简单来说网格搜索是自动化寻找最佳参数的方法。它本身没有任何神奇之处,只是把你的所有参数的可能都试一遍,每一个参数都打个分(打分方法由你来确定),返回一个分数最好的。

交叉验证是在不碰测试集的情况下,只用训练集和模型本身来检验模型表现的一种方法。恰 巧这两者可以封装在一起使用,增加了学生的理解难度。不过你有哪个细节不明白,可以继 续跟帖。

回答一下你的问题:

网格搜索是为了确定最优参数的一种全部遍历方式,这个参数是指的是什么?

大多数算法都是有几个参数可以设置的,当你不知道哪个参数最好的时候,网格搜索可以帮你验证一下。例

如 http://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.tree.DecisionTree

Regressor.html#sklearn-tree-decisiontreeregressor16

max\_depth: int or None, optional (default=None)

就是一个参数,默认是 None,你可以传入一个整数。

比如说 project 1 是指的我们表格中用哪些 features 的组合去评估最好吗?

你是指泰坦尼克哪个项目吗?选择 features 一般来说不是网格搜索做的事情。

还有就是用交叉验证去测试这些参数的不同组合哪些最准确,但是一定要使用交叉验证去衡量吗?

网格搜索可以不用交叉验证,交叉验证相当于把每个参数组合,都试 k 次,然后取平均分作为这个参数组合的最终得分。

http://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.model\_selection.GridSearchCV.html

里面 cv\_results\_ 可以看到详情。

## 有其它方法吗?

交叉验证有很多种方法, K-fold 只是其中的一种, 更多

见 https://en.wikipedia.org/wiki/Cross-validation\_(statistics)12

你理解的是对的。*GridSearchCV* 帮我们解决的问题就是,在不碰测试集的前提下,不碰测试集的前提下,不碰测试集的前提下,寻找模型的最佳参数!为了找到这个最佳参数,我们就需要知道模型的表现,为了知道模型表现,我就要打分,为了打分,就要把训练集重新分割为训练集(*9/10*)和验证集(*1/10*)。我们遍历了参数,每一个可能的参数组合都在 K 份验证集上跑一遍分,取平均分最高的作为最优参数。

总结: *GridSearchCV* 没什么神奇的地方,就是干了体力活,只是一次性干了很多(抽象层次比较高),所以一上来不是那么容易理解。其实你把 cv\_results\_ 返回的那个 *dictionary* 变成 *csv* 一看,就知道它是怎么工作的了!