中山大学数据科学与计算机学院移动信息工程专业

人工智能本科生实验报告

（**2017-2018**学年秋季学期）

课程名称：**Artificial Intelligence**

教学班级	周五**5-6**	专业（方向）	移动互联网
学号	15352285	姓名	任磊达

一、 实验题目

逻辑回归

二、 实验内容

算法原理

逻辑斯特回归是一种对于线性分类器（PLA)的优化，使用Logistic函数对于向量点乘结果进行求和操作得到一个概率值，而后以较大的概率值进行预测。

算法步骤

1. 初始化权重，可以使用初始化为0或者初始化为随机数。
2. 计算当前权重在训练集上预测的误差，调整权重。
3. 使用多次迭代得到的权重得到模型，而后预测测试集数据。
   - 如果使用bagging策略，可以使用验证机得到的最优解进行分类。

基本原理

- 模型参数$\mathbf{w}$, 输入特征向量$\mathbf{x}$, 长度一样。
- 初步预测参数和PLA类似：$s = W^T x$
- 使用`sigmoid` 函数$h(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$进行概率转化$p = \frac{e^{W^T x}}{1+e^{W^T x}}$
  - 预测阶段直接使用这个p值进行比较预测。

梯度下降

使用似然函数比较预测结果与真实结果之间的关联度

$$likelihood(w) = \prod_{n=1}^{N} P(y_n|x_n, w)$$

$$= \prod_{n=1}^{N} h(x_n)^{y_n}(1-h(x_n))^{1-y_n}$$

对等式两边取自然对数，得到进一步简化后的公式：

$$L(w) = \sum_{n=1}^{N} y_n ln(h(x_n)) + (1-y_n) ln(1-h(x_n))$$

直观的，当L(w)越大，预测结果与真实结果越相关，定义损失函数C(w),优化目标为：

$$min_w C(w) = min_w - L(w)$$

$$= -\sum_{n=1}^{N} [y_n ln(h(x_n)) + (1-y_n) ln(1-h(x_n))]$$

$$= \sum_{n=1}^{N} [y_n ln(1+e^{-W^T x}) + (1-y_n) ln(1+e^{W^T x})]$$

而优化这样的凸函数，使用梯度下降法实现，每一个w的位置减去对应位置的梯度（偏导数）

$$w_{j,.i+1}=w_{j,i}-\frac{\partial C(w)}{\partial w_j}$$

$$=w_{j,i}-\sum_{n=1}^{N}[y_n*(-x_{n,j})*e^{-W^Tx_n}*\frac{1}{1+e^{-W^Tx_n}}+(1-y_n)*(x_j)*e^{W^Tx_n}\frac{1}{1+e^{W^Tx_n}}]$$

$$=w_{j,i}-\sum_{n=1}^{N}\frac{1}{1+e^{-W^Tx_n}}*(y_n*(-x_{n,j})*e^{-W^Tx_n}+(1-y_n)*(x_{n,j}))$$

$$=w_{j,i}-\sum_{n=1}^{N}\frac{x_{n,j}}{1+e^{-W^Tx_n}}(1-y_n(e^{-W^Tx_n}+1))$$

$$=w_{j,i}-\sum_{n=1}^{N}x_{n,j}*(\frac{1}{1+e^{-W^Tx_n}}-y_n)$$

当考虑梯度下降的步长时候，可以在偏导前面加一个参数控制步长

$$w_{j,.i+1}=w_{j,i}-\eta\frac{\partial C(w)}{\partial w_j}$$

$$=w_{j,i}-\eta\sum_{n=1}^{N}[y_n*(-x_{n,j})*e^{-W^Tx_n}*\frac{1}{1+e^{-W^Tx_n}}+(1-y_n)*(x_j)*e^{W^Tx_n}\frac{1}{1+e^{W^Tx_n}}]$$

$$=w_{j,i}-\eta\sum_{n=1}^{N}\frac{1}{1+e^{-W^Tx_n}}*(y_n*(-x_{n,j})*e^{-W^Tx_n}+(1-y_n)*(x_{n,j}))$$

$$=w_{j,i}-\eta\sum_{n=1}^{N}\frac{x_{n,j}}{1+e^{-W^Tx_n}}(1-y_n(e^{-W^Tx_n}+1))$$

$$=w_{j,i}-\eta\sum_{n=1}^{N}x_{n,j}*(\frac{1}{1+e^{-W^Tx_n}}-y_n)$$

L2正则化

在该模型当中，如果一个w_j的绝对值过大，可以认为试图模拟高阶函数，增大模型复杂度。而过高的模型复杂度容易形成过拟合的模型，于是在原有模型上面加上一个L2正则化以增加在验证集以及测试集上面的准确度：

这时候损失函数定义为：

$$C'(w)=C(w)+\lambda\sum_{j=1}^{n}w_j^2$$

而这时候梯度下降中的偏导变为

$$\frac{\partial(\eta C(w)+\lambda\sum_{j=1}^{n}w_j^2)}{\partial w_j}=\frac{\eta\partial C(w)}{\partial w_j}+\frac{\lambda\sum_{j=1}^{n}w_j^2}{\partial w_j}$$

$$=\eta\sum_{n=1}^{N}x_{n,j}*(\frac{1}{1+e^{-W^Tx_n}}-y_n)+2\lambda w_j$$

伪代码

```
Variable:
    fLen     : frature/weight len
    x        : train frature set
    y        : train label set
    test     : test feature
    w        : feature of model
    delta    : change item
    cost     : predict part

w <- zeros(0, fLen)

# train
# while not convergence
for iter in range(ITER_NUM):
    delta <- zeros(0,fLen)
    for i in range(data_len):
        cost <- 1.0 / (1 + exp(-W.*x[i]))
        for j in range(fLen):
            delta[j] <- x[i][j] * delta[j] - y[i]
    for j in range(fLen):
        w[j] <- w[j] - delta[j]

# predict
sum = 0
for i in range(fLen):
    sum <- sum + w[i] * test[i]

1 if sum > 0.5, else 0
```

关键代码截图

训练代码

```
void LogisticRegression::train(int OptimizerFlag)
{
    if(oriReadFlag == false) ReadOriginalData();
    if(testReadFlag== false) ReadTestData();
    if(genFlag == false)     GenTrain_Valid();

    //标准化
    if(OptimizerFlag & (1 << Standalize)) StandalizeData();

    initZeroWeight(w);         // 初始化方式
    double alpha = 0.00001; // 学习率
    double theta = bool(OptimizerFlag & (1 << Normalize))? 1e-4 : 0;         // 正则化项系数
    double u = 0.9, v = 0.999, m = 0, n = 0, m_ = 0, n_ = 0, ep = 1e-8; // adam系数
    dr << "iteration,Accuracy,Precision,Recall,F1,loss" << endl;
    for (int iter = 1; iter <= 100; ++iter) {
        initZeroWeight(delta);
        // Normalizer
        double loss_normal= 0;
        if(OptimizerFlag & (1 << Normalize))
            for(int wi = 0; wi < w.size(); ++wi)
            {
                loss_normal += theta * w[wi] * w[wi];
            }
        double loss = loss_normal;
        // 分两步为普通梯度下降，一个for为SGD
        for(int F = 0; F < trainData.size(); ++F)
        {
            double wtxi = 0;
            for (int idx = 0; idx < oridata[0].first.size(); ++idx) {
                wtxi += w[idx] * trainData[F].first[idx];
            }
            double hxi = 1.0 / (1 + exp(-wtxi));
            if(hxi < 1 && hxi > 0)
            loss -= trainData[F].second * log(hxi) + (1 - trainData[F].second) * log(1-hxi);
            if(OptimizerFlag & (1 << SGD))
            {
                // 随机梯度下降
                for (int idx = 0; idx < oridata[0].first.size(); ++idx) {
                    w[idx] -= alpha * (exp(wtxi)/ (1 + exp(wtxi)) - trainData[F].second) *
trainData[F].first[idx];
                }
            }
            else
            {
                for (int idx = 0; idx < oridata[0].first.size(); ++idx) {
                    delta[idx] += (exp(wtxi)/ (1 + exp(wtxi)) - trainData[F].second) *
trainData[F].first[idx];
                }
            }
        }
        if((OptimizerFlag & (1 << SGD)) == 0)
        {
            if(OptimizerFlag & (1 << DynamicLearnRate))
            {
              // adam 方法调整优化率
                m = u * m + (1 - u) * loss;
                n = v * n + (1 - v) * loss * loss;

                m_ = m / (1 - pow(u, iter));
```

```
                n_ = n / (1 - pow(v, iter));
                double delta_ = (m_ / (sqrt(n_) + ep)) * alpha;
                cerr << delta_ << endl;
                for (int idx = 0; idx < oridata[0].first.size(); ++idx) {
                    w[idx] -= delta_ * delta[idx] - 2 * theta * w[idx];
                }
            }
            else{
                for (int idx = 0; idx < oridata[0].first.size(); ++idx) {
                    w[idx] -= alpha * delta[idx] - 2 * theta * w[idx];
                }
            }
        }

        dr << iter << ",";
        cerr << "ITER " << iter << ": (" ;
        for(int i = 0; i < w.size(); ++i) cerr << w[i] << ","; cerr <<")";
        double Accuracy = validate();
        dr << loss << endl;
        // bagging
        if((OptimizerFlag&(1<<Bagging)) && Accuracy > bestAccu)
        {
            bestAccu = Accuracy;
            bestw = w;
        }
    }
}
```

划分测试集

使用5：1的默认概率比例划分数据集

```
void LogisticRegression::GenTrain_Valid(double alpha)
{
    // new dataset.
    trainData.clear();
    validData.clear();
    // 20% percent to valid
    for(int dat = 0; dat < (int)oridata.size(); ++dat)
    {
        if(rand()*1.0/RAND_MAX < alpha)
        {
            validData.push_back(oridata[dat]);
        }
        else
        {
            trainData.push_back(oridata[dat]);
        }
    }
    cout << "Divide train(" << trainData.size() << "), valid(" << validData.size() << ")\n";
}
```

创新点&优化

- 随机梯度下降
    - 原始梯度下降方法中间是计算所有样本的损失函数对于单个w系数的偏导，这样损失了单个样本的特性，而在随机梯度下降算法当中，使用单个样本对于w进行更新，用更小的步长来实现w的更新，这样做的好处是优

化了对于最优指的逼近。
    - 进一步而言可以采用更加通用化的mini-batch梯度下降，使用部分样本来更新w，这样可以一定程度上缓和单个样本对的误差。
- 标准化
    - 由于特征上的每一列单位可能不同，使用除以标准差来消去单位，于是方法是计算每一列的标准差，而后标准化每一个元素。
- 正则化
    - 当模型复杂度高的时候，可以很好的拟合训练集上的数据的同时泛化能力差。
    - 这时候加入一个正则项来惩罚模型复杂度，提高泛化能力。
- 动态学习率调整
    - 在本次实验中使用Adam方法进行动态学习率调整，简而言之该方法存储了前两次梯度的一次和二次项，从而依次来缓冲梯度忽然变化带来的影响，从而调整动态学习率。
- bagging
    - 使用在验证集上，多次迭代中，表现最优的模型进行测试集的验证。
- 随机初始化
    - 由于梯度下降法容易陷入局部最优解，通过随机初始化多个初始参数，可以尝试找到多个局部最优解，可知当初始化参数个数足够多的时候，会收敛到全局最优。

三、 实验结果及分析

实验结果展示示例

> 小数据测试

数据集

使用实验文档数据集，零初始化

No	Attribute1	Attribute2	label
train1	1	2	1
train2	2	-1	0
test1	3	3	?

初始化**w**为`[0,0,0]`

训练

1. 由于是零初始化，每个样本权重分数为0,每个参数添加一个bias attribute `1`
2. 每一维的梯度计算：

$$\nabla Cost(W_{0,0}) = (\frac{1}{1+e^0} - 1) * 1 + (\frac{1}{1+e^0} - 0) * 1 = 0.5$$
$$\nabla Cost(W_{0,1}) = (\frac{1}{1+e^0} - 1) * 1 + (\frac{1}{1+e^0} - 0) * 2 = 1$$
$$\nabla Cost(W_{0,2}) = (\frac{1}{1+e^0} - 1) * 2 + (\frac{1}{1+e^0} - 0) * (-1) = -0.5$$

3. 更新梯度：

$$W_{1,0}=W_{0,0}-\nabla Cost(W_{0,0})=-0.5$$
$$W_{1,1}=W_{0,1}-\nabla Cost(W_{0,1})=1$$
$$W_{1,2}=W_{0,2}-\nabla Cost(W_{0,2})=0.5$$

4. 测试

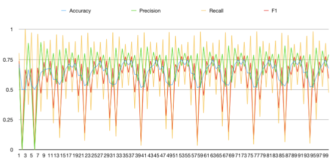
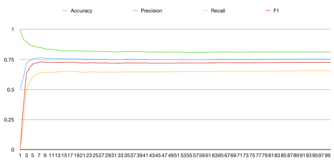
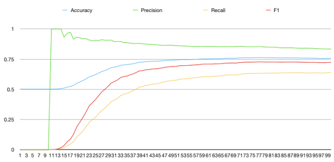
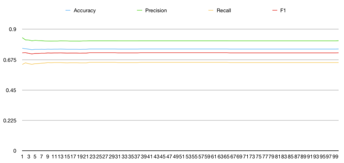
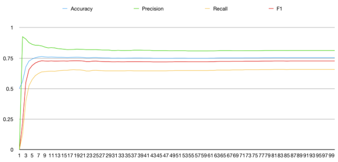
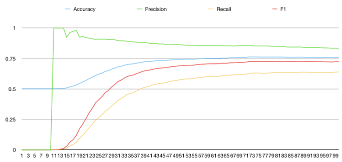
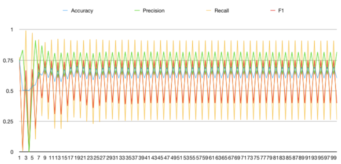
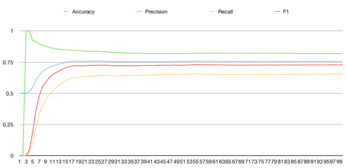
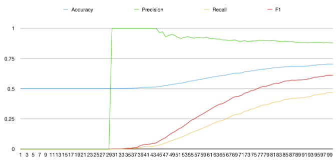
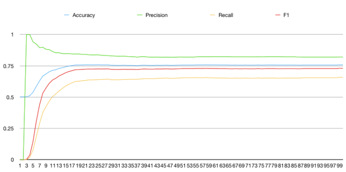
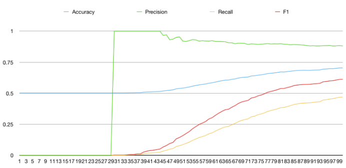
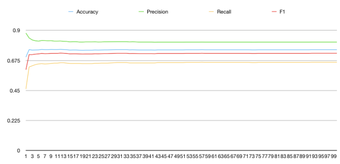
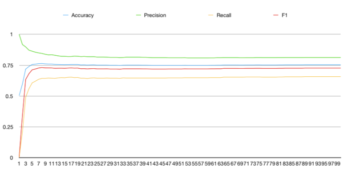
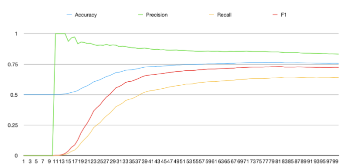
$$W^Tx=-0.5*1+1*3+0.5*3=4$$
$$\frac{1}{1+e^{-4}}=0.982>0.5$$

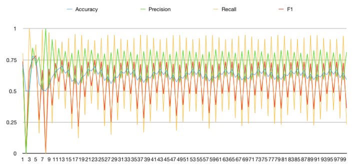
判定为1

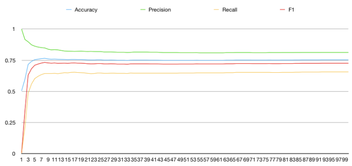
评测指标展示即分析

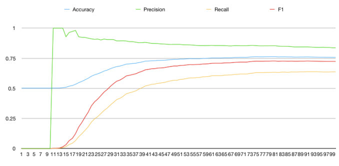
基础指标&优化指标

对于四个指标优化效果

优化类型	学习率=1e-4	学习率=1e-5	学习率=1e-6
无优化			
SGD（随机梯度下降）			
标准化			
SGD+标准化			
正则化			
adam动态学习率			



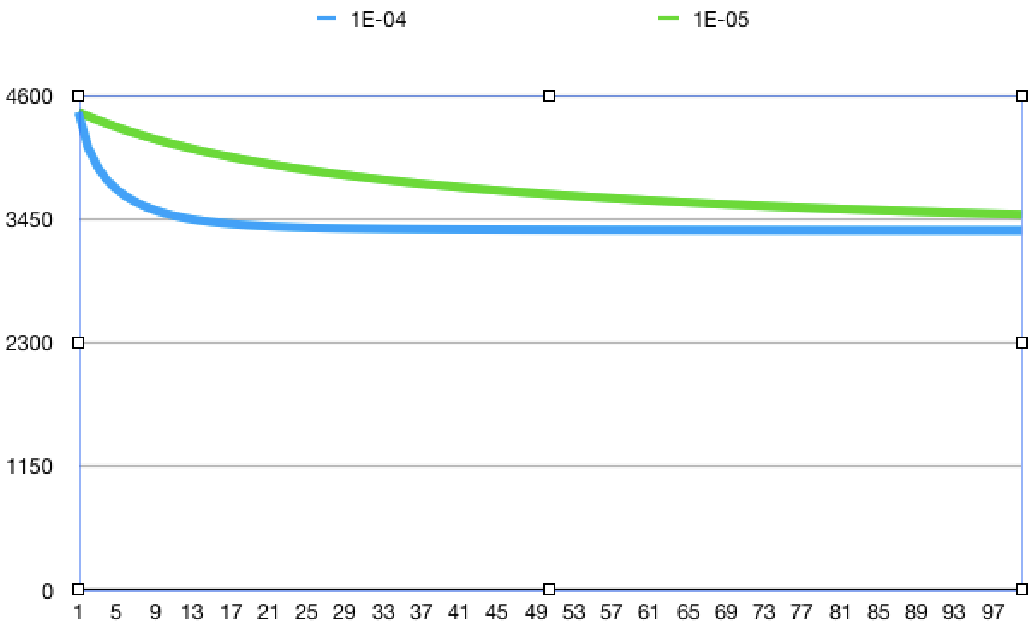




可以看到随机梯度下降对于模型的稳定性有显著的优化，同时学习率过大不会收敛，学习率过小不容易收敛。

正则化项优化

这里比较了两种L2正则化系数对于模型损失函数值影响：



可以看到在收敛速度上有明显的差距。

四、 思考题

1. 如果把 梯度为 0 作为算法停止的条件，可能存在怎样的弊端？
   1. 可能由于学习率模型不会收敛到梯度为0的位置。
   2. 陷入局部最优。
2. η 的大小会怎么影响梯度下降的结果？ 给出具体的解释，可视化的解释最好，比如图形展示等
   1. 如实验结果展示，η 偏大会难以收敛，偏小收敛速度慢。
3. 思考这两种优化方法（随机梯度下降，批量梯度下降）的优缺点
   1. 随机梯度下降可以加速收敛速度，但是可能不会一直往"正确的"方向移动，而是通过大量样本弥补单个样本带来的误差
   2. 批量梯度下降可以实现并行实现，但训练速度慢。
   - btw，可以使用mini-batch下降综合两者优点优化。