基于逻辑回归的分类问题——以鸢尾花分类为例

董明辉 20342006 （微电子科学与技术学院）

Saturday 8th January, 2022

目录

1 原理

1.1 逻辑回归

逻辑回归又叫对数几率回归，是一种广义的线性回归分析模型。虽然名字里有回归，但其实是分类模型，常用于二分类。

逻辑回归的原理是用逻辑函数把线性回归结果 $(-\infty, \infty)$ 映射到 $(0, 1)$。

1.1.1 线性回归函数

线性回归函数的数学表达式:

$$y = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \cdots + \theta_n x_n = \theta^\mathsf{T} x \tag{1}$$

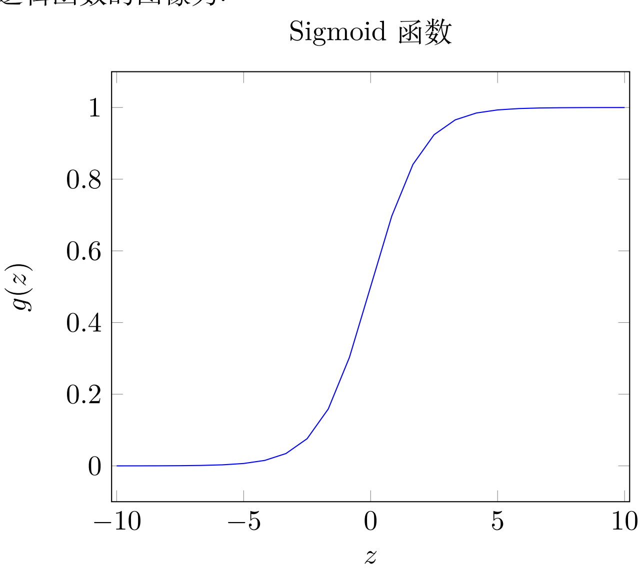
其中 x_i 是自变量，y 是因变量，y 的值域为 $(-\infty, \infty)$，θ_0 是常数项，$\theta_i (i = 1, 2, \cdots, n)$ 是待求系数，不同的权重 θ_i 反映了自变量对因变量不同的贡献程度。

1.1.2 逻辑函数 (Sigmoid 函数)

逻辑函数的数学表达式为:

$$g(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}} \tag{2}$$

逻辑函数的图像为:



从 Sigmoid 函数的图像中我们可以看出当 z 趋于 $-\infty$ 时，$g(z)$ 趋于 0, 当 z 趋于 ∞ 时，$g(z)$ 趋于 1，且函数的值域为 $(0, 1)$，而概率也是介于 0 到 1 的数，因此我们可以将 Sigmoid 函数的值域与概率联系起来。

逻辑函数的导函数:

逻辑函数的表达式为:

$$g(y) = \frac{1}{1 + e^{-y}} = \frac{e^y}{1 + e^y} \tag{3}$$

导函数为:

$$g'(y) = \frac{e^y(1+e^y) - y * e^y}{(1+e^y)^2} \tag{4}$$

经过变换我们可以得到:

$$g'(y) = g(y) * [1 - g(y)] \tag{5}$$

1.1.3 逻辑回归函数

将线性回归函数的结果 y, 放到 Sigmoid 函数中去，就构成了逻辑回归函数，即:

$$g(y) = \frac{1}{1+e^{-y}} = \frac{1}{1+e^{-(\theta_0+\theta_1 x_1+\cdots+\theta_n x_n)}} = \frac{1}{1+e^{-\theta^\intercal x}} \tag{6}$$

以鸢尾花为例，鸢尾花的特征即为(6)中的 x，我们可以这些样本数据训练逻辑回归模型，求解得到 x 的参数 θ。

1.2 求解逻辑回归中的参数

1.2.1 极大似然函数

以二分类为例，令山鸢尾的标签为 0，杂色鸢尾的标签为 1，根据(6) 得到杂色鸢尾的概率为:

$$p(Y=1|x) = \frac{1}{1+e^{-\theta^\intercal x}} \tag{7}$$

相应的山鸢尾的概率为:

$$p(Y=0|x) = 1 - p(Y=1|x) = 1 - \frac{1}{1+e^{-\theta^\intercal x}} = \frac{1}{1+e^{\theta^\intercal x}} \tag{8}$$

再令:

$$\frac{1}{1+e^{-\theta^\intercal x}} = g(y) = g_\theta(x) \tag{9}$$

则杂色鸢尾花的后验概率可写为:

$$p(Y=1|x) = g_\theta(x) \tag{10}$$

山鸢尾的后验概率可写为:

$$p(Y=0|x) = 1 - g_\theta(x) \tag{11}$$

对于一个鸢尾花的样本数据 (x, y)，它的标签是 y 的概率为:

$$p(y|x;\theta) = (g_\theta(x))^y (1-g_\theta(x))^{1-y} \tag{12}$$

其中 $y \in 0, 1$。当 $y=0$ 时，(12)表示山鸢尾的概率；当 $y=1$ 时，表示杂色鸢尾的概率。

当有 m 个观测样本时，合事件发生的总概率为每个样本发生的概率相乘，即为似然函数，可以写成:

$$L(\theta) = \prod_{i=1}^{m} p(y_i|x_i;\theta) = \prod_{i=1}^{m} (g_\theta(x_i))^{y_i} (1-g_\theta(x_i))^{1-y_i} \tag{13}$$

其中 θ 为待求参数。

为了方便求解，引入不改变函数单调性的对数 ln, 把连乘变成求和，得到对数似然函数:

$$l(\theta) = \ln(L(\theta)) = \sum_{i=1}^{m} \ln(p(y_i|x_i;\theta)) = \sum_{i=1}^{m}(y_i \ln(g_\theta(x_i)) + (1-y_i)\ln(1-g_\theta(x_i))) \tag{14}$$

到这里，我们可以由对数似然函数构造损失函数，用梯度下降法求出使得损失最小的参数 θ。

1.2.2 构造损失函数

结合逻辑回归中的极大似然函数，取整个数据集上的平均对数似然损失，我们可以得到:

$$J(\theta) = -\frac{1}{m}\ln(L(\theta)) \tag{15}$$

其中 $J(\theta)$ 为损失函数，由对数似然函数前面加负号取平均得到。

因此, 在逻辑回归模型中，最大化似然函数和最小化损失函数实际上是等价的，即:

$$\max \ln(L(\theta)) \Leftrightarrow \min J(\theta) \tag{16}$$

至此，可由梯度下降法求解得到损失函数最小所对应的参数 θ。

1.2.3 梯度下降法

梯度下降法的基本思想是:

1. 明确现在所处的位置;
2. 找到该处下降最快的方向，即梯度相反的方向;
3. 沿着梯度相反方向走一个步长，到达新的位置;
4. 判断是否梯度为零，如果没有则重复步骤一，否则如果达到则停止。

由损失函数(15)可知:

$$J(\theta) = -\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(y_i \ln(g_\theta(x_i)) + (1-y_i)\ln(1-g_\theta(x_i))) \tag{17}$$

对损失函数求偏导可得:

$$\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_j} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}[g(\theta^\intercal x_i) - y_i] * x_i^j \tag{18}$$

至此，找到了梯度下降的方向，只要给定一个步长就可以用迭代的方式求解出待求参数 θ。

1.3 利用二分类实现多分类

利用二分类实现三分类的方法是**使用多次二分类**。

以鸢尾花为例，设山鸢尾的标签为 1，其余两种鸢尾花的标签为 0，利用样本数据得到一个模型 1，该模型可用来预测测试样本是鸢尾花的概率。同理，再分别令杂色鸢尾，维吉尼亚鸢尾的标签为 1，其余两种鸢尾花标签为 0。用同样的样本训练得到模型 2，模型 3。最后，将测试样本分别通过模型 1，模型 2，模型 3 得到分别是山鸢尾、杂色鸢尾、维吉尼亚鸢尾的概率，最大的概率所对应的就是预测的该样本的类型。

2 代码实现

基于以上原理，可以利用 Python 来实现以上逻辑回归分类。

2.1 LogisticRegressionSelf 类

首先，我们先构造一个包含逻辑回归模型的类，类中包括参数 θ，训练模型的函数，做出预测的函数。

完整代码见附录。

导入 numpy 包：

```
import numpy as np
```

创建类和初始化函数：

```
class LogisticRegressionSelf:
    def __init__(self):
        """初始化LogisticpegressionSelf模型"""
        self.coef_ = None #维度
        self.intercept_ = None #截距
        self._theta = None
```

根据(3)构造 Sigmoid 函数：

```
    def _sigmoid(self, x):
        y = 1.0 / (1.0 + np.exp(-x))
        return y
```

构造训练模型的函数，包括损失函数 $J(\theta)$，损失函数的导数 $dJ(\theta)$，模拟梯度下降的函数。

```
    def fit(self, X_train, y_train, eta=0.01, n_iters=1e4):
        assert X_train.shape[0] == y_train.shape[0], '训练数据集的长度需要和标签长度保持一致'
        #计算损失函数
        def J(theta, X_b, y):
            p_predcit = self._sigmoid(X_b.dot(theta))
            try:
                return -np.sum(y * np.log(p_predcit) +
                        (1 - y) * np.log(1 - p_predcit)) / len(y)
```

```
        except:
            return float('inf')
    #求sigmoid梯度的导数
    def dJ(theta, X_b, y):
        x = self._sigmoid(X_b.dot(theta))
        return X_b.T.dot(x - y) / len(X_b)
    #模拟梯度下降
    def gradient_descent(X_b,y,initial_theta,eta,n_iters=1e4,epsilon=1e-8):
        theta = initial_theta
        i_iter = 0
        while i_iter < n_iters:
            gradient = dJ(theta, X_b, y)
            last_theta = theta
            theta = theta - eta * gradient
            i_iter += 1
            if (abs(J(theta, X_b, y) - J(last_theta, X_b, y)) < epsilon):
                break
        return theta
    X_b = np.hstack([np.ones((len(X_train), 1)), X_train])
    initial_theta = np.zeros(X_b.shape[1]) #列向量
    self._theta = gradient_descent(X_b, y_train, initial_theta, eta,n_iters)
    self.intercept_ = self._theta[0] #截距
    self.coef_ = self._theta[1:] #维度
    return self
```

构造概率预测函数以及根据概率实现二分类的函数:

```
def predict_proba(self, X_predict):
    X_b = np.hstack([np.ones((len(X_predict), 1)), X_predict])
    return self._sigmoid(X_b.dot(self._theta))
def predict(self, X_predict):
    proba = self.predict_proba(X_predict)
    return np.array(proba > 0.5, dtype='int')
```

2.2 主程序

上述代码已经构造了逻辑回归需要用到的模型，接下来在主程序中导入逻辑分类所需要的数据，划分训练集，测试集，并进行数据可视化。

导入需要用到的包:

```
import matplotlib.pyplot as plt#可视化用
import numpy as np
from sklearn.datasets import load_iris#训练和测试所用数据
from LogisticRegressionSelf import LogisticRegressionSelf#逻辑回归类
```

导入数据:

```
iris = load_iris()
```

对导入的数据进行可视化处理:

```
##取100个样本，取前两列特征，花萼长度和宽度
x = iris.data[0:150, 0:2]
y = iris.target[0:150]
##分别取前两类样本，0和1
samples_0 = x[y == 0, :] #把y=0的样本取出来
samples_1 = x[y == 1, :]
samples_2 = x[y == 2, :]
# 散点图可视化
p1 = plt.scatter(samples_0[:, 0], samples_0[:, 1], marker='o', color='g')
p2 = plt.scatter(samples_1[:, 0], samples_1[:, 1], marker='o', color='r')
p3 = plt.scatter(samples_2[:, 0], samples_2[:, 1], marker='o', color='b')
plt.xlabel(iris.feature_names[0])
plt.ylabel(iris.feature_names[1])
plt.legend([p1, p2, p3], iris.target_names[0:3], loc='upper right')
plt.grid()
```

得到的图像如下所示:

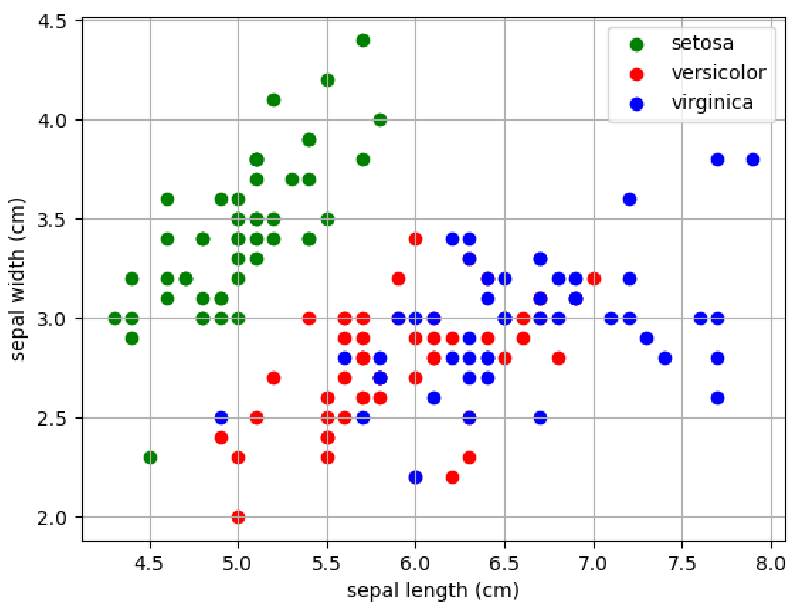


图 1: 导入的数据

划分测试/训练数据，120 个训练数据，30 个测试数据:

```
x_train = np.vstack([x[:40, :], x[50:90], x[100:140]])
y_train = np.concatenate([y[:40], y[60:100], y[100:140]])
x_test = np.vstack([x[40:50], x[90:100], x[140:]])
```

```
y_test = np.concatenate([y[40:50], y[90:100], y[140:]])
```

训练得到 3 个模型，分别预测样本为山鸢尾、杂色鸢尾、维吉尼亚鸢尾的概率:

```
z_proba = []
lr = []
for i in range(3):
   lr.insert(i, LogisticRegressionSelf())
   lr[i].fit(x_train, np.where(y_train == i, 1, 0),n_iters=1e5)
```

将样本数据输入到概率预测函数，得到三组概率，取概率最大的为该样本作为该样本的类型:

```
for i in range(3):
    z_proba.insert(i, lr[i].predict_proba(x_test))

num_test = x_test.shape[0]
prediction = np.argmax(z_proba, axis=0)#返回每一列最大值的索引
accuracy = np.sum(prediction == y_test) / num_test
print(r'the accuracy of prediction is :', accuracy)
```

输出为:the accuracy of prediction is : 0.8
可视化处理:

```
nx, ny = 1000, 500
x_min, x_max = plt.xlim()
y_min, y_max = plt.ylim()
x_grid, y_grid = np.meshgrid(np.linspace(x_min, x_max, nx),
                   np.linspace(y_min, y_max, ny))

for i in range(3):
   z_proba[i] = lr[i].predict_proba(np.c_[x_grid.ravel(), y_grid.ravel()])

z_prediction = np.argmax(z_proba, axis=0)
z_prediction = z_prediction[:].reshape(x_grid.shape)

# plt.contour(x_grid,y_grid,z_prediction,colors=['k'])
plt.contourf(x_grid,y_grid,z_prediction,2,alpha=0.3,colors=['g','r','b'])
plt.show()
```

3 结果

终端输出为:the accuracy of prediction is : 0.8
分类效果如下图2所示

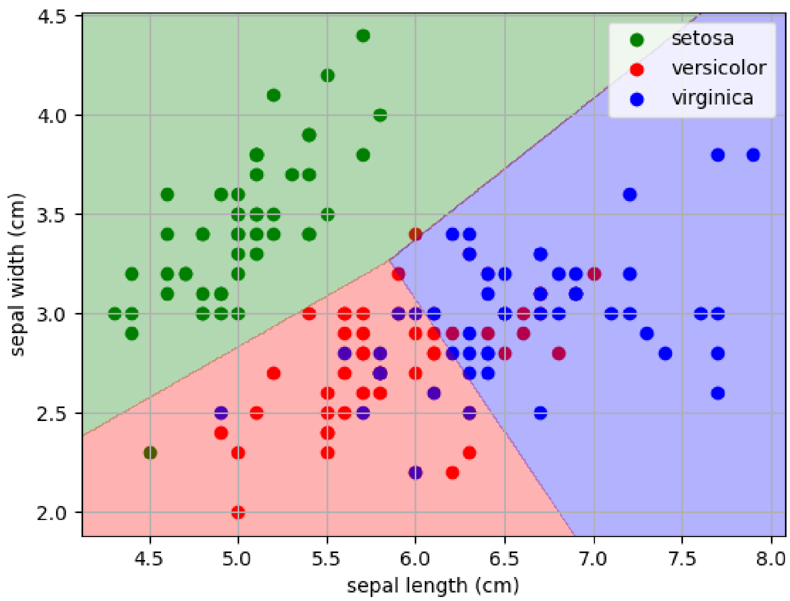


图 2: 鸢尾花逻辑回归分类效果

4 附录 (完整代码)

LogisticRegressionSelf 类代码:

```
#LogisticRegressionSelf.py
import numpy as np


class LogisticRegressionSelf:

    def __init__(self):
        """初始化LogisticpegressionSelf模型"""
        self.coef_ = None #维度
        self.intercept_ = None #截距
        self._theta = None

    #sigmoid函数，私有化函数
    def _sigmoid(self, x):
        y = 1.0 / (1.0 + np.exp(-x))
        return y

    def fit(self, X_train, y_train, eta=0.01, n_iters=1e4):
        assert X_train.shape[0] == y_train.shape[0],
            '训练数据集的长度需要和标签长度保持一致'
```

```
        #计算损失函数
        def J(theta, X_b, y):
            p_predcit = self._sigmoid(X_b.dot(theta))
            try:
                return -np.sum(y * np.log(p_predcit) +
                               (1 - y) * np.log(1 - p_predcit)) / len(y)
            except:
                return float('inf')

        #求sigmoid梯度的导数
        def dJ(theta, X_b, y):
            x = self._sigmoid(X_b.dot(theta))
            return X_b.T.dot(x - y) / len(X_b)

        #模拟梯度下降
        def gradient_descent(X_b,
                             y,
                             initial_theta,
                             eta,
                             n_iters=1e4,
                             epsilon=1e-8):
            theta = initial_theta
            i_iter = 0
            while i_iter < n_iters:
                gradient = dJ(theta, X_b, y)
                last_theta = theta
                theta = theta - eta * gradient
                i_iter += 1
                if (abs(J(theta, X_b, y) - J(last_theta, X_b, y)) < epsilon):
                    break
            return theta

        X_b = np.hstack([np.ones((len(X_train), 1)), X_train])
        initial_theta = np.zeros(X_b.shape[1]) #列向量
        self._theta = gradient_descent(X_b, y_train, initial_theta, eta,
                                       n_iters)
        self.intercept_ = self._theta[0] #截距
        self.coef_ = self._theta[1:] #维度
        return self

    def predict_proba(self, X_predict):
        X_b = np.hstack([np.ones((len(X_predict), 1)), X_predict])
        return self._sigmoid(X_b.dot(self._theta))

    def predict(self, X_predict):
        proba = self.predict_proba(X_predict)
```

```python
        return np.array(proba > 0.5, dtype='int')
```

主程序代码:

```python
#main.py
import matplotlib.pyplot as plt#可视化用
import numpy as np
from sklearn.datasets import load_iris#训练和测试所用数据
from LogisticRegressionSelf import LogisticRegressionSelf#逻辑回归类

iris = load_iris()
# iris.feature_names,
# iris.target_names
# iris.data #能特征数据的具体信息
# iris.target #能看每行数据的标签值

##取100个样本，取前两列特征，花萼长度和宽度
x = iris.data[0:150, 0:2]
y = iris.target[0:150]
##分别取前两类样本，0和1
samples_0 = x[y == 0, :] #把y=0的样本取出来
samples_1 = x[y == 1, :]
samples_2 = x[y == 2, :]
# 散点图可视化
p1 = plt.scatter(samples_0[:, 0], samples_0[:, 1], marker='o', color='g')
p2 = plt.scatter(samples_1[:, 0], samples_1[:, 1], marker='o', color='r')
p3 = plt.scatter(samples_2[:, 0], samples_2[:, 1], marker='o', color='b')
plt.xlabel(iris.feature_names[0])
plt.ylabel(iris.feature_names[1])
plt.legend([p1, p2, p3], iris.target_names[0:3], loc='upper right')

################################
# 划分测试/训练数据，120个训练数据，30个测试数据
x_train = np.vstack([x[:40, :], x[50:90], x[100:140]])
y_train = np.concatenate([y[:40], y[60:100], y[100:140]])
x_test = np.vstack([x[40:50], x[90:100], x[140:]])
y_test = np.concatenate([y[40:50], y[90:100], y[140:]])

################################
#创建逻辑回归对象，训练3个模型
z_proba = []
lr = []
for i in range(3):
    lr.insert(i, LogisticRegressionSelf())
    lr[i].fit(x_train, np.where(y_train == i, 1, 0),n_iters=1e5)

################################
```

```python
#测试
for i in range(3):
    z_proba.insert(i, lr[i].predict_proba(x_test))

num_test = x_test.shape[0]
prediction = np.argmax(z_proba, axis=0)#返回每一列最大值的索引
accuracy = np.sum(prediction == y_test) / num_test
print(r'the accuracy of prediction is :', accuracy)

###############################
#可视化
nx, ny = 1000, 500
x_min, x_max = plt.xlim()
y_min, y_max = plt.ylim()
x_grid, y_grid = np.meshgrid(np.linspace(x_min, x_max, nx),
                         np.linspace(y_min, y_max, ny))

for i in range(3):
    z_proba[i] = lr[i].predict_proba(np.c_[x_grid.ravel(), y_grid.ravel()])

z_prediction = np.argmax(z_proba, axis=0)
z_prediction = z_prediction[:].reshape(x_grid.shape)

# plt.contour(x_grid,y_grid,z_prediction,colors=['k'])
plt.contourf(x_grid,y_grid,z_prediction,2,alpha=0.3,colors=['g','r','b'])
plt.show()
```