哈尔滨工业大学计算机科学与技术学院
实验报告

课程名称: 机器学习

课程类型: 选修

实验题目: 逻辑回归

学号: 1190202110

姓名: 田雪洋

2021 年 10 月 19 日

一、实验目的

理解逻辑回归模型，掌握逻辑回归模型的参数估计算法。

二、实验要求及实验环境

1. 实验要求

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。

验证：1. 可以手工生成两个分别类别数据（可以用高斯分布），验证你的算法。考察类条件分布不满足朴素贝叶斯假设，会得到什么样的结果。

2. 逻辑回归有广泛的用处，例如广告预测。可以到 UCI 网站上，找一实际数据加以测试。

2. 实验环境

Windows10; python3.8.6;Pycharm

三、设计思想（本程序中的用到的主要算法及数据结构）

对于给定的数据集 $T=\{(x_i,y_i)\}$，其中 $x_i\epsilon R^n, y_i\epsilon\{0,1\}$，可以使用 logistics 回归模型来进行分类。为此，我们对数据集进行如下规定：

$$X=\begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \end{pmatrix}, y=\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}, w^T=\begin{pmatrix} w_1 & w_2 & \cdots & w_n \end{pmatrix}$$

根据 logistics 回归模型，

$$P\left(y=1|x\right)=\frac{e^{wx}}{1+e^{wx}}=\pi\left(x\right), P\left(y=0|x\right)=\frac{1}{1+e^{wx}}=1-\pi\left(x\right) \tag{1}$$

则其似然函数为：

$$\prod_{i=1}^{n}\left[\pi\left(x_i\right)\right]^{y_i}\left[1-\pi\left(x_i\right)\right]^{1-y_i} \tag{2}$$

则其对数似然函数为：

$$L\left(W\right)=\sum_{i=1}^{n}\left[y_i\left(w\cdot x_i\right)-\log\left(1+e^{w\cdot x_i}\right)\right] \tag{3}$$

仿照实验 1 的结论，为了避免过拟合现象，我们在似然函数后添加正则项，得到:

$$L\left(W\right)=\sum_{i=1}^{n}\left[y_i\left(w\cdot x_i\right)-\log\left(1+e^{w\cdot x_i}\right)\right]+\frac{\lambda}{2}\left\|w\right\|^2 \tag{4}$$

对 $L\left(W\right)$ 求极大值，便可以得到 w 的估计值了。在这里我们采用多种方法求解。

1. 梯度下降法

首先我们使用梯度下降法来求解，为此，我们需要转换为求 $-L\left(W\right)$ 的极小值。在综合考虑数据集的样本数量后，我们最终确定目标函数为:

$$arg\min_{w}-\frac{1}{n}L\left(W\right) \tag{5}$$

则梯度下降法的迭代公式为:

$$W=W-\eta\lambda W-\frac{\eta}{n}\frac{\partial L\left(W\right)}{\partial W}=W-\eta\lambda W+\frac{\eta}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(y_ix_i-\frac{x_i}{1+e^{w\cdot x_i}}\right) \tag{6}$$

其中 $\eta\lambda W$ 为正则项。

2. 共轭梯度法

此外，还可以使用共轭梯度法进行求解，由于共轭梯度法要求系数矩阵为对称矩阵且正定，但显然本题的一阶导方程不满足，因此，对于一般形式的线性方程，共轭梯度法需要求其 Hessian 矩阵。其迭代过程如下:

(1) 初始条件

$$g_1=Hx_1-b$$

$$d_1=r_1=-g_1$$

(2) 迭代式

$$a_k = \frac{d_k^T r_k}{d_k^T H d_k}$$

$$x_{k+1} = x_k + a_k d_k$$

$$r_{k+1} = r_k - a_k H d_k$$

$$\beta_k = \frac{r_{k+1}^T H d_k}{d_k^T H d_k}$$

$$d_{k+1} = r_{k+1} - \beta_k d_k$$

所以只需要求解出似然函数的一阶导数的 Hessian 矩阵即可,Hessian 矩阵 $H = X^T A X$, 其中,

$$A = \begin{pmatrix} \pi(x_1)[1-\pi(x_1)] & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \pi(x_2)[1-\pi(x_2)] & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \pi(x_n)[1-\pi(x_n)] \end{pmatrix}$$

3. 牛顿法

牛顿法的基本思想是用梯度信息和二阶导数对目标函数进行逼近，然后把极小值作为新的迭代点，并不断重复这一过程，直到求出极小点。其步骤可以总结为以下四步:

(1) 设置初始点及终止条件

(2) 检验是否满足终止条件

(3) 计算二阶导数，并确定搜索方向

$$d_k : \nabla^2 f(x_k)\, d = -\nabla f(x_k)$$

(4) 计算下一个迭代点

$$x_{k+1} = x_k + d_k$$

重复步骤（2）

本题的一阶导数在上文中已经给出，所以下面只需要求解二阶导数即可:

$$\frac{\partial^2 L}{\partial \mathbf{w} \partial \mathbf{w^T}} = \sum_{i=1}^{n} \left(x_i x_i^T \frac{e^{w \cdot x_i}}{1+e^{w \cdot x_i}} \frac{1}{1+e^{w \cdot x_i}} \right)$$

则牛顿法的完整迭代式为:

$$x_{k+1}=x_k-\alpha\left(\frac{\partial^2 L}{\partial \mathbf{w}\partial \mathbf{w}^{\mathbf{T}}}^{-1}\frac{\partial L\left(W\right)}{\partial W}+\lambda w\right)$$

四、实验结果与分析

1. 生成数据

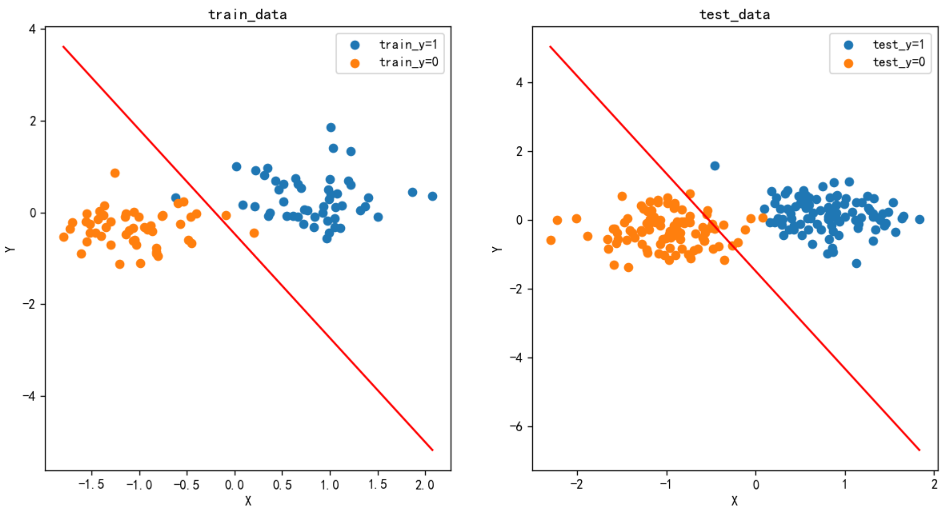
首先，先产生若干符合高斯分布的样本点，其中反例均值为 [-1, -0.3]，正例均值为 [0.8, 0.3]，方差均为 0.2，若不满足贝叶斯假设，则协方差为：0.1。训练集的样本点数为 50，测试集的样本点数为 100，学习速率为 1，正则项系数为 0.01，精度为 10^{-5}。

2. 四次实验如下

2.1. 有惩罚项，满足贝叶斯假设

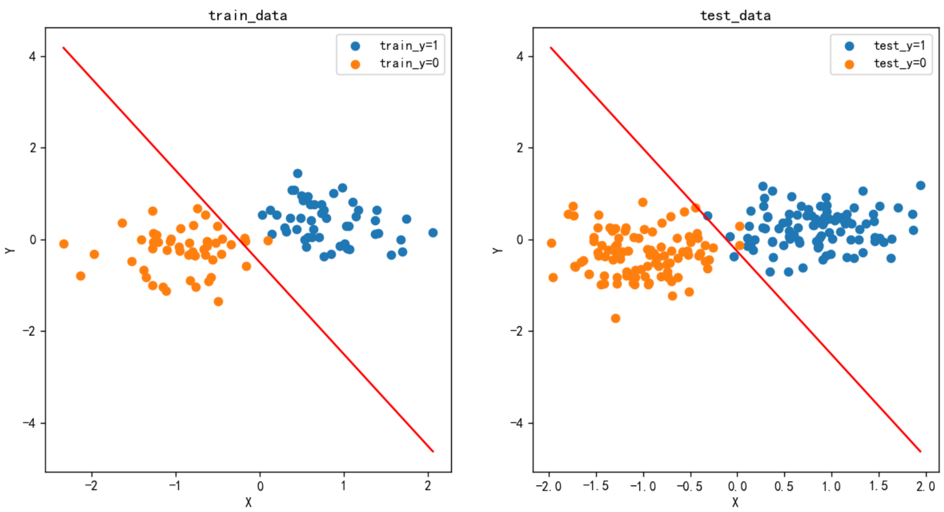
对于有惩罚项，满足贝叶斯假设的测试集和训练集，我们的到了如下结果：

- 梯度下降法



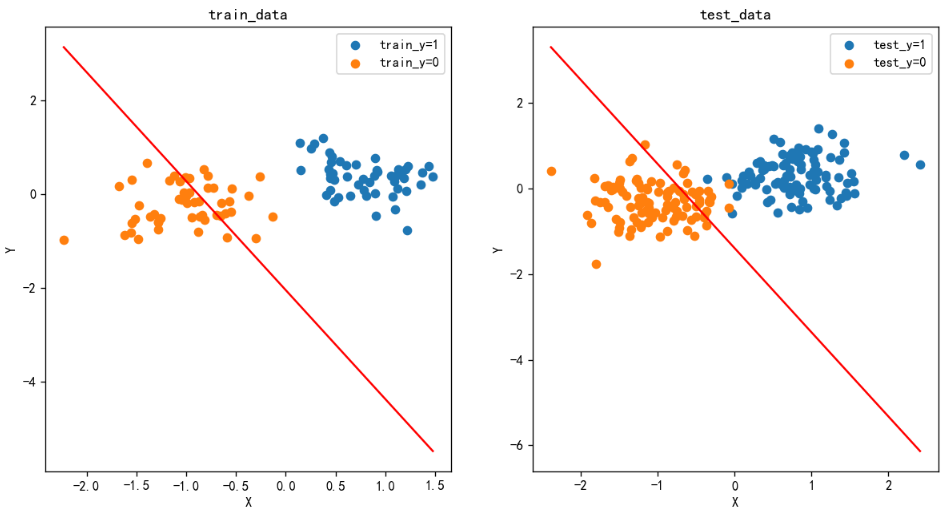
其中训练集的准确率为：97%，测试集的准确率为 99%。可以看到 logistics 回归在此时取到了较好的分类效果，可以明显地分开两个类。

- 牛顿法



其中训练集的准确率为：97%，测试集的准确率为 98.5%。可以看到 logistics 回归在此时取到了较好的分类效果，可以明显地分开两个类。

- 共轭梯度法

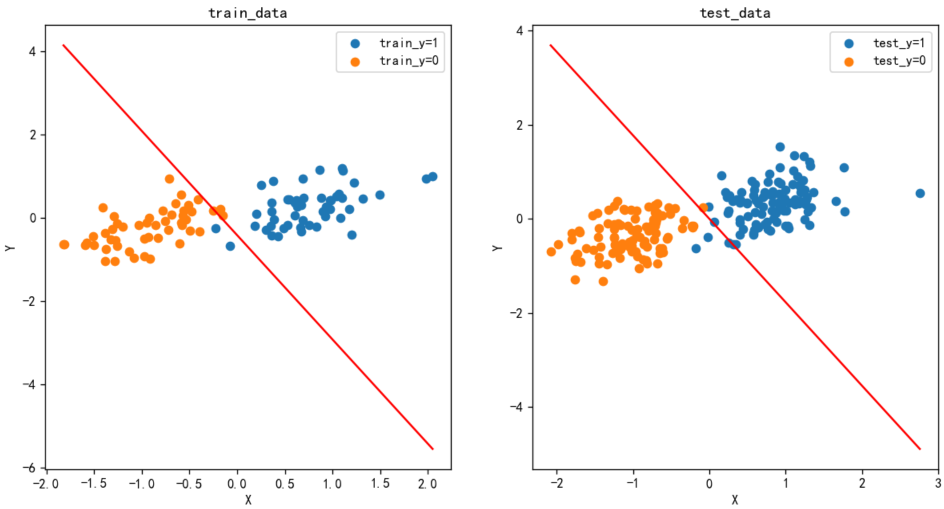


其中训练集的准确率为：84%，测试集的准确率为 83%。可以看到 logistics 回归在使用共轭梯度法时，取得的效果并不是很理想。

2.2. 有惩罚项，不满足贝叶斯假设

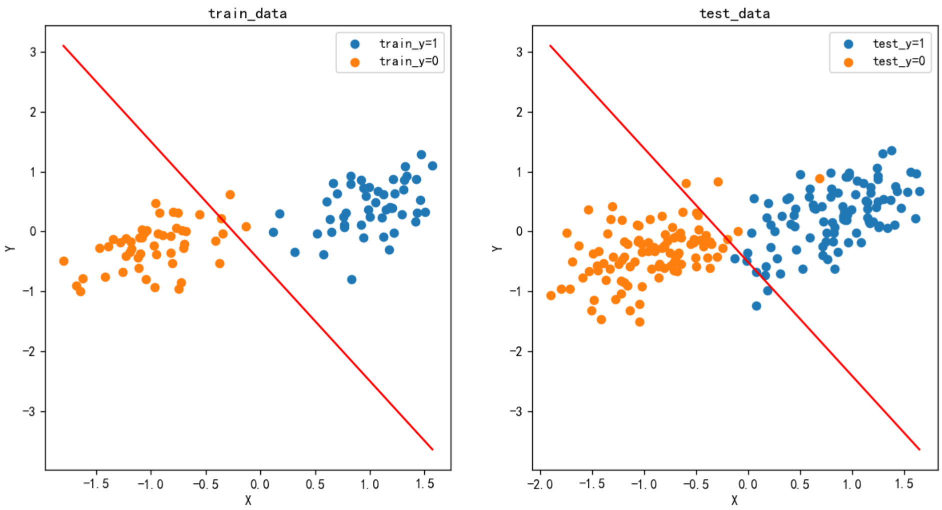
对于有惩罚项，不满足贝叶斯假设的测试集和训练集，我们的到了如下结果：

- 梯度下降法



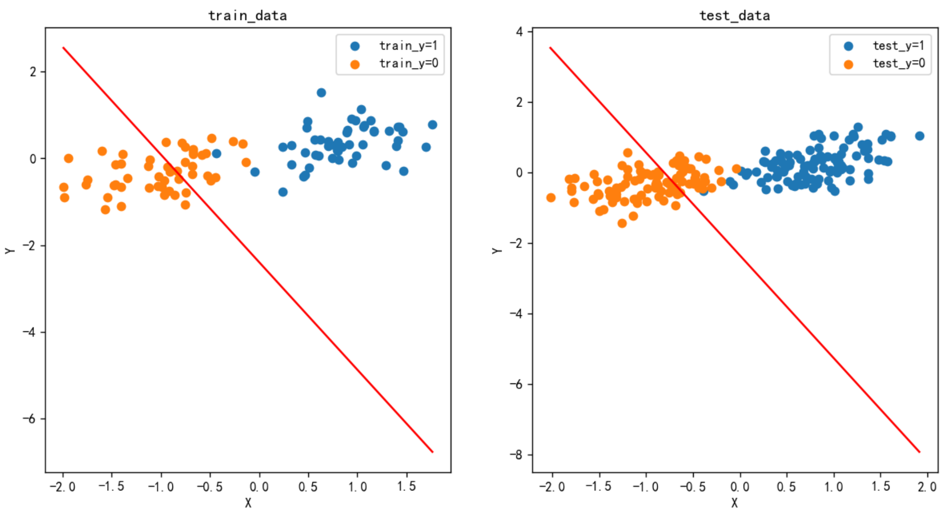
其中训练集的准确率为：96%，测试集的准确率为 98.5%。可以看到 logistics 回归在此时取到了较好的分类效果，可以明显地分开两个类。

- 牛顿法



其中训练集的准确率为：98%，测试集的准确率为 95.5%。可以看到 logistics 回归在此时取到了较好的分类效果，可以明显地分开两个类。

- 共轭梯度法

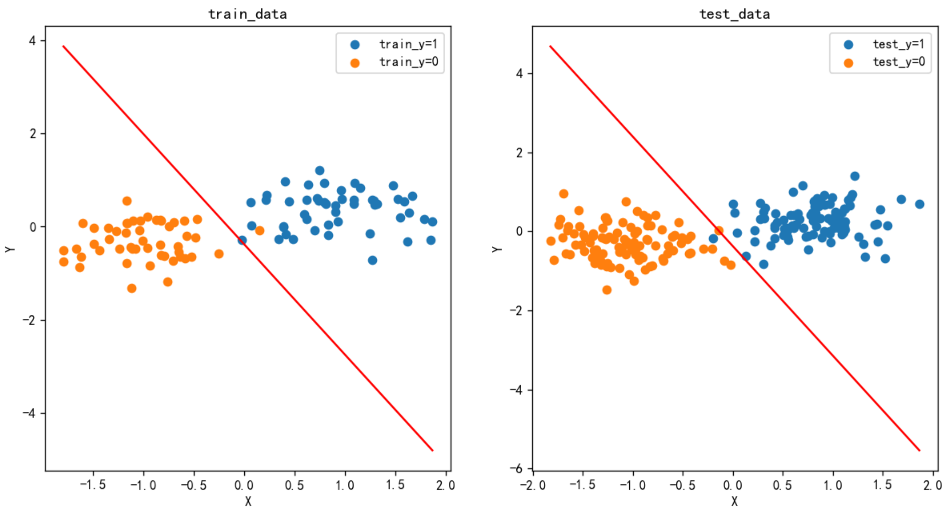


其中训练集的准确率为：81%，测试集的准确率为 83.5%。可以看到 logistics 回归在使用共轭梯度法时，取得的效果并不是很理想。

2.3. 无惩罚项，满足贝叶斯假设

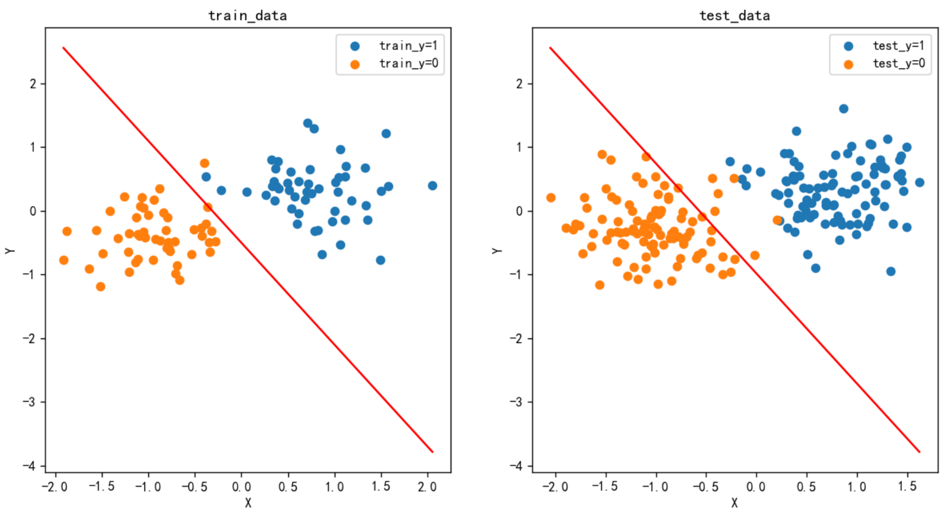
对于无惩罚项，满足贝叶斯假设的测试集和训练集，我们的到了如下结果：

- 梯度下降法



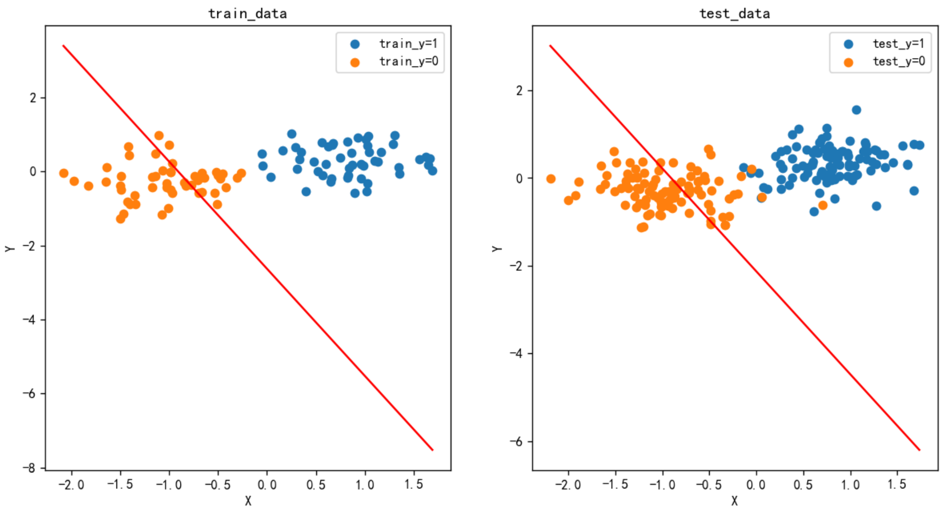
其中训练集的准确率为：98%，测试集的准确率为 99%。可以看到 logistics 回归在此时取到了较好的分类效果，可以明显地分开两个类。

- 牛顿法



其中训练集的准确率为：99%，测试集的准确率为 98%。可以看到 logistics 回归在此时取到了较好的分类效果，可以明显地分开两个类。

- 共轭梯度法

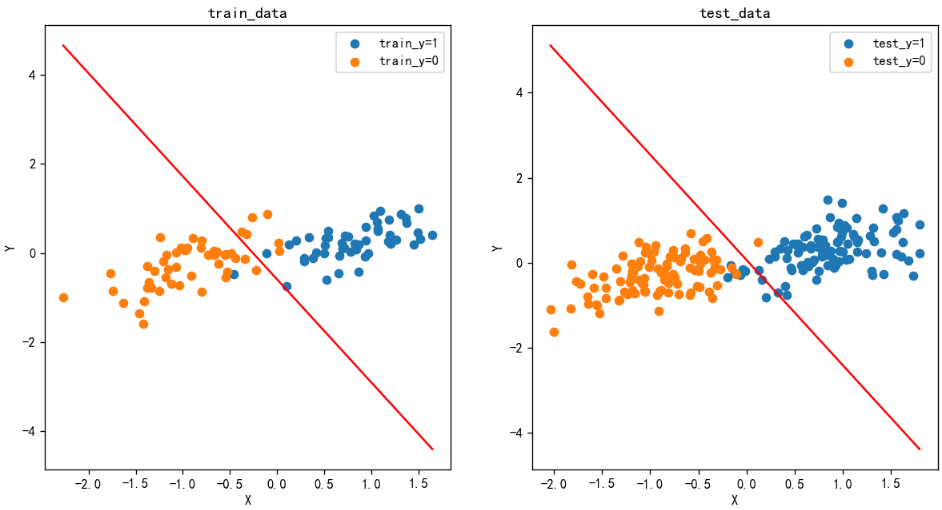


其中训练集的准确率为：81%，测试集的准确率为 85%。可以看到 logistics 回归在使用共轭梯度法时，取得的效果并不是很理想。

2.4. 无惩罚项，不满足贝叶斯假设

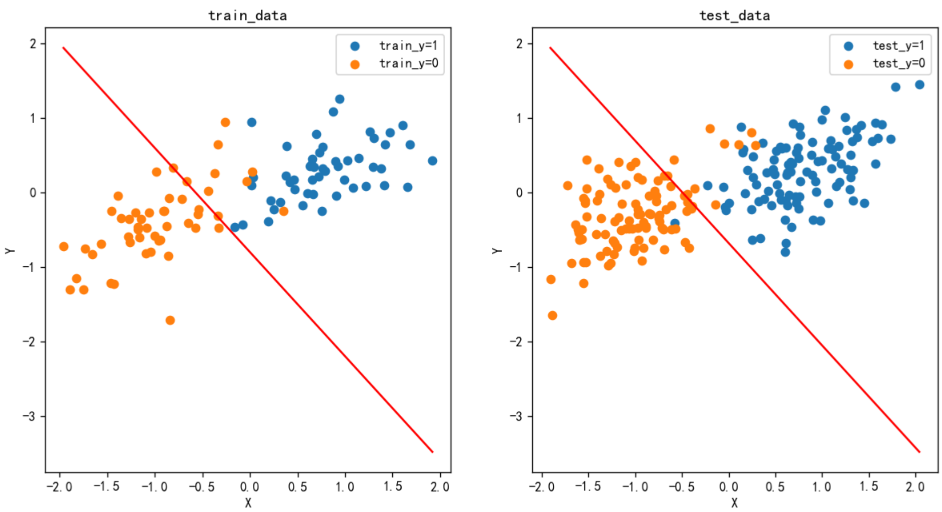
对于无惩罚项，不满足贝叶斯假设的测试集和训练集，我们的到了如下结果：

- 梯度下降法



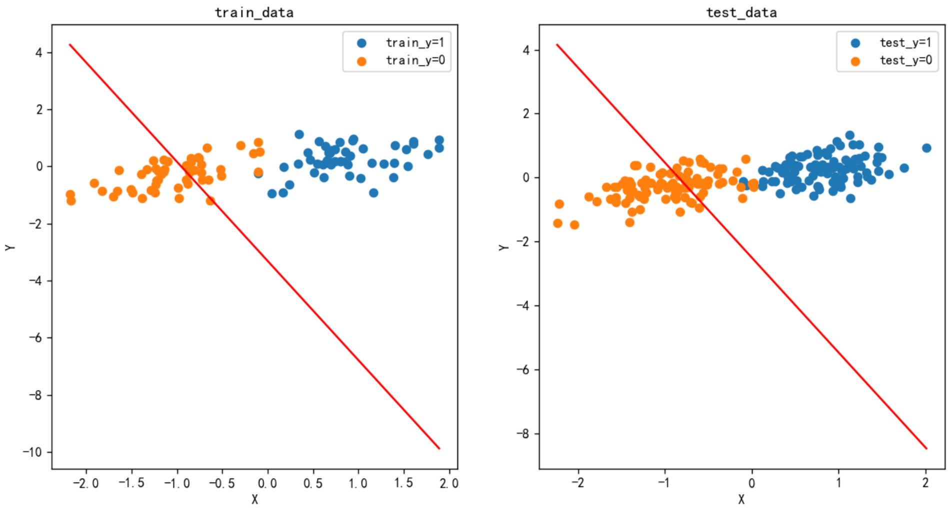
其中训练集的准确率为：93%，测试集的准确率为 97.5%。可以看到 logistics 回归在此时取到了较好的分类效果，可以明显地分开两个类。

- 牛顿法



其中训练集的准确率为：90%，测试集的准确率为 91.5%。可以看到 logistics 回归在此时取到了较好的分类效果，可以明显地分开两个类。

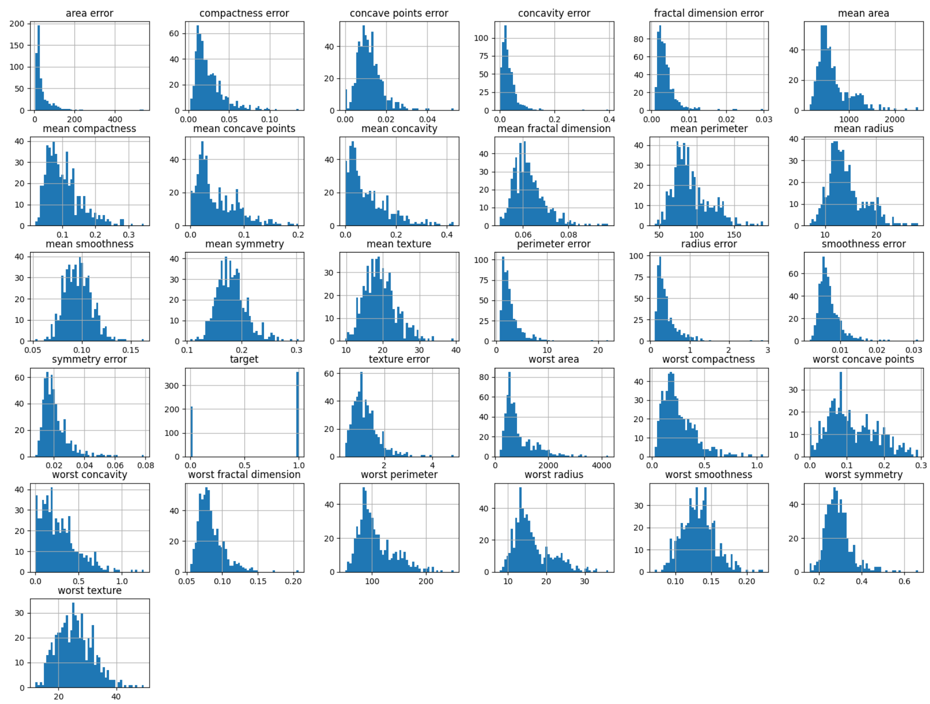
- 共轭梯度法



其中训练集的准确率为：85%，测试集的准确率为 84%。可以看到 logistics 回归在使用共轭梯度法时，取得的效果并不是很理想。

3.UCI 数据集

UCI 数据集中的 breast_cancer 数据集是简单经典的用于二分类任务的数据集。本次实验采用乳腺癌数据集进行 logistics 回归模型的测试。原数据集中有 30 个特征，样本数量为 569。各个样本的特征如下：



在本次实验中，首先将数据进行归一化处理，然后代入模型进行测试，结果测试集中的准确率为：63.6%，测试集的准确率为：61.4%。可以看到无论是测试集还是训练集，模型的准确率都很低。经分析，主要原因是，我写的这个 logistics 模型只适用于线性可分的数据集，而本数据集是线性不可分的，因此训练出的效果极差。

五、结论

- 对于梯度下降法，和牛顿法，logistics 回归的效果较好，但共轭梯度法的效果较差
- 对于牛顿法，由于需要计算二阶导数（或黑塞矩阵）的逆，其收敛速度较慢，而且还可能不存在逆。
- 从实验可以看出，当数据集满足朴素贝叶斯假设时 logistics 回归模型的分类表现略好于不满足朴素贝叶斯假设时的

六、参考文献

(1) 周志华著. 机器学习, 北京: 清华大学出版社, 2016.1

(2) 李航著. 统计学习方法，北京：清华大学出版社，2020.6

七、附录：源代码（带注释）

源代码见相关文件

(1) gd.py: 数据预处理，生成，梯度下降法，牛顿法，共轭梯度法的 logistics 模型

(2) test01.py-test04.py：梯度下降法在数据集是否满足贝叶斯假设，是否含正则项的求解过程及绘图

(3) nt_test01.py-nt_test04.py：牛顿法在数据集是否满足贝叶斯假设，是否含正则项的求解过程及绘图

(4) gc_test01.py-gc_test04.py：共轭梯度法在数据集是否满足贝叶斯假设，是否含正则项的求解过程及绘图

(5) cancer.py 乳腺癌数据集进行 logistics 回归模型的测试及绘图