

欠拟合与过拟合

课前准备

- 下载Anaconda软件，请点击[这里](#)进行下载。

本节要点

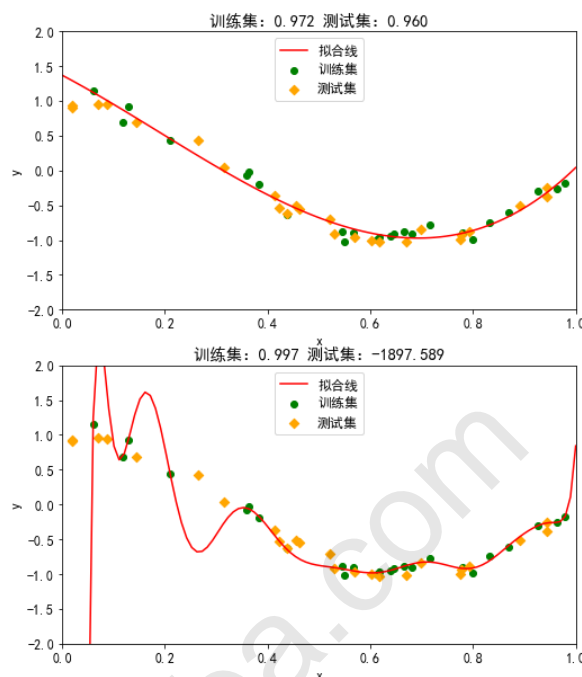
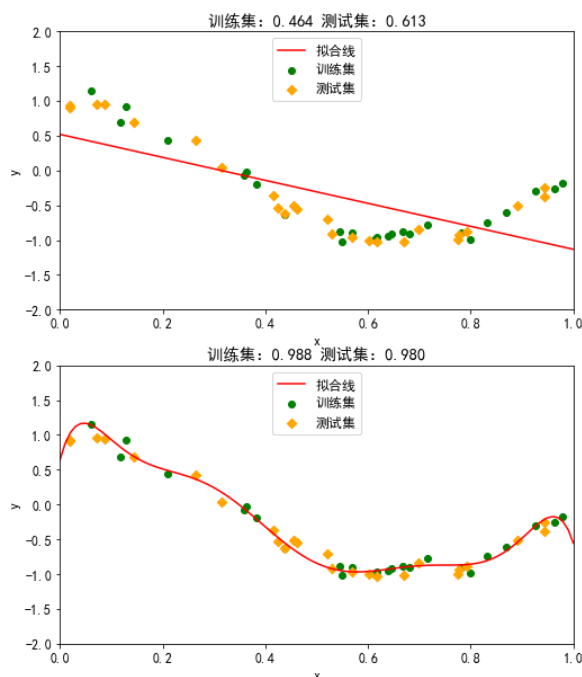
- 欠拟合与过拟合概念与产生原因。
- 多项式扩展原理。
- L1, L2与Elastic Net正则化。

再谈拟合

概念

之前，我们介绍过拟合的概念。拟合指构建一种算法，使得算法的预测值能够符合样本的真实值。与拟合相关的两个概念是**欠拟合**与**过拟合**。

- 欠拟合：模型过于简单，未能充分捕获样本数据的特征。表现为模型在训练集上的效果不好。
- 过拟合：模型过于复杂，过分捕获样本数据的特征，从而将样本数据中一些特殊特征当成了共性特征。表现为模型在训练集上的效果非常好，但是在未知数据上的表现效果不好。



解决方案

欠拟合解决方案：

- 增加模型复杂度。
 - 引入新的特征，例如多项式扩展。
 - 使用复杂的模型，例如由线性模型改成非线性模型。
- 增加迭代次数。

过拟合解决方案：

- 收集更多的数据。

- 降低模型的复杂度。
 - 使用简单的模型。
 - 减少特征数量。
 - 使用正则化。
- 减少迭代次数。
 - early stopping。

课堂练习

关于欠拟合与过拟合，说法正确的是（ ）。【不定项】

- A 某模型在训练集上的效果明显大于测试集，这是欠拟合现象。
 B 如果模型在训练集上的效果与在测试集上的效果差不多，则模型既没有欠拟合，也没有过拟合。
 C 当产生过拟合时，首先想到的解决方案，是收集更多的数据。
 D 模型既不是越简单越好，也不是越复杂越好。

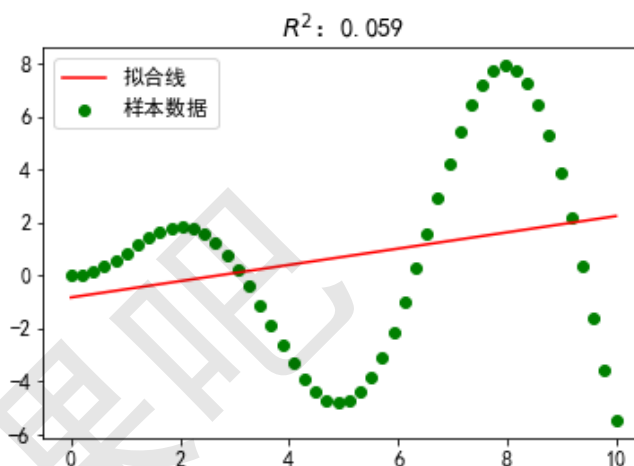
多项式扩展

欠拟合现象

我们可以使用线性回归模型来拟合数据，然而，在现实中，数据未必总是线性（或接近线性）的。当数据并非线性时，直接使用LinearRegression的效果可能会较差，产生欠拟合。

```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 from sklearn.linear_model import LinearRegression
4
5 plt.rcParams["font.family"] = "SimHei"
6 plt.rcParams["axes.unicode_minus"] = False
7 plt.rcParams["font.size"] = 12
8
9 x = np.linspace(0, 10, 50)
10 # 构造非线性数据。
11 y = x * np.sin(x)
12 # 为x扩展一个维度，从一维变成二维。也可以通过reshape来实现同样的功能。
13 x = x[:, np.newaxis]
14 lr = LinearRegression()
15 lr.fit(x, y)
16 plt.scatter(x, y, c="g", label="样本数据")
17 plt.plot(x, lr.predict(x), "r-", label="拟合线")
18 plt.legend()
19 plt.title(f"$R^2$: {lr.score(x, y):.3f}")
```

```
1 | Text(0.5, 1.0, '$R^2$: 0.059')
```



多项式扩展规则

此时，我们可以尝试使用多项式扩展来进行改进。**多项式扩展**，可以认为是对现有数据进行的一种转换，通过生成新的特征，从而将数据由低维映射到高维空间中，这样模型就可以拟合更广泛的数据。

我们将原始的特征称为**输入特征**，将多项式扩展之后的特征称为**输出特征**，多项式扩展的规则如下（假设为 n 阶扩展）：

- 对所有输入特征进行乘积组合。
- 每个输入特征具有一个指数，指数的取值范围为 $[0, n]$ 。
- 遍历所有指数可能的取值，但是需要保证所有输入特征的指数之和不超过 n （小于等于 n ）。
- 对每个符合上述条件的指数组合，作为扩展之后的输出特征。

假设，我们有如下的二元线性模型：

$$\hat{y} = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2$$

如果该模型的拟合效果不佳，我们就可以对该模型进行多项式扩展。例如，我们进行2阶扩展（也可以进行更高阶的扩展），符合条件的指数组合为：

$$[x_1^0 x_2^0, x_1^1 x_2^0, x_1^0 x_2^1, x_1^2 x_2^0, x_1^1 x_2^1, x_1^0 x_2^2]$$

因此，经过多项式扩展之后，最终的输出特征为：

$$[1, x_1, x_2, x_1^2, x_1 x_2, x_2^2]$$

模型也最终变为：

$$\hat{y} = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + w_3 x_1 x_2 + w_4 x_1^2 + w_5 x_2^2$$

当进行多项式扩展后，特征数量由之前的2个变成5个（特征维度从2维变成5维），从而可以更灵活的去拟合数据。



课堂练习



经过多项式扩展之后，最高次项已经不再是1，这样的数据，还能适用于线性回归这样的模型吗？

- A 可以。
- B 不能。
- C 有时能，有时不能。
- D 不好确定。



经过多项式扩展后，我们依然可以使用之前的线性回归模型去拟合数据。这是因为，我们可以假设：

$$\vec{z} = (z_1, z_2, z_3, z_4, z_5) = (x_1, x_2, x_1 x_2, x_1^2, x_2^2)$$

这样，之前的模型就会变成：

$$\hat{y} = w_0 + w_1 z_1 + w_2 z_2 + w_3 z_3 + w_4 z_4 + w_5 z_5$$

从而，我们依然可以认为，这还是一种线性模型。

PolynomialFeatures

我们可以使用sklearn中提供的PolynomialFeatures类来实现多项式扩展。通过powers_属性可以获取扩展之后每个输入特征的指数组合（矩阵）。关于指数矩阵，描述如下：

- 矩阵的每一列对应输入特征，即列数等于输入特征数。
- 矩阵的每一行对应输出特征，即行数等于输出特征数。
- 矩阵的形状为[输出特征数， 输入特征数]。
- 矩阵的值表示每个输入特征的指数值。
 - powers_[i, j]表示第i个输出特征中，第j个输入特征的指数值。

例如，如果输入样本的特征数为2，多项式扩展阶数为2，则指数矩阵为：

$$powers = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 2 & 0 \\ 1 & 1 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$$

对于两个输入特征 x_1 与 x_2 来讲，多项式转换之后的值为：

$$[x_1^0 x_2^0, x_1^1 x_2^0, x_1^0 x_2^1, x_1^2 x_2^0, x_1^1 x_2^1, x_1^0 x_2^2]$$

即：

$$[1, x_1, x_2, x_1^2, x_1 x_2, x_2^2]$$

```

1 from sklearn.preprocessing import PolynomialFeatures
2
3 x = np.array([[1, 2], [3, 4]])
4 # degree: 扩展的阶数。阶数越高，则输出特征越多。
5 # include_bias: 是否包含偏置，默认为True。
6 poly = PolynomialFeatures(2, include_bias=True)
7 # 对输入数据进行转换。
8 # 相当于调用fit之后，再调用transform。
9 # poly.fit(x)
10 # r = poly.transform(x)
11 r = poly.fit_transform(x)
12 print("转换之后的结果：")
13 print(r)
14 print("指数矩阵：")
15 print(poly.powers_)
16 print("输入的特征数量：", poly.n_input_features_)
17 print("输出的特征数量：", poly.n_output_features_)
18
19 for x1, x2 in x:
20     for e1, e2 in poly.powers_:
21         print(x1 ** e1 * x2 ** e2, end="\t")
22     print()

```

```

1 转换之后的结果：
2 [[ 1.  1.  2.  1.  2.  4.]
3  [ 1.  3.  4.  9. 12. 16.]]
4 指数矩阵：
5 [[0 0]
6  [1 0]
7  [0 1]
8  [2 0]
9  [1 1]
10 [0 2]]
11 输入的特征数量： 2
12 输出的特征数量： 6
13 1  1  2  1  2  4
14 1  3  4  9  12 16

```



课堂练习



如果有2个输入特征，经过多项式3阶扩展后，会有几个输出特征（含偏置项）？

- A 7个
- B 8个
- C 9个
- D 10个



解决欠拟合

现在，就让我们对之前的程序来进行多项式扩展，尝试解决欠拟合问题。

```

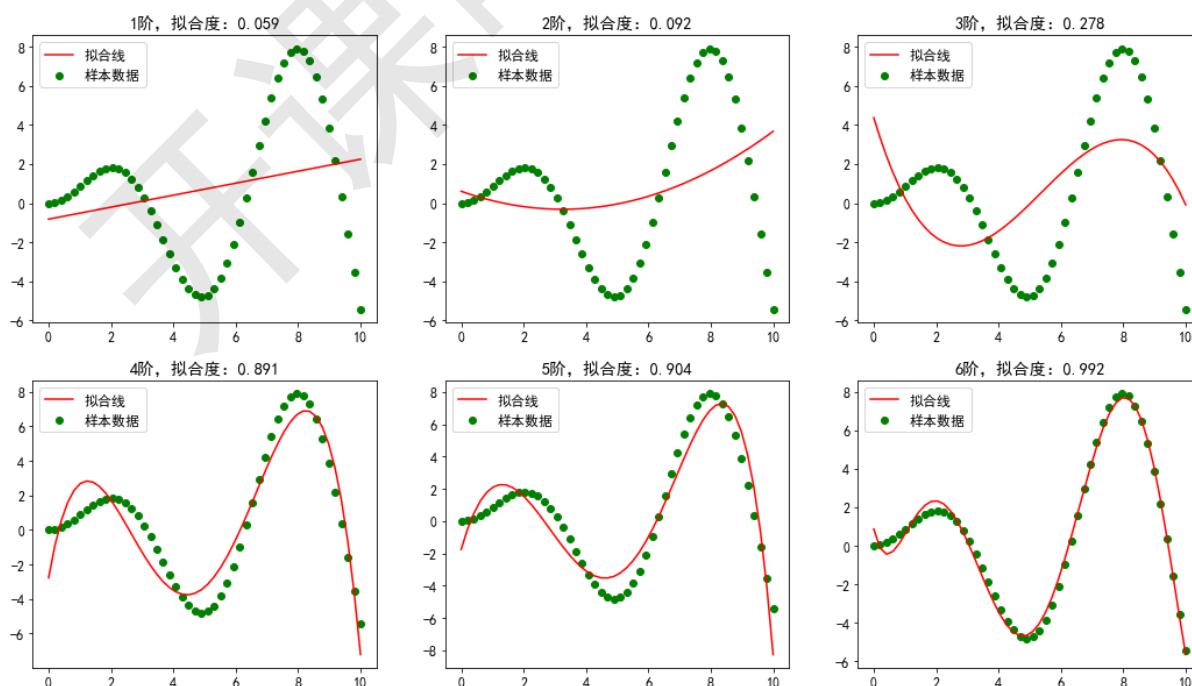
1 x = np.linspace(0, 10, 50)
2 y = x * np.sin(x)
3 X = x[:, np.newaxis]
4 figure, ax = plt.subplots(2, 3)
5 figure.set_size_inches(18, 10)
6 ax = ax.ravel()

```

```

7
8 # 进行1阶到6阶的多项式扩展。(1阶相当于没有扩展)
9 for n in range(1, 7):
10     poly = PolynomialFeatures(degree=n, include_bias=False)
11     X_transform = poly.fit_transform(X)
12     lr = LinearRegression()
13     lr.fit(X_transform, y)
14     ax[n - 1].set_title(f"{n}阶, 拟合度: {lr.score(X_transform, y):.3f}")
15     ax[n - 1].scatter(x, y, c="g", label="样本数据")
16     ax[n - 1].plot(x, lr.predict(X_transform), "r-", label="拟合线")
17     ax[n - 1].legend()

```



流水线

在上例中，我们使用多项式对训练数据进行了转换（扩展），然后使用线性回归类（LinearRegression）在转换后的数据上进行拟合。可以说，这是两个步骤。我们虽然可以分别去执行这两个步骤，然而，当数据预处理的工作较多时，可能会涉及更多的步骤（例如标准化，One-Hot编码，特征选择等操作），此时分别执行每个步骤会显得过于繁琐。

流水线（Pipeline类）可以将每个评估器视为一个步骤，然后将多个步骤作为一个整体而依次执行，这样，我们就无需分别执行每个步骤。例如，在上例中，我们就可以将多项式转换与训练模型两个步骤视为一个整体，一并执行。

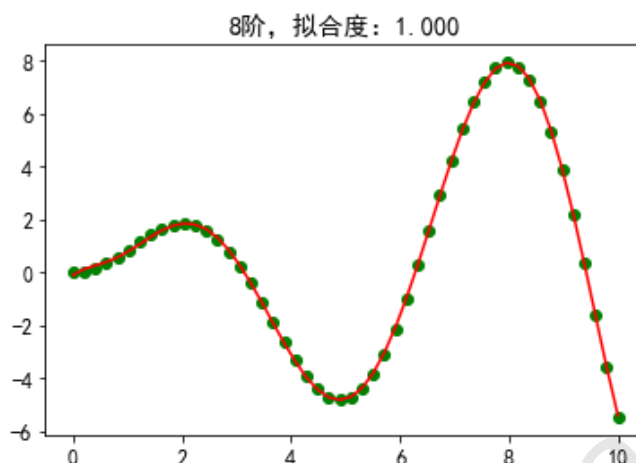
流水线具有最后一个评估器的所有方法。当通过流水线对象调用方法 f 时，会执行这样的过程（假设流水线具有 n 个评估器）：

- 如果 f 是`fit`或`fit_transform`方法，则会首先对前 $n-1$ 个评估器依次调用`fit_transform`方法，然后在最后一个评估器上调用 f 方法。
- 如果 f 是其他方法，则会首先对前 $n-1$ 个评估器依次调用`transform`方法，然后在最后一个评估器上调用 f 方法。

例如，当在流水线上调用`fit`方法时，将会依次在每个评估器上调用`fit_transform`方法，前一个评估器将转换之后的结果传递给下一个评估器，直到最后一个评估器调用`fit`方法为止（最后一个评估器不会调用`transform`方法）。而当在流水线上调用`predict`方法时，则会依次在每个评估器上调用`transform`方法，在最后一个评估器上调用`predict`方法。

```
1 from sklearn.pipeline import Pipeline
2
3 x = np.linspace(0, 10, 50)
4 y = x * np.sin(x)
5 X = x[:, np.newaxis]
6 # 定义流水线的步骤。类型为一个列表，列表中的每个元素是元组类型，
7 # 格式为：[(步骤名1, 评估器1), (步骤名2, 评估器2), ..., (步骤名n, 评估器n)]
8 steps = [("poly", PolynomialFeatures(include_bias=False)), ("lr", LinearRegression())]
9 pipe = Pipeline(steps)
10 # 设置流水线的参数。所有可用的参数，可以通过pipe.get_params()获取。
11 pipe.set_params(poly__degree=8)
12 pipe.fit(X, y)
13 score = pipe.score(X, y)
14 plt.title(f"8阶，拟合度: {score:.3f}")
15 plt.scatter(X, y, c="g", label="样本数据")
16 plt.plot(X, pipe.predict(X), "r-", label="拟合线")
```

1 | [`matplotlib.lines.Line2D` at `0x1b125c59b48`]



课堂练习



关于流水线（Pipeline），说法正确的有（ ）。【不定项】

- A 使用流水线，可以省略频繁的`fit`与`transform`过程。
- B 流水线可以加快程序的运行速度。
- C 流水线可以将多个步骤作为一个整体而执行。
- D 流水线内的所有步骤（评估器），都必须具有`transform`方法。



正则化

过拟合现象

通过之前的程序，我们发现，使用多项式扩展完美的解决了欠拟合问题。如果我们使用更多阶（8阶）的多项式扩展，甚至可以将拟合度提高为1。但是，问题来了，多项式扩展时，是否阶数越多越好呢？

```

1  from sklearn.model_selection import train_test_split
2
3  def true_fun(x):
4      """数据分布的函数，用于生成由x -> y的映射。
5
6      根据x数组中的每个元素，返回该元素的余弦计算值y。
7
8      Parameters
9      -----
10     x : array-like
11         训练数据集。
12
13     Returns
14     -----
15     y : array-like
16         x对应的余弦映射结果。
17
18     """
19
20     return np.cos(1.5 * np.pi * x)
21
22
23 def fit_and_plot(model):
24     """用来训练模型，并且绘制模型的拟合效果。
25
26     Parameters
27     -----
28     model : object
29         模型对象。
30
31     """
32
33     np.random.seed(0)
34     x = np.random.rand(50)
35     # 在映射函数上，增加一定的误差（噪声）。这样更符合现实中数据的分布。
36     # 误差服从正态分布。
37     y = true_fun(x) + np.random.randn(len(x)) * 0.1
38     X = x[:, np.newaxis]
39     X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.5,
40 random_state=0)
41     model.fit(X_train, y_train)
42     train_score = model.score(X_train, y_train)
43     test_score = model.score(X_test, y_test)
44     plt.scatter(X_train, y_train, c="g", label="训练集")
45     plt.scatter(X_test, y_test, c="orange", marker="D", label="测试集")
46     s = np.linspace(0, 1, 100).reshape(-1, 1)
47     plt.plot(s, model.predict(s), c="r", label="拟合线")
48     plt.xlabel("x")
49     plt.ylabel("y")
50     plt.xlim((0, 1))
51     plt.ylim((-2, 2))
52     plt.legend(loc="upper center")
53     plt.title(f"训练集: {train_score:.3f} 测试集: {test_score:.3f}")
54

```



```

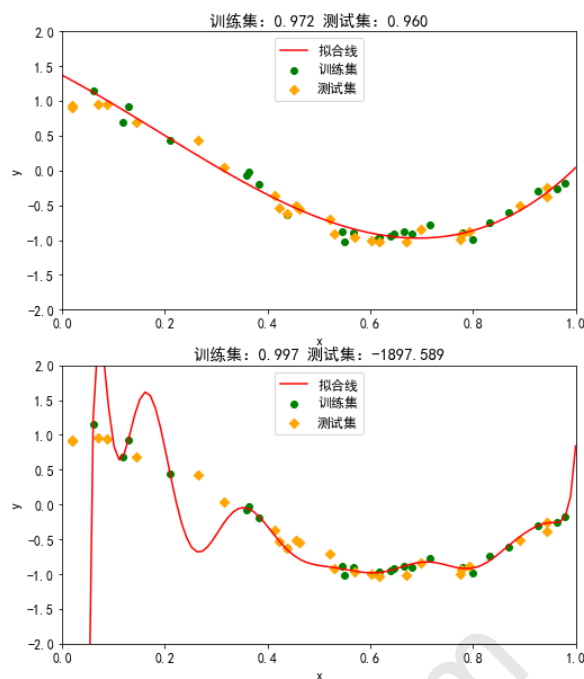
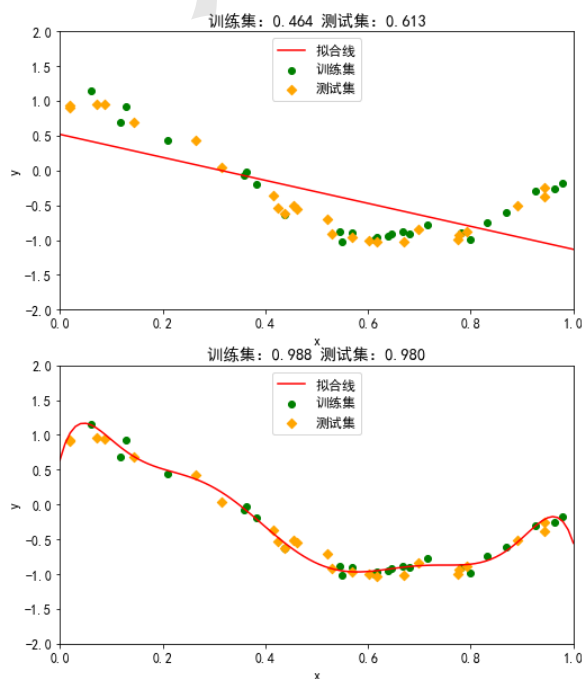
55 # 定义多项式扩展的阶数。
56 degrees = [1, 3, 8, 15]
57 plt.figure(figsize=(18, 10))
58 for i, n in enumerate(degrees):
59     plt.subplot(2, 2, i + 1)
60     pipe = Pipeline([("poly", PolynomialFeatures(degree=n, include_bias=False)),
61                     ("lr", LinearRegression())])
62     fit_and_plot(pipe)
63     # named_steps返回字典对象，提供流水线中每个步骤的名称（key）与对象（value）的映射。
64     print(pipe.named_steps["lr"].coef_)

```

```

1 [-1.65201925]
2 [-3.89922088 -3.34968481  5.92093622]
3 [ 2.82447079e+01 -4.99295928e+02  3.53686879e+03 -1.31271460e+04
4   2.71571014e+04 -3.15089674e+04  1.91826234e+04 -4.77061916e+03]
5 [ 2.07071311e+04 -4.97833841e+05  6.76423888e+06 -5.85834707e+07
6   3.45651499e+08 -1.44778371e+09  4.41812369e+09 -9.97113468e+09
7   1.67390055e+10 -2.08331288e+10  1.89560333e+10 -1.22494207e+10
8   5.32316771e+09 -1.39466930e+09  1.66452216e+08]

```



常用的正则化

我们将之前的程序中，输出系数（权重与偏置）的注释取消，再次运行程序，我们会发现什么？



在线性回归中，模型过于复杂，通常表现为模型的参数过大（指绝对值过大），即如果模型的参数过大，就容易出现过拟合现象。我们可以通过正则化来降低过拟合的程度。**正则化**，就是通过在损失函数中加入关于权重的惩罚项，进而限制模型的参数过大，从而减低过拟合，增加的惩罚项，我们也称作正则项。

根据正则项的不同，我们可以将正则化分为如下几种：

- L2正则化
- L1正则化
- Elastic Net

L2正则化

L2正则化是最常用的正则化，将所有权重的平方和作为正则项。使用L2正则的线性回归模型称为Ridge回归（岭回归）。加入L2正则化的损失函数为：

$$J(w) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m (y^{(i)} - \hat{y}^{(i)})^2 + \alpha \sum_{j=1}^n w_j^2$$

- m : 样本数量。
- n : 特征数量。
- α : 惩罚系数 ($\alpha > 0$) 。

从包含正则项的损失函数中，我们可以发现，我们将损失函数分为两部分，一部分为原来的损失函数，另外一部分为正则项的惩罚，这样，如果当权重过大时，即使原来的损失函数值很小，但是整个项的损失值会很多，因此，整个损失值（二者的和）也不会很小，从而，权重过大的 w 就可能不会成为最佳解。

L1正则化

L1正则化使用所有权重的绝对值和作为正则项。使用L1正则的线性回归模型称为Lasso回归（Least Absolute Shrinkage and Selection Operator——最小绝对值收缩与选择因子）。

$$J(w) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m (y^{(i)} - \hat{y}^{(i)})^2 + \alpha \sum_{j=1}^n |w_j|$$

Elastic Net

Elastic Net (弹性网络)，同时将绝对值和与平方和作为正则项，是L1正则化与L2正则化之间的一个折中。使用该正则项的线性回归模型称为Elastic Net算法。

$$J(w) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m (y^{(i)} - \hat{y}^{(i)})^2 + \alpha(p \sum_{j=1}^n |w_j| + (1 - p) \sum_{j=1}^n w_j^2)$$

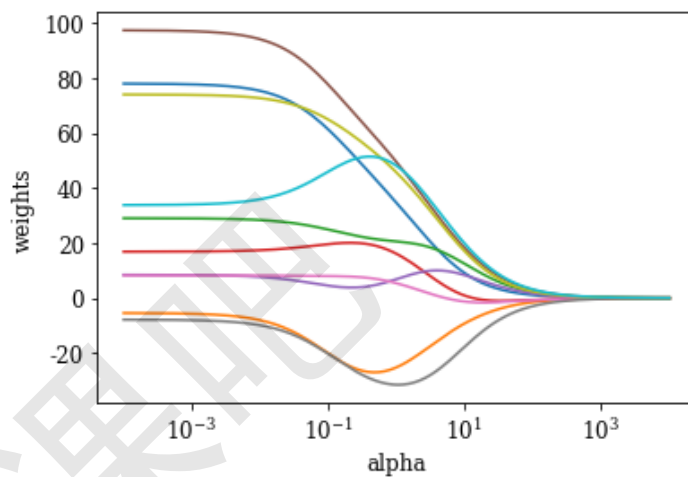
- p : L1正则化的比重 ($0 \leq p \leq 1$)。

正则化对权重的影响

我们以L2正则化为例，来演示不同 α 取值下，正则化对权重的影响。

```
1 from sklearn.datasets import make_regression
2 from sklearn.linear_model import Ridge
3 # 注意：当坐标轴使用对数比例后，这里需要改成英文字体，否则无法正常显示。
4 plt.rcParams["font.family"] = "serif"
5
6 # 创建回归数据集。
7 # n_samples: 样本数量。
8 # n_features: 特征数量。
9 # coef: 是否返回权重。默认为False。
10 # random_state: 随机种子。
11 # bias: 偏置。
12 # noise: 增加的噪声干扰，值越大，干扰越大。
13 X, y, w = make_regression(n_samples=10, n_features=10, coef=True,
14                           random_state=1, bias=3.5, noise=0.0)
15
16 alphas = np.logspace(-4, 4, 200)
17 # 定义列表，用来保存在不同alpha取值下，模型最优的权重(w)值。
18 coefs = []
19 # 创建岭回归对象。
20 ridge = Ridge()
21 for a in alphas:
22     # alpha: 惩罚力度，值越大，惩罚力度越大。
23     ridge.set_params(alpha=a)
24     ridge.fit(X, y)
25     # 将每个alpha取值下，Ridge回归拟合的最佳解(w)加入到列表中。
26     coefs.append(ridge.coef_)
27
28 # gca get current axes 获取当前的绘图对象。
29 ax = plt.gca()
30 # 当y是二维数组时，每一列会认为是一个单独的数据集。
31 ax.plot(alphas, coefs)
32 # 设置x轴的比例。(对数比例)
33 ax.set_xscale("log")
34 # 设置x轴的标签。
35 ax.set_xlabel("alpha")
36 # 设置y轴的标签。
37 ax.set_ylabel("weights")
```

```
1 | Text(0, 0.5, 'weights')
```



课堂练习

关于正则化，以下说法错误的是（ ）。

- A 常用的正则化有L1，L2与 Elastic Net三种。
- B α 值越大，正则化强度越大。
- C 正则化，是通过在损失函数上，加入正则项，从而可以限制权重（ w ）过大。
- D 如果模型比较复杂，就一定会产生过拟合。



正则化说明

- Lasso更容易产生稀疏解，这就减少了模型所依赖的特征数量。因此，可以使用Lasso进行特征选择。
- Ridge模型具有较高的稳定性。
- Elastic Net是Lasso与Ridge之间的一个折中，其可以像Lasso一样产生稀疏解，同时具有Ridge的部分稳定性。
- 当多个特征具有相关性时，Lasso可能只会随机选择其中的一个，而Elastic Net可能会选择多个。

扩展内容：关于Lasso为什么容易产生稀疏解，而Ridge不容易产生稀疏解，老梁提供辅助视频，供大家扩展学习。

通过Lasso实现特征选择

我们以模拟生成的数据为例，来演示通过Lasso结合SelectFromModel实现特征选择。

```
1 from sklearn.linear_model import Lasso
2
3 x, y = make_regression(n_samples=10, n_features=10, coef=False,
4                       random_state=1, bias=3.5, noise=1)
5 lasso = Lasso(alpha=1)
6 lasso.fit(X, y)
7 print(lasso.coef_)
```

```
1 [54.14243012 71.93458854 3.52415557 13.50646852 36.90416205 5.6709588
2  -0.         -0.         73.44001013 71.26297921]
```

```
1 from sklearn.feature_selection import SelectFromModel
2
3 # estimator: 评估器，即SelectFromModel类要进行特征选择的模型。
4 # threshold: 阈值，当特征权重小于阈值时，丢弃该特征。
5 # prefit: 传入的评估器（estimator参数）是否已经训练过了。默认为False。
6 sfm = SelectFromModel(estimator=lasso, threshold=1e-5, prefit=True)
7 X_transform = sfm.transform(X)
8 print(X_transform[:3])
9 # 返回布尔数组，用来表示是否选择对应的特征，True为选择，False为丢弃。
10 print(sfm.get_support())
```

```
1 [[ 1.13376944 -0.3224172 -1.09989127 -2.06014071 -0.87785842 0.04221375
2   -0.38405435 1.46210794]
3  [ 0.19829972 0.18656139 0.11900865 -0.20075807 0.37756379 0.12182127
4    0.41005165 -0.22232814]
5  [ 0.86540763 -0.52817175 -2.3015387 -0.61175641 -0.7612069 0.3190391
6   -1.07296862 1.62434536]]
7 [ True  True False  True  True  True False  True  True  True]
```

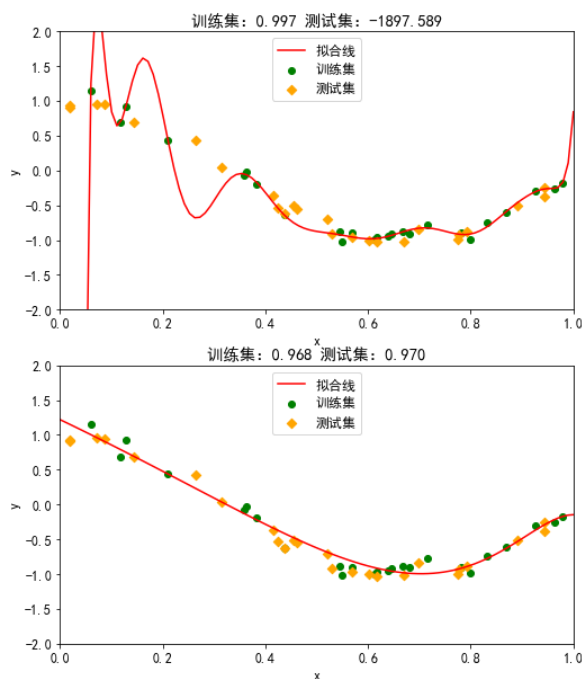
解决过拟合

现在，我们分别使用三种正则化方式，尝试解决过拟合问题。

```
1 from sklearn.linear_model import ElasticNet
2 # 将字体改回中文字体。
3 plt.rcParams["font.family"] = "SimHei"
4
5 np.random.seed(0)
6 x = np.random.rand(50)
7 y = true_fun(x) + np.random.randn(len(x)) * 0.1
8 X = x[:, np.newaxis]
9 X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.5)
10 models = [("线性回归（无正则化）", LinearRegression()), ("L1正则化: ", Lasso(alpha=0.02)),
11          ("L2正则化", Ridge(alpha=0.02)), ("弹性网络", ElasticNet(alpha=0.02,
12                                l1_ratio=0.5))]
12 plt.figure(figsize=(18, 10))
```

```
13 for i, (name, model) in enumerate(models):
14     plt.subplot(2, 2, i + 1)
15     pipe = Pipeline([("poly", PolynomialFeatures(degree=15, include_bias=False)),
16                     ("model", model)])
17     fit_and_plot(pipe)
18     print(model.coef_)
```

```
1 [ 2.07071311e+04 -4.97833841e+05  6.76423888e+06 -5.85834707e+07
2   3.45651499e+08 -1.44778371e+09  4.41812369e+09 -9.97113468e+09
3   1.67390055e+10 -2.08331288e+10  1.89560333e+10 -1.22494207e+10
4   5.32316771e+09 -1.39466930e+09  1.66452216e+08]
5 [-2.28050995 -0.         0.         0.         0.         0.
6   1.37135264  0.         0.         0.         0.         0.
7   0.         0.         0.         ]
8 [-3.54177497 -0.98692712  0.47117231  0.99378303  1.03351056  0.86683848
9   0.63550359  0.40472689  0.20025764  0.02892467 -0.11067832 -0.22293056
10  -0.31276194 -0.38465655 -0.4423375 ]
11 [-1.86165016 -0.2996501  -0.         0.         0.01961693  0.20690235
12   0.27988858  0.28810391  0.26055212  0.21407932  0.15841395  0.09914914
13   0.0394854   0.         0.         ]
```



课堂练习

以下说法错误的是 ()。

- A α 值越小, Lasso 越倾向产生更多值为 0 的权重。
- B Lasso 可以实现特征选择。
- C Ridge 具有更好的稳定性。
- D Elastic Net 与 Lasso 都可能产生稀疏解。

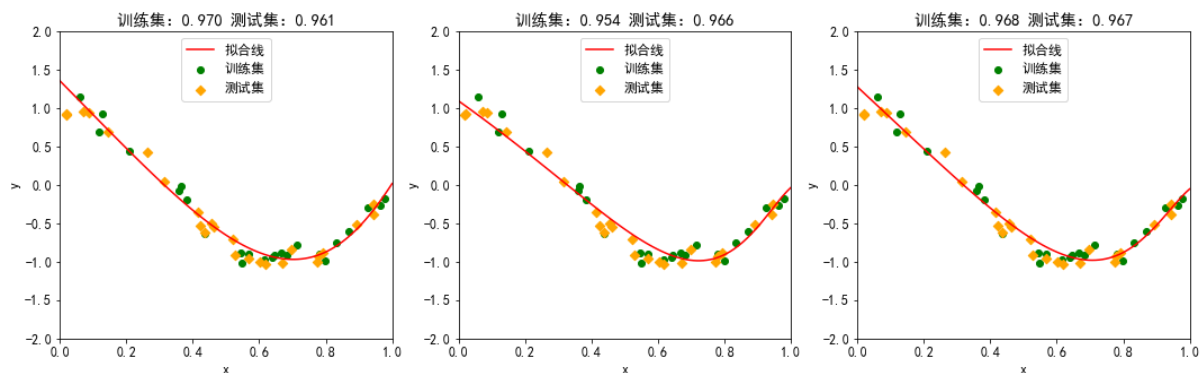
交叉验证调整超参数

通过刚才的示例, 我们可知, 通过正则化, 已经有效的缓解了过拟合, 不过, 刚才示例中, 超参数 α 的取值是比较随意的, 如果使用合适的 α 值, 或许还能够提高模型的效果。这里, 我们可以使用交叉验证来调整参数 α 的取值。

在sklearn中，提供了LassoCV, RidgeCV与ElasticNetCV类，可以用来交叉验证。

```
1 from sklearn.linear_model import LassoCV, RidgeCV, ElasticNetCV
2
3 alphas = [0.001, 0.005, 0.01, 0.05, 0.1, 0.5]
4 models = [("L1正则化: ", LassoCV(max_iter=5000)), ("L2正则化", RidgeCV()),
5           ("弹性网络", ElasticNetCV(l1_ratio=0.5))]
6 plt.figure(figsize=(18, 5))
7 for i, (name, model) in enumerate(models):
8     plt.subplot(1, 3, i + 1)
9     pipe = Pipeline([("poly", PolynomialFeatures(degree=15)), ("model", model)])
10    # 将模型设置为10折交叉验证，其实在models中，各个模型的构造器中，可以指定cv=10,但是需要三个都指
    定。
11    # 这里在循环中，只需要使用一行代码就可以了。
12    pipe.set_params(model__cv=10)
13    pipe.set_params(model__alphas=alphas)
14    fit_and_plot(pipe)
15    # 输出最佳的超参数alpha。
16    print(name, model.alpha_)
```

```
1 L1正则化: 0.001
2 L2正则化 0.05
3 弹性网络 0.001
```



拓展点

- Lasso回归容易产生稀疏解的原因。

总结

- 欠拟合与过拟合的现象。
- 欠拟合与过拟合的解决方案。
- 多项式扩展。
- 正则化。

作业

1. 对波士顿房价采用多项式扩展，是否可以提高训练集的回归效果。
2. 训练之后，是否也会提高测试集的效果呢？