使用 Python 实现对数几率回归模型

天津工业大学 余元强 计算机 1601

一、问题描述

该实验要求编程实现对数几率回归模型，并对 Iris 数据集进行分类以验证模型的效能。另外，题目要求我们完成以下任务：

（1）将数据集的 50%作为训练集，50%作为测试集，检验模型在测试集上的分类正确率；

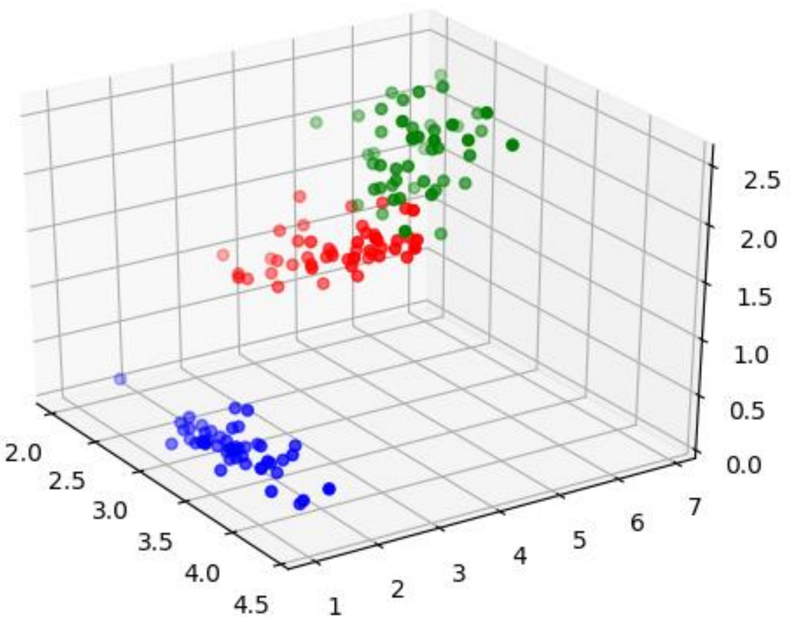
（2）将数据集的 70%作为训练集，30%作为测试集，检验模型在测试集上的分类正确率；

（3）将数据集的 90%作为训练集，10%作为测试集，检验模型在测试集上的分类正确率。

二、数据集描述

Iris 数据集包含 150 个数据集，分为 3 类，每类 50 个数据，每个数据包含 4 个属性。其中 3 个种类分别为 Iris Setosa（山鸢尾）、Iris Versicolour（杂色鸢尾），以及 Iris Virginica（维吉尼亚鸢尾），4 个属性分别为 Sepal.Length（花萼长度），Sepal.Width（花萼宽度）， Petal.Length（花瓣长度），Petal.Width（花瓣宽度），单位均为厘米。

抽取其中三个特征绘制三维散点图如下所示。



其中前五行的特征如下表所示。

索引	SL	SW	PL	PW
0	5.1	3.5	1.4	0.2
1	4.9	3.0	1.4	0.2
2	4.7	3.2	1.3	0.2
3	4.6	3.1	1.5	0.2
4	5.0	3.6	1.4	0.2

三、问题的建模与求解

3.1 激活函数定义

激活函数（Activation functions）对于人工神经网络模型去学习、理解非常复杂和非线性的函数来说具有十分重要的作用。对于此 Logistic 回归问题，本文采用的激活函数为 Sigmoid 函数，即对于任何输入向量 X，其属于正例的概率为

$$P(y=1|X,W,b)=\sigma(WX+b)=\frac{1}{1+e^{-(WX+b)}}$$

为了求解模型中的两个参数，我们接下来定义损失函数。

3.2 损失函数定义

针对 Logistic 模型，某样本属于类别 y 的概率可以表示为

$$P(y|X,W,b)=\sigma(WX+b)^{y}(1-\sigma(WX+b))^{1-y}$$

而参数 W 与 b 可采用极大似然法对其进行估计。假设训练数据集有 m 个训练样本，则其似然函数可以表示成

$$\mathrm{L}=\prod_{i=1}^{m}\sigma(WX+b)^{y(i)}\,(1-\sigma(WX+b))^{1-y(i)}$$

为了计算上的方便，本文采用 Log 似然函数，且希望损失函数值越小越好，故还需对似然函数进行取反运算，则损失函数为

$$\mathrm{l}=-\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(y(i)\log\big(\sigma(WX+b)\big)+(1-y(i))\log(1-\sigma(WX+b)))$$

3.3 梯度下降法

为了求出损失函数的最小值，这里采用梯度下降法进行求解，梯度表达式经过推导可得

$$\nabla W_j\big(l_{W,b}\big)=-\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(y^{(i)}-\sigma\big(Wx^{(i)}+b\big))\,x_j^{(i)}$$

故由梯度下降法，得到如下的更新公式：

$$W_j = W_j + \alpha\nabla W_j(l_{W,b})$$

3.4 模型的求解

由于山鸢尾和杂色鸢尾的特征区分过于明显，导致较少的训练集依然可以由很高的正确率，如下图所示。

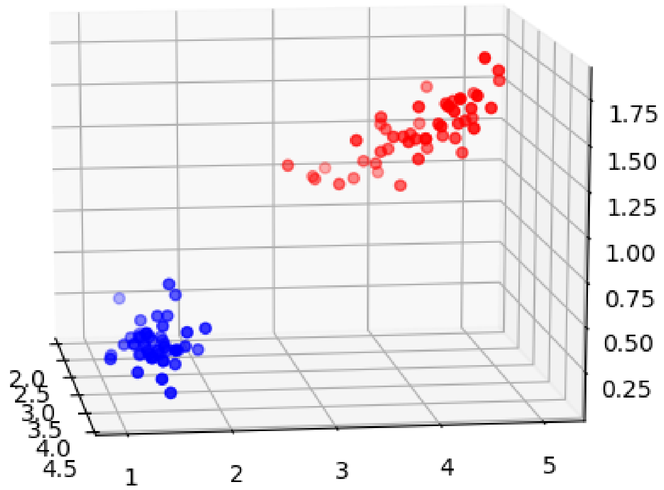


图 两例的散点图

故为了测试模型的稳健性，这里对杂色鸢尾和维吉尼亚鸢尾的花进行分类。本文将 4 个特征均拿来作为训练数据，散点图如下所示，其中红色表示杂色鸢尾的三个特征，蓝色表示维吉尼亚鸢尾的三个特征。

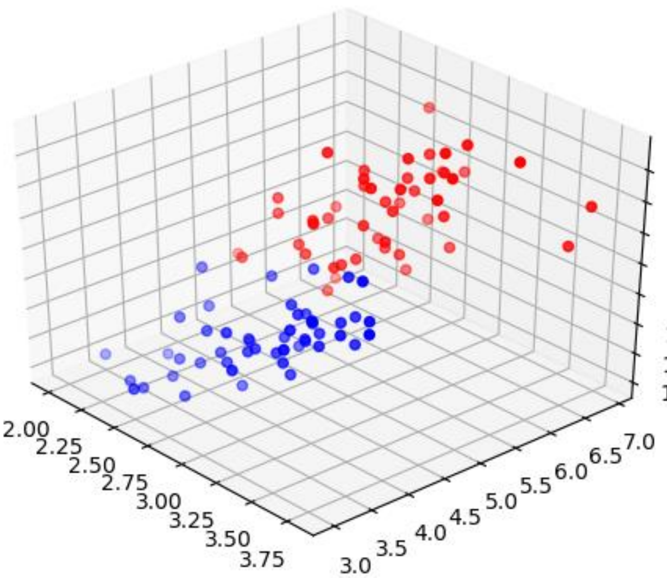


图 两例的散点图

将数据集的 50%作为训练集，50%作为测试集时，学习率为 0.001，最大迭代次数为 1000，训练后正确率为 66%，模型损失函数变化曲线如图 1 所示。

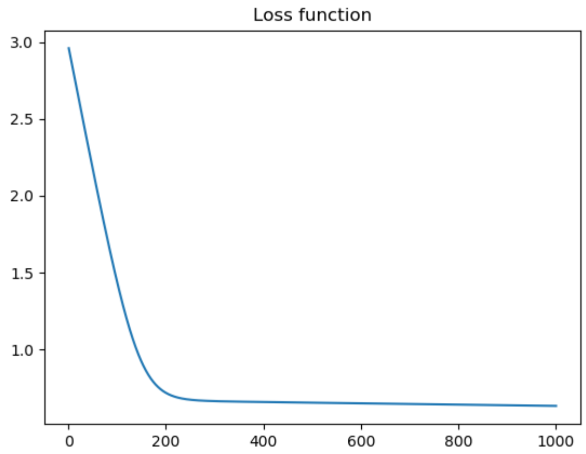


图 1 50%训练集时损失函数曲线图

将数据集的 70%作为训练集，30%作为测试集时，学习率为 0.005，最大迭代次数为 1000，训练后正确率为 93.3%，模型损失函数变化曲线如图 2 所示。

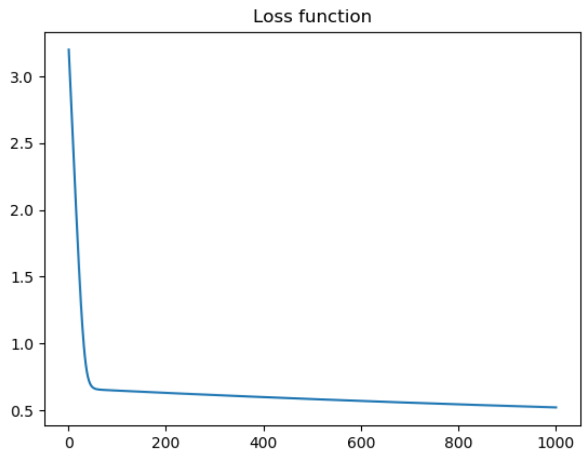


图 2 70%训练集时损失函数曲线图

将数据集的 90%作为训练集，10%作为测试集时，学习率为 0.005，最大迭代次数为 1000，训练后正确率为 100%，模型损失函数变化曲线如图 3 所示。

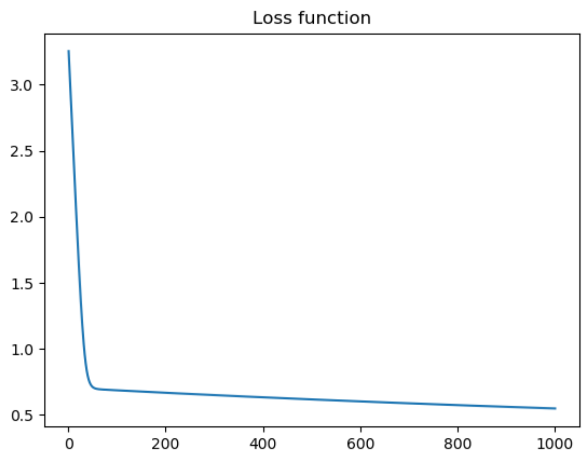


图 3 90%训练集时损失函数曲线图

四、实验结果分析

将实验结果总结为下表。

训练集占比	测试集占比	分类正确率
50%	50%	**66%**
70%	30%	**93.3%**
90%	10%	**100%**

由实验结果可以直观看到，当训练集在所有样本中所占比例越来越大时，其模型训练出来的准确率越来越高，且占比为 90%时准确率为 1，该模型灵敏度与鲁棒性较高，具有一定的推广能力。

本文仅能区分第二类和第三类，对于三分类的问题，我们也可以采用 Andrew NG 提出的方法构造 3 个二分类器，如下所示。

对于第 1 个二分类器，将山鸢尾的标签记为 1，杂色鸢尾和维吉尼亚鸢尾记为 0，进行训练；

对于第 2 个二分类器，将杂色鸢尾的标签记为 1，山鸢尾和维吉尼亚鸢尾记为 0，进行训练；

对于第 3 个二分类器，将维吉尼亚鸢尾的标签记为 1，山鸢尾和杂色鸢尾记为 0，进行训练。

在对新的样本进行预测时，将该样本所有特征放入三个 Logistic 分类器模型中，得出 3 个输出值，比较将其归为 1 的概率中哪个分类器输出值大，则将其标记为对应分类器的鸢尾花。事实证明，该方法的确有一定的效果，例如，将第一个样本代入 3 个分类器中进行预测，标定为正例的概率分别为[0.56465853, 0.34038794, 0.39631655]，故该样本属于第一类。