

1. 逻辑回归思想

逻辑回归用 sigmoid 函数:

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

训练集

$$\{x_i: y_i\}_{i=1}^m$$

对于二分类模型

“正类”为:

$$P(y = 1|x) = \frac{e^{w^T + b}}{1 + e^{w^T + b}}$$

“负类”为:

$$P(y = 0|x) = \frac{1}{1 + e^{w^T + b}}$$

2. 用极大似然法估计对多分类对数做几率回归

可以得到极大似然函数:

$$L(w, b) = \sum_{i=1}^m \ln P(y_i | x_i, w, b)$$

要选择合适的参数 w, b 使输入参数 x_i 和输出 y_i 关系更为紧密, 即使得 $L(w, b)$ 最大,

$$(w^*, b^*) = \operatorname{argmax} L(w, b)$$

将这两类模型统一起来:

$$P(y_i | x_i, w, b) = y_i P_1(x_i; w, b) + (1 - y_i) P_0(x_i; w, b)$$

其中 $y_i = 0, 1$

令 $x = (x; 1)$, $w^T x + b$ 算符为 $\beta^T \hat{x}$, 将极大似然函数代入可得,

$$L(\beta) = \sum_{i=1}^m \ln \left(y_i \cdot \frac{e^{\beta^T \hat{x}}}{1 + e^{\beta^T \hat{x}}} + (1 - y_i) \cdot \frac{1}{1 + e^{\beta^T \hat{x}}} \right)$$

分离分母,

$$L(\beta) = \sum_{i=1}^m \ln \left(y_i \cdot e^{\beta^T \hat{x}} + (1 - y_i) \right) - \ln(1 + e^{\beta^T \hat{x}})$$

又已知 $y_i = 0$ 或 1 , 该问题等价于极小化下式,

$$L(\beta) = \sum_{i=1}^m -y_i \cdot e^{\beta^T \hat{x}} + \ln(1 + e^{\beta^T \hat{x}})$$

对于二分类, 目标函数为

$$L(\beta) = \sum_{i=1}^m (y_i \cdot \ln(e^{\beta^T \hat{x}}) - \ln(1 + e^{\beta^T \hat{x}}))$$

等价于最小化

$$L(\beta) = \sum_{i=1}^m (-y_i \beta^T \hat{x} + \ln(1 + e^{\beta^T \hat{x}}))$$

3. 二分类算法思路:

1. 输入训练集 $\{x_i: c_i\}_{i=1}^m$
2. 初始化 w, b , 令 $\beta = (w, b)$ $\hat{x} = (x; 1)$
3. 求解参数 w, b
 - 1) 牛顿法:

计算:

$$L(\beta) = \sum_{i=1}^m (-y_i \beta^T \hat{x}_i + \ln(1 + e^{\beta^T \hat{x}_i}))$$

$$P_1(\hat{x}_i; \beta^T) = \frac{1}{1 + e^{\beta^T \hat{x}_i}}$$

$$\beta^* = \operatorname{argmin} L(\beta)$$

$$\frac{\partial L(\beta)}{\partial \beta} = - \sum_{i=1}^m \hat{x}_i (y_i - P_1(\hat{x}_i; \beta))$$

$$\frac{\partial^2 L(\beta)}{\partial \beta \partial \beta^T} = - \sum_{i=1}^m \hat{x}_i \hat{x}_i^T P_1(\hat{x}_i; \beta) (1 - P_1(\hat{x}_i; \beta))$$

$$\beta^{t+1} = \beta^t - \left(\frac{\partial^2 L(\beta)}{\partial \beta \partial \beta^T} \right)^{-1} \cdot \frac{\partial L(\beta)}{\partial \beta}$$

迭代, 得到 w, b 。

- 2) 梯度下降法:

$$L(\beta) = \sum_{i=1}^m (y_i \cdot \ln P_1(\hat{x}) + (1 - y_i) \cdot \ln(1 - P_1(\hat{x})))$$

等价于最小化:

$$L(\beta) = \sum_{i=1}^m (-y_i \beta^T \hat{x} + \ln(1 + e^{\beta^T \hat{x}}))$$

$$h(\hat{x}) = \frac{e^{\beta^T \hat{x}}}{1 + e^{\beta^T \hat{x}}}$$

$$\frac{\partial L(\beta)}{\partial \beta_j} = - \sum_{i=1}^n (y_i - h(\hat{x}_i)) \cdot \hat{x}_i$$

$$\beta_j := \beta_j + \Delta\beta_j$$

$$\Delta\beta_j = -\alpha \cdot \frac{\partial L(\beta)}{\partial \beta_j}$$

$$\beta_j := \beta_j + \alpha \cdot \sum_{i=1}^n (y_i - h(\hat{x}_i)) \cdot \hat{x}_i$$

迭代，得到 w, b 。

4. 用测试样本集去通过概率大小分类，计算正确率。

4. 代码实现：

选用包含 LogisticRegression 函数的 sklearn 进行逻辑回归分类

```
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.linear_model import LinearRegression,SGDRegressor,Ridge,LogisticRegression
from sklearn.metrics import mean_squared_error, classification_report
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
from sklearn.metrics import mean_squared_error
import pandas as pd
import numpy as np

def logistic():
    """
    逻辑回归做二分类进行乳腺癌预测，用数据集的 0.7 作为训练集，用数据集的 0.3
    作为测试集。Pytorch 进行二分类要分每个维度分别进行，这里有 sklearn 内置逻辑回归
    函数对数据进行分类。首先读取在线数据集，然后进行数据分割，按 0.7/0.3 分割为训练
    集和测试集。
    """
    # 构造列标签名字
    column = ['Sample code number', 'Clump Thickness', 'Uniformity of Cell Size', 'Uniformity
    of Cell Shape',
              'Marginal Adhesion', 'Single Epithelial Cell Size', 'Bare Nuclei', 'Bland
    Chromatin', 'Normal Nucleoli',
              'Mitoses', 'Class']
    # 读取在线数据集
    data = pd.read_csv(
        "https://archive.ics.uci.edu/ml/machine-learning-databases/breast-cancer-wisconsin/breast-
        cancer-wisconsin.data",
        names=column)
    # print(data)
    # 对存在缺失值进行处理，替换为 nan
    data = data.replace(to_replace='?', value=np.nan)
    data = data.dropna()
    # 输出 data 的数据量和维度。
    print("数据量， 维度： \n", data.shape)
    print("数据集： \n", data)
    # 进行数据的分割，用数据集的 0.7 作为训练集，用数据集的 0.3 作为测试集
    x_train, x_test, y_train, y_test = train_test_split(data[column[1:10]], data[column[10]],
        test_size=0.3)
```

```
# 输出训练样本两个类分别的样本量。
print("训练样本类，数据量：\n", y_train.value_counts())
# 输出测试样本两个类分别的样本量。
print("测试样本类，数据量：\n", y_test.value_counts())
# 进行标准化处理
std = StandardScaler()
x_train = std.fit_transform(x_train)
x_test = std.transform(x_test)
# 逻辑回归来对训练集进行训练
lg = LogisticRegression(C=1.0)
# 求得训练集 X 的均值、方差、最大值、最小值等固有属性
lg.fit(x_train, y_train)
print('回归系数\n', lg.coef_)
# 训练后返回预测结果
y_predict = lg.predict(x_test)
# 输出预测结果计算出的决定系数 R^2
print("拟合优度：", lg.score(x_test, y_test))
# classification_report 函数用于显示主要分类指标。显示每个类的精确度，召回率，
F1 值等
print(" 分 类 指 标：", classification_report(y_test, y_predict, labels=[2, 4],
target_names=["良性", "恶性"]))

if __name__ == "__main__":
    logistic()
```

5. 输出结果:

```
数据量, 维度:
(683, 11)
数据集:
      Sample code number  Clump Thickness  ...  Mitoses  Class
0          1000025          5  ...      1      2
1          1002945          5  ...      1      2
2          1015425          3  ...      1      2
3          1016277          6  ...      1      2
4          1017023          4  ...      1      2
..          ...          ...  ...      ...      ...
694         776715          3  ...      1      2
695         841769          2  ...      1      2
696         888820          5  ...      2      4
697         897471          4  ...      1      4
698         897471          4  ...      1      4

[683 rows x 11 columns]
训练样本类, 数据量:
  2    312
  4    166
Name: Class, dtype: int64
测试样本类, 数据量:
  2    132
  4     73
Name: Class, dtype: int64
```

```
回归系数
[[ 1.19967514  0.59630373  1.06276511  0.39187684 -0.14101706  1.38601652
   0.65826599  0.71886856  0.49763396]]
拟合优度: 0.9560975609756097
分类指标:
              precision    recall  f1-score   support

   良性         0.95         0.98         0.97         132
   恶性         0.97         0.90         0.94          73

 accuracy              0.96              0.96              205
 macro avg              0.96              0.94              205
weighted avg              0.96              0.96              205
```