Föreläsning 9: Multipel linjär regression och modellval

Matias Quiroz[1]

[1]Statistiska institutionen, Stockholms universitet

VT 2023

Innehåll

- Multipel linjär regression.
- Tolkning av multipel linjär regression.
- Prediktion i multipel linjär regression.
- Residualanalys.
- Dummyvariabler i regression.
- Modellval.
- Modellval genom korsvalidering.

Fler variabler förklarar mer variation

- Förra föreläsningen gick vi igenom enkel linjär regression.
- R-kvadrat är ett mått på **förklaringsgraden**: Hur mycket av variationen i y kan vi fånga med hjälp av x.
- Exempel: Kroppsfett mot midjemått för 250 män:

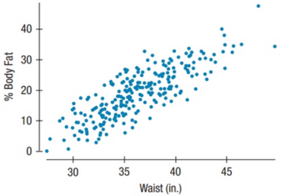


Figure 1: Figur 9.1 i De Veaux et al. (2021).

- Den räta linjen $\widehat{Body\ Fat} = -42.7 + 1.7 Waist$ ger $R^2 = 0.678$, dvs midjemått förklarar nästan 68% av variationen i kroppsfett.
- Finns det några andra variabler som kan förklara en del av de resterande 32%?

Multipel linjär regression

- Multipel linjär regression tillåter oss göra en minsta kvadratanpassning när vi har fler än en förklarande variabel.
- Idén för minsta kvadratanpassningen är samma som förut.
- Vi vill **miminimera residualkvadratsumman**, men nu har vi fler variabler som predikterar y.
- Exempel: Om vi har två variabler x_1 och x_2 predikteras y enligt

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2. \tag{1}$$

- Vi vill att minsta kvadratanpassningen minimerar

$$\sum e^2, \tag{2}$$

  där $e = y - \hat{y} = y - (b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2)$.
- De värden på b_0, b_1 och b_2 som minimerar (2) används i (1) för att prediktera y.

Multipel linjär regression, forts.

- Vi kan generalisera idén till godtyckligt många variabler.
- En **multipel linjär regression** med k variabler, $x_1, x_2, \ldots, x_k$, predikterar y enligt

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \cdots + b_k x_k. \tag{3}$$

- Minsta kvadratanpassningen minimerar

$$\sum e^2, \tag{4}$$

där $e = y - \hat{y} = y - (b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \cdots + b_k x_k)$.

- De värden på $b_0, b_1, b_2, \ldots, b_k$ som minimerar (4) används i (3) för att prediktera y.

Multipel linjär regression, forts.

- Minsta kvadratanpassningens

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \cdots + b_k x_k$$

  egenskaper:

  1. Minimerar residualkvadratsumman i (4).
  2. Residualerna summer till 0, dvs $\sum e = 0$.
  3. Den anpassade regressionen går genom punkten $(\overline{x}_1, \overline{x}_2, \ldots, \overline{x}_k, \overline{y})$.

- Formlerna för att räkna ut $b_0, b_1, b_2, \ldots, b_k$ är krångliga.
- Vi använder programvara (R!) för räkna ut minsta kvadratanpassningen.

Multipel linjär regression, forts.

- För enkel linjär regression räknar `lm` i R ut b_0 och b_1.

```
load("Datasets/Bodyfat.Rdata")
lm(Pct.BF ~ Waist, data = Bodyfat)
Call: lm(formula = Pct.BF ~ Waist, data = Bodyfat)
Coefficients: (Intercept) Waist -42.7 1.7
```

- Enkelt att modifiera `lm` för multipel linjär regression. Exempel när vi inkludera längd som en till prediktor.

```
load("Datasets/Bodyfat.Rdata")
lm(Pct.BF ~ Waist + Height, data = Bodyfat)
Call: lm(formula = Pct.BF ~ Waist + Height, data = Bodyfat)
Coefficients: (Intercept) Waist Height -3.101 1.773 -0.602
```

- $b_0 = -3.101$, $b_1 = 1.773$ och $b_2 = -0.602$.

Multipel linjär regression, forts.

- R output av `summary()` för den enkla linjära regressionen

```
> summary(lm(Pct.BF ~ Waist, data = Bodyfat))

Call:
lm(formula = Pct.BF ~ Waist, data = Bodyfat)

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max 
-10.8987  -3.6453   0.1864   3.1775  12.7887 

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)    
(Intercept) -42.73413    2.71651  -15.73   <2e-16 ***
Waist         1.69997    0.07431   22.88   <2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 ‘***’ 0.001 ‘**’ 0.01 ‘*’ 0.05 ‘.’ 0.1 ‘ ’ 1

Residual standard error: 4.713 on 248 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.6785,	Adjusted R-squared:  0.6772 
F-statistic: 523.3 on 1 and 248 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

- Mestadels av outputen förklaras i Del 2 av kursen.
- Vi känner igen de rödmarkerade: **Residualernas fördelningsmått samt min och max**, **skattningarna** b_0 och b_1, **residualernas standardavvikelse** s_e, och **R-kvadrat** R^2.

- R output av `summary()` för den multipla linjära regressionen

```
> summary(lm(Pct.BF ~ Waist + Height, data = Bodyfat))

Call:
lm(formula = Pct.BF ~ Waist + Height, data = Bodyfat)

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max 
-11.1692  -3.4133  -0.0977   3.0995   9.9082 

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)    
(Intercept) -3.10088    7.68611  -0.403    0.687    
Waist        1.77309    0.07158  24.770  < 2e-16 ***
Height      -0.60154    0.10994  -5.472 1.09e-07 ***
---
Signif. codes:  0 ‘***’ 0.001 ‘**’ 0.01 ‘*’ 0.05 ‘.’ 0.1 ‘ ’ 1

Residual standard error: 4.46 on 247 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.7132,	Adjusted R-squared:  0.7109 
F-statistic: 307.1 on 2 and 247 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

- Mestadels av outputen förklaras i Del 2 av kursen.
- Vi känner igen de rödmarkerade: **Residualernas fördelningsmått samt min och max**, **skattningarna** b_0, b_1 och b_2, **residualernas standardavvikelse** s_e, och **R-kvadrat** R^2.

Multipel linjär regression, forts.

- Notera att den multipla linjära regressionen förklarar mer av variationen:
  1. Större R-kvadrat: $R^2 = 0.6785$ (enkel) jämfört med $R^2 = 0.7135$ (multipel).
  2. Mindre residualstandardavvikelse: $s_e = 4.713$ jämfört med $s_e = 4.46$.
- Man kan visa att R^2 **alltid blir större i en multipel regression med fler variabler**.
- Man kan också visa att s_e **alltid blir mindre i en multipel regression med fler variabler**.
- Om vi inkluderar en tredje förklarande variabel i regressionen ovan, hade dess R^2 varit ännu större och s_e varit ännu mindre.
- Intuitivt kan man förstå fenomenet som att det sämsta som kan hända är att den nya förklarande variabeln som inkluderas inte förklarar någon variation.
- Det ovannämnda skulle inträffa om den nya förklarande variabeln var okorrelerad med responsen y.

Tolkning av multipel linjär regression

- Minsta kvadratanpassningen för vår regression med två förklarande variabler

$$\widehat{Body\ Fat} = -3.101 + 1.773 Waist - 0.602 Height.$$

- Ekvationen tycks säga att det finns ett negativt samband mellan kroppsfett och längd.
- Låt oss kolla på punktdiagrammet mellan kroppsfett och längd:

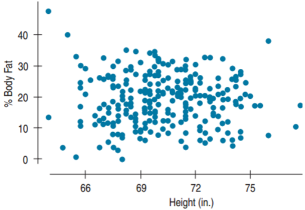


Figure 2: Figur 9.2 i De Veaux et al. (2021).

- Punktdiagrammet verkar inte visa något samband. Vad händer?

Tolkning av multipel linjär regression, forts.

- Den anpassade modellen: $\widehat{Body\ Fat} = -3.101 + 1.773\,Waist - 0.602\,Height$.
- Anpassningen av b_2 tar också hänsyn till vad midjemåttet är.
- Antag att vi håller midjemåttet x_1 konstant vid 37 (runt $\overline{x}_1$). Förväntar vi oss ett negativt samband?
- Ja, längre män bör i genomsnitt ha lägre kroppsfett jämfört med kortare män givet att de har samma midjemått.
- Negativt samband för män som har midjemått 36-38:

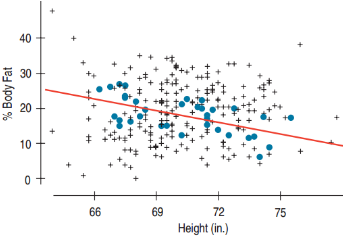


Figure 3: Figur 9.3 i De Veaux et al. (2021).

Tolkning av multipel linjär regression, forts.

- I en multipel linjär regression måste vi alltid tolka sambanden (positivt/negativt) **givet värden på de andra variablerna**.
- Detta är en **betingad tolkning**.
- När vi försökte tolka b_2 från figuren nedan så blev det fel, eftersom figuren visar ett marginellt (obefintligt) samband mellan kroppsfett och längd:

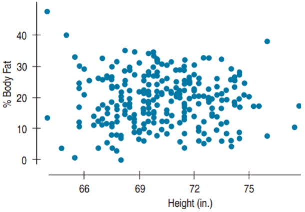


Figure 4: Figur 9.2 i De Veaux et al. (2021).

- Marginellt här betyder att vi betraktar sambandet mellan kroppsfett och längd oberoende av midjemått.

Tolkning av multipel linjär regression, forts.

- Låt oss betraka ett annat exempel då vi måste vara försiktiga med hur vi tolkar en multipel linjär regression.
- En regression predikterar huspriser med hjälp av antal sovrum enligt

$$\widehat{Price} = 338975 + 40234 Bedroom,$$

  och visar ett rimligt positivt samband mellan variablerna.
- Hus med ett extra sovrum tenderar att i genomsnitt säljas för \$40234 mer.
- Tolkningen av en enkel linjär regression är aldrig svår.

Tolkning av multipel linjär regression, forts.

- När vi också inkluderar boytan som prediktor blir prediktionen

$$\widehat{Price} = 308100 + 135 \, \textit{Living Area} - 43347 \, \textit{Bedroom}. \quad (5)$$

- Koefficienten för *Bedroom* i (5) visar inte ett negativt samband mellan pris och antal sovrum, dvs att hus med fler sovrum säljs till lägre pris.
- Tolkningen måste alltid **hålla dom andra variablerna konstanta**.
- Om boytan är konstant, kan det lägre priset i lägenheter med fler sovrum förklaras av något av följande:
  - Andra boytor i hemmet (vardagsrum, kök, osv) måste vara mindre.
  - Sovrummen är mindre.
- Tänk alltid efter när man tolkar multipel linjär regression, speciellt om sambanden ändras kraftigt efter att ha inkluderat en variabel.

Prediktion i multipel linjär regression

- Prediktion är lika enkelt som för enkel linjär regression.
- Vi vill sälja en lägenhet på 904 square feet (ca 82 kvadratmeter) och som har 3 sovrum.
- Enligt vår modell kan vi förvänta oss att en sådan lägenhet i genomsnitt säljs

$$\hat{y} = 308100 + 135 \cdot 904 - 43347 \cdot 3 = 300099,$$

dvs ca \$300000.

- Som vanligt gäller att inte prediktera för variabelvärden x som är utanför intervallet för de x-värden som har använts för att anpassa modellen.

Förutsättningar och antaganden i multipel linjär regression

- Både y och alla $x_1, x_2, \ldots, x_k$ måste vara numeriska variabler.
- y måste förhålla sig (approximativt) linjärt till vardera prediktor.
- Inga uppenbara outliers — kan påverka minsta kvadratanpassningen. Anpassa regressionen utan outliers för att kontrollera att resultaten blir ungefär desamma.
- Spridningen för y beror inte på $x_1, x_2, \ldots, x_k$. Residualernas varians måste vara konstant.
- Residualernas bör vara (approximativt) normalfördelade.
- Dessa kan valideras genom en residualanalys.

Residualanalys

- Den anpassade multipla linjära regressionen är

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \cdots + b_k x_k.$$

- En förutsättning för att använda multipel linjär regression är att den linjära modellen måste vara trovärdig, dvs anpassa observerade data.
- "All models are wrong, but some are useful" – George E. P. Box.
- Kom ihåg: Om modellen beskriver data på ett adekvat sätt, så kommer residualerna inte ha något tydligt mönster i sig. De beter sig slumpmässigt.
- I Föreläsning 8 lärde vi oss att en förutsättning för att residualerna inte ska visa ett uppenbart mönster är att y och x måste förhålla sig linjärt.
- I multipel linjär regression kan vi göra parvisa punktdiagram mellan y och vardera förklarande variabel för att kolla detta antagande.
- Om de inte förhåller sig linjärt så kan vi transformera variablerna för att få ett linjärt förhållande. **Ladder of powers** från Föreläsning 8.

Residualanalys, forts.

- Residualernas standardavvikelse kan räknas enligt

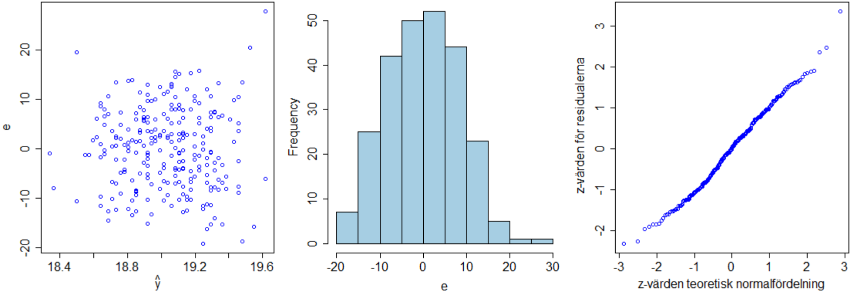
$$s_e = \sqrt{\frac{\sum e^2}{n-k-1}}.$$

- Varför delar vi med $n-k-1$ istället för n, $n-1$, $n-2$? Vi behöver lära oss mer statistik innan vi kan förklara det.
- För att räkna samplingfördelningar för $b_1, \ldots, b_k$ (Del 2 av kursen) behöver vi fler modellantaganden som medför:
  1. **Residualerna är normalfördelade**.
  2. **Residualernas varians är konstant**, dvs beror inte på x.
- Vi kan undersöka 1. genom 68–95–99.7 regeln eller en normalfördelningsplot.
- Vi kan undersöka 2. genom att plotta e mot $\hat{y}$ och se om spridningen är konstant.
- I enkel linjär regression plottade vi e mot x. I multipel linjär regression kan vi ha många x, därför enklare att plotta e mot $\hat{y}$ istället.

- Låt oss göra en residualanalys för modellen

$$\widehat{Body\ Fat} = -3.101 + 1.773Waist - 0.602Height.$$

- Residualanalysen visar att modellen är trovärdig.



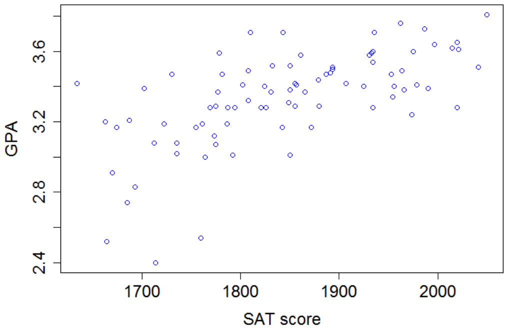
- Kommentarer:
  - Residualernas spridning är någorlunda konstant.
  - Histogrammet och normalfördelningsplotten visar att data är approximativt normalfördelade.

Residualanalys, forts.

- I många problem är det svårt att få antangandena att stämma.
- Uppgift 5.4 i Inlämningsuppgift 1 är ett exempel.
- "All models are wrong, but some are useful" – George E. P. Box.
- Så länge en regressionsmodell kan ge en bättre prediktion än prediktionen $\overline{y}$ så är den "useful" i någon mening.
- Viktigt att kommunicera modellens brister.

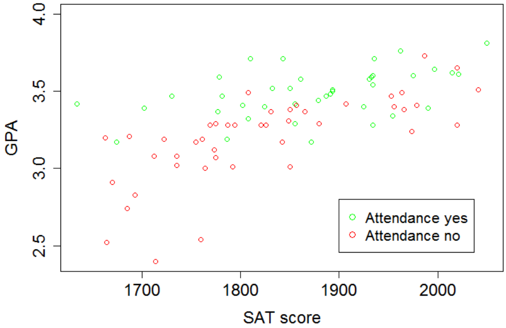
Dummyvariabler i regression

- En av förutsättningarna för regression är att y och alla $x_1, x_2, \ldots, x_k$ måste vara numeriska variabler.
- Ibland vill man ha en **kategorisk variabel som prediktor**.
- Låt oss prediktera snittbetyg (`GPA`) i USA med hjälp av 84 universitetsstudenters `SAT` score (amerikanska varianten av högskoleprovet).
- Båda dessa variabler är numeriska. Ett positivt samband verkar föreligga:



Dummyvariabler i regression, forts.

- Antag nu att vi också har en variabel `attendance`, som har utfallet `yes` om studenten deltagit i minst 75% av föreläsningar och `no` annars.
- Samma som föregående figur, men nu visar färgen vad studenten hade för `attendance`:



- Sambandet mellan `GPA` och `SAT` score verkar skilja sig beroende på `attendance`. Hur kan vi inkludera denna information i regressionen?

Dummyvariabler i regression, forts.

- Vi kan skapa en såkallad dummyvariabel (**dummy/indicator variable** variable på engelska).
- En dummyvariabel kodar en kategorisk variabel med två utfall som en numerisk variabel med utfallet 0 eller 1.
- Den omkodade variabeln används i en multipel linjär regression tillsammans med de andra variablerna (`SAT` score i vårt fall).
- Kodningen av `attendance="yes"` som 1 och `attendance="no"` som 0, eller tvärtom, är godtycklig men påverkar tolkningen.
- Vi väljer `attendance="yes"` som 1 och `attendance="no"` som 0.

```
load("Datasets/GPA.Rdata")  Attendance coded as yes = 1 and no = 0
lm(GPA ~ SAT + attendance, data = GPA)
Call: lm(formula = GPA ~ SAT + attendance, data = GPA)
Coefficients: (Intercept) SAT attendance 0.6439 0.0014 0.2226
```

Dummyvariabler i regression, forts.

- R output av `summary()` för den enkla linjära regressionen

```
> summary(lm(GPA ~ SAT + attendance, data = GPA))

Call:
lm(formula = GPA ~ SAT + attendance, data = GPA)

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-0.64311 -0.06820  0.01251  0.11787  0.31531

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 0.643850   0.358205   1.797    0.076 .
SAT         0.001400   0.000196   7.141 3.60e-10 ***
attendance  0.222644   0.040842   5.451 5.27e-07 ***
---
Signif. codes:  0 ‘***’ 0.001 ‘**’ 0.01 ‘*’ 0.05 ‘.’ 0.1 ‘ ’ 1

Residual standard error: 0.1813 on 81 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.5654,	Adjusted R-squared:  0.5547
F-statistic:  52.7 on 2 and 81 DF,  p-value: 2.193e-15
```

- Ungefär 56% av variationen i `GPA` förklaras av `SAT` och `attendance`.
- Hur tolkar vi coefficienten för `attendance`, dvs $b_2 = 0.222644 \approx 0.223$?

Dummyvariabler i regression, forts.

- Prediktionen: $\widehat{GPA} = 0.64385 + 0.0014SAT + 0.223attendance.$
- Prediktionen för student 1 som har `attendance=0` ("No")

$$\widehat{GPA}^{(1)} = 0.64385 + 0.0014SAT + 0.223 \cdot 0 = 0.64385 + 0.0014SAT.$$

- Prediktionen för student 2 som har `attendance=1` ("Yes")

$$\widehat{GPA}^{(2)} = 0.64385 + 0.0014SAT + 0.223 \cdot 1 = 0.64385 + 0.0014SAT + 0.223.$$

- Givet att **båda studenterna har samma `SAT`**,

$$\widehat{GPA}^{(2)} = \underbrace{0.64385 + 0.0014SAT}_{\widehat{GPA}^{(1)}} + 0.223 \cdot 1 = \widehat{GPA}^{(1)} + 0.223.$$

- Givet samma `SAT`, tenderar en student som har deltagit i minst 75% av föreläsningarna (dummy=1) att i **genomsnitt** ha 0.223 högre GPA jämfört med en student som deltagit mindre än 75% (dummy=0).

Dummyvariabler i regression, forts.

- Tolkningen är utifrån kodningen av dummyvariabeln (dvs vilken kategori som är 0 eller 1)!
- Viktigt att hålla koll på hur man har kodat dummyvariabeln!
- Allmän tolkning av koefficienten b för en dummyvariabel är följande.
- **Givet alla andra variablerna lika**, kommer prediktionen för en observation vars dummy$=1$ vara b större ($b > 0$), eller b mindre ($b < 0$), än prediktionen för en observation vars dummy$=0$.

Modellval

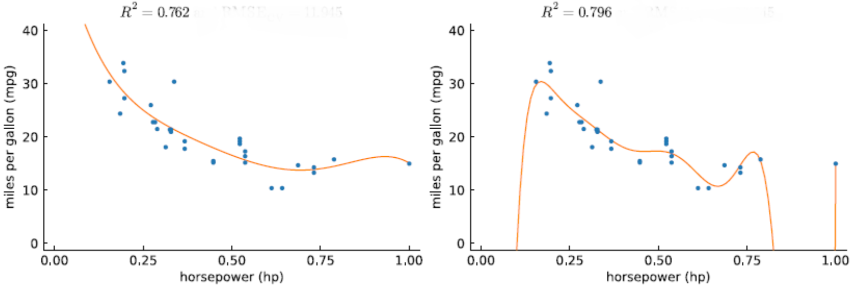
- Den multipla linjära regressionsmodellen predikterar enligt

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \cdots + b_k x_k.$$

- Är alla förklarande variabler $x_1, x_2, \ldots, x_k$ viktiga för att prediktera y?
- Resonemang: Bättre att inkludera fler än för få, använd alla variabler!
- Det finns ett problem med resonemanget: Överanpassning av data (**overfitting the data** på engelska).
- Enkelt förklarat: Ju mer "flexibel" modellen är, desto mer av variationen i y kan fångas.
- Låter som en fantastisk egenskap vid en första anblick. Vi vill ju fånga variationen i y! Vad är problemet?

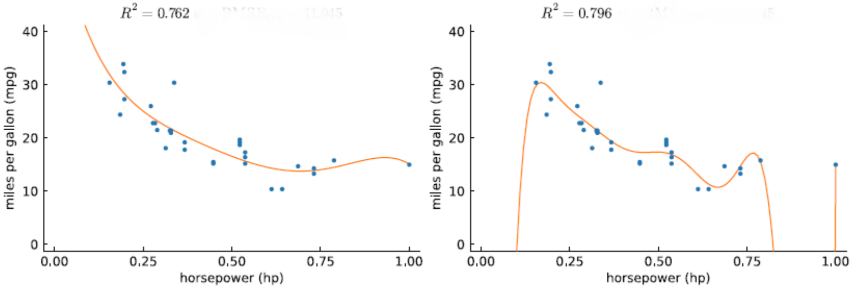
Modellval, forts.

- Enklast att förklara överanpassning med polynom regression (en icke-linjär regression som täcks i SDA II). Teaser: Villanis `widget`.
- Miles per gallon (`mpg`) mot horsepower (`hp`) för olika bilar:



- Modellen till höger är mer flexibel än den till vänster.
- Den flexibla modellen har högre R^2, dvs fångar mer av variationen i y.
- Vilken modell skulle ni ha valt? Varför?

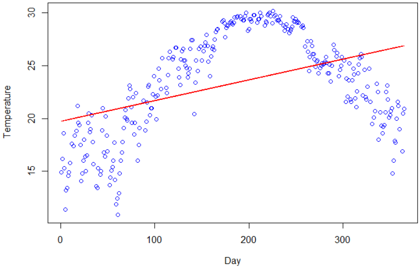
Modellval, forts.



- Antag att vi vill prediktera y för $x = 0.85$ (horsepower skalad till intervallet $[0, 1]$). Den mer flexibla modellen ger en galen prediktion!
- En modell sägs ha en generaliseringsförmåga (**generalization** på engelska) om modellen har en förmåga att på ett tillförligt sätt prediktera y med hjälp av x-värden som **inte användes när modellen anpassades**.
- När en alltför flexibel modell har en dålig generaliseringsförmåga säger vi att **modellen överanpassar data**.

Modellval, forts.

- En modell kan också underanpassa data (**underfitting the data** på engelska) och därmed ha en dålig generaliseringsförmåga.
- Exempel: 300 dagars temperaturer i en japansk stad under ett år (65 saknas):



- Antag att vi vill prediktera y för $x = 229$ (saknas i data). Galen prediktion!
- Till skillnad från överanpassning, ger underanpassning också dåliga prediktioner för x-värden som användes när modellen anpassades.
- När en alltför enkel modell ger en dålig anpassning av observationerna säger vi att **modellen underanpassar data**.

Modellval i linjär regression, forts.

- Finns många tänkbara kriterium på vad som anses vara en bra modell.
- Ett sådant är att den bör ha god generaliseringsförmåga, dvs modellen varken underanpassar eller överanpassar data.
- Att studera olika modeller generaliseringsförmåga är en stor grej inom machine learning[1].
- Att modellera icke-linjärt är ett sätt att få en mer flexibel model.
- I en multipel linjär regression är ett annat sätt att få en mer flexibel modell att inkludera fler x variabler.
- Antag att vi har två multipla regressionsmodeller,

$$\hat{y}^{(1)} = b_0^{(1)} + b_1^{(1)} x_1 + b_2^{(1)} x_2$$
$$\hat{y}^{(2)} = b_0^{(2)} + b_1^{(2)} x_1 + b_2^{(2)} x_2 + b_3^{(2)} x_3 + b_4^{(2)} x_4.$$

- Kan vi använda R^2 för att avgöra vilken av dom som är bäst?

[1] Påminner om kursen Maskininlärning på masternivå.

Modellval i linjär regression, forts.

- Nej, R^2 blir alltid större när vi inkluderar fler variabler i en regression!
- R^2 tar inte hänsyn till överanpassning.
- För att motverka detta kan man använda justerat R-kvadrat (**adjusted R^2** på engelska)

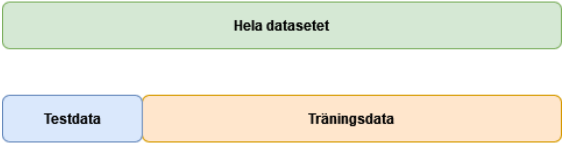
$$R^2_{\text{adj}} = 1 - (1 - R^2)\frac{n-1}{n-k-1}\left(= 1 - \frac{\text{SSE}/(n-k-1)}{\text{SST}/(n-1)}\right),$$

där k är antalet förklarande variabler och n är antal observationer.

- $\overline{R}^2 < R^2$. Kan bli negativ om R^2 är liten.
- Ett annat verktyg för modellval är korsvalidering (**cross validation** på engelska).
- Korsvalidering är mycket populärt i maskininlärning.

Modellval genom korsvalidering, forts.

- Underliggande idé: Utvärderar modellens generaliseringsförmåga genom att prediktera observationer som inte användes när modellen skattades.
- Data delas upp i två delmängder:
  - Träningsdata (**training data** på engelska): Data som används för att anpassa modellen.
  - Testdata (**test data** på engelska): Data som används för att utvärdera modellens prediktionsförmåga.
- Exempel med 75% som träningsdata och 25% som testdata.



- Om data ligger i ordning bör observationerna sorteras i slumpmässig ordning innan uppdelning så båda mängderna är representativa för stickprovet.

Modellval genom korsvalidering, forts.

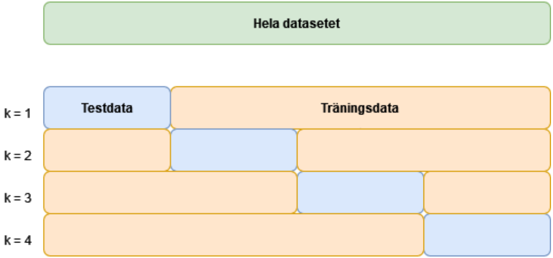
- Ett mått på prediktionsförmågan är att räkna residualkvadratsumman för de n_{test} testobservationerna,

$$\mathrm{SSE}_{\text{test}} = \sum_{i=1}^{n_{\text{test}}} (y_i - \hat{y}_i)^2.$$

- Notera
  - Vi summerar enbart över testobservationerna.
  - $\hat{y}_i$ är en prediktion baserat på en anpassning **enbart på träningsdata**.
  - Om anpassningen har överanpassat träningsdata så kommer $\mathrm{SSE}_{\text{test}}$ vara stor.
- Att dela upp data enligt ovan och välja modellen med lägst $\mathrm{SSE}_{\text{test}}$ har en nackdel...
- ... Vi skulle helst vilja att varje observation får möjlighet att ingå i både träningsdata och i valideringsdata (dock inte samtidigt).
- Korsvalidering!

Modellval genom korsvalidering, forts.

- Korsvalideringsuppdelning med $K = 4$ såkallade **folds**:



- Notera att vi fick $K = 4$ folds pga uppdelningen 75% och 25%. Vid till exempel 90% och 10% hade vi fått $K = 10$ folds.

- Korsvalideringen SSE för alla observationer.

$$\mathrm{SSE}_{\text{cv}} = \mathrm{SSE}_{\text{test}}^{(1)} + \mathrm{SSE}_{\text{test}}^{(2)} + \mathrm{SSE}_{\text{test}}^{(3)} + \mathrm{SSE}_{\text{test}}^{(4)}.$$

- **Mean squared error** (MSE) för korsvalideringen $\mathrm{MSE}_{\text{cv}} = \frac{\mathrm{SSE}_{\text{cv}}}{n}$.

Modellval genom korsvalidering, forts.

- Vanligt att rapportera korsvalideringens **root mean square error** (RMSE)

$$\mathrm{RMSE}_{\mathsf{cv}} = \sqrt{\frac{\mathrm{SSE}_{\mathsf{cv}}}{n}}.$$

- Antag att vi vill jämföra M stycken modeller för ett givet dataset.
- Utför korsvalidering på varje modell separat. Notera att man **måste använda samma korsvalideringsuppdelning av data** för alla modellerna.
- Proceduren ger en $\mathrm{RMSE}_{\mathsf{cv}}$ för varje modell, dvs

$$\mathrm{RMSE}_{\mathsf{cv}}^{(1)}, \mathrm{RMSE}_{\mathsf{cv}}^{(2)}, \ldots, \mathrm{RMSE}_{\mathsf{cv}}^{(M)}.$$

- Välj den modell som har lägst $\mathrm{RMSE}_{\mathsf{cv}}$.
- Ni kommer att få praktisk erfarenhet av korsvalidering i Lab 4 och Inlämningsuppgift 1.

References I

De Veaux, R. D., Velleman, P., and Bock, D. (2021). *Stats: Data and Models*. Pearson, Harlow, United Kingdom, fifth edition.