机器学习与深度学习

-逻辑回归



Personal Website: https://www.miaopeng.info/

Email: miaopeng@stu.scu.edu.cn

Github: https://github.com/MMeowhite

Youtube: https://www.youtube.com/@pengmiao-bmm

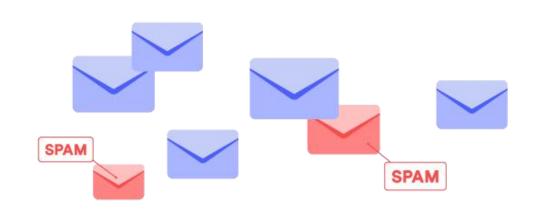
「 目录章节

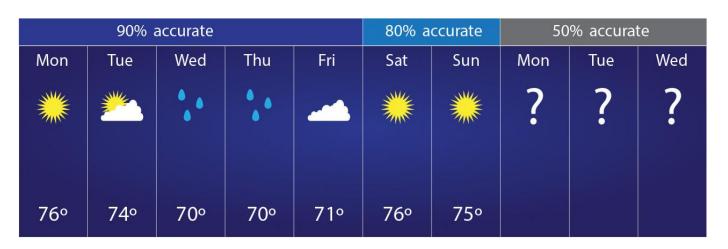
CONTENTS

- 01 逻辑回归的概念与原理
- 02 模型求解与评估
- 03 模型扩展与改进
- 04 模型实现与实战
- 05 总结

▶ 为什么学逻辑回归?

▶ 如何预测天气、垃圾邮件识别、疾病诊断? 【二分类问题: 否/是->0/1】





- 分类任务入门必修:逻辑回归是最经典、最易理解的**二分类**模型(0/1),数学原理清晰,易于初次学习理解。
- 同样通过**回归系数可以解释每个特征对结果的影响大小和方向**,是后续深度模型不可替代的优势。
- 扩展性好,可通过正则化防止过拟合,也能推广到**多分类**(One-vs-Rest、Softmax),同时也为后面学习帮助理解概率预测、最大似然估计、分类决策边界等概念打下基础。

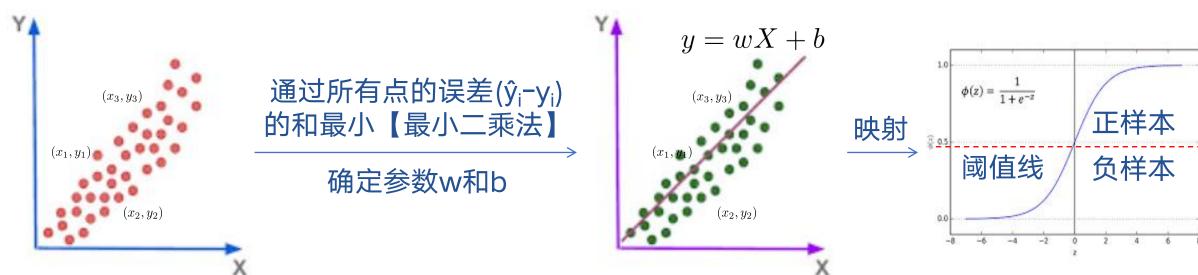
线性回归是机器学习的第二级台阶。

▶ 什么是逻辑回归?

- ➤ 定义:逻辑回归(Logistic Regression)是一种用于分类(尤其是二分类)任务的统计与机器学习模型
- \triangleright 公式:将输入特征的线性组合 $z=\beta_0+\beta_1x_1+\cdots+\beta_nx_n+\epsilon$
 - 通过Sigmoid函数映射到(0, 1)区间:

$$\hat{p} = \sigma(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}}$$

▶ 决策规则:设定阈值(常用 0.5),如果大于阈值最后输出为1(正类),小于阈值最后输出为0(负类)。



▶ 逻辑回归的严谨完整形式

- ▶ 假设我们有一组观测数据,共m个样本,每个样本有n个特征:
 - 第i个样本的输入特征为向量: $\mathbf{x}^{(i)} = [x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \dots, x_n^{(i)}]^T$
 - 对应的目标值为: $y^{(i)}$ 注意y的取值范围为: $y^{(i)} \in \{0,1\}$
- ▶ 我们先通过一个线性模型来拟合这些数据,然后通过sigmoid函数输出分类的概率:

$$z^{(i)} = \beta_0 + \beta_1 x_1^{(i)} + \beta_2 x_2^{(i)} + \dots + \beta_n x_n^{(i)}$$
$$\hat{p}^{(i)} = \sigma(z^{(i)})$$

注: $z^{(i)}$ 表示模型对第i个样本的线性输出值, β_i 表示第i个特征的回归系数, β_0 表示截距, $x^{(i)}$ 表示该样本的第i个特征输入, $p^{(i)}$ 表示输出概率。

- ▶ 由于逻辑回归的输出是一个二元事件发生的概率,而在概率论里如果响应变量只能取两个值P(y=1|x)=p, P(y=0|x)=1-p,最自然的建模方式就是假设它服从伯努利分布(Bernoulli distribution),它正好描述了单次二元试验中"成功"(1)或"失败"(0)的概率。
 - 于是对于m个样本,独立性假设下总似然估计:

$$L(\beta) = \prod_{i=1}^{m} \hat{p}_i^{y_i} (1 - \hat{p}_i)^{1 - y_i}$$

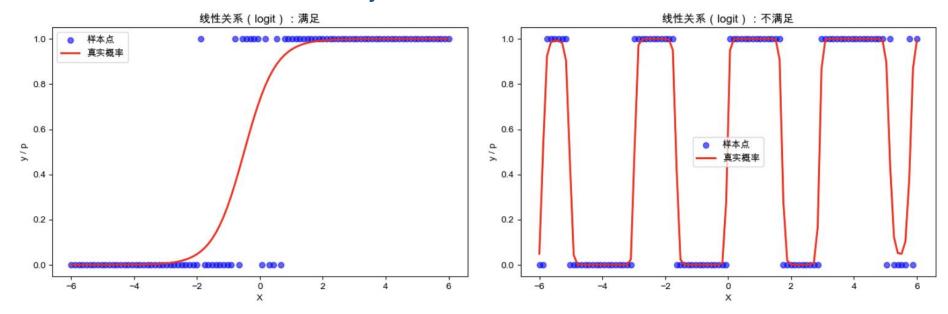
● 取对数之后得到对数似然(log-likelihood):

$$\mathcal{L}(\beta) = \sum_{i=1}^{m} [y_i log(\hat{p}_i) + (1 - y_i) \log(1 - \hat{p}_i)]$$

● 训练的目标就是最大化对数似然,等价于最小化负对数似然(常取平均形式),即:

$$\max_{\beta} \sum_{i=1}^{m} [y_i \log(\hat{p}_i) + (1 - y_i) \log(1 - \hat{p}_i)] \to \min_{\beta} -\frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} [y_i \log(\hat{p}_i) + (1 - y_i) \log(1 - \hat{p}_i)]$$

- 逻辑回归模型的假设类似于线性回归模型的假设,如果不满足以下的假设,那么模型拟合效果肯定不佳:
 - 1) **正确的函数形式**:目标变量y的**对数几率**与自变量之间存在线性关系:



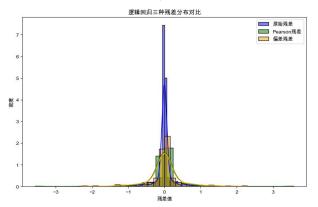
● 根据sigmoid公式,可把概率转换回线性输出,提示需要满足一定的线性关系:

$$\log \frac{P(y=1|X)}{1 - P(y=1|x)} = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_n X_n$$

逻辑回归建立在类似线性回归的假设上,脱离这些假设,模型就失去了它应有的解释力。

▶ 扩展:逻辑回归中的残差

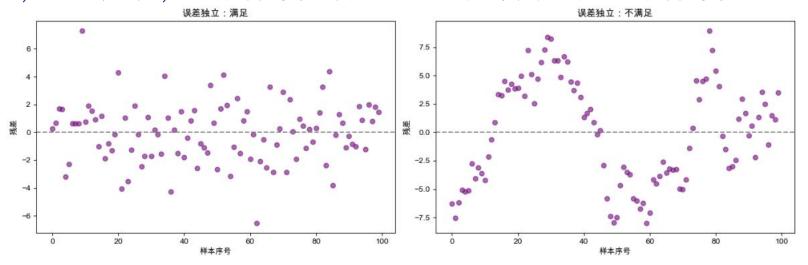
- 在逻辑回归中, 残差不再是"真实值减预测值"这种简单的数值差, 而是对二分类概率预测误差的度量方式。
 - 1) **原始残差(Raw Residual)**: 定义为真实类别(0或1)减去预测概率,反映了模型预测概率与实际结果的直接差异。
 - 2) Pearson残差:原始残差除以伯努利分布的标准差,用于衡量标准化后的偏差大小,方便比较不同样本的残差。
 - 3) **偏差残差(Deviance Residual)**:基于似然函数推导,用于衡量每个样本对整体模型偏差的贡献,在逻辑回归中更常用,因为它与模型的极大似然估计框架一致。



- ◆原始残差(蓝色):是实际标签y与预测概率的差值,分布较为集中,通常在 -1到1之间。
- ◆ Pearson残差(绿色):对原始残差进行了标准化,考虑了概率的方差,分布更宽,能更好反映异常点。
- ◆ 偏差残差(橙色):基于对数似然损失,分布通常更偏斜,能突出模型拟合不好的样本。

逻辑回归的残差是对预测概率与真实分类之间差异的度量,可以用原始残差、标准化的 Pearson残差或基于似然的偏差残差来表示。

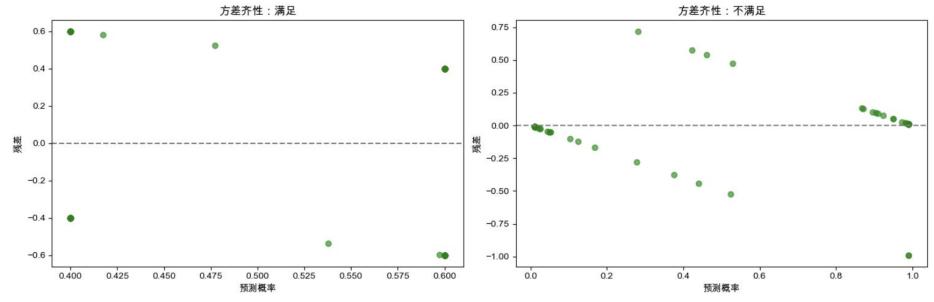
- 逻辑回归模型的假设类似于线性回归模型的假设,如果不满足以下的假设,那么模型拟合效果肯定不佳:
 - 2) **误差独立**: 残差之间不相关。各个样本的残差(预测误差)彼此之间不应存在系统性关联,也就是说,一个样本的预测误差不应该影响另一个样本的误差。



● 时间序列数据误差就会相互影响,例如:股票价格,气温预测,用户行为数据等。

逻辑回归建立在类似线性回归的假设上,脱离这些假设,模型就失去了它应有的解释力。

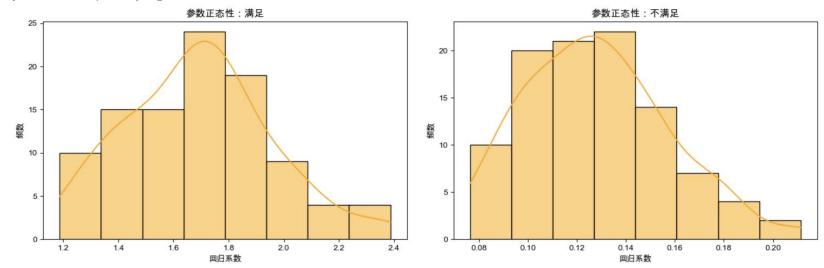
- 逻辑回归模型的假设类似于线性回归模型的假设,如果不满足以下的假设,那么模型拟合效果肯定不佳:
 - 3)**方差齐性**: 残差方差相等。无论预测值大还是小,模型的误差都应该"差不多大"。



● 模型在所有样本上的预测波动要保持一致,例如右图在预测概率较小的时候残差明显较小,但是预测概率越大的时候残差就较大。

逻辑回归建立在类似线性回归的假设上,脱离这些假设,模型就失去了它应有的解释力。

- 逻辑回归模型的假设类似于线性回归模型的假设,如果不满足以下的假设,那么模型拟合效果肯定不佳:
 - 4)正态性: 残差服从正态分布。线性回归模型中的残差(error term)应该服从均值为 0 的正态分布。



● 目的:为了推理和检验;提高模型置信度;小样本场景更敏感。

线性回归建立在一组数学假设上,脱离这些假设,模型就失去了它应有的解释力。

▶ 小结

- ▶ 为什么需要学习逻辑回归?
 - 逻辑回归可作为线性回归的拓展,学习逻辑回归能够帮助我们理解概率建模与分类的基本原理,并为更复杂的机器学习模型打下理论与方法论基础。
- ▶ 什么是逻辑回归?
 - 用是一种用于二分类问题的广义线性模型,它通过对输入特征的线性组合施加 Sigmoid 函数,输出属于某一类别的概率,并以最大似然估计进行参数求解。

$$z^{(i)} = \beta_0 + \beta_1 x_1^{(i)} + \beta_2 x_2^{(i)} + \dots + \beta_n x_n^{(i)} \qquad \mathcal{L}(\beta) = \sum_{i=1}^m [y_i log(\hat{p}_i) + (1 - y_i) \log(1 - \hat{p}_i)]$$

$$\hat{p}^{(i)} = \sigma(z^{(i)}) \qquad \max_{\beta} \sum_{i=1}^m [y_i log(\hat{p}_i) + (1 - y_i) \log(1 - \hat{p}_i)] \rightarrow \min_{\beta} -\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m [y_i log(\hat{p}_i) + (1 - y_i) \log(1 - \hat{p}_i)]$$

- ▶ 模型假设:
 - 线性可加性: X和log(Y)之间是线性关系。
 - 独立性: 观测值之间相互独立。

- 同方差性:误差方差相等。
- 正态性:误差服从正态分布。

线性回归是一种在满足线性、独立、同方差、正态等假设下,用线性方程刻画自变量与 因变量关系的基础预测与分析方法。

「 目录章节

CONTENTS

- 01 线性回归的概念和原理
- 02 模型求解与评估
- 03 模型扩展与改进
- 04 模型实现与实战
- 05 总结

▶ 模型求解的目标: 最小化负对数似然

- ▶ 首先进行数据的统一准备:
 - 记训练集(x_i,y_i),i=1,...,m,每个 $x_i \in R^n$, $y_i \in \{0,1\}$ 。设计矩阵为: $X \in \mathbb{R}^{m \times n}$
 - 线性部分:

$$z_i = x_i^T \beta$$

● Sigmoid映射部分:

$$p_i \equiv \hat{p}_i = \sigma(z_i) = \frac{1}{1 + e^{-z_i}}$$

● 对数似然:

$$\mathcal{L}(\beta) = \sum_{i=1}^{m} [y_i \log p_i + (1 - y_i) \log(1 - p_i)]$$

● 通常将其转换为最小化负对数似然(平均形式或总和形式都可)

$$J(\beta) = -\mathcal{L}(\beta) = -\sum_{i=1}^{m} [y_i \log p_i + (1 - y_i) \log(1 - p_i)]$$

● 求得最小化负对数似然情况下的参数值即为训练的模型:

$$\min_{\beta} - \sum_{i=1}^{m} [y_i \log(p_i) + (1 - y_i) \log(p_i)]$$

▶ 模型求解的方法的基础: 梯度与Hessian

- ▶ 首先第一步是求关键导数,是所有方法的出发点:
 - 对单样本项:

$$\mathcal{L}_i = y_i \log p_i + (1 - y_i) \log(1 - p_i)$$

● 各分量进行求导:

$$\frac{\partial p_i}{\partial z_i} = p_i (1 - p_i) \qquad \frac{\partial z_i}{\partial \beta} = x_i$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}_i}{\partial \beta} = \frac{\partial \mathcal{L}_i}{\partial p_i} \cdot \frac{\partial p_i}{\partial \beta}$$

$$= y_i \frac{1}{p_i} \frac{\partial p_i}{\partial \beta} + (1 - y_i) \frac{1}{1 - p_i} \frac{\partial (1 - p_i)}{\partial \beta}$$

$$= y_i (1 - p_i) x_i - (1 - y_i) p_i x_i$$

$$= (y_i - p_i) x_i$$

➤ 因此总体(负对数似然J的梯度,矩阵形式):

$$\nabla J(\beta) = -\nabla \mathcal{L}(\beta) = \sum_{i=1}^{m} (p_i - y_i) x_i = X^T(p - y)$$

- X为特征矩阵标签: $X^T \in \mathbb{R}^{n \times m}$
- p为各个输出概率: $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_n)^T \in \mathbb{R}^{n \times 1}$
- y为列标签: $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)^T \in \mathbb{R}^{n \times 1}$

▶ 模型求解的方法: 1) 梯度下降法

- ▶ 目标:使用一阶信息(梯度)做迭代优化。
 - 根据之前梯度推导以及梯度下降更新公式(批量梯度下降):

$$\beta^{(t+1)} = \beta^{(t)} - \lambda_t \nabla J(\beta^{(t)}) = \beta^{(t)} - \lambda_t \mathbf{X}^T (\mathbf{p}^{(t)} - \mathbf{y})$$

- 其中: $\mathbf{p^{(t)}} = \sigma(X\beta^{(t)})$, 为步长 (学习率)
- ▶ 复杂度:
 - 每次迭代计算 $\mathbf{p^{(t)}} = \sigma(X\beta^{(t)})$ (O(mn)),然后再乘 $\mathbf{X}^T(\mathbf{p} \mathbf{y})$ (O(mn)),所以复杂度为**O(mn)**
- ➤ SGD/mini-batch: 用单样本或小批次近似梯度,更新为:

$$\beta \leftarrow \beta - \lambda \sum_{i \in \mathcal{B}} (p_i - y_i) x_i$$

- 好处是每步成本低,适合极大数据;缺点是噪声、需要学习率调度(如衰减、动量、Adam 等)。
- 步长选择: 固定步长、逐步衰减、或者线性/Armijo/backtracking 行搜索; 步长太大会发散, 太小会收敛慢。

▶ 模型求解的方法: 2) 牛顿法

- ▶ 核心思想:利用二阶信息(Hessian)做二阶泰勒近似,进行快速(二阶)收敛的更新:
 - Newton更新:

$$\beta^{(t+1)} = \beta^{(t)} - H(\beta^{(t)})^{-1} \nabla J(\beta^{(t)})$$

- Hessian (二阶导) 可根据一阶导再求导可得: $H(\beta) = \nabla^2 J(\beta) = \sum_{i=1}^n p_i (1-p_1) x_i x_i^T = \mathbf{X}^T \mathbf{W} \mathbf{X}$
- 代入:

$$\beta^{(t+1)} = \beta^{(t)} - (\mathbf{X}^T \mathbf{W} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T (\mathbf{p} - \mathbf{y})$$

● IRLS(迭代重加权最小二乘)的等价形式:定义"工作响度"z:

$$z = \mathbf{X}\beta^{(t)} + \mathbf{W}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{p})$$

● 则 Newton 更新等价于解加权最小二乘问题:

$$\beta^{(t+1)} = \operatorname{argmin}_{\beta} \frac{1}{2} (z - \mathbf{X}\beta)^T \mathbf{X} (z - \mathbf{X}\beta)$$

● 其正规方程X™XXβ=X™Z而解为β=(X™XX)⁻¹X™Z。把z展开科研算得到与上面 Newton更新一致。

▶ 模型求解的方法: 3) 拟牛顿法

- ➤ 由于牛顿法需要显式计算并求逆 Hessian,代价大且在高维不实用。拟牛顿法的想法是:用一个容易维护的矩阵Bk(近似Hessian)或它的拟Hk来代替真实Hessian,并逐步更新这个近似矩阵,使其逐步接近真实的Hessian,同时满足重要的约束条件(Secant条件):
 - 由梯度的泰勒展开:

$$\nabla f(x_{k+1}) \approx \nabla f(x_k) + \nabla^2 f(x_k)(x_{k+1} - x_k)$$

● 定义:

$$s_k = s_{k+1} - x_k, \quad y_k = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)$$

● 若B_{k+1}是Hessian的近似,我们希望它满足:

$$B_{k+1}s_k = y_k$$

• 这就是secant方程:表示用 B_{k+1} 能够重现两个点之间梯度的线性变化。对应地,对逆近似 H_{k+1} 则要求:

$$H_{k+1}y_k = s_k$$

对更新形式的约束与选择: 1)满足secant条件; 2)保持对称(Hessian对称); 3)若可能则保持正定(以保证搜索方向为下降方向); 4)更新尽量"最小改变"(即不要无谓地偏离原来信息)

▶ 模型求解的方法: 3) 拟牛顿法

- ➤ BFGS更新(Hessian近似B_{k+1}的形式):
 - 标准的BFGS Hessian近似更新为:

$$B_{k+1} = B_k - \frac{B_k s_k s_k^T B_k}{s_k^T B_k s_k} + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k}$$

● 显然满足对更新形式的约束与选择:即这是对称的;满足secant方程;在 B_k 正定且 y_k T_{S_k} > 0的情况下, B_{k+1} 仍是正定的。

$$s_k = s_{k+1} - x_k, \quad y_k = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)$$

- ➤ BFGS 的逆更新(更常用于实现: 逆 Hessian H_k=B_k-1的更新):
 - 实际实现里通常维护H_k,因为搜索的方向是-H_k∇f_k。其等价的逆更新公式是:

$$H_{k+1} = (I - \rho_k s_k y_k^T) H_k (I - \rho_k y_k s_l^T) + \rho_k s_k s_k^T, \quad \rho_k = \frac{1}{y_k^T s_k}$$

- 这个更新在H_k初始为正定时能保持正定性,且是满足secant条件下的"最小修正"解。
- ▶ 算法主循环:
 - 1.计算搜索方向- $H_k \nabla f_k$ -> 2.更新参数β <- β $H_k \nabla f_k$ -> 3.计算 s_k , y_k 并更新 H_{k+1} ,如此循环直至最后的梯度为0。

▶ 扩展: BFGS更新公式推导

- ▶ 直观出发点与约束:
 - 我们要维护一个对称矩阵Bk作为 Hessian 的近似($B_k = \nabla^2 f$)。
 - 在一次迭代中计算出位移 $S_k = X_{k+1} X_k$ 和梯度增量 $Y_k = \nabla f(X_{k+1}) \nabla f(X_k)$ 。
 - 根据牛顿迭代法,自然要求新的近似Bk+1要求满足secant条件,即: $B_{k+1}s_k=y_k$
 - 同时还希望Bk+1是对称的,并且尽量不偏离之前的Bk(即做尽可能小的修正),且更 新秩尽可能低(便于计算)。
- ➤ 基于上述,假设Bk+1与Bk的差是秩-2(即两个秩-1矩阵之和)的对称修正,写成两个秩-1矩阵之和为,即设:

$$B_{k+1} = B_k + U + V$$

● 我们选择U与V为对称形式的秩-1矩阵(即形如auu^T),并把自然候选选为:

$$U = a(B_k s_k)(B_k s_k)^T, \quad V = b y_k y_k^T$$

● 这样即满足了U, V都是堆成且秩至多为1, U+V的秩至多为2。用向量u=Bksk简记,上式变为:

$$B_{k+1} = B_k + auu^T + by_k y_k^T$$

▶ 扩展: BFGS更新公式推导

- ➤ 下一步我们用secant条件B_{k+1}s_k=y_k来解a, b:
 - 代入secant条件得到:

$$B_{k+1}s_k + au(u^Ts_k) + by_k(y_k^Ts_k) = y_k$$

● 由于u=B_kS_k,因此u^TS_k = S_k^TB_kS_k。记S=S_k^TB_kS_k与Y=y_k^TS_k,代入并整理:

$$u + auS + by_kY = y_k \to (1 + aS)u + bYy_k = y_k$$

- ▶ 这是关于向量u和y_k的线性组合等于y_k。为了让等式在向量空间成立,一个自然且最简单的 选择是让系数满足:
 - 前项消去:

$$1 + aS = 0 \to a = -\frac{1}{S} = -\frac{1}{s_k^T B_k s_k}$$

● 后项使得:

$$bY = 1 \rightarrow b = \frac{1}{Y} = \frac{1}{y_k^T s_k}$$

● 带回U, V的定义, 就得到:

$$B_{k+1} = B_k - \frac{B_k s_k s_k^T B_k}{s_k^T B_k s_k} + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k}$$

▶ 扩展: BFGS更新公式推导

- ▶ B_k是Hessian矩阵(目标函数的二阶导数)的近似矩阵,而H_k是B_k的逆矩阵,叫做逆 Hessian近似矩阵。
 - 利用矩阵求逆更新的Sherman-Morrison-Woodbury公式求H_{k+1}=B_{k+1}-1, 这个公式指明, 对于矩阵更新:

$$A + UCV^T$$

● 其逆矩阵更新为:

$$(A + UCV^{T})^{-1} = A^{-1} - A^{-1}U(C^{-1} + V^{T}A^{-1}U)^{-1}V^{T}A^{-1}$$

➤ 把Bk+1写成Bk加上两个秩一矩阵的差:

$$B_{k+1} = B_k + UCV^T$$

● 其中:

$$U = egin{bmatrix} y_k & B_k s_k \end{bmatrix}$$
 $V = egin{bmatrix} y_k & B_k s_k \end{bmatrix}$ $C = egin{bmatrix} rac{1}{y_k^T s_k} & 0 \ 0 & -rac{1}{s_k^T B_k s_k} \end{bmatrix}$

● 套用Sherman-Morrison-Woodbury公式做矩阵运算,经过代数整理之后,得到:

$$H_{k+1} = \left(I - \frac{s_k y_k^T}{y_k^T s_k}\right) H_k \left(I - \frac{y_k s_k^T}{y_k^T s_k}\right) + \frac{s_k s_k^T}{y_k^T s_k}$$

▶ 模型评估:目标与基本指标

- 逻辑回归的评估目标通常是判断它在真实应用中能否可靠地预测,并且能否在不同场景下 稳定表现:
 - 分类准确性:确保模型能够正确区分正类和负类。
 - 概率预测能力:不仅分类正确,还能输出可信的概率值(如 0.8 代表"非常可能是正类")。
 - 泛化能力: 在新数据上的表现稳定, 避免过拟合。
 - 可解释性: 特征系数和概率输出便于业务理解和使用。
- ▶ 评估的基本指标可分为分类性能和概率质量两大类:
 - 分类性能类指标:包括准确率(Accuracy)、精确率(Precision)、召回率(Recall/Sensitivity)、F1值(Precision和Recall的调和平均)。
 - 概率质量类指标: AUC (Area Under the ROC Curve)、ROC曲线、对数损失(Log Loss)、Brier Score。

逻辑模型评估的核心是验证其分类正确性与概率预测质量,常用指标包括准确率、精确率、有价率、F1、AUC、对数损失等。

▶ 模型评估: 分类性能指标

➤ 分类性能类指标主要依赖于混淆矩阵(Confusion Matrix):

	预测正类	预测负类
实际正类	真阳性,TP	假阴性,FN
实际负类	假阳性,FP	真阴性,TN

◆ 1) 准确率:

$$Accuracy = \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN}$$

- 所有预测中即预测正负类正确的概率。
- ◆ 2) 精确率:

$$Precision = \frac{TP}{TP + FP}$$

- 预测为正的样本中,有多少是真的正类。
- ◆ 3) 召回率:

$$Recall = \frac{TP}{TP + FN}$$

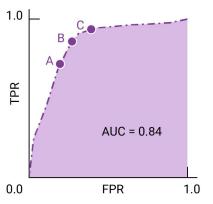
- 实际正类中,有多少被预测对。
- ◆ 4) F1值:

$$F1 = 2 \times \frac{Precision \times Recall}{Precision + Recall}$$

● 平衡精确率与召回率。

▶ 模型评估: 概率质量类指标

- 概率质量类指标主要评估概率预测的好坏。
 - ◆ 1) ROC曲线与AUC (Area Under the ROC Curve):



● 假设判定阈值为t,模型预测概率为p:

$$TPR(t) = \frac{TP(t)}{P} = P(\hat{p} \ge t | Y = 1)$$
$$FPR(t) = \frac{FP(t)}{N} = P(\hat{p} \ge t | Y = 0)$$

ROC曲线函数表达为:

$$ROC: t \mapsto (FPR(t), TPR(t)), \quad t \in [0, 1]$$

- ROC曲线本质上是以假阳性率(FPR)为横轴,真阳性率(TPR)为纵轴绘制的曲线,随着判定阈值(threshold)从高到低变化,计算对应的FPR和TPR点集。
- AUC就是ROC曲线的面积,衡量模型区分正负样本的能力,0.5 为随机水平,1 为完美分类。
- ◆ 2) 对数损失(Log loss):

$$LogLoss = -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} [y_i \log(p_i) + (1 - y_i) \log(1 - p_i)]$$

- 概率越接近真实标签,损失越小。
- ◆ 3) Brier Score: 预测概率与真实标签之间的均方误差

Brier Score =
$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (p_i - y_i)^2$$

● Brier Score 越小,表示预测概率越接近真实结果。它综合考虑了概率的校准(预测概率与真实频率的一致性)和判别能力。

▶ 小结

- ▶ 逻辑回归模型的求解主要包含三种方法:梯度下降法、牛顿法、拟牛顿法。
 - 梯度下降法:通过迭代沿着目标函数负梯度方向更新参数,逐步逼近最优解,计算简单但收敛速度较慢。

$$\beta \leftarrow \beta - \lambda \sum_{i \in \mathcal{B}} (p_i - y_i) x_i$$

● 牛顿法:利用一阶和二阶导数信息直接迭代更新参数,收敛速度快,但需要计算 Hessian 矩阵,代价较高。

$$\beta^{(t+1)} = \beta^{(t)} - (\mathbf{X}^T \mathbf{W} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T (\mathbf{p} - \mathbf{y})$$

● 拟牛顿法: 在牛顿法基础上用近似的 Hessian 替代真实二阶导数,兼顾计算效率与收敛速度。

$$H_{k+1} = \left(I - \frac{s_k y_k^T}{y_k^T s_k}\right) H_k \left(I - \frac{y_k s_k^T}{y_k^T s_k}\right) + \frac{s_k s_k^T}{y_k^T s_k}$$

线性回归可用正规方程法或梯度下降法求解,模型好坏可用 MSE、RMSE 衡量误差大小, 用R²衡量解释能力。

▶ 小结

> 逻辑回归模型的评估主要包含两类指标:分类性能指标和概率质量指标。

 类别	指标名称	公式	说明
分类性能指标	准确率	$Accuracy = \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN}$	正确预测样本数 / 总样本数, 整体正确性。
	精确率	$Precision = \frac{TP}{TP + FP}$	在预测为正类的样本中,真正 为正类的比例 。
	召回率/灵敏度	$Recall = \frac{TP}{TP + FN}$	在实际正类样本中,被正确预 测为正类的比例。
	F1分数	$F1 = 2 \times \frac{Precision \times Recall}{Precision + Recall}$	精确率与召回率的调和平均, 综合考量模型性能。
概率质量指标	ROC-AUC	$\mathrm{ROC}: t \mapsto (\mathrm{FPR}(t), \mathrm{TPR}(t)), t \in [0,1]$	反映模型区分正负样本的能力, 曲线下的面积越大越好。
	对数似然 (Log-Loss)	LogLoss = $-\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} [y_i \log(p_i) + (1 - y_i) \log(1 - p_i)]$	度量预测概率与真实标签的差 异,值越小说明概率预测越准 确。
	Brier Score	Brier Score = $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (p_i - y_i)^2$	预测概率与真实标签之间的均 方误差,越小越好。

线性回归可用正规方程法或梯度下降法求解,模型好坏可用 MSE、RMSE 衡量误差大小,用R²衡量解释能力。

「 目录章节

CONTENTS

- 01 线性回归的概念和原理
- 02 模型求解与评估
- 03 模型扩展与改进
- 04 模型实现与实战
- 05 总结

▶ 模型扩展与改进——正则化

- ➤ 1)岭回归(Ridge Regression):
 - 在损失函数中加入**L2范数**:

$$J(\theta) = -\mathcal{L}(\theta) + \frac{\lambda}{2} ||\theta||_2^2 = -\sum_{i=1}^m [y_i \log p_i + (1 - y_i) \log(1 - p_i)] + \frac{\lambda}{2} \sum_{j=1}^m \beta_j^2$$

- 意义: 防止过拟合,稳定参数估计,使模型更加平滑。
- ▶ 2) Lasso 回归(L1正则):
 - 在损失函数中加入**L1范数**:

$$J(\theta) = -\mathcal{L}(\theta) + \lambda ||\theta||_1 = -\sum_{i=1}^{m} [y_i \log p_i + (1 - y_i) \log(1 - p_i)] + \lambda \sum_{j=1}^{m} \beta_j$$

- 意义:增加参数的稀疏性,做特征选择,适合高维稀疏数据。
- ➤ 3)弹性网回归(Elastic Net)
 - 综合 L1 + L2:

$$J(\theta) = -\mathcal{L}(\theta) + |\lambda_1||\theta||_1 + |\lambda_2||\theta||_2^2$$

● 意义:结合L1和L2,兼顾特征选择和稳定性。

▶ 模型扩展与改进——其他

- ➤ 1)多项逻辑回归(Multinomial Logistic Regression):
 - 假设类别数为K, 样本xi属于第k类的概率为:

$$P(Y_i = k | \mathbf{x}_i) = \frac{\exp(\mathbf{x}_i^T \beta_k)}{\sum_{l=1}^K \exp(\mathbf{x}_i^T \beta_l)}, \quad k = 1, \dots, K$$

- 其中通常固定K=0作为基准类。
- 对应的对数似然为:

$$\mathcal{L}(\beta) = \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} \mathbf{1}_{\{y_i = k\}} \log P(Y_i = k | \mathbf{x}_i)$$

- 应用场景:多类别预测。
- ▶ 2)分层逻辑回归(Hierarchical Logistic Regression):
 - 对不同层次引入随机效应,假设两层:

$$logit(P(Y_{ij} = 1)) = \mathbf{x}_{ij}^T \beta + u_j$$

- i表示第j组中的第i个样本。
- u_i~N(0, σ_u²)为随机效应,捕捉组内相关性
- 参数估计通常用广义线性混合模型(GLMM)方法。

▶ 模型扩展与改进——其他

> 3) 加入交互项和多项式特征:

● 将原始特征向量x扩展为包含交互项和多项式项的新特征向量z【让逻辑回归(本来是线性 决策边界)能够捕捉非线性关系和变量之间的相互作用。】:

$$\mathbf{z} = [x_1, x_2, \cdots, x_d, x_1 x_2, x_1^2, \cdots]$$

● 然后用逻辑回归模型:

$$p = \sigma(\mathbf{z}^T \beta)$$

● 应用场景:特征之间存在相互作用效应;变量与结果是非线性关系;特征影响在某些条件下才显现;提高线性模型的表现而不换模型。

▶ 4)加权逻辑回归:

● 给每个样本一个非负权重w_i,加权对数似然为:

$$\mathcal{L}(\beta) = \sum_{i=1}^{m} w_i [y_i \log p_i + (1 - y_i) \log(1 - p_i)]$$

- 对不同样本赋予不同权重,解决样本不平衡或重要性不同的问题。
- 应用场景: 样本或类别不平衡时采用效果最佳; 成本敏感学习; 样本代表性不同(抽样或调查数据); 处理数据稀疏但重要的样本。

▶ 模型扩展与改进——其他

> 5) 在线学习和增量训练

- 适合大规模数据和流数据,模型能持续更新而非一次性训练。
- 通过逐批更新模型参数,实现持续学习,避免一次性加载全部数据,节省内存并适应数据 分布变化。
- 应用场景: 大规模数据集、持续更新模型等场景。

▶ 6)模型融合与集成

- 将逻辑回归与其他模型(如决策树、随机森林、梯度提升树)结合,提升预测性能。
- 如逻辑回归作为基学习器或用于后续融合。

▶ 7)广义线性模型(GLM)

- 逻辑回归是GLM的一种,可以根据需要选择其他连接函数(如Probit回归)。
- 在输入端仍是线性部分 $\eta=X\beta$,在输出端用链接函数 $g(\mu)=\eta$ 连接不同分布。
- 常用实例:逻辑回归(Logistic Regression):二分类; Poisson 回归:计数数据; Gamma 回归:正值连续变量。

▶ 小结

逻辑回归可通过多种扩展提升性能,包括正则化、多项分类、分层建模、加权训练等,以 适应不同数据特征和任务需求。

▶ 可引入非线性特征、交互项或广义线性模型扩展,增强表达能力并保持可解释性。

▶ 在大规模与流式数据场景下,可采用在线学习、增量训练或与其他模型融合,提升适应性

与预测精度。



逻辑回归可通过正则化、多类别与分层扩展、加权训练、非线性特征、GLM扩展、模型 融合及在线学习等方式增强适应性、表达力与预测性能。

「 目录章节

CONTENTS

- 01 线性回归的概念和原理
- 02 模型求解与评估
- 03 模型扩展与改进
- 04 模型实现与实战
- 05 总结

▶ 算法实现: numpy实现

> 实现: MyLogisticRegression类,第一步: 先定义类及初始化方法及内部(私有_)方法。

```
class MyLogisticRegression:
   def __init__(self, learning_rate=0.01, n_iters=1000,
                fit intercept=True, method="qd",
                alpha=0.0, l1 ratio=0.0):
       self.learning_rate = learning_rate
       self.n iters = n iters
       self.fit_intercept = fit_intercept
       self.method = method
       self.alpha = alpha # 正则化强度
       self.l1_ratio = l1_ratio # L1占比, 0=L2, 1=L1
       self.theta = None
   def add intercept(self, X):
       if self.fit intercept:
           intercept = np.ones((X.shape[0], 1))
           return np.hstack((intercept, X))
       return X
   def _sigmoid(self, z):
       return 1 / (1 + np.exp(-z))
   def _loss(self, theta, X, y):
       z = X @ theta
       y_pred = self._sigmoid(z)
       # 逻辑回归负对数似然
       log_loss = -np.mean(y * np.log(y_pred + 1e-8) + (1 - y) * np.log(1 - y_pred + 1e-8))
       # 正则化项、截距theta[0]不正则化
       reg_l1 = self.alpha * self.l1_ratio * np.sum(np.abs(theta[1:]))
       reg_12 = 0.5 * self.alpha * (1 - self.l1_ratio) * np.sum(theta[1:] ** 2)
       return log_loss + reg_l1 + reg_l2
   def _gradient(self, theta, X, y):
       z = X @ theta
       y pred = self. sigmoid(z)
       error = y_pred - y
       grad = (1 / len(y)) * (X.T @ error)
       # 正则化梯度, 截距theta[0]不正则化
       if self.alpha > 0:
           # L1梯度用次梯度(符号函数),对theta[0]置0
           grad_reg_l1 = self.alpha * self.l1_ratio * np.sign(theta)
           grad_reg_l1[0] = 0
           # L2梯度
           grad_reg_l2 = self.alpha * (1 - self.l1_ratio) * theta
           grad_reg_l2[0] = 0
           grad += grad_reg_l1 + grad_reg_l2
        return grad
```

- 类定义及初始化:可选参数包括学习率、迭代次数、是否加截距、正则化强度alpha和L1比例l1_ration(Elastic Net)。
- _add_intercept方法(_表示私有):用于在特征矩阵前加一列1,实现截距。
- _sigmoid方法(_表示私有): 实现sigmoid函数运算。
- _loss方法(_表示私有): 实现损失函数:

$$J(\theta) = -\mathcal{L}(\theta) + \lambda(\alpha||\theta||_1 + \frac{1}{2}(1-\alpha)||\theta||_2^2)$$

● _gradient方法(_表示私有): 实现梯度计算:

$$\nabla J(\theta) = -\nabla \mathcal{L}(\theta) + \lambda(\alpha \operatorname{sign}(\theta) + (1 - \alpha)||\theta||)$$

▶ 算法实现: numpy实现

➤ 实现: MyLogisticRegression类, 第二步: 实现核心的模型训练方法: fit(X, y)。

```
def fit(self, X, y):
    X = np.array(X)
    v = np.array(v)
    X = self._add_intercept(X)
    self.theta = np.zeros(X.shape[1])
    if self.method == "newton":
        for in range(self.n iters):
           z = X @ self.theta
            y pred = self. sigmoid(z)
           W = np.diag(y_pred * (1 - y_pred))
           # 海森矩阵
            if self.alpha > 0 and self.l1 ratio < 1:
                reg_hessian = self.alpha * (1 - self.l1_ratio) * np.eye(len(self.theta))
            else:
                reg_hessian = 0
            if isinstance(reg_hessian, int):
                H = (1 / len(y)) * (X.T @ W @ X)
            else:
                reg hessian[0, 0] = 0
                H = (1 / len(y)) * (X.T @ W @ X) + reg_hessian
            H_inv = np.linalg.pinv(H)
            self.theta -= self.learning rate * (H inv @ self. gradient(self.theta, X, y))
    elif self.method == "lbfgs":
        from scipy.optimize import minimize
        def loss(theta):
            return self. loss(theta, X, y)
        def grad(theta):
            return self._gradient(theta, X, y)
        result = minimize(loss, self.theta, jac=grad, method='L-BFGS-B')
        self.theta = result.x
    elif self.method == "qd":
        for _ in range(self.n_iters):
           self.theta -= self.learning_rate * self._gradient(self.theta, X, y)
    else:
        raise ValueError("Unsupported optimization method. Use 'newton', 'lbfgs', or 'gd'.")
```

- 数据转换为numpy数组,并加截 距项。
- 根据method参数,选择实现牛顿 法、BFGS法、梯度下降法。
- 牛顿法根据公式更新:

$$\beta^{(t+1)} = \beta^{(t)} - H(\beta^{(t)})^{-1} \nabla J(\beta^{(t)})$$

● L-BFGS根据公式更新,直接采用 封装好的minimize函数:

$$H_{k+1} = \left(I - \frac{s_k y_k^T}{y_k^T s_k}\right) H_k \left(I - \frac{y_k s_k^T}{y_k^T s_k}\right) + \frac{s_k s_k^T}{y_k^T s_k}$$

● 梯度下降法更新:

$$\beta^{(t+1)} = \beta^{(t)} - \lambda_t \nabla J(\beta^{(t)})$$
$$= \beta^{(t)} - \lambda_t \mathbf{X}^T (\mathbf{p}^{(t)} - \mathbf{y})$$

▶ 算法实现: numpy实现

> 实现: MyLogisticRegression类, 第三步: 实现核心的模型预测、评估方法。

```
def predict_proba(self, X):
    X = self._add_intercept(np.array(X))
    return self._sigmoid(X @ self.theta)

def predict(self, X, threshold=0.5):
    proba = self.predict_proba(X)
    return (proba >= threshold).astype(int)

def score(self, X, y):
    y_pred = self.predict(X)
    return np.mean(y_pred == y)
```

● predict_proba方法返回每个样本属于正类(1)的概率。

- predict方法返回每个样本的类别预测(0或1)
- score方法评估模型预测的准确率。

▶ 算法实现: pytorch实现(练习)

➤ 利用Pytorch实现关键步骤:

```
def __init__(self, learning_rate=0.01, n_iters=1800,
             fit_intercept=True, method="gd",
             alpha=0.0, l1 ratio=0.0, device="cpu");
      super(TorchLogisticRegression, self).__init__()
     self.learning_rate = learning_rate
     self.n_iters = n_iters
     self.fit_intercept = fit_intercept
     self.method = method
     self.alpha = alpha # 正則化陽度
     self.ll_ratio = ll_ratio # L1比例
     self.device = device
     self.theta = None # 权重参数 (包括截距)
 def add intercept(self, X):
    if self.fit_intercept:
         intercept = torch.ones((X.shape[0], 1), device=self.device)
         return torch.cat((intercept, X), dim=1)
def _sigmoid(self, z):
return torch.sigmoid(z)
 def _loss(self, y_pred, y, theta):
 def fit(self, X, y):
    X = torch.tensor(X, dtype=torch.float32, device=self.device)
    y = torch.tensor(y, dtype=torch.float32, device=self.device)
    n_features = X.shape[1]
      self.theta = nn.Parameter(torch.zeros(n_features, device=self.device))
         optimizer = optim.SGD([self.theta], lr=self.learning_rate)
         for _ in range(self.n_iters):
            v pred = self. sigmoid(X @ self.theta)
             loss = self._loss(y_pred, y, self.theta)
            loss.backward()
            optimizer.step()
     elif self.method == "lbfgs": # 拟牛顿 L-BFGS
         optimizer = optim.LBFGS([self.theta], lr=self.learning rate, max iter=self.n iters)
            optimizer.zero grad()
            y_pred = self._sigmoid(X @ self.theta)
             loss = self._loss(y_pred, y, self.theta)
            loss.backward()
            return loss
         ontimizer.sten(closure)
      elif self.method == "newton":
         # PvTorch 没有直接封装 IRLS (Newton-Raphson)
         # 这里手写实现: Hessian + gradient
          for _ in range(self.n_iters):
            y_pred = self._sigmoid(X @ self.theta)
            W = torch.diag((y_pred * (1 - y_pred)).detach())
            grad = torch.autograd.grad(self._loss(y_pred, y, self.theta), self.theta)[0]
H_inv = torch.linalg.pinv(H)
              self.theta -= self.learning_rate * (H_inv @ grad)
        raise ValueError("Unsupported method: use 'qd', 'lbfqs', or 'newton'.")
     X = torch.tensor(X, dtype=torch.float32, device=self.device)
    X = self._add_intercept(X)
     return self._sigmoid(X @ self.theta).detach().cpu().numpy()
 def predict(self, X, threshold=0.5):
     proba = self.predict_proba(X)
     return (proba >= threshold).astype(int)
     y_pred = self.predict(X)
     return (v pred == v).mean()
```

● 任务:补充方框中的核心代码部分即可。主要实现 _loss函数即可,这是核心部分

▶ 算法实战:广告点击预测

▶ 如之前一样,首先第一步就是导入数据,并查看数据的情况,决定下一步该干什么。

```
import pandas as pd

# 读取数据
data = pd.read_csv('advertising.csv')

# 查看信息
data.info()
data.head()
```



Robust logistical

Manuel

2016-06-03

● 可以看见没有null数据,但是有几列的数据类型为object,需要转换为OneHot编码。

35 73889.99

▶ 算法实战:房价预测

根据上面的分析,进行数据预处理,并进行数据集划分(训练集、测试集)。

```
from sklearn.preprocessing import OneHotEncoder
from sklearn.model selection import train test split
# 1. 独热编码处理类别变量
encoder = OneHotEncoder(sparse_output=False)
categorical_cols = ['Ad Topic Line', 'City', 'Country', 'Timestamp']
X categorical = encoder.fit transform(data[categorical cols])
data = data.drop(columns=categorical cols)
data = pd.concat([data, pd.DataFrame(X_categorical)], axis=1)
 # 查看编码后的数据结构
data.info()
# 2. 标签与特征分离
X = data.drop(columns=['Clicked on Ad'], axis=1)
X.columns = X.columns.astype(str)
y = data['Clicked on Ad']
# 3. 分割数据集
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.2, random_state=42)
# 查看划分后的形状
print(f"X_train shape: {X_train.shape}, X_test shape: {X_test.shape}")
print(f"y train shape: {y train.shape}, y test shape: {y test.shape}")
```

<class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
RangeIndex: 1000 entries, 0 to 999

Columns: 3212 entries, Daily Time Spent on Site to 3205

dtypes: float64(3209), int64(3)

memory usage: 24.5 MB

X_train shape: (800, 3211), X_test shape: (200, 3211)

y_train shape: (800,), y_test shape: (200,)

● 经过Onehot独热编码之后,新增非常多列,该几列的值全部转换为0/1,并且Null全部被消除,训练机划分数据形状也正常,可以进行下一步。

▶ 算法实战:房价预测

➤ 定义模型进行训练、预测,最后通过**准确率、召回率、F1分数等**指标评估效果。

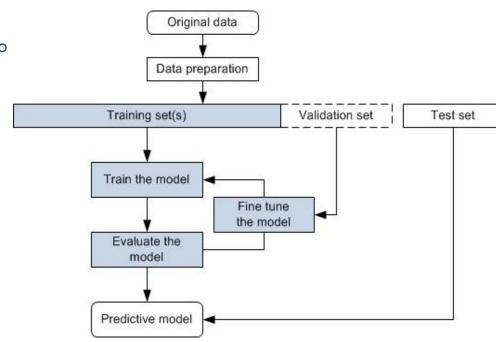
```
# 使用L1正则化的逻辑回归
from sklearn.linear_model import LogisticRegression as SklearnLogisticRegression
model = SklearnLogisticRegression(penalty='l1', solver='liblinear', C=10.0, max iter=1000)
model.fit(X_train, y_train)
acc = model.score(X_test, y_test)
print(f"Sklearn L1 Logistic Regression Accuracy: {acc:.4f}\n")
# 使用L2正则化的逻辑回归
model = SklearnLogisticRegression(penalty='l2', solver='lbfgs', C=10.0, max_iter=1000)
model.fit(X_train, y_train)
acc = model.score(X test, y test)
print(f"Sklearn L2 Logistic Regression Accuracy: {acc:.4f}\n")
# 使用弹性网正则化的逻辑回归
model = SklearnLogisticRegression(penalty='elasticnet', solver='saga',
                                l1_ratio=0.5, C=10.0, max_iter=1000)
model.fit(X train, y train)
acc = model.score(X_test, y_test)
print(f"Sklearn Elastic Net Logistic Regression Accuracy: {acc:.4f}\n")
# random forest回归
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
rf_model = RandomForestClassifier(n_estimators=100, random_state=42)
rf_model.fit(X_train, y_train)
rf acc = rf model.score(X test, y test)
print(f"Random Forest Classifier Accuracy: {rf acc:.4f}\n")
# xgboost回归
from xgboost import XGBClassifier
xgb_model = XGBClassifier(use_label_encoder=False, eval_metric='logloss',
                         n_estimators=100, random_state=42)
xgb_model.fit(X_train, y_train)
xqb acc = xqb model.score(X test, y test)
print(f"XGBoost Classifier Accuracy: {xgb_acc:.4f}\n")
```

```
Sklearn L1 Logistic Regression Accuracy: 0.9500
 /opt/homebrew/anaconda3/envs/ml-dl-fullstack-quide/lib/python3.13/site-pa
STOP: TOTAL NO. OF ITERATIONS REACHED LIMIT.
Increase the number of iterations (max_iter) or scale the data as shown i
     https://scikit-learn.org/stable/modules/preprocessing.html
Please also refer to the documentation for alternative solver options:
     https://scikit-learn.org/stable/modules/linear model.html#logistic-re
__n_iter_i = _check_optimize_result(_ _ _ _ _
Sklearn L2 Logistic Regression Accuracy: 0.9300
/opt/homebrew/anaconda3/envs/ml-dl-fullstack-guide/lib/pvthon3.13/site-pa
<u>warnings.warn(</u>
Sklearn Elastic Net Logistic Regression Accuracy: 0.4450
Random Forest Classifier Accuracy: 0.9400
/opt/homebrew/anaconda3/envs/ml-dl-fullstack-quide/lib/python3.13/site-pa
Parameters: { "use label encoder" } are not used.
_ bst.update(dtrain, iteration=i, fobj=obj)
XGBoost Classifier Accuracy: 0.9350
```

● 可见L1正则化对于该任务的提升效率不大,而比较复杂的模型的拟合效果较好。

▶ 小结

- ▶ 模型实现:
 - 主要的方法:初始化参数(__init__),拟合方法(fit),预测方法(predict),评估指标(score),实现这些方法的私有方法(_xxx)
- ▶ 模型实战:
 - 数据准备:导入数据、清洗缺失值、特征选择/编码。
 - 数据划分: 训练集 / 测试集(常用70%/30% 或80%/20%)。
 - 特征预处理:标准化/归一化/去NULL值/独热 编码等。
 - 模型训练: 1)梯度下降法; 2)牛顿法; 3) 拟牛顿法等。
 - 模型评估:通过准确率,精准率,召回率,F1 分数等进行评估。



逻辑回归类的实现核心是完成参数初始化、在 fit() 中通过不同方法求解模型系数、在 predict() 中计算预测概率和类别标签,通过分类评价指标进行评估。

「 目录章节

CONTENTS

- 01 线性回归的概念和原理
- 02 模型求解与评估
- 03 模型扩展与改进
- 04 模型实现与实战
- 05 总结

▶ 总结

> 逻辑回归的概念与原理

- ✓ 逻辑回归用于处理分类问题,本质是通过Logistic 函数(Sigmoid)将线性组合映射到 [0,1] 的概率空间。
- ✓ 其核心思想建立自变量与因变量属于某一类别的对数几率(logit)之间的线性关系。
- ✓ 模型假设: 1)线性关系(自变量与 logit); 2)独立性; 3)方差齐性; 4)正态分布。

> 逻辑回归的求解与评估

✓ 逻辑回归的参数求解常用三种方法: 1)梯度下降; 2)牛顿法(IRLS); 3)拟牛顿法(如 BFGS)。评估指标分为两类: 分类性能指标: 准确率(Accuracy)、精确率(Precision)、召回率(Recall)、F1-score; 概率质量指标: ROC-AUC、对数似然(Log-Likelihood)、Brier Score等。

> 逻辑回归的扩展与改进

✓ 线性回归的扩展与改进主要有: 1)添加正则项; 2)多分类逻辑回归(One-vs-Rest, Softmax 回归); 3)针对特殊需求发展变种(加权、多项式、在线增量、GLM)等。

逻辑回归通过 sigmoid 函数将线性回归输出映射为概率,实现分类预测,参数可用梯度下降或迭代加权最小二乘法求解,并通过分类与概率指标评估性能,同时可扩展至正则化、多分类与非线性场景以增强适用性。

感谢聆听



Personal Website: https://www.miaopeng.info/

Email: miaopeng@stu.scu.edu.cn

Github: https://github.com/MMeowhite

Youtube: https://www.youtube.com/@pengmiao-bmm