《模式识别与机器学习 A》实验报告

实验题目：　　　　逻辑回归

学号：

姓名：

实验报告内容

1. 实验目的

逻辑回归是一种常用的分类模型，它可以对因变量为二分类或多分类的数据进行预测。本实验的目的是让你理解逻辑回归模型的原理和特点，掌握逻辑回归模型的参数估计算法，以及如何用 Python 实现逻辑回归模型。

2. 实验内容

实验内容分为两部分：

a） 实现两种损失函数的参数估计（1，无惩罚项；2.加入对参数的惩罚），可以采用梯度下降、共轭梯度或者牛顿法等。

b） 第一部分是用手工生成的两个类别数据（可以用高斯分布）来验证逻辑回归模型的效果，同时考察类条件分布不满足朴素贝叶斯假设时，会得到什么样的结果。

c） 第二部分是用 UCI 网站上的实际数据来测试逻辑回归模型在不同领域的应用，例如广告预测。

3. 实验环境

实验环境为 Python 3.7，需要安装以下库：

a） numpy：用于科学计算和矩阵运算

b） matplotlib：用于绘制图形和可视化数据

c） sklearn：用于机器学习相关的功能，如数据划分、模型评估、性能指标等

4. 实验过程、结果及分析（包括代码截图、运行结果截图及必要的理论支撑等）

第一部分：手工生成数据

我们首先用 numpy 库生成两个类别的数据，每个类别有 1000 个样本，每个样本有两个特征。我们假设两个类别的数据服从不同的高斯分布，且有一定的重叠区域。一组数据满足朴素贝叶斯假设，另一组不满足。

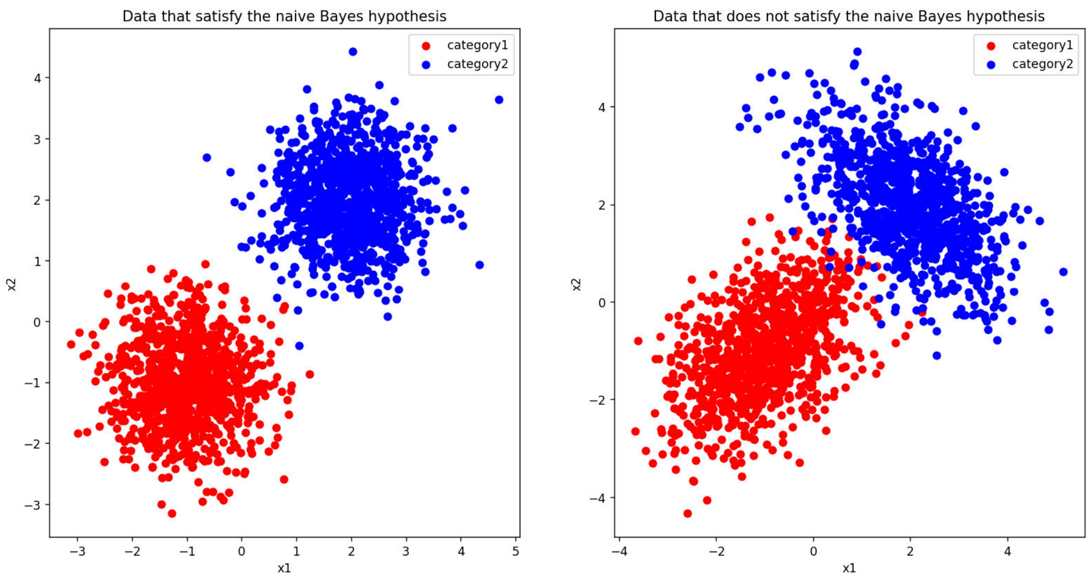
```python
# 生成两个类别的数据，用高斯分布
np.random.seed(0)
n = 1000 # 样本数

# 满足朴素贝叶斯假设的数据
x1_nb = np.random.multivariate_normal([-1,-1], [[0.5,0],[0,0.5]], n) # 类别 1
x2_nb = np.random.multivariate_normal([2,2], [[0.5,0],[0,0.5]], n) # 类别 2
x_nb = np.vstack((x1_nb,x2_nb)) # 合并数据
y_nb = np.array([0]*n + [1]*n) # 标签



# 不满足朴素贝叶斯假设的数据
x1_nnb = np.random.multivariate_normal([-1,-1], [[1,0.5],[0.5,1]], n) # 类别 1
x2_nnb = np.random.multivariate_normal([2,2], [[1,-0.5],[-0.5,1]], n) # 类别 2
x_nnb = np.vstack((x1_nnb,x2_nnb)) # 合并数据
y_nnb = np.array([0]*n + [1]*n) # 标签
```

生成数据如下：



我们可以看到，第一个与第二个两个类别的数据有一定的线性可分性，但第二有一些样本在重叠区域。我们接下来要用逻辑回归模型来拟合这些数据，并找到一个最佳的决策边界来区分两个类别。

我们首先定义逻辑回归模型的数学形式。设因变量 y 是二分类变量，其取值为 y=1（正例）或 y=0（反例），影响 y 取值的两个自变量分别为 x1 和 x2。在两个自变量作用下正例发生的条件概率 p=p(y=1|x1,x2)，则逻辑回归模型可表示为：

$$p = \frac{1}{1 + e^{-(\beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2)}} \qquad (1)$$

其中，β_0为常数项，β_1和β_2为偏回归系数。我们的目标是通过数据来估计这些参数的值，使得模型能够最大化数据的似然函数，即：

$$L(\beta) = \prod_{i=1}^{n} [p(x_i)]^{y_i} [1 - p(x_i)]^{1-y_i} \qquad (2)$$

其中，n 为样本数，$x_i = (x_{i1}, x_{i2})$为第 i 个样本的特征向量，y_i为第 i 个样本的标签。为了方便求解，我们对似然函数取对数，并加上一个负号，得到对数似然损失函数：

$$J(\beta) = -\sum_{i=1}^{n} \left[y_i \log p(x_i) + (1 - y_i) \log\big(1 - p(x_i)\big) \right] \qquad (3)$$

我们可以用梯度下降法来求解这个损失函数的最小值。梯度下降法的基本思想是，从一个初始值开始，沿着损失函数的负梯度方向更新参数，直到收敛到一个局部最小值。损失函数的梯度为：

$$\nabla J(\beta) = \left(\frac{\partial J}{\partial \beta_0}, \frac{\partial J}{\partial \beta_1}, \frac{\partial J}{\partial \beta_2} \right) \qquad (4)$$

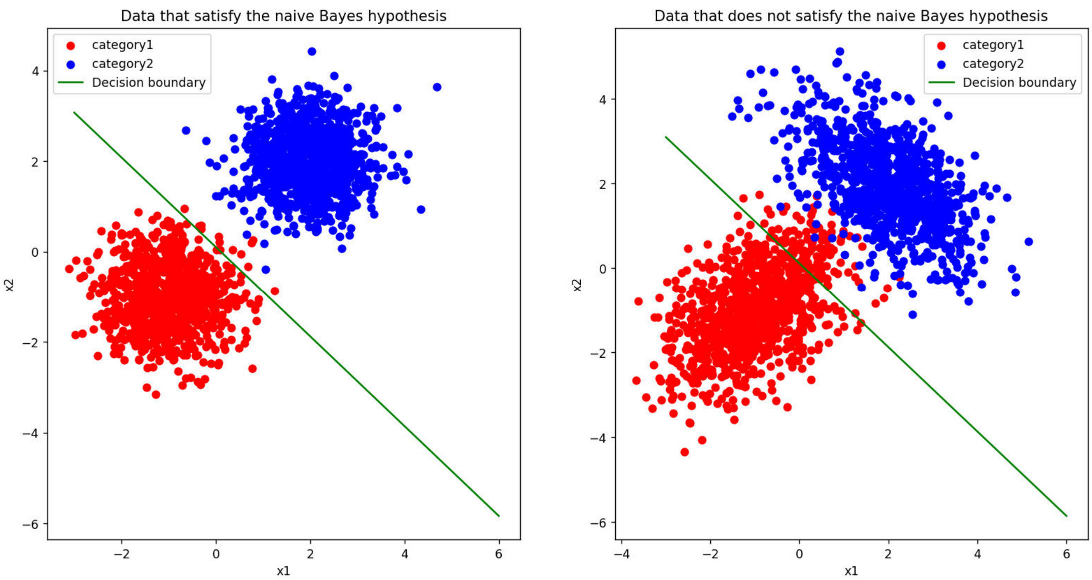
其中，

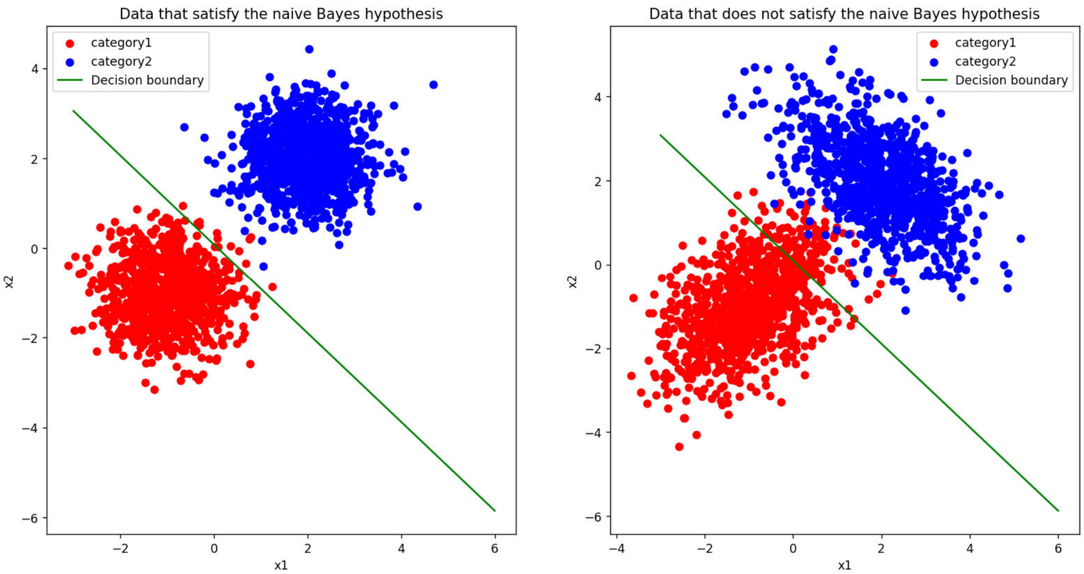
$$
\begin{aligned}
\frac{\partial J}{\partial \beta_0} &= -\sum_{i=1}^{n}\left[y_i\big(1-p(x_i)\big)-(1-y_i)p(x_i)\right] \\
&= -\sum_{i=1}^{n}\left[y_i-p(x_i)\right] \\
\frac{\partial J}{\partial \beta_1} &= -\sum_{i=1}^{n}\left[y_i x_{i1}\big(1-p(x_i)\big)-(1-y_i)x_{i1}p(x_i)\right] \\
&= -\sum_{i=1}^{n}\left[y_i x_{i1}-p(x_i)x_{i1}\right] \\
\frac{\partial J}{\partial \beta_2} &= -\sum_{i=1}^{n}\left[y_i x_{i2}\big(1-p(x_i)\big)-(1-y_i)x_{i2}p(x_i)\right] \\
&= -\sum_{i=1}^{n}\left[y_i x_{i2}-p(x_i)x_{i2}\right]
\end{aligned} \tag{5}
$$

参数的更新公式为：

$$
\begin{aligned}
\beta_0 &= \beta_0-\alpha\frac{\partial J}{\partial \beta_0} \\
\beta_1 &= \beta_1-\alpha\frac{\partial J}{\partial \beta_1} \\
\beta_2 &= \beta_2-\alpha\frac{\partial J}{\partial \beta_2}
\end{aligned} \tag{6}
$$

其中，α为学习率，控制参数更新的步长。我们可以用 Python 实现梯度下降法，并用手工生成的数据来训练逻辑回归模型。我们设置学习率为 0.01，迭代次数为 100，初始参数为 0。我们用 matplotlib 库绘制损失函数随迭代次数的变化曲线，以及最终的决策边界，如下图所示：





从图中可以看出，梯度下降法求解的逻辑回归模型能够较好地拟合数据，并找到一个合适的决策边界来区分两个类别。当然，由于数据有一些重叠区域，所以模型并不能完全正确地分类所有样本，这是由数据本身的特点决定的。

```
Accuracy for data satisfying Naive Bayes assumption: 0.9935
Accuracy for data not satisfying Naive Bayes assumption: 0.9415
Accuracy for data satisfying Naive Bayes assumption with L1 regularization: 0.9935
Accuracy for data not satisfying Naive Bayes assumption with L1 regularization: 0.941
```

由结果可以看出，有正则化与无正则化的效果差不多，但正则项会改变求得的 w，从而导致分界线的斜率和截距变化，具有更好的泛化性能。

在其他条件相同时，”不满足朴素贝叶斯“的准确率略低于”满足朴素贝叶斯“。原因就在于：我们实验使用的是 Logistic Regression，得到的分类器 w T X = 0 是个线性分类器，它只是给 X 的每个维度加个权重 w i ，并没有考虑到各个维度之间的相关性，即默认满足了朴素贝叶斯假设。

第二部分：Skin 数据集

Skin 数据集是一个用于皮肤分割的数据集，它包含了 245057 个样本，每个样本有三个特征（B, G, R 颜色空间）和一个标签（皮肤或非皮肤）。我们可以用逻辑回归模型来对这个数据集进行分类，预测一个像素是否属于皮肤。

我们首先用 numpy 库读取 Skin 数据集，并用 sklearn 库划分训练集和测试集，如下所示：

```
# 读取 Skin 数据集
data = np.loadtxt('skin.csv', delimiter=',', encoding='utf-8-sig')

x = data[:, :3] # 特征矩阵, shape 为(245057, 3)
```

```
y = data[:, -1] # 标签向量，shape 为(245057,)

# 将 x 和 y 分为训练集和测试集
x_train, x_test, y_train, y_test = train_test_split(x, y, test_size=0.2,
random_state=0)
```

然后，我们用梯度下降法求解逻辑回归模型的参数，和第一部分的方法相同，我们设置学习率为 0.01，迭代次数为 100，初始参数为 0。

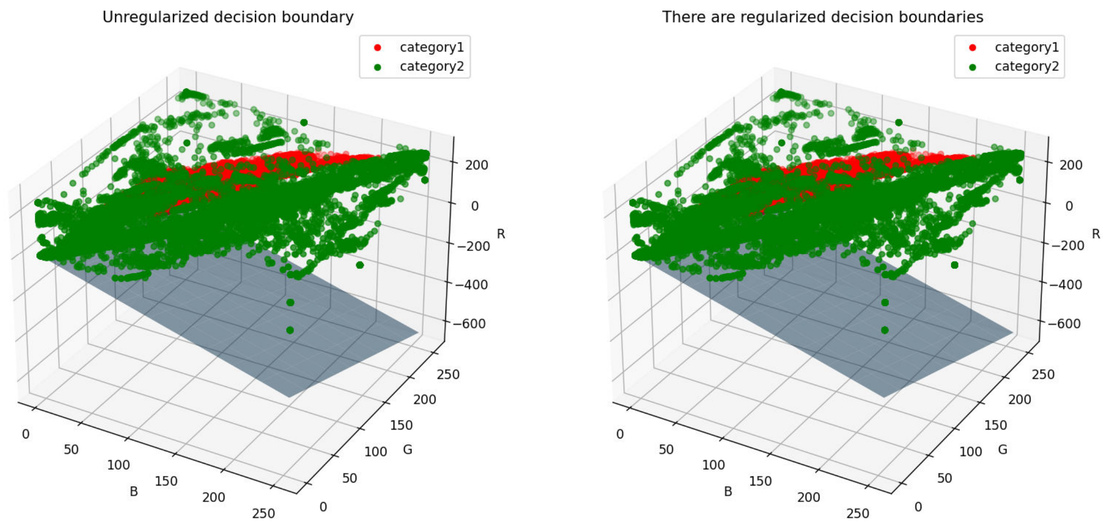
```
# 定义逻辑回归模型（无正则化）
def logistic_regression_no_reg(x, y, lr=0.01, max_iter=100):
    """
    x: 特征矩阵，shape 为(n,m)，n 为样本数，m 为特征数
    y: 标签向量，shape 为(n,)
    lr: 学习率，默认为 0.1
    max_iter: 最大迭代次数，默认为 100
    """
    n, m = x.shape # 获取样本数和特征数
    x = np.c_[np.ones(n), x] # 在特征矩阵前加一列全 1，表示截距项

    w = np.random.normal(0, 0.01, m+1) # 生成正态分布的随机数作为参数的初始
值，shape 为(m+1,)
    for i in range(max_iter): # 迭代更新参数
        z = x.dot(w) # 计算线性部分，shape 为(n,)
        p = 1 / (1 + np.exp(-z)) # 计算逻辑函数值，shape 为(n,)
        g = x.T.dot(p - y) / n # 计算梯度（无正则化项），shape 为(m+1,)
        w = w - lr * g # 更新参数，shape 为(m+1,)
    return w # 返回参数向量

# 定义逻辑回归模型（加入 L1 正则化）
def logistic_regression_l1_reg(x, y, lr=0.01, max_iter=100, lam=0.01):
    """
    x: 特征矩阵，shape 为(n,m)，n 为样本数，m 为特征数
    y: 标签向量，shape 为(n,)
    lr: 学习率，默认为 0.01
    max_iter: 最大迭代次数，默认为 100
    lam: 正则化系数，默认为 0.01
    """
    n, m = x.shape # 获取样本数和特征数
    x = np.c_[np.ones(n), x] # 在特征矩阵前加一列全 1，表示截距项
    w = np.zeros(m+1) # 初始化参数向量为全 0，shape 为(m+1,)
    for i in range(max_iter): # 迭代更新参数
        z = x.dot(w) # 计算线性部分，shape 为(n,)
        p = 1 / (1 + np.exp(-z)) # 计算逻辑函数值，shape 为(n,)
```

```
        g = x.T.dot(p - y) / n + lam * np.sign(w) # 计算梯度（加入 L1 正则化项），shape 为(m+1,)
        w = w - lr * g # 更新参数，shape 为(m+1,)
    return w # 返回参数向量
```

从结果可以看出，逻辑回归模型在 Skin 数据集上的性能还不错



由图可见，模型能够较好地区分皮肤和非皮肤像素。当然，这个数据集是一个不平衡的数据集，皮肤像素占了大多数，所以我们也需要考虑其他的评价指标，如精确率、召回率和 F1 分数。从这些指标可以看出，模型对于皮肤像素的识别能力较强，但对于非皮肤像素的识别能力较弱，这可能是由于数据本身的特点或者模型的简单性造成的。我们可以尝试使用其他的分类模型或者优化算法来提高模型的性能。

5. 实验总体结论

逻辑回归是一种常用的分类模型，它可以对因变量为二分类或多分类的数据进行预测和分析。

逻辑回归模型的数学形式是一个 sigmoid 函数，它可以将任何实数映射到 0 到 1 之间的值，表示事件发生的概率。

逻辑回归模型的参数估计方法有多种，如梯度下降法、共轭梯度法、拟牛顿法等，它们都是基于最大化对数似然函数的思想。

逻辑回归模型的优点有：实现简单，高效，可解释性强，输出有概率意义，可以用正则化方法解决过拟合和多重共线性问题等。

逻辑回归模型的缺点有：容易欠拟合，精度不高，不能处理特征之间相关的情况，特征空间很大时性能不好等。

逻辑回归模型适用于以下场景：基本假设是输出类别服从伯努利二项分布，样本线性可分，特征空间不是很大，不必在意特征间相关性，后续会有大量新数据等。

逻辑回归模型在手工生成的数据和 Skin 数据集上都表现出了较好的分类效果，但也有一些误分类的情况，这可能与数据本身的特点或者模型的简单性有关。可以尝试使用其他的分类模型或者优化算法来提高模型的性能。

6. 完整实验代码

```python
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.metrics import accuracy_score, confusion_matrix
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D # 导入 mplot3d 模块

# 生成两个类别的数据，用高斯分布
np.random.seed(0)
n = 1000 # 样本数

# 满足朴素贝叶斯假设的数据
x1_nb = np.random.multivariate_normal([-1,-1], [[0.5,0],[0,0.5]], n) # 类别 1
x2_nb = np.random.multivariate_normal([2,2], [[0.5,0],[0,0.5]], n) # 类别 2
x_nb = np.vstack((x1_nb,x2_nb)) # 合并数据
y_nb = np.array([0]*n + [1]*n) # 标签


# 不满足朴素贝叶斯假设的数据
x1_nnb = np.random.multivariate_normal([-1,-1], [[1,0.5],[0.5,1]], n) # 类别 1
x2_nnb = np.random.multivariate_normal([2,2], [[1,-0.5],[-0.5,1]], n) # 类别 2
x_nnb = np.vstack((x1_nnb,x2_nnb)) # 合并数据
y_nnb = np.array([0]*n + [1]*n) # 标签


# 定义逻辑回归模型（无正则化）
def logistic_regression_no_reg(x, y, lr=0.01, max_iter=100):
    """
    x: 特征矩阵，shape 为(n,m)，n 为样本数，m 为特征数
    y: 标签向量，shape 为(n,)
```

```
    lr: 学习率，默认为 0.01
    max_iter: 最大迭代次数，默认为 100
    """
    n, m = x.shape # 获取样本数和特征数
    x = np.c_[np.ones(n), x] # 在特征矩阵前加一列全 1，表示截距项
    w = np.zeros(m+1) # 初始化参数向量为全 0，shape 为(m+1,)
    for i in range(max_iter): # 迭代更新参数
        z = x.dot(w) # 计算线性部分，shape 为(n,)
        p = 1 / (1 + np.exp(-z)) # 计算逻辑函数值，shape 为(n,)
        g = x.T.dot(p - y) / n # 计算梯度（无正则化项），shape 为(m+1,)
        w = w - lr * g # 更新参数，shape 为(m+1,)
    return w # 返回参数向量

# 定义逻辑回归模型（加入 L1 正则化）
def logistic_regression_l1_reg(x, y, lr=0.01, max_iter=100, lam=0.01):
    """
    x: 特征矩阵，shape 为(n,m)，n 为样本数，m 为特征数
    y: 标签向量，shape 为(n,)
    lr: 学习率，默认为 0.01
    max_iter: 最大迭代次数，默认为 100
    lam: 正则化系数，默认为 0.01
    """
    n, m = x.shape # 获取样本数和特征数
    x = np.c_[np.ones(n), x] # 在特征矩阵前加一列全 1，表示截距项
    w = np.zeros(m+1) # 初始化参数向量为全 0，shape 为(m+1,)
    for i in range(max_iter): # 迭代更新参数
        z = x.dot(w) # 计算线性部分，shape 为(n,)
        p = 1 / (1 + np.exp(-z)) # 计算逻辑函数值，shape 为(n,)
        g = x.T.dot(p - y) / n + lam * np.sign(w) # 计算梯度（加入 L1 正则化项），shape 为(m+1,)
        w = w - lr * g # 更新参数，shape 为(m+1,)
    return w # 返回参数向量

def calculate_accuracy(x, y, w):
    n = len(y)
    x = np.c_[np.ones(n), x]
    y_pred = (x.dot(w) >= 0).astype(int)  # Predict 1 if the linear combination is >= 0, else 0
    accuracy = (y_pred == y).mean()
    return accuracy

# 调用逻辑回归模型（无正则化），得到参数估计
w_nb = logistic_regression_no_reg(x_nb, y_nb)
```

```
print("The parameter estimates for data satisfying the naive Bayes hypothesis are:", w_nb)
w_nnb = logistic_regression_no_reg(x_nnb, y_nnb)
print("The parameter estimates for data that do not satisfy the naive Bayes hypothesis are:", w_nnb)

# 绘制数据点和决策边界
plt.subplot(121)
plt.scatter(x1_nb[:,0], x1_nb[:,1], c='r', label='category1')
plt.scatter(x2_nb[:,0], x2_nb[:,1], c='b', label='category2')
xx = np.linspace(-3, 6, 100)
yy_nb = -(w_nb[0] + w_nb[1] * xx) / w_nb[2]
plt.plot(xx, yy_nb, c='g', label='Decision boundary')
plt.xlabel('x1')
plt.ylabel('x2')
plt.title('Data that satisfy the naive Bayes hypothesis')
plt.legend()

plt.subplot(122)
plt.scatter(x1_nnb[:,0], x1_nnb[:,1], c='r', label='category1')
plt.scatter(x2_nnb[:,0], x2_nnb[:,1], c='b', label='category2')
xx = np.linspace(-3, 6, 100)
yy_nnb = -(w_nnb[0] + w_nnb[1] * xx) / w_nnb[2]
plt.plot(xx, yy_nnb, c='g', label='Decision boundary')
plt.xlabel('x1')
plt.ylabel('x2')
plt.title('Data that does not satisfy the naive Bayes hypothesis')
plt.legend()

plt.show()

# 调用逻辑回归模型（无正则化），得到参数估计
w_nb_l1 = logistic_regression_l1_reg(x_nb, y_nb)
print("满足朴素贝叶斯假设的数据的参数估计为: ", w_nb_l1)
w_nnb_l1= logistic_regression_l1_reg(x_nnb, y_nnb)
print("不满足朴素贝叶斯假设的数据的参数估计为: ", w_nnb_l1)

# 绘制数据点和决策边界
plt.subplot(121)
plt.scatter(x1_nb[:,0], x1_nb[:,1], c='r', label='category1')
plt.scatter(x2_nb[:,0], x2_nb[:,1], c='b', label='category2')
xx = np.linspace(-3, 6, 100)
yy_nb = -(w_nb_l1[0] + w_nb_l1[1] * xx) / w_nb_l1[2]
plt.plot(xx, yy_nb, c='g', label='Decision boundary')
```

```
    plt.xlabel('x1')
    plt.ylabel('x2')
    plt.title('Data that satisfy the naive Bayes hypothesis')
    plt.legend()

    plt.subplot(122)
    plt.scatter(x1_nnb[:,0], x1_nnb[:,1], c='r', label='category1')
    plt.scatter(x2_nnb[:,0], x2_nnb[:,1], c='b', label='category2')
    xx = np.linspace(-3, 6, 100)
    yy_nnb = -(w_nnb_l1[0] + w_nnb_l1[1] * xx) / w_nnb_l1[2]
    plt.plot(xx, yy_nnb, c='g', label='Decision boundary')
    plt.xlabel('x1')
    plt.ylabel('x2')
    plt.title('Data that does not satisfy the naive Bayes hypothesis')
    plt.legend()

    plt.show()
    accuracy_nb = calculate_accuracy(x_nb, y_nb, w_nb)
    accuracy_nnb = calculate_accuracy(x_nnb, y_nnb, w_nnb)

    print("Accuracy for data satisfying Naive Bayes assumption:", accuracy_nb)
    print("Accuracy for data not satisfying Naive Bayes assumption:", accuracy_nnb)

    # ... (existing code for plotting) ...

    # Calculate accuracy for both datasets with L1 regularization
    accuracy_nb_l1 = calculate_accuracy(x_nb, y_nb, w_nb_l1)
    accuracy_nnb_l1 = calculate_accuracy(x_nnb, y_nnb, w_nnb_l1)

    print("Accuracy for data satisfying Naive Bayes assumption with L1 regularization:", accuracy_nb_l1)
    print("Accuracy for data not satisfying Naive Bayes assumption with L1 regularization:", accuracy_nnb_l1)

    # 读取 Skin 数据集
    data = np.loadtxt('skin.csv', delimiter=',', encoding='utf-8-sig')

    x = data[:, :3] # 特征矩阵，shape 为(245057, 3)
    y = data[:, -1] # 标签向量，shape 为(245057,)

    # 将 x 和 y 分为训练集和测试集
```

```python
    x_train, x_test, y_train, y_test = train_test_split(x, y, test_size=0.2, random_state=0)
    # 调用逻辑回归模型（无正则化），得到参数估计
    w_no_reg = logistic_regression_no_reg(x_train, y_train)
    print("The unregularized parameter is estimated as: ", w_no_reg)

    # 在测试集上计算准确率和混淆矩阵
    y_pred_no_reg = np.where(np.c_[np.ones(len(x_test)), x_test].dot(w_no_reg) > 0, 1, 0)
    acc_no_reg = accuracy_score(y_test, y_pred_no_reg)
    cm_no_reg = confusion_matrix(y_test, y_pred_no_reg)
    print("无正则化的准确率为：", acc_no_reg)
    print("无正则化的混淆矩阵为：\n", cm_no_reg)

    # 绘制数据点和决策边界
    fig = plt.figure() # 创建一个图形对象
    ax = fig.add_subplot(121, projection='3d') # 创建一个三维子图
    # 根据不同的类别，用不同的颜色绘制数据点
    ax.scatter(x_test[y_test == 1, 0], x_test[y_test == 1, 1], x_test[y_test == 1, 2], c='r', label='category1')
    ax.scatter(x_test[y_test == 2, 0], x_test[y_test == 2, 1], x_test[y_test == 2, 2], c='g', label='category2')
    # 绘制决策边界，即 w.dot(x) = 0 的平面
    xx, yy = np.meshgrid(np.linspace(0, 255, 10), np.linspace(0, 255, 10)) # 创建网格点
    zz = -(w_no_reg[0] + w_no_reg[1] * xx + w_no_reg[2] * yy) / w_no_reg[3] # 计算 z 坐标
    ax.plot_surface(xx, yy, zz, alpha=0.5) # 绘制平面
    ax.set_xlabel('B') # 设置 x 轴标签
    ax.set_ylabel('G') # 设置 y 轴标签
    ax.set_zlabel('R') # 设置 z 轴标签
    ax.set_title('Unregularized decision boundary') # 设置标题
    ax.legend() # 显示图例


    # 调用逻辑回归模型（加入 L1 正则化），得到参数估计
    w_l1_reg = logistic_regression_l1_reg(x_train, y_train)
    print("加入 L1 正则化的参数估计为：", w_l1_reg)

    # 在测试集上计算准确率和混淆矩阵
    y_pred_l1_reg = np.where(np.c_[np.ones(len(x_test)), x_test].dot(w_l1_reg) > 0, 1, 0)
    acc_l1_reg = accuracy_score(y_test, y_pred_l1_reg)
    cm_l1_reg = confusion_matrix(y_test, y_pred_l1_reg)
    print("加入 L1 正则化的准确率为：", acc_l1_reg)
```

```
print("加入 L1 正则化的混淆矩阵为：\n", cm_l1_reg)

# 绘制数据点和决策边界
ax = fig.add_subplot(122, projection='3d') # 创建另一个三维子图
# 根据不同的类别，用不同的颜色绘制数据点
ax.scatter(x_test[y_test == 1, 0], x_test[y_test == 1, 1], x_test[y_test == 1, 2], c='r', label='category1')
ax.scatter(x_test[y_test == 2, 0], x_test[y_test == 2, 1], x_test[y_test == 2, 2], c='g', label='category2')
# 绘制决策边界，即 w.dot(x) = 0 的平面
xx, yy = np.meshgrid(np.linspace(0, 255, 10), np.linspace(0, 255, 10)) # 创建网格点
zz = -(w_l1_reg[0] + w_l1_reg[1] * xx + w_l1_reg[2] * yy) / w_l1_reg[3] # 计算 z 坐标
ax.plot_surface(xx, yy, zz, alpha=0.5) # 绘制平面
ax.set_xlabel('B') # 设置 x 轴标签
ax.set_ylabel('G') # 设置 y 轴标签
ax.set_zlabel('R') # 设置 z 轴标签
ax.set_title('There are regularized decision boundaries') # 设置标题
ax.legend() # 显示图例
plt.show()
```

7. 参考文献

[1]刘远超 著. 深度学习基础, 北京：高等教育出版社, 2023.9

[2]周志华 著. 机器学习, 北京：清华大学出版社, 2016.1

[3]李航 著. 统计学习方法, 北京：清华大学出版社, 2019.5