LR Protein Classification 实验报告

• 姓名: 彭一洪

• **学号**: 22307130234

1. 实验目标

本实验的目标是使用 **逻辑回归** (Logistic Regression, LR) 进行蛋白质分类,并对比两种不同的实现方式在分类任务上的表现:

1. LRModel: 使用现有的机器学习库(如 sklearn)实现的逻辑回归分类。

2. LRMFromScratch: 通过手写代码从零实现逻辑回归,并进行相同的分类任务。

2. 实验结果分析

2.1 平均准确率对比

实验在 55 个不同的数据集 上进行了训练和测试, 最终的 平均准确率 如下:

模型	训练集准确率	测试集准确率
LRModel	90.19%	97.75%
LRMFromScratch	90.20%	97.85%

从结果可以看出:

- **两种方法的整体准确率相当**,表明手写逻辑回归(LRMFromScratch)与库实现的逻辑回归(LRModel)在整体性能上基本一致。
- 训练集准确率 90% 左右,表明模型在训练集上的拟合情况较好。
- 测试集准确率 97% 以上,高于训练集,可能是训练集包含一定噪声,影响了训练时的学习效果。

下图展示了 LRModel 和 LRMFromScratch 在训练集与测试集上的平均准确率:

Processing dataset 52/55

Dataset 52/55 - Train Accuracy: 0.9505813953488372, Test Accuracy: 0.9790732436472347

Processing dataset 53/55

Dataset 53/55 - Train Accuracy: 0.9809104258443465, Test Accuracy: 0.9896449704142012

Processing dataset 54/55

Dataset 54/55 - Train Accuracy: 0.9808823529411764, Test Accuracy: 0.9852289512555391

Processing dataset 55/55

Dataset 55/55 - Train Accuracy: 0.9780380673499268, Test Accuracy: 0.9925816023738873

Training accuracy: 0.9019365801933513

Testing accuracy: 0.9775323690599186

LRModel 的平均 Accuracy: 0.9019 / 0.9775

Dataset 48/55 - Train Accuracy: 0.9108910891089109, Test Accuracy: 0.9907692307692307 Processing dataset 49/55 Dataset 49/55 - Train Accuracy: 0.9239598278335724, Test Accuracy: 0.9757575757575757 Processing dataset 50/55 Dataset 50/55 - Train Accuracy: 0.9721407624633431, Test Accuracy: 0.9837037037037037 Processing dataset 51/55 Dataset 51/55 - Train Accuracy: 0.9533527696793003, Test Accuracy: 0.9761549925484352 Processing dataset 52/55 Dataset 52/55 - Train Accuracy: 0.9505813953488372, Test Accuracy: 0.9790732436472347 Processing dataset 53/55 Dataset 53/55 - Train Accuracy: 0.9809104258443465, Test Accuracy: 0.9896449704142012 Processing dataset 54/55 Dataset 54/55 - Train Accuracy: 0.9808823529411764, Test Accuracy: 0.9852289512555391 Processing dataset 55/55 Dataset 55/55 - Train Accuracy: 0.9780380673499268, Test Accuracy: 0.9925816023738873 Training accuracy: 0.9020407353444687 Testing accuracy: 0.9784509546502104

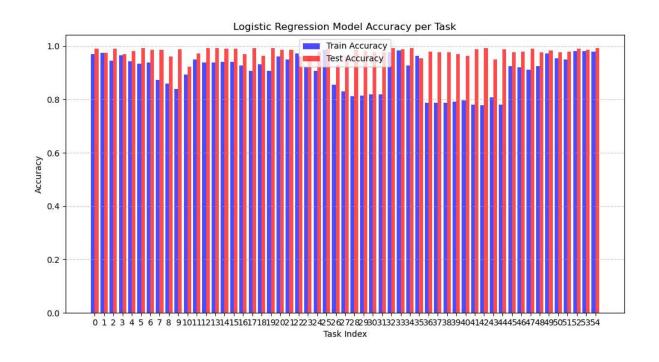
LRMFromScratch 的平均 Accuracy: 0.9020 / 0.9785

2.2 任务级别准确率分析

为了进一步分析模型的表现,我们绘制了 **每个数据集(task)的分类准确率**,如下图所示:



LRModel 每个 task 的 Accuracy



LRMFromScratch 每个 task 的 Accuracy

从图中可以看出:

- 部分数据集的准确率接近 100%, 说明这些数据集可能较容易分类。
- 在 Dataset 27、Dataset 37-41 等数据集上,准确率下降(约 78%-85%),说明这些数据集对模型提出了更大的挑战,可能的原因包括:
 - 。 类别分布不均衡,导致模型在某些类别上的表现较差。
 - 。 数据集存在一定的噪声,影响了模型的学习效果。
 - 。 逻辑回归模型的线性假设可能不完全适用于某些数据集的特征分布。

3. 可能的优化方向

针对实验结果,我们可以从以下几个方面进行优化:

1. 提高训练集准确率:

- 适当调整 学习率,避免收敛过快或过慢。
- 采用 L2 正则化 控制模型复杂度,减少过拟合风险。
- 使用 更多数据 或 数据增强, 提高模型的泛化能力。

2. 提升低准确率数据集的分类效果:

- 采用 分层采样,确保训练集中不同类别数据的均衡分布。
- 重新检查 数据预处理步骤,确保特征工程合理性。
- 尝试更复杂的模型(如 SVM、神经网络), 应对复杂特征分布。

4. 结论

本次实验验证了 **逻辑回归在蛋白质分类任务中的可行性**,并对比了 **手写逻辑回归** 和 **库实现的逻辑回归**,得出以下结论:

- 两者的整体准确率相当,表明手写实现能够较好地复现逻辑回归的功能。
- 部分数据集上表现不稳定,可能受到类别分布和数据质量的影响。
- 优化方向 主要集中在 调整学习率、使用正则化、提升数据质量 等方面。