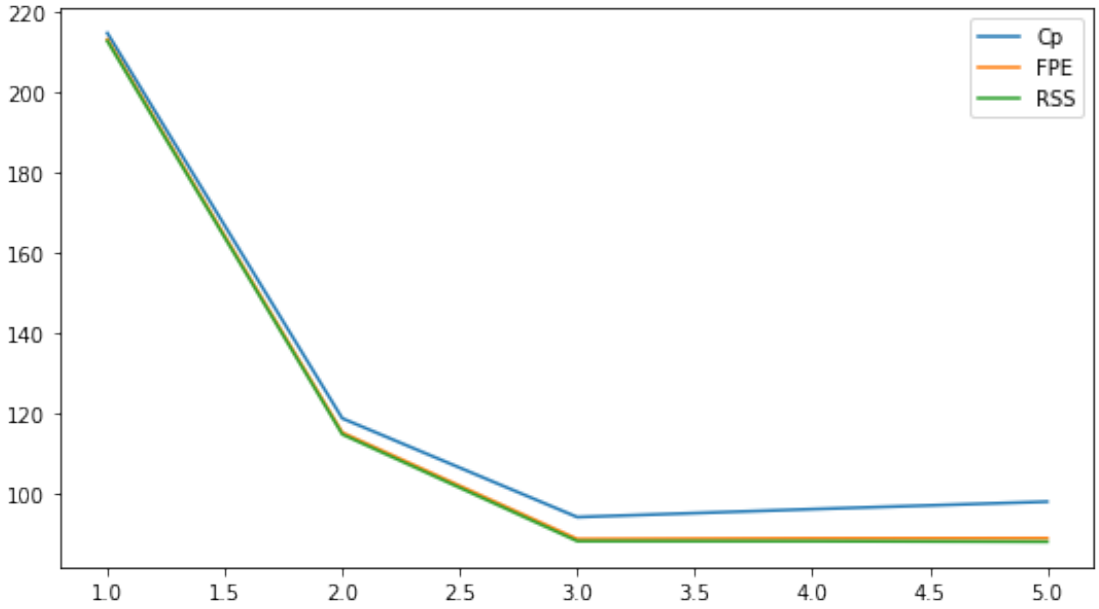
Далі в якості Теста 3 розглядатимемо саме ціни на нерухомість, оскільки ця задача є цікавішою. При захисті роботи продемонструємо дослідження також і для першої вибірки.

## 1.2 Пошук моделі. Послідовне включення (метод з лабораторної роботи №2)

### 1.2.1 Тест 1

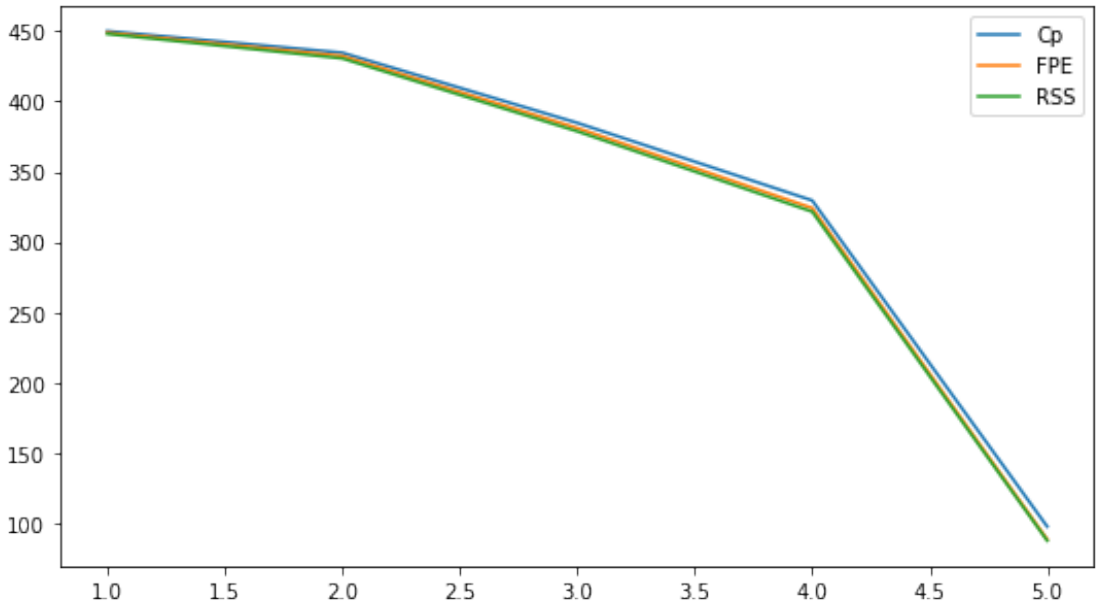
```
In [244]: df1 = config1.run_single_LSMB_model_selection(p=None,
                                                        criteria=['Cp', 'FPE', 'RSS'],
                                                        plot=True)
          print()
          df2 = config1.run_single_LSMB_model_selection(p='reverse',
                                                        criteria=['Cp', 'FPE', 'RSS'],
                                                        plot=True)
```

```
=============
DIRECT
=============
Regressors order:
        [1 2 3 4 5]
```




```
Optimal:
        s* = 3
        regressors = [1, 2, 3]
        theta* = [ 2.93417679 -1.95807657  0.96119887  0.          0.        ]

=============
REVERSE
=============
Regressors order:
        [5 4 3 2 1]
```



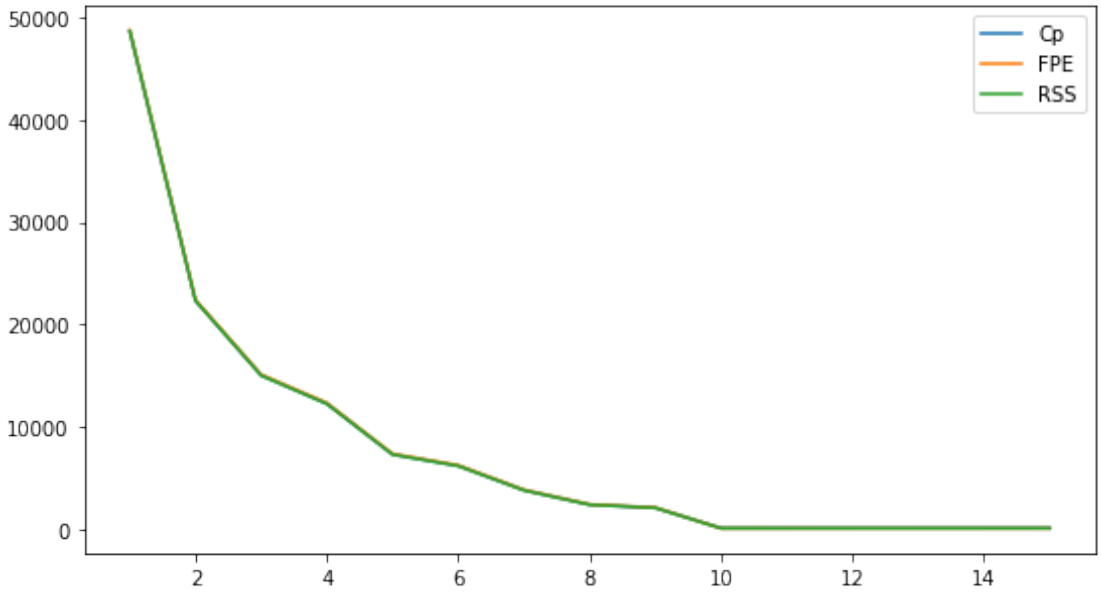

```
Optimal:
        s* = 5
        regressors = [1, 2, 3, 4, 5]
        theta* = [ 2.92528656 -1.96404659  0.94802332 -0.04141331  0.07425203]
```

Як видно, при прямому порядку критерій $C_p$ має мінімум в точці $s = 3$. А при зворотньому - в точці $s = 5$. Алгоритм МНКО діє послідовно в порядку розташування регресорів, а в другому випадку найбільш впливові регресори були в як раз кінці. Тому перші, ті що не впливові, залишаються за критерієм, хоча, насправді, їх треба вилучити.

### 1.2.2 Тест 2

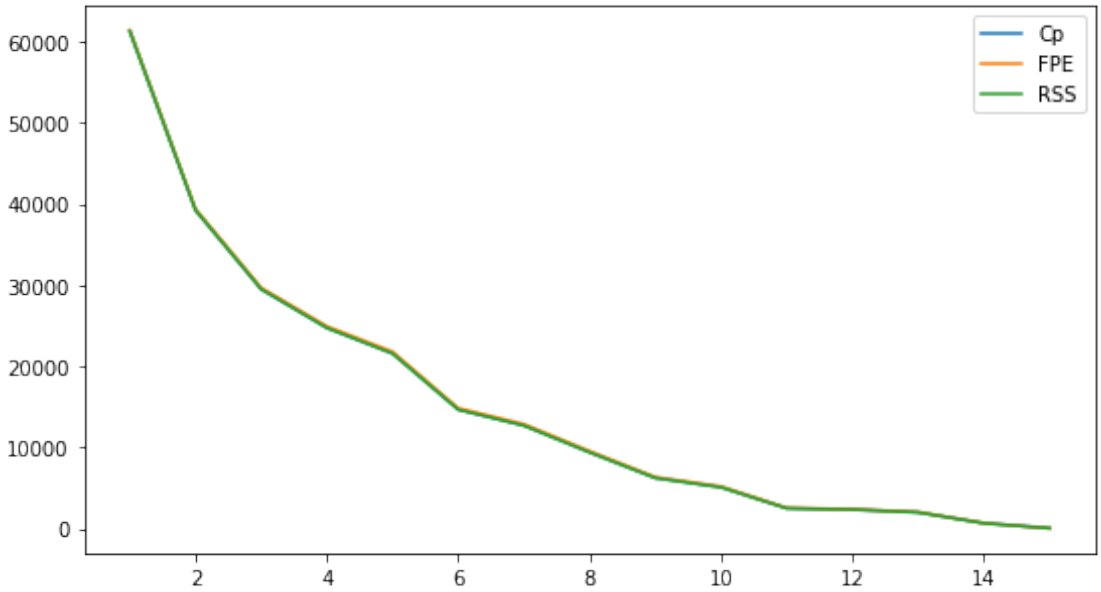
```
In [264]: df1 = config2.run_single_LSMB_model_selection(p=None,
                                                        criteria=['Cp', 'FPE', 'RSS'],
                                                        plot=True)
          print()
          df2 = config2.run_single_LSMB_model_selection(p='reverse',
                                                        criteria=['Cp', 'FPE', 'RSS'],
                                                        plot=True)

=============
DIRECT
=============
Regressors order:
        [ 1  2  3  4  5  6  7  8  9 10 11 12 13 14 15]
```




```
Optimal:
        s* = 10
        regressors = [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10]
        theta* = [5.34957983 7.68519352 3.23045789 1.43320723 8.99113426 4.04264347
 8.02605224 6.64152218 2.25299834 9.43014176 0.         0.
 0.         0.         0.        ]

=============
REVERSE
=============
Regressors order:
        [15 14 13 12 11 10  9  8  7  6  5  4  3  2  1]
```




```
Optimal:
        s* = 15
        regressors = [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15]
        theta* = [ 5.35884827  7.69388952  3.22576623  1.43850351  8.99698342  4.05267537
  8.03636612  6.64606609  2.26220489  9.4353677   0.0189138  -0.07486503
 -0.03273382  0.05130706 -0.02752136]
```

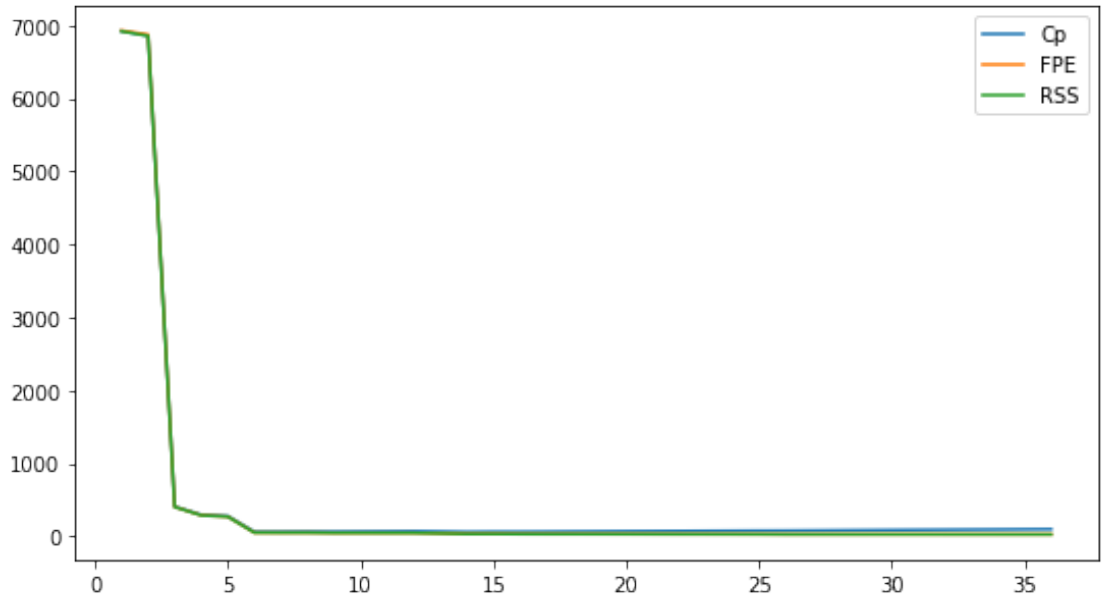
Ситуація дуже схожа на Тест 1: при прямому порядку критерій $C_p$ має мінімум в точці $s = 10$. А при зворотньому - в точці $s = 15$. Тут (в другому випадку) також найбільш впливові регресори в кінці, а невпливові на початку, і алгоритм пропонує враховувати всі регресори, що є не дуже добре.

### 1.2.3 Тест 3

```
In [256]: df1 = config3.run_single_LSMB_model_selection(p=None,
                                                        criteria=['Cp', 'FPE', 'RSS'],
                                                        plot=True)
          print()
          df2 = config3.run_single_LSMB_model_selection(p='reverse',
                                                        criteria=['Cp', 'FPE', 'RSS'],
                                                        plot=True)
```

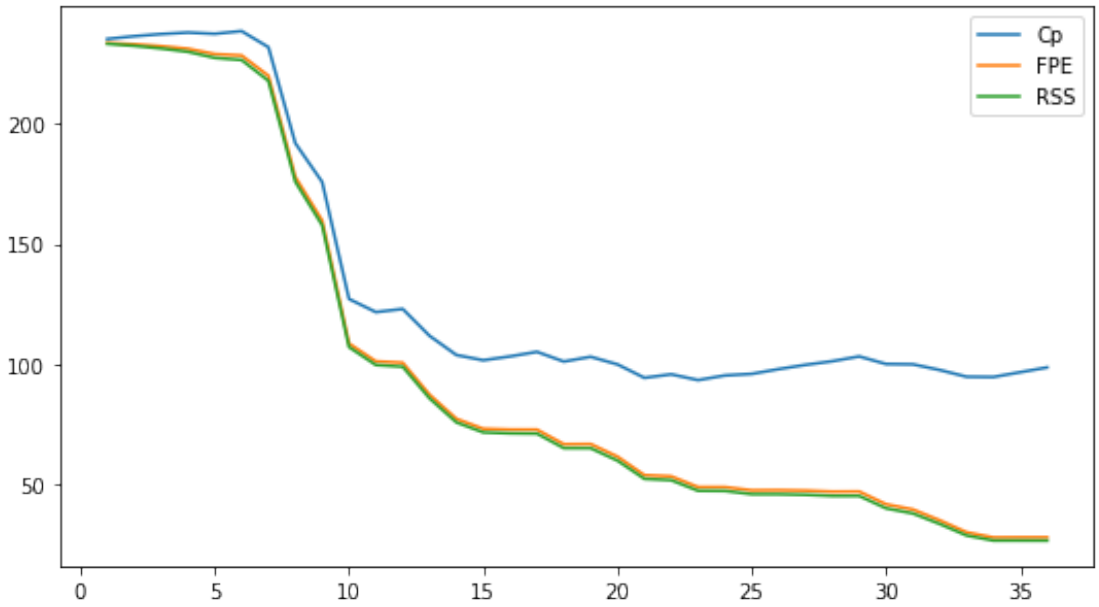
```
=============
DIRECT
=============
Regressors order:
        [ 1  2  3  4  5  6  7  8  9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23 24
```

```
 25  26  27  28  29  30  31  32  33  34  35  36]
```




```
Optimal:
        s* = 14
        regressors = [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14]
        theta* = [-1.28216774e-02  1.35851253e-05  1.01151515e-01  1.25308956e-01
  4.12106912e-02  3.12536597e-03  3.92878638e-04 -4.94563644e-06
  1.29231644e-02 -2.45073557e-03 -3.51982786e-03  1.69078657e-02
  4.24867319e-01  3.14435771e-02  0.00000000e+00  0.00000000e+00
  0.00000000e+00  0.00000000e+00  0.00000000e+00  0.00000000e+00
  0.00000000e+00  0.00000000e+00  0.00000000e+00  0.00000000e+00
  0.00000000e+00  0.00000000e+00  0.00000000e+00  0.00000000e+00
  0.00000000e+00  0.00000000e+00  0.00000000e+00  0.00000000e+00]

=============
REVERSE
=============
Regressors order:
        [36 35 34 33 32 31 30 29 28 27 26 25 24 23 22 21 20 19 18 17 16 15 14 13
 12 11 10  9  8  7  6  5  4  3  2  1]
```




```
Optimal:
        s* = 23
        regressors = [14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32
        theta* = [ 0.00000000e+00  0.00000000e+00  0.00000000e+00  0.00000000e+00
  0.00000000e+00  0.00000000e+00  0.00000000e+00  0.00000000e+00
  0.00000000e+00  0.00000000e+00  0.00000000e+00  0.00000000e+00
  0.00000000e+00 -2.61098624e-02 -2.95063243e-02  6.48993849e-01
  9.19192746e-02  6.26520803e-02  1.20066421e-01  6.97063260e-02
 -4.17975867e-02 -7.73319356e-01  1.55498563e-02  3.57490733e-02
 -5.79498604e-07  9.78581656e-02  9.61967394e-05  9.14427971e-03
  1.01267236e-02 -8.23456848e-03  7.53719402e-03  7.69962763e-03
 -1.80806774e-02 -4.87035069e-03  1.07276179e-03  3.69006574e-03]
```

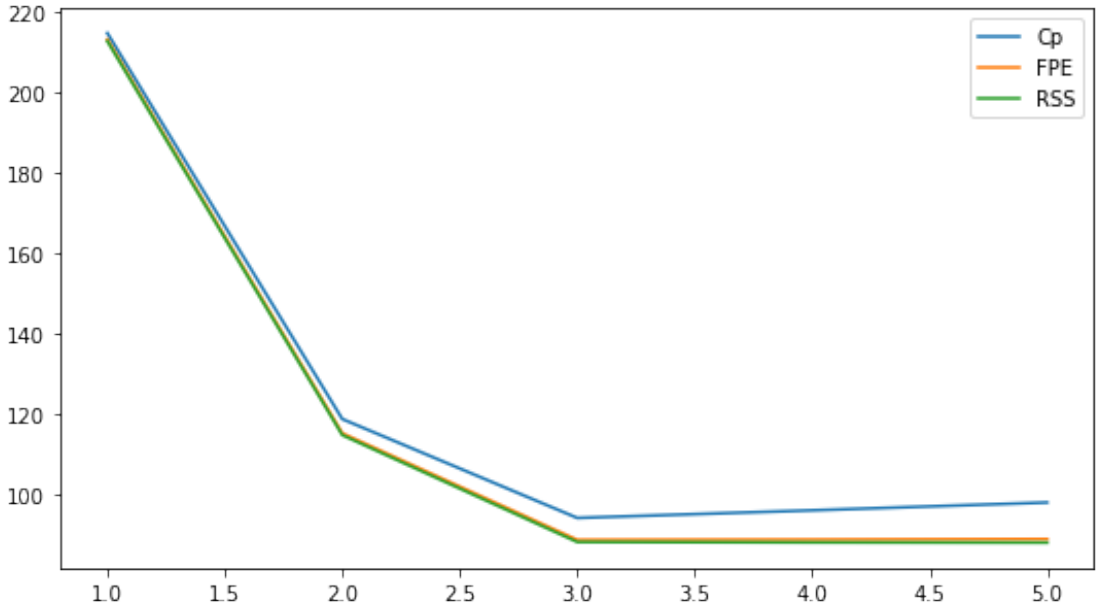
При прямому порядку критерій $C_p$ має мінімум в точці $s = 14$. А при зворотньому - в точці $s = 23$. Виходить, результати алгоритмів перетинаються тільки в одному регресорі - №14. Це повинно бути спричиненим тим, що впливові регресори знаходиться як на початку, так і в середині, так і в кінці; а неінформативні розташовані серед них довільно.

## 1.3 Пошук моделі. Метод кореляційного включення

### 1.3.1 Тест 1

```
In [257]: print('True parameters: {}'.format(config1.theta))
          df1 = config1.run_single_LSMB_model_selection(p='correlation',
                                                        criteria=['Cp', 'FPE', 'RSS'],
                                                        plot=True)
```

```
True parameters: [ 3 -2  1  0  0]
====================
CORRELATION INCLUDING
====================
Correlations with target:
        [0.06608656 0.04732197 0.0214448  0.00308982 0.00320026]
Regressors order:
        [1 2 3 5 4]
```



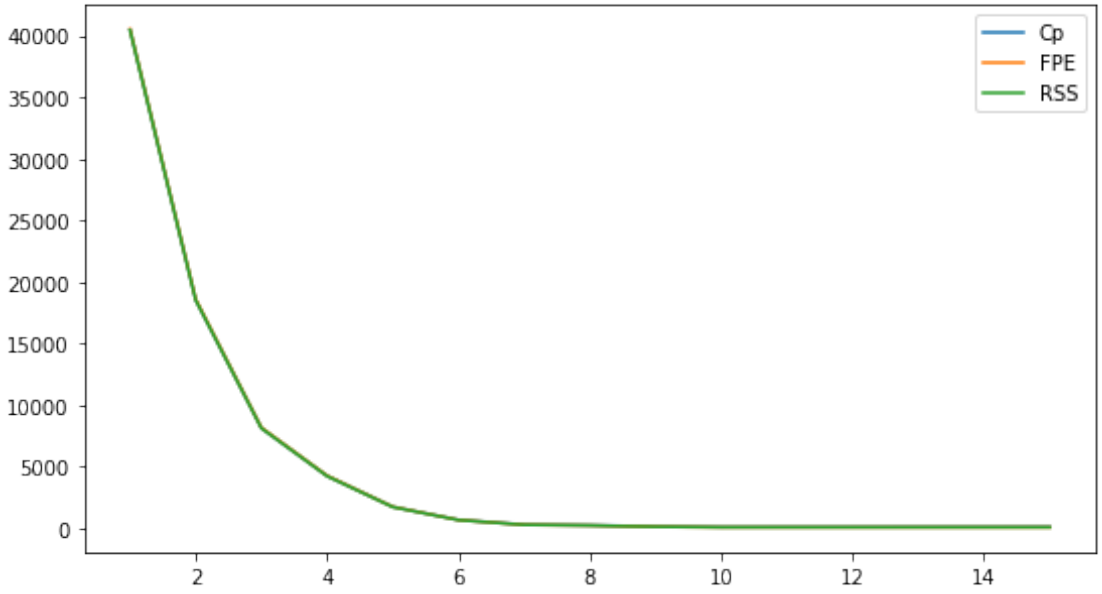

```
Optimal:
        s* = 3
        regressors = [1, 2, 3]
        theta* = [ 2.93417679 -1.95807657  0.96119887  0.          0.        ]
```

Як видно, кореляції з вихідною величиною останніх двох регресорів на порядок менші за перших трьох, тому вони знаходяться в кінці, і критерій має мінімум в точці $s = 3$, що означає - не враховувати ці два останні регресори, а це є якраз оптимально.

### 1.3.2 Тест 2

```
In [277]: print('True parameters: {}'.format(config2.theta))
          df1 = config2.run_single_LSMB_model_selection(p='correlation',
                                                        criteria=['Cp', 'FPE', 'RSS'],
                                                        plot=True)
```

```
True parameters: [1.08631304 7.56699925 9.87829854 1.23698103 1.95130363 7.51601044
 3.30060728 9.37353548 8.89118059 5.43780306 0.         0.
 0.         0.         0.        ]
====================
CORRELATION INCLUDING
====================
Correlations with target:
        [3.83305152e-02 1.55625374e-01 2.09276844e-01 1.39829913e-02
 2.83244475e-02 1.57539656e-01 6.13691829e-02 1.90083208e-01
 2.06724138e-01 1.23777841e-01 1.24969261e-02 6.35983396e-04
 1.01440860e-04 3.86404508e-03 1.67161737e-03]
Regressors order:
        [ 3  9  8  6  2 10  7  1  5  4 11 14 15 12 13]
```



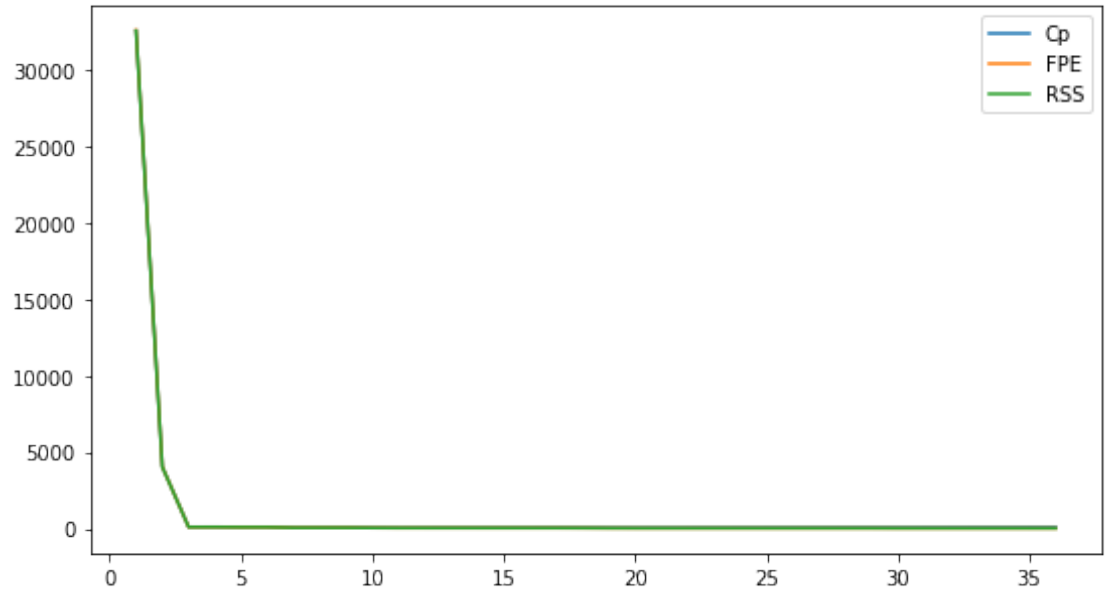

```
Optimal:
        s* = 10
        regressors = [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10]
        theta* = [1.05876253 7.50327434 9.85888761 1.3377948  1.96155001 7.46867561
 3.35366087 9.27692936 9.01995245 5.40978014 0.         0.
 0.         0.         0.        ]
```

Кореляції всіх неінформативних регресорів дуже малі - порядка -3, -4, що спричинене шумами. В результаті, розмістивши їх в кінці, критерій має мінімум в точці $s = 10$, що якраз відповідає врахуванню тільки впливових регресорів.

### 1.3.3 Тест 3

```
In [279]: print('True parameters: {}'.format(config3.theta))
          df1 = config3.run_single_LSMB_model_selection(p='correlation',
                                                        criteria=['Cp', 'FPE', 'RSS'],
                                                        plot=True)
```

```
True parameters: unknown
=====================
CORRELATION INCLUDING
=====================
Correlations with target:
        [5.57596614e-03 4.96374698e+00 8.26491953e-02 4.51442989e-01
 1.63882816e-02 7.07669256e+00 4.66445015e+00 1.63966386e+00
 2.48714016e-01 2.23758820e-02 1.54214723e-01 1.70630669e-01
 7.72140589e-02 2.37815311e-01 1.62738556e-02 9.72242664e-02
 4.89641813e-02 3.17601408e-04 1.30886967e-01 6.30718701e-02
 6.81193001e-02 5.14465628e-03 3.46980247e-01 1.26038896e-01
 4.16687853e+01 2.03176351e-01 5.55885342e+01 3.55780446e-01
 3.95449211e-01 1.43006510e-01 1.56705081e-02 5.93336132e-02
 1.22572971e-02 3.28385950e-02 6.19136590e-02 1.97682209e-02]
Regressors order:
        [27 25  6  2  7  8  4 29 28 23  9 14 26 12 11 30 19 24 16  3 13 21 20 35
 32 17 34 10 36  5 15 31 33  1 22 18]
```




```
Optimal:
        s* = 11
```

```
      regressors = [2, 4, 6, 7, 8, 9, 23, 25, 27, 28, 29]
      theta* = [ 0.00000000e+00  6.16508069e-05  0.00000000e+00  1.17978290e-01
  0.00000000e+00  1.62350673e-03  3.69267563e-03 -3.26930295e-06
  2.14658894e-02  0.00000000e+00  0.00000000e+00  0.00000000e+00
  0.00000000e+00  0.00000000e+00  0.00000000e+00  0.00000000e+00
  0.00000000e+00  0.00000000e+00  0.00000000e+00  0.00000000e+00
  0.00000000e+00  0.00000000e+00  6.47731113e-02  0.00000000e+00
  5.15876051e-05  0.00000000e+00  2.72399131e-04  5.69459418e-03
  5.16573136e-03  0.00000000e+00  0.00000000e+00  0.00000000e+00
  0.00000000e+00  0.00000000e+00  0.00000000e+00  0.00000000e+00]
```

Інформації щодо істинного впливу регресорів на вихідну змінну в цій задачі ми не маємо, тому можемо робити висновки тільки на основі розроблених методів пошуку оптимальної складності. Даний алгоритм показує, що з вихідною величиною дуже корелюють два регресори, для яких значення кореляції мають порядок 1: це 27 і 25; чотири регресори мають кореляції порядка 0: це 6, 2, 7 і 8. Далі 12 регресорів, для яких кореляції порядка -1, і для інших ще менше. Розташувавши регресори відповідно до кореляцій і виконавши МНКО, маємо мінімум критерія в точці $s = 11$, і, дійсно, алгоритм пропонує регресори як з початку (відносно розташування в оригінальній матриці X), так і з кінця, тобто гіпотези, описані вище, підтверджуються.

## 1.4 Пошук моделі. Метод випадкового включення

### 1.4.1 Тест 1

```
In [282]: Ks = [10, 20, 50, 100]
          for K in Ks:
              config1.run_single_random_LSMB_model_selection(K=K, criteria=['Cp'],
                                                             main_criterion='Cp')
```

```
================================
RANDOM INCLUDING WITH K = 10
================================

  s*      regressors*         Cp
0  4     [1, 2, 3, 5]  95.907950
1  4     [1, 2, 3, 4]  96.001499
2  5  [1, 2, 3, 4, 5]  97.865019
3  5  [1, 2, 3, 4, 5]  97.865019
4  5  [1, 2, 3, 4, 5]  97.865019
...
  s*      regressors*         Cp
5  5  [1, 2, 3, 4, 5]  97.865019
6  4     [1, 2, 3, 5]  95.907950
7  4     [1, 2, 3, 5]  95.907950
8  5  [1, 2, 3, 4, 5]  97.865019
9  5  [1, 2, 3, 4, 5]  97.865019

Optimal:
```

```
        s* = 4
        regressors = [1, 2, 3, 5]
================================
RANDOM INCLUDING WITH K = 20
================================

  s*      regressors*         Cp
0  4     [1, 2, 3, 5]  95.907950
1  4     [1, 2, 3, 4]  96.001499
2  4     [1, 2, 3, 4]  96.001499
3  5  [1, 2, 3, 4, 5]  97.865019
4  5  [1, 2, 3, 4, 5]  97.865019
...
   s*      regressors*         Cp
15  5  [1, 2, 3, 4, 5]  97.865019
16  5  [1, 2, 3, 4, 5]  97.865019
17  4     [1, 2, 3, 5]  95.907950
18  4     [1, 2, 3, 5]  95.907950
19  4     [1, 2, 3, 4]  96.001499

Optimal:
        s* = 3
        regressors = [1, 2, 3]
================================
RANDOM INCLUDING WITH K = 50
================================

  s*      regressors*         Cp
0  4     [1, 2, 3, 5]  95.907950
1  4     [1, 2, 3, 5]  95.907950
2  3        [1, 2, 3]  94.017191
3  5  [1, 2, 3, 4, 5]  97.865019
4  5  [1, 2, 3, 4, 5]  97.865019
...
   s*      regressors*         Cp
45  4     [1, 2, 3, 4]  96.001499
46  4     [1, 2, 3, 5]  95.907950
47  5  [1, 2, 3, 4, 5]  97.865019
48  3        [1, 2, 3]  94.017191
49  5  [1, 2, 3, 4, 5]  97.865019

Optimal:
        s* = 3
        regressors = [1, 2, 3]
================================
RANDOM INCLUDING WITH K = 100
================================
```

```
  s*      regressors*         Cp
0  5  [1, 2, 3, 4, 5]  97.865019
1  4     [1, 2, 3, 4]  96.001499
2  4     [1, 2, 3, 5]  95.907950
3  5  [1, 2, 3, 4, 5]  97.865019
4  4     [1, 2, 3, 5]  95.907950
...
   s*      regressors*         Cp
95  5  [1, 2, 3, 4, 5]  97.865019
96  5  [1, 2, 3, 4, 5]  97.865019
97  5  [1, 2, 3, 4, 5]  97.865019
98  5  [1, 2, 3, 4, 5]  97.865019
99  5  [1, 2, 3, 4, 5]  97.865019

Optimal:
        s* = 3
        regressors = [1, 2, 3]
```

При $K >= 20$ маємо стабільно правильний вибір регресорів. А при меншій кількості випадкових формувань послідовностей метод все ще може враховувати неінформативні регресори. Тож робимо висновок, що $K \approx 20$ буде достатньо для побудови правильної моделі.

### 1.4.2 Тест 2

```
In [289]: Ks = [50, 100, 200, 500]
          for K in Ks:
              config2.run_single_random_LSMB_model_selection(K=K, criteria=['Cp'],
                                                             main_criterion='Cp')

================================
RANDOM INCLUDING WITH K = 50
================================

   s*                                        regressors*          Cp
0  13        [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 13, 15]  109.052547
1  14    [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 14, 15]  111.077234
2  14    [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 14, 15]  111.077234
3  15  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...  113.012982
4  15  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...  113.012982
...
    s*                                          regressors*          Cp
45  15  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...  113.012982
46  15  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...  113.012982
47  15  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...  113.012982
48  15  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...  113.012982
49  13        [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 13, 14, 15]  109.051216

Optimal:
```

```
        s* = 12
        regressors = [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12]
================================
RANDOM INCLUDING WITH K = 100
================================

   s*                                          regressors*          Cp
0  15  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...  113.012982
1  15  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...  113.012982
2  15  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...  113.012982
3  15  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...  113.012982
4  14    [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 13, 14, 15]  111.050814
...
    s*                                           regressors*          Cp
95  14    [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 12, 13, 14, 15]  111.013007
96  14    [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 15]  111.013640
97  14    [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14]  111.073273
98  15  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...  113.012982
99  14    [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 15]  111.013640

Optimal:
        s* = 12
        regressors = [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 13]
================================
RANDOM INCLUDING WITH K = 200
================================

   s*                                          regressors*          Cp
0  15  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...  113.012982
1  15  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...  113.012982
2  14    [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14]  111.073273
3  15  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...  113.012982
4  15  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...  113.012982
...
     s*                                           regressors*          Cp
195  15  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...  113.012982
196  15  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...  113.012982
197  15  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...  113.012982
198  15  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...  113.012982
199  15  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...  113.012982

Optimal:
        s* = 10
        regressors = [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10]
================================
RANDOM INCLUDING WITH K = 500
================================
```

```
   s*                                          regressors*          Cp
0  15  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...  113.012982
1  14    [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 13, 14, 15]  111.050814
2  15  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...  113.012982
3  15  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...  113.012982
4  15  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...  113.012982
...
     s*                                          regressors*          Cp
495  15  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...  113.012982
496  14    [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 12, 13, 14, 15]  111.013007
497  15  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...  113.012982
498  14    [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 14, 15]  111.077234
499  15  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...  113.012982

Optimal:
        s* = 11
        regressors = [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 15]
```

В даній задачі за результатами дослідження видно, що алгоритм працює дуже добре при досить великих $K >= 200$. При меншій кількості випадкових формувань результат роботи менш стабільний (хоча і при великих K не завжди стабільно правильний вибір), і менш точний, хоча і набагато швидший. Тож $K \approx 200$ буде достатньо.

### 1.4.3 Тест 3

```
In [296]: Ks = [10, 20, 50, 100, 300, 500, 1000]
          for K in Ks:
              config3.run_single_random_LSMB_model_selection(K=K, criteria=['Cp'],
                                                             main_criterion='Cp')
```

```
================================
RANDOM INCLUDING WITH K = 10
================================

   s*                                          regressors*         Cp
0  13  [4, 7, 8, 13, 17, 18, 21, 24, 27, 28, 31, 33, 34]  68.367063
1  19  [1, 5, 7, 8, 9, 10, 11, 13, 14, 16, 18, 19, 22...  79.815037
2  16  [4, 5, 8, 10, 11, 13, 15, 19, 21, 23, 24, 26, ...  75.638691
3  15  [2, 5, 7, 9, 14, 15, 16, 17, 18, 23, 25, 30, 3...  89.511266
4  15  [2, 6, 10, 15, 17, 19, 20, 21, 23, 24, 26, 28,...  92.807331
...
   s*                                          regressors*         Cp
5  17  [1, 2, 3, 4, 8, 9, 10, 13, 17, 19, 22, 25, 26,...  74.259286
6  10                [1, 2, 4, 5, 6, 16, 18, 26, 31, 34]  56.133457
7  19  [2, 3, 6, 7, 9, 11, 13, 15, 16, 18, 21, 22, 23...  76.762696
8  10            [2, 10, 14, 15, 16, 22, 26, 27, 28, 36]  77.153497
9  19  [1, 3, 4, 6, 8, 9, 13, 15, 16, 17, 18, 22, 25,...  71.940356
```

```
Optimal:
        s* = 10
        regressors = [1, 2, 4, 5, 6, 16, 18, 26, 31, 34]
================================
RANDOM INCLUDING WITH K = 20
================================

   s*                                          regressors*         Cp
0  11           [3, 6, 8, 9, 15, 16, 21, 22, 27, 29, 30]  69.034028
1  16  [1, 2, 3, 4, 6, 7, 11, 13, 14, 21, 22, 25, 28,...  68.706982
2  27  [2, 3, 4, 5, 7, 8, 9, 11, 12, 14, 15, 16, 17, ...  84.964975
3  17  [1, 3, 5, 6, 7, 11, 12, 14, 17, 18, 23, 25, 26...  87.369001
4  24  [2, 3, 5, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16,...  89.806780
...
    s*                                          regressors*         Cp
15  21  [1, 3, 4, 7, 10, 11, 13, 14, 15, 17, 18, 19, 2...  76.975123
16   6                              [2, 4, 9, 16, 22, 36]  61.096358
17  16  [2, 3, 4, 5, 6, 8, 11, 12, 14, 16, 20, 24, 29,...  63.854962
18  19  [2, 3, 5, 6, 7, 8, 10, 11, 15, 16, 17, 18, 19,...  77.577881
19  13  [1, 6, 9, 15, 16, 20, 21, 22, 23, 26, 30, 33, 35]  71.786257

Optimal:
        s* = 6
        regressors = [2, 4, 9, 16, 22, 36]
================================
RANDOM INCLUDING WITH K = 50
================================

   s*                                          regressors*         Cp
0  18  [2, 6, 7, 8, 9, 12, 13, 14, 15, 17, 18, 21, 23...  84.004745
1  21  [3, 4, 8, 9, 14, 16, 17, 18, 21, 22, 23, 24, 2...  77.665279
2  20  [3, 4, 5, 7, 8, 11, 15, 16, 17, 18, 19, 21, 25...  74.815123
3  23  [3, 7, 9, 12, 13, 14, 15, 17, 18, 19, 21, 23, ...  90.804127
4  13  [3, 4, 6, 12, 13, 14, 18, 19, 22, 23, 24, 30, 32]  63.870565
...
    s*                                          regressors*         Cp
45  16  [3, 4, 7, 9, 10, 13, 16, 17, 18, 19, 21, 23, 2...  65.603009
46  11           [2, 4, 5, 7, 13, 17, 18, 23, 24, 25, 34]  64.474391
47  15  [3, 4, 7, 8, 13, 14, 15, 16, 20, 22, 26, 28, 3...  65.337222
48  29  [1, 3, 4, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, ...  89.063137
49  10              [3, 5, 6, 19, 23, 24, 28, 29, 32, 35]  82.323554

Optimal:
        s* = 11
        regressors = [1, 2, 4, 5, 6, 7, 13, 14, 16, 17, 18]
================================
RANDOM INCLUDING WITH K = 100
================================
```

```
   s*                                          regressors*         Cp
0  14  [2, 4, 7, 8, 11, 12, 13, 17, 19, 26, 28, 32, 3...  71.596149
1  23  [1, 2, 3, 4, 5, 7, 10, 11, 14, 15, 16, 17, 20,...  78.035155
2   8                      [4, 6, 7, 13, 19, 23, 24, 26]  57.358204
3  18  [2, 4, 5, 7, 8, 11, 12, 15, 16, 19, 22, 23, 24...  74.717910
4  15  [3, 4, 9, 11, 12, 15, 17, 19, 20, 28, 30, 31, ...  74.383302
...
    s*                                           regressors*         Cp
95  15  [2, 4, 5, 7, 13, 14, 17, 18, 19, 25, 26, 27, 2...  68.784865
96   6                             [2, 4, 17, 18, 26, 36]  71.431696
97  25  [1, 2, 3, 4, 6, 8, 9, 10, 12, 13, 14, 15, 16, ...  83.179062
98  21  [1, 4, 5, 6, 8, 9, 10, 13, 14, 16, 17, 18, 21,...  73.345661
99  11          [4, 7, 9, 10, 13, 14, 19, 22, 26, 32, 36]  58.853253

Optimal:
        s* = 10
        regressors = [3, 4, 6, 7, 10, 16, 22, 24, 26, 30]
================================
RANDOM INCLUDING WITH K = 300
================================

   s*                                          regressors*         Cp
0  10               [1, 3, 4, 7, 12, 16, 17, 26, 30, 36]  55.471972
1  14  [1, 4, 12, 13, 15, 17, 18, 20, 26, 27, 28, 30,...  72.489937
2  13     [1, 3, 4, 5, 6, 8, 22, 23, 24, 25, 27, 34, 35]  65.088863
3   9                   [3, 6, 7, 9, 11, 15, 16, 21, 26]  65.193806
4  15  [3, 4, 5, 9, 12, 13, 15, 17, 18, 19, 21, 27, 3...  70.587435
...
     s*                                           regressors*         Cp
295  11            [1, 2, 3, 4, 8, 12, 13, 14, 27, 29, 36]  66.259638
296  16  [3, 4, 5, 6, 7, 10, 13, 14, 20, 24, 26, 27, 29...  63.975051
297   4                                     [6, 16, 17, 26]  63.032251
298  23  [3, 4, 5, 7, 9, 10, 13, 14, 15, 16, 18, 20, 21...  76.886979
299  19  [3, 6, 7, 8, 9, 11, 12, 14, 15, 16, 17, 19, 20...  78.850904

Optimal:
        s* = 6
        regressors = [3, 4, 7, 16, 19, 27]
================================
RANDOM INCLUDING WITH K = 500
================================

   s*                                          regressors*         Cp
0  10              [3, 5, 6, 16, 19, 21, 23, 24, 28, 33]  72.510077
1  16  [2, 3, 4, 5, 6, 11, 13, 16, 20, 21, 24, 25, 26...  63.010999
2  22  [4, 6, 7, 8, 9, 11, 14, 16, 17, 20, 21, 22, 23...  76.964328
3  18  [1, 2, 4, 7, 10, 12, 15, 17, 18, 22, 23, 24, 2...  76.563448
```

```
4  22  [1, 3, 4, 6, 8, 11, 12, 13, 15, 16, 17, 18, 19...  77.953536
...
     s*                                          regressors*         Cp
495  29  [2, 5, 6, 8, 9, 10, 11, 12, 14, 15, 16, 17, 18...  92.359643
496  20  [1, 5, 6, 7, 9, 10, 11, 12, 13, 16, 18, 21, 22...  79.857308
497  14  [1, 7, 8, 9, 10, 12, 15, 16, 17, 23, 26, 31, 3...  77.205777
498  19  [2, 3, 5, 6, 10, 11, 12, 13, 15, 16, 17, 19, 2...  79.754996
499  15  [1, 3, 4, 6, 11, 13, 14, 15, 17, 18, 21, 22, 2...  66.134954

Optimal:
        s* = 9
        regressors = [3, 4, 6, 7, 9, 12, 13, 14, 26]
================================
RANDOM INCLUDING WITH K = 1000
================================

   s*                                          regressors*         Cp
0  10                [1, 4, 11, 17, 21, 22, 24, 27, 35, 36]  71.556395
1  24  [1, 3, 4, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 14, 15, 16, 17, ...  78.606533
2  27  [2, 4, 5, 6, 8, 9, 10, 11, 15, 16, 17, 18, 19,...  85.401718
3  14  [4, 5, 7, 8, 10, 12, 16, 17, 18, 25, 27, 30, 3...  67.357648
4  18  [1, 7, 8, 11, 13, 14, 16, 20, 21, 22, 23, 24, ...  84.101391
...
     s*                                          regressors*         Cp
995  21  [1, 2, 4, 5, 6, 8, 9, 10, 13, 16, 18, 19, 23, ...  73.994861
996  21  [2, 3, 4, 6, 8, 11, 13, 14, 15, 17, 18, 19, 20...  77.655959
997  27  [2, 3, 4, 5, 7, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 17,...  86.254461
998  15  [4, 5, 8, 12, 13, 14, 19, 21, 22, 27, 29, 30, ...  72.028169
999  23  [1, 4, 5, 6, 7, 8, 10, 11, 12, 13, 14, 17, 18,...  77.208763

Optimal:
        s* = 6
        regressors = [4, 5, 6, 16, 17, 29]


In [297]: Ks = [2000]
          for K in Ks:
              config3.run_single_random_LSMB_model_selection(K=K, criteria=['Cp'],
                                                             main_criterion='Cp')

================================
RANDOM INCLUDING WITH K = 2000
================================

   s*                                          regressors*         Cp
0  20  [1, 4, 6, 8, 12, 13, 14, 15, 17, 18, 19, 27, 2...  77.097628
1  27  [1, 2, 3, 4, 5, 8, 10, 13, 15, 16, 17, 18, 19,...  88.701951
2  25  [1, 2, 4, 5, 7, 8, 9, 10, 12, 13, 15, 17, 18, ...  84.275121
```

```
3   14  [2, 4, 5, 7, 8, 10, 16, 17, 18, 23, 24, 27, 31...  67.502929
4   13  [1, 2, 6, 17, 19, 22, 23, 24, 25, 27, 28, 30, 34]  86.912595
...
      s*                                          regressors*         Cp
1995  17  [4, 5, 6, 10, 14, 17, 18, 19, 21, 22, 26, 28, ...  80.121412
1996  25  [1, 2, 3, 4, 7, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 17, 19...  83.557161
1997  23  [3, 7, 8, 9, 10, 11, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 2...  86.346675
1998  24  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 10, 11, 12, 13, 14, 15, ...  77.661793
1999  27  [2, 3, 4, 5, 6, 8, 9, 11, 12, 14, 17, 19, 21, ...  87.589707

Optimal:
        s* = 7
        regressors = [4, 5, 6, 16, 17, 27, 31]
```

Для цієї задачі будемо аналізувати метод, порівнюючи його результати з результатами попереднього алгоритму. Видно, що алгоритм нестабільний, повертає різні комбінації регресорів. Оскільки в цій задачі маємо дуже багато регресорів (36), то припускаємо, що для побудови хорошої моделі потрібно виконати дуже багато випадкових генерувань послідовностей, наприклад $K \approx 1000$. Враховуючи, що попередній метод повертає такий набір: [2, 4, 6, 7, 8, 9, 23, 25, 27, 28, 29], бачимо, що ці результати перетинаються приблизно наполовину. За цим методом завжди або часто вважаються впливовими регресори 4, 6, 7, 16, 17 - перші три мають велику кореляцію з вихідною величиною, а два останні - не дуже велику, проте їх точно потрібно включати в модель. Нестабільність роботи алгоритма також може бути спричинена маленьким розміром вибірки (відносно кількості регресорів) - приблизно 1000, чого скоріш за все недостатньо.

## 1.5 Пошук моделі. Метод перебірного включення

### 1.5.1 Тест 1

```
In [300]: total_df, best_df = config1.run_single_picking_LSMB_model_selection(\
                                                              criteria=['Cp'],
                                                              main_criterion='Cp')

================================
PICKING INCLUDING
================================
Optimal:
        s* = 3
        regressors = [1, 2, 3]
```

Таблиця, яка добре демонструє роботу алгоритма (порядок зберігається), наведена нижче:

```
In [301]: total_df

Out[301]:     s       regressors          Cp
          0   1              [1]  214.848610
```

```
1   1              [2]  569.137599
2   1              [3]  389.569791
3   1              [4]  467.699667
4   1              [5]  450.006820
5   2           [1, 2]  118.663149
6   1              [1]  214.848610
7   2           [1, 3]  216.599313
8   2           [1, 4]  203.582136
9   2           [1, 5]  210.770049
10  3        [1, 2, 3]   94.017191
11  3        [1, 2, 4]  119.255285
12  3        [1, 2, 5]  116.878326
13  3        [1, 2, 3]   94.017191
14  4     [1, 2, 3, 4]   96.001499
15  2           [1, 2]  118.663149
16  1              [1]  214.848610
17  4     [1, 2, 3, 5]   95.907950
18  3        [1, 2, 3]   94.017191
19  4     [1, 2, 3, 4]   96.001499
20  5  [1, 2, 3, 4, 5]   97.865019
21  2           [1, 2]  118.663149
22  1              [1]  214.848610
```

Таблиця, яка містить глобально кращий результат на кожній ітерації підвищення складності

```
In [302]: best_df
```

```
Out[302]:   s* regressors*          Cp
          0  1         [1]  214.848610
          1  2      [1, 2]  118.663149
          2  3   [1, 2, 3]   94.017191
          3  3   [1, 2, 3]   94.017191
          4  3   [1, 2, 3]   94.017191
```

Отже, для даної задачі алгоритм спрацював добре, він повернув оптимальну модель.

### 1.5.2 Тест 2

```
In [361]: total_df, best_df = config2.run_single_picking_LSMB_model_selection(\
                                                        criteria=['Cp'],
                                                        main_criterion='Cp')
```

```
================================
PICKING INCLUDING
================================
Optimal:
        s* = 10
        regressors = [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10]
```

Таблиця, яка добре демонструє роботу алгоритма (порядок зберігається), наведена нижче:

```
In [362]: total_df
```

Out[362]:

| | s | regressors | Cp |
|---|---|---|---|
| 0 | 1 | [1] | 51604.048344 |
| 1 | 1 | [2] | 43532.540113 |
| 2 | 1 | [3] | 40484.057161 |
| 3 | 1 | [4] | 58348.468954 |
| 4 | 1 | [5] | 54122.151523 |
| 5 | 1 | [6] | 48234.238030 |
| 6 | 1 | [7] | 49261.682679 |
| 7 | 1 | [8] | 41262.597861 |
| 8 | 1 | [9] | 42697.150718 |
| 9 | 1 | [10] | 46688.880859 |
| 10 | 1 | [11] | 52877.477822 |
| 11 | 1 | [12] | 58507.010273 |
| 12 | 1 | [13] | 55668.546912 |
| 13 | 1 | [14] | 58233.789009 |
| 14 | 1 | [15] | 58075.530065 |
| 15 | 2 | [1, 3] | 24296.622435 |
| 16 | 1 | [3] | 40484.057161 |
| 17 | 2 | [2, 3] | 18772.260468 |
| 18 | 2 | [3, 4] | 26296.626841 |
| 19 | 2 | [3, 5] | 24204.462362 |
| 20 | 2 | [3, 6] | 20248.008097 |
| 21 | 2 | [3, 7] | 22516.747018 |
| 22 | 2 | [3, 8] | 15974.764777 |
| 23 | 2 | [3, 9] | 18544.806985 |
| 24 | 2 | [3, 10] | 21234.875517 |
| 25 | 2 | [3, 11] | 24842.104058 |
| 26 | 2 | [3, 12] | 26383.747773 |
| 27 | 2 | [3, 13] | 24859.853694 |
| 28 | 2 | [3, 14] | 25188.913591 |
| 29 | 2 | [3, 15] | 26605.828375 |
| .. | .. | ... | ... |
| 109 | 10 | [2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 12] | 127.224293 |
| 110 | 10 | [2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 13] | 127.227733 |
| 111 | 10 | [2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 14] | 127.043925 |
| 112 | 10 | [2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 15] | 126.643167 |
| 113 | 11 | [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11] | 105.158353 |
| 114 | 11 | [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 12] | 105.125329 |
| 115 | 11 | [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 13] | 105.103888 |
| 116 | 11 | [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 14] | 105.157423 |
| 117 | 11 | [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 15] | 105.121343 |
| 118 | 10 | [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10] | 103.158799 |
| 119 | 11 | [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11] | 105.158353 |
| 120 | 12 | [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12] | 107.125305 |

```
121   9                      [2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10]    125.228342
122   8                         [2, 3, 5, 6, 7, 8, 9, 10]    178.976926
123   7                            [2, 3, 6, 7, 8, 9, 10]    297.908708
124   6                               [2, 3, 6, 8, 9, 10]    684.680793
125   5                                   [2, 3, 6, 8, 9]   1740.698164
126   4                                      [3, 6, 8, 9]   4250.629045
127   3                                         [3, 8, 9]   8138.785038
128   2                                            [3, 8]  15974.764777
129   1                                               [3]  40484.057161
130  12            [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 13]    107.103842
131  12            [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 14]    107.157069
132  12            [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 15]    107.120060
133  13         [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13]    109.073276
134  13         [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 14]    109.124952
135  13         [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 15]    109.079281
136  14     [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14]    111.073273
137  14     [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 15]    111.013640
138  15  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...    113.012982

[139 rows x 3 columns]
```

Таблиця, яка містить глобально кращий результат на кожній ітерації підвищення складності

```
In [363]: best_df
```

```
Out[363]:     s*                      regressors*           Cp
          0    1                              [3]  40484.057161
          1    2                           [3, 8]  15974.764777
          2    3                        [3, 8, 9]   8138.785038
          3    4                     [3, 6, 8, 9]   4250.629045
          4    5                  [2, 3, 6, 8, 9]   1740.698164
          5    6               [2, 3, 6, 8, 9, 10]    684.680793
          6    7            [2, 3, 6, 7, 8, 9, 10]    297.908708
          7    8         [2, 3, 5, 6, 7, 8, 9, 10]    178.976926
          8    9      [2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10]    125.228342
          9   10   [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10]    103.158799
          10  10   [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10]    103.158799
          11  10   [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10]    103.158799
          12  10   [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10]    103.158799
          13  10   [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10]    103.158799
          14  10   [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10]    103.158799
```

Для даної задачі також алгоритм спрацював добре і повернув оптимальну модель. Час роботи алгоритма тут звісно більший за перший метод (кореляційного включення), проте менший за другий метод (випадкового включення) і при цьому повертає правильну структуру, тож в цьому плані є кращим.

### 1.5.3 Тест 3

```
In [311]: total_df, best_df = config3.run_single_picking_LSMB_model_selection(\
                                                        criteria=['Cp'],
                                                        main_criterion='Cp')

================================
PICKING INCLUDING
================================
Optimal:
        s* = 7
        regressors = [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]
```

Таблиця, яка добре демонструє роботу алгоритма (порядок зберігається), наведена нижче:

```
In [312]: total_df
```

Out[312]:

| | s | regressors | Cp |
|---|---|---|---|
| 0 | 1 | [1] | 6922.622699 |
| 1 | 1 | [2] | 171607.168945 |
| 2 | 1 | [3] | 595.423285 |
| 3 | 1 | [4] | 8072.403830 |
| 4 | 1 | [5] | 8415.507144 |
| 5 | 1 | [6] | 158.358196 |
| 6 | 1 | [7] | 175.164569 |
| 7 | 1 | [8] | 208501.298773 |
| 8 | 1 | [9] | 69222.239836 |
| 9 | 1 | [10] | 187787.682459 |
| 10 | 1 | [11] | 19886.729830 |
| 11 | 1 | [12] | 5277.995979 |
| 12 | 1 | [13] | 280.697357 |
| 13 | 1 | [14] | 119107.026909 |
| 14 | 1 | [15] | 207716.568406 |
| 15 | 1 | [16] | 208.827496 |
| 16 | 1 | [17] | 124823.714740 |
| 17 | 1 | [18] | 199572.038985 |
| 18 | 1 | [19] | 20872.240938 |
| 19 | 1 | [20] | 131690.187233 |
| 20 | 1 | [21] | 15268.403104 |
| 21 | 1 | [22] | 3751.889765 |
| 22 | 1 | [23] | 10822.918605 |
| 23 | 1 | [24] | 107593.708684 |
| 24 | 1 | [25] | 4139.687219 |
| 25 | 1 | [26] | 28801.198215 |
| 26 | 1 | [27] | 32587.576839 |
| 27 | 1 | [28] | 109136.079786 |
| 28 | 1 | [29] | 95121.691000 |
| 29 | 1 | [30] | 182670.791806 |

```
..   ..                                                  ...           ...
672  31  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     89.009264
673  31  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     89.051761
674  31  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     89.120734
675  31  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     89.106388
676  32  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     90.880558
677  32  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     91.006471
678  32  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     91.048445
679  32  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     91.117755
680  32  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     91.103769
681  33  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     92.767377
682  33  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     92.800002
683  33  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     92.878469
684  33  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     92.855271
685  34  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     94.695102
686  34  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     94.766422
687  34  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     94.739615
688  35  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     96.693792
689  35  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     96.668793
690  25  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     77.229872
691  26  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     79.226699
692  27  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     81.226596
693  28  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     83.149919
694  29  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     85.148968
695  30  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     87.124184
696  31  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     89.120961
697  32  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     90.880558
698  33  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     92.767377
699  34  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     94.695102
700  35  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     96.693792
701  36  [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14...     98.667221

[702 rows x 3 columns]
```

Таблиця, яка містить глобально кращий результат на кожній ітерації підвищення складності

```
In [313]: best_df
```

```
Out[313]:    s*              regressors*          Cp
          0   1                      [6]  158.358196
          1   2                  [6, 16]   78.361004
          2   3               [4, 6, 16]   54.822413
          3   4            [3, 4, 6, 16]   49.481128
          4   5         [3, 4, 5, 6, 16]   47.128611
          5   6      [3, 4, 5, 6, 9, 16]   45.398392
          6   7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
          7   7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
```

```
8   7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
9   7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
10  7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
11  7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
12  7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
13  7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
14  7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
15  7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
16  7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
17  7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
18  7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
19  7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
20  7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
21  7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
22  7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
23  7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
24  7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
25  7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
26  7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
27  7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
28  7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
29  7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
30  7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
31  7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
32  7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
33  7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
34  7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
35  7  [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]   44.912894
```

Для цієї задачі алгоритм працює довго, (хоча знову не довше ніж другий метод випадкового включення) і повертає такий набір регресорів [3, 4, 5, 6, 9, 16, 26]. Багато з них (3, 4, 6, 16, 26) дійсно перетинаються з результатами попередніх методів.

Якщо об'єднати результати трьох методів для цієї задачі, то отримаємо такий набір регресорів і такі ваги для них:

```
In [365]: regressors1 = {2, 4, 6, 7, 8, 9, 23, 25, 27, 28, 29}
          regressors2 = {4, 5, 6, 16, 17, 27, 31}
          regressors3 = {3, 4, 5, 6, 9, 16, 26}
          total = list(a.union(b).union(c))

          theta, _, RSS_next, df = LSMB(config3.X[:, total], config3.y,
                                        verbose=False, create_dataframe=True)

          print('{} regressors: {}'.format(len(total), total))
          print('   with theta: {}'.format(theta.flatten()))

17 regressors: [2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 16, 17, 23, 25, 26, 27, 28, 29, 31]
   with theta: [ 1.58490768e-01  1.25658013e-01  3.24787641e-02  2.18965046e-03
```

```
2.52196152e-03  2.70591730e-06  1.24677093e-02 -7.81374595e-04
9.09810152e-03 -1.72335314e-02  7.60034785e-02  7.21612391e-02
7.66623610e-05  5.78935734e-03  8.60323900e-03  7.36291655e-03
1.28642815e-02]
```

# 2 Висновки

Досліджуючи три методи пошуку моделі оптимальної складності, ми з'ясували - якщо говорити про ефективність алгоритму в контексті правильної структури і швидкодії, то вона залежить від умов і задачі, великий вплив на неї мають розмірності вибірок (кількість екземплярів та кількість регресорів) та наявність шумів. Конкретно для наших трьох задач: Тест 1 є найпростішим з усіх, і всі алгоритми ефективно побудували модель; Тест 2 є більш великою задачею, і для нього найефективнішими виявилися метод кореляційного включення та метод перебірного включення (хоча останній трохи менше через трохи повільнішу роботу), а метод випадкового включення також працює добре, проте потребує великої кількості випадкових генерацій послідовностей; Тест 3 є реальною задачею, для нього невідомі істинні параметри моделі, але ефективність алгоритмів очевидна, оскільки з 36 регресорів ми зупинилися на 17ти найвпливовіших.

# 3 Код програми

## 3.1 Імпорт необхідних бібліотек, налаштування

```
In [237]: import numpy as np
          import pandas as pd
          from scipy.integrate import odeint
          from itertools import permutations
          import matplotlib.pyplot as plt
          %matplotlib inline

          from pylab import rcParams
          rcParams['figure.figsize'] = 9, 5
```

## 3.2 Реалізація МНКО

До реалізації додано обрахування W - розширеної матриці нормальної системи рівнянь для повної моделі на початку роботи МНКО, і подальше її використання. Як наслідок, маємо більш оптимізований алгоритм, оскільки в ньому тепер замість зайвих операцій над частинами однієї й тієї ж матриці відбувається звернення до частин матриці W.

```
In [238]: def LSMB(X, y, W=None, s=None, started=True, sigma_estimation=None,
                   verbose=False, deep_verbose=False, create_dataframe=False):
              assert X.ndim == 2 and X.shape[1] > 0
              m = X.shape[1]
              if started:
                  W = np.hstack((X.T @ X, (X.T @ y).reshape(-1, 1)))
                  started = False
              assert W.ndim == 2 and W.shape[0] == m
              if m > 1:
                  if create_dataframe:
                      w, H_inv, RSS, df = LSMB(X[:,:-1], y, W[:-1,:], s,
                                               started, sigma_estimation,
                                               verbose, deep_verbose, create_dataframe)
                      if s and m > s:
                          return w, H_inv, RSS, df
                  else:
                      w, H_inv, RSS = LSMB(X[:,:-1], y, W[:-1,:], s,
                                           started, sigma_estimation,
                                           verbose, deep_verbose, create_dataframe)
                      if s and m > s:
                          return w, H_inv, RSS
                  # w is of shape = [m-1, 1]; H_inv is of shape = [m-1, m-1]
                  h = W[:m-1,m-1].reshape(-1,1) # shape = [m-1, 1]
                  eta = W[m-1,m-1] # shape = [1, 1]
                  alpha = H_inv @ h # shape = [m-1, 1]
                  beta = eta - h.T @ alpha # shape = [1, 1]
                  beta_inv = 1 / beta # shape = [1, 1]
                  gamma = W[m-1,-1] # shape = [1, 1]
```

```
            nu = beta_inv * (gamma - h.T @ w) # shape = [1, 1]
            w = np.vstack((w - nu * alpha, nu))  # shape = [m, 1]
            H_next_inv = np.vstack((np.hstack((H_inv + beta_inv * alpha @ alpha.T,
                                               (- beta_inv * alpha).reshape(-1, 1))),
                                    np.hstack((-beta_inv * alpha.T, beta_inv))))
            RSS_next = (RSS - nu.flatten() ** 2 * beta.flatten())[0]

        else: # 1
            H_inv = np.array([[0]])
            eta = beta = W[0,0] # X[:,-1].T @ X[:,-1]
            beta_inv = 1 / beta
            alpha = h = np.array([0])
            gamma = W[0, -1] # X[:,-1].T @ y
            nu = np.array([beta_inv * gamma])
            w = np.array([nu])
            H_next_inv = np.array(beta_inv).reshape(1, 1)
            RSS_next = (y.T @ y - W[0, -1:] @ w)[0]
            if create_dataframe:
                if sigma_estimation is None:
                    df = pd.DataFrame(columns=['s', 'RSS', 'Cp', 'FPE', 'theta'])
                else:
                    df = pd.DataFrame(columns=['s', 'RSS', 'Cp_simple',
                                               'Cp', 'FPE', 'theta'])

        if verbose:
            print('================================================')
            print('\tStep {}'.format(m))
            print('================================================')
            if deep_verbose:
                print('h_{}:\t\t{}'.format(m, h.reshape(-1,1)[:,0]))
                print('eta_{}:\t\t{}'.format(m, eta))
                print('alpha_{}:\t{}'.format(m, alpha.reshape(-1,1)[:,0]))
                print('beta_{}:\t\t{}'.format(m, beta))
                print('gamma_{}:\t{}'.format(m, gamma))
                print('nu_{}:\t\t{}'.format(m, nu))
                print('================================================')
            print('> θ_{}: {}'.format(m, w[:, 0]))
            print('> H_{}_inv:\n{}'.format(m, H_next_inv))
            print('> RSS_{}: {}'.format(m, RSS_next))
        if create_dataframe:
            n = y.shape[0]
            FPE = (n + m) / (n - m) * RSS_next
            Cp_simple = RSS_next + 2 * m
            if sigma_estimation is None:
                df = df.append({'s': m, 'RSS': RSS_next,
                                'Cp': Cp_simple, 'FPE': FPE,
                                'theta': w[:, 0]},
                               ignore_index=True)
```

```
            else:
                Cp = RSS_next + 2 * sigma_estimation * m
                df = df.append({'s': m, 'RSS': RSS_next,
                                'Cp_simple': Cp_simple,
                                'Cp': Cp, 'FPE': FPE,
                                'theta': w[:, 0]},
                               ignore_index=True)
            return w, H_next_inv, RSS_next, df
        return w, H_next_inv, RSS_next
```

### 3.3 Реалізація класу моделювання і усіх необхідних методів

```
In [ ]: class ModelConfig():
            m = 5
            n = 10
            n_grid = [10, 30, 100]
            theta = np.array([3, -2, 1, 0, 0])
            a = 0
            b = 2
            sigma = 0.3
            s0 = 3
            s = m

            def __init__(self, m=None, s0=None, theta=None, a=None, b=None,
                         X=None, y=None):
                if m:
                    self.m = m
                    self.s = m
                if s0:
                    self.s0 = s0
                if theta:
                    if isinstance(theta, dict) and theta['random']:
                        self.theta = np.zeros(self.m)
                        self.theta[:self.s0] = np.random.uniform(*theta['random'],
                                                                 size=self.s0)
                    elif theta == 'unknown':
                        assert X is not None, 'Please provide data (X)'
                        assert y is not None, 'Please provide target values as well (y)'
                        self.theta = theta
                    else:
                        self.theta = theta
                if a:
                    self.a = a
                if b:
                    self.b = b
                if X is not None:
                    assert y is not None, 'Please provide target values as well (y)'
                    self.X = np.array(X)
```

```
            self.y = np.array(y)
            (self.n, self.m) = X.shape
            self.s = self.m
        else:
            self.compile()

    def generate_noise_and_output(self):
        self.ksi = np.random.normal(0, self.sigma, size=self.n)
        self.y = self.X @ self.theta + self.ksi

    def compile(self, n=None, sigma=None):
        if n:
            self.n = n
        if sigma:
            self.sigma = sigma
        self.X = np.random.uniform(self.a, self.b, size=(self.n, self.m))
        self.generate_noise_and_output()

    def show(self, n_limit=10):
        print('Regressors: m = {}'.format(self.m))
        print('True parameters: θ = {}'.format(self.theta))
        if not isinstance(self.theta, str):
            equation_str = ''
            for i, theta_i in enumerate(self.theta):
                equation_str += ' + ({}) * x{}'.format(theta_i, i+1)
            equation_str = 'y0 = '+ equation_str[3:]
            print(equation_str)
            print('Noise generation: σ = {}'.format(self.sigma))
        print('Sample length: n = {}'.format(self.n))
        print('X[:10]:\n{}'.format(self.X[:n_limit]))
        print('y[:10]:\n{}'.format(self.y[:n_limit]))

    def show_estimations(self):
        print('RSS(m) = {:5.5}'.format(self.RSS))
        print('σ* = {:5.5}'.format(self.sigma_hat ** .2))

    def estimate_sigma(self):
        _, _, self.RSS = RMNK(self.X, self.y, s=self.s,
                              verbose=False, create_dataframe=False)
        self.sigma_hat = self.RSS ** 2 / (self.X.shape[0] - self.X.shape[1])

    def run_grid_LSMB_model_selection(self):
        self.estimate_sigma()
        for i, n in enumerate(self.n_grid):
            for j, sigma in enumerate(self.sigma_grid):
                self.compile(n, sigma)
                print('------------------------------------------------------------')
                print('\t\t\tSAMPLE #{}'.format(i * len(self.n_grid) + j + 1))
```

```
                print('-------------------------------------------------------------')
                print('\t\tCONFUGURATIONS & DATA')
                self.show()
                print('\n\t\tRLSM ITERATIONS')
                theta_pred, _, _, df = LSMB(self.X, self.y, s=self.s,
                                            verbose=True,
                                            create_dataframe=True)
                print('\n\t\t\tRESULTS')
                print('\nPARAMETERS')
                print('True values:\tθ: {}'.format(self.theta))
                print('Estimates:\tθ*: {}'.format(theta_pred[:,0]))
                plt.plot(df['s'], df['RSS'], label='RSS')
                plt.plot(df['s'], df['Cp'], label='Cp')
                plt.plot(df['s'], df['FPE'], label='FPE')
                plt.legend()
                plt.show()
                print(df)
                print('s* by Cp:  {}'.format(np.array(df['Cp']).argmin()+1))
                print('s* by FPE: {}'.format(np.array(df['FPE']).argmin()+1))
                print()

    def run_single_LSMB_model_selection(self, p=None, plot=False,
                                        criteria=['Cp', 'FPE', 'RSS']):
        """Single LSMB

        p : list or str
            if list: permutation indices
            if str: one of 'direct', 'reverse', 'correlation'
                    defines how to create permutation
        """
        if p == 'reverse':
            print('=============\nREVERSE\n=============')
            p = np.flip(np.arange(self.m), axis=0)
        elif p == 'correlation':
            print('====================\nCORRELATION INCLUDING\n====================')
            correlations = np.abs(np.cov(self.X.T, self.y.T)[-1,:-1])
            p = np.argsort(-correlations)
            print('Correlations with target:\n\t{}'.format(correlations))
        elif isinstance(p, list):
            print('=============\nCUSTOM\n=============')
        else:
            print('=============\nDIRECT\n=============')
            p = np.arange(self.m)
        print('Regressors order:\n\t{}'.format(p+1))
        theta_pred, _, _, df = LSMB(self.X[:,p], self.y, s=self.s,
                                    verbose=False, create_dataframe=True)

        df['regressors'] = [str(sorted(p[:int(s)]+1)) for s in df.s]
```

```
        for criterion in criteria:
            df[criterion] = np.round(df[criterion], 6)
        if plot:
            for criterion in criteria:
                plt.plot(df['s'], df[criterion], label=criterion)
                plt.legend()
            plt.show()
        df = df.sort_values(by=criteria).reset_index()\
                    [['s', 'regressors', 'theta'] + criteria]
        self.s_opt, self.regressors_opt, \
        self.theta_opt = df.loc[0, ['s', 'regressors', 'theta']]
        self.theta_opt = np.hstack((self.theta_opt,
                         np.zeros(self.m -
                                  len(self.theta_opt))))[np.argsort(p)]
        print('Optimal:')
        print('\ts* = {}'.format(self.s_opt))
        print('\tregressors = {}'.format(self.regressors_opt))
        print('\ttheta* = {}'.format(self.theta_opt))
        return df

    def run_single_full_LSMB_model_selection(self,
                                             criteria=['Cp', 'FPE', 'RSS']):
        print('=============\nBRUT FORCE\n=============')
        total_df = pd.DataFrame()
        for p in permutations(range(self.m)):
            p = np.array(p)
            theta_pred, _, _, df = LSMB(self.X[:,p], self.y, s=self.s,
                                        verbose=False, create_dataframe=True)
            df = df.drop(columns=['theta'])
            df['regressors'] = [str(sorted(p[:int(s)]+1)) for s in df.s]
            total_df = pd.concat([total_df, df], axis=0)
        for criterion in criteria:
            total_df[criterion] = np.round(total_df[criterion], 6)
        total_df = total_df.drop_duplicates()
        total_df = total_df.sort_values(by=criteria).reset_index()\
                    [['s', 'regressors'] + criteria]
        return total_df

    def run_single_random_LSMB_model_selection(self, K=20,
                                               criteria=['Cp', 'FPE', 'RSS'],
                                               main_criterion='Cp'):
        print('================================\nRANDOM INCLUDING WITH K = {}\n=========
        permutations = [np.random.permutation(self.m) for k in range(K)]
        total_df = pd.DataFrame()
        best_df = pd.DataFrame()
        self.main_criterion_value = np.Inf
        for p in permutations:
            p = np.array(p)
```

```
            theta_pred, _, _, df = LSMB(self.X[:,p], self.y, s=self.s,
                                        verbose=False, create_dataframe=True)
            df = df.drop(columns=['theta'])
            df['regressors'] = [str(sorted(p[:int(s)]+1)) for s in df.s]
            df = df.sort_values(by=criteria).reset_index()
            main_criterion_value = df.loc[0, main_criterion]
            if main_criterion_value < self.main_criterion_value:
                self.main_criterion_value = main_criterion_value
                self.theta_pred = theta_pred
                self.s_opt, self.regressors_opt = df.loc[0,
                                                         ['s', 'regressors']]
            total_df = pd.concat([total_df, df], axis=0)
            best_df = pd.concat([best_df, df.loc[0:0]], axis=0)
        for criterion in criteria:
            total_df[criterion] = np.round(total_df[criterion], 6)
            best_df[criterion] = np.round(best_df[criterion], 6)
        total_df = total_df.drop_duplicates()
        total_df = total_df.sort_values(by=criteria).reset_index()\
                   [['s', 'regressors'] + criteria]
        best_df = best_df.rename(columns={'s': 's*',
                                 'regressors': 'regressors*'}).reset_index()\
                  [['s*', 'regressors*'] + criteria]
        print()
        print(best_df[:5])
        print('...')
        print(best_df[-5:])
        print()
        print('Optimal:')
        print('\ts* = {}\n\tregressors = {}'.format(self.s_opt,
                                                   self.regressors_opt))
        return total_df, best_df

    def run_single_picking_LSMB_model_selection(self,
                                                criteria=['Cp', 'FPE', 'RSS'],
                                                main_criterion='Cp'):
        print('================================\nPICKING INCLUDING\n==================
        total_df = pd.DataFrame()
        best_df = pd.DataFrame()
        self.main_criterion_value = np.Inf
        remained_indices = list(range(self.m))
        regressors_indices = []
        while len(remained_indices) > 0:
            local_main_criterion_value = np.Inf
            for i in remained_indices:
                p = np.array(regressors_indices + [i])
                theta_pred, _, _, df = LSMB(self.X[:,p], self.y, s=len(p),
                                            verbose=False,
                                            create_dataframe=True)
```

```
                df = df.drop(columns=['theta'])
                df['regressors'] = [str(sorted(p[:int(s)]+1)) for s in df.s]
                df = df.sort_values(by=criteria).reset_index()
                main_criterion_value = df.loc[0, main_criterion]
                if main_criterion_value < local_main_criterion_value:
                    local_main_criterion_value = main_criterion_value
                    local_df = df[:1]
                    local_i = i
                if main_criterion_value < self.main_criterion_value:
                    self.main_criterion_value = main_criterion_value
                    self.theta_pred = theta_pred
                    self.s_opt, \
                    self.regressors_opt = df.loc[0, ['s', 'regressors']]
                total_df = pd.concat([total_df, df], axis=0)
            regressors_indices += [local_i]
            remained_indices.remove(local_i)
            best_df = pd.concat([best_df, local_df], axis=0)
        for criterion in criteria:
            total_df[criterion] = np.round(total_df[criterion], 6)
            best_df[criterion] = np.round(best_df[criterion], 6)
        total_df = total_df.drop_duplicates().reset_index()\
                   [['s', 'regressors'] + criteria]
#         total_df = total_df.sort_values(by=criteria).reset_index()\
#                    [['s', 'regressors'] + criteria]
        best_df = best_df.rename(columns={'s': 's*',
                                 'regressors': 'regressors*'}).reset_index()\
                  [['s*', 'regressors*'] + criteria]
        print('Optimal:')
        print('\ts* = {}\n\tregressors = {}'.format(self.s_opt,
                                                   self.regressors_opt))
        return total_df, best_df
```