Lab4. 非线性最小二乘

林昭炜 3170105728 数媒1701

1. 试验内容

本次实验分为如下任务和我完成的情况简介

实现 Gauss-Newton 迭代优化

在实验中我严格按照输入格式实现了我的 Gauss-Newton 迭代优化器 `class Solver5728` .

实现 Backtracking & Exact Line Search

实现了最简单的 Exact Line Search, 并且略做优化, 实现了 Backtracking Line Search.

实现 3 个 Residual Functions

三个 Functions 包括了:

- 线性函数的Residual Function

```
LineResidual(double k, double b, int num_dots,
             bool perturb_x = false, bool perturb_y = false)
```

- 圆方程的 Residual Function

```
CircleResidual(double A, double B, double R)
```

- 椭圆方程的 Residual Function, 支持从文件里读入, 从而可以读入老师的测试样例

```
EclipseResidual(double A, double B, double C);
EclipseResidual(std::string filename)
```

实现对实验结果可视化分析的 Python 脚本

很多时候我们很难判断输出结果正确与否，或者结果拟合的情况，所以我写了一个 Python 脚本从 C++ 输出的文件 (包含坐标和方程参数), 可视化结果，方便判断与分析。

2. 实现环境

编译环境: Visual Studio 2019, C++ latest

运行环境: Windows 10,16GB RAM, i7 7700HQ

OpenCV: 4.1.1

Python: 3.7 (matplotlib, numpy)

3. 理论基础

Gauss-Newton 迭代优化

高斯牛顿迭代法源于牛顿法，最速梯度下降发使用的是梯度作为每次迭代方向，而牛顿法考虑到了二阶导数的信息。但是在利用二阶信息的时候我们需要计算 Hessian 矩阵，而这个矩阵的计算消耗量比较大，空间也需要特别大，因此提出了专门针对最小二乘的 GN 算法。

首先我们知道最小二乘的公式如下: $F(\mathbf{x}) = ||R(\mathbf{x})||_2^2$, 其中 $R(\mathbf{x})$ 是残差函数，我们对 $R(\mathbf{x})$ 进行泰勒展开代入原方程。首先我们计算一下:

$$J_F = \frac{\partial F}{\partial R} \cdot \frac{\partial R}{\partial x} = \frac{\partial(||R||_2^2)}{\partial R} \cdot J_R = 2R^T J_R \tag{1}$$

$$\begin{aligned} F(x+\Delta x) &= ||R(x+\Delta x)||_2^2 \approx ||R(x) + J_R \Delta x||_2^2 \\ &= ||R(x)||_2^2 + 2R^T J_R \Delta x + \Delta x^T J_R^T J_R \Delta x \\ &\text{By (1) we have:} \\ &= F(x) + J_F \Delta x + \Delta x^T J_R^T J_R \Delta x \end{aligned}$$

我们想要最快到达目的，则意味着:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \Delta x} &= \frac{\partial(F(x) + J_F \Delta x + \Delta x^T J_R^T J_R \Delta x)}{\partial \Delta x} \\ &= J_R^T J_R \Delta x + J_R^T R = 0 \end{aligned}$$

所以我们迭代的方向就是:

$$\Delta x = (J_R^T J_R)^{-1} J_R^T R \tag{2}$$

Backtracking Line Search

Exact Line Search 通过每一步迭代是匀速的，每隔一个间隔采样是否到达了目标。

Backtracking 方法更加聪明，对于 $F(x+\alpha\Delta x)$ 来说, 我们确定了 $x, \Delta x$, 而 α 是变量，我们不妨设为 $\phi(\alpha)$, 那么我们希望能满足如下不等式:

$$\phi(\alpha) \le \phi(0) + \gamma \phi'(\alpha)\alpha. \tag{3}$$

其中我们需要求出 $\phi'(0)$:

$$\begin{aligned} \phi'(0) = \frac{dF(x+\alpha\Delta x)}{d\alpha} &= \frac{dF(x+\alpha\Delta x)}{d(x+\alpha\Delta x)} \Delta x \\ &= \Delta F^T(x) \Delta x \\ &\approx ||\Delta x||^2 \end{aligned}$$

Residual Functions

这里我们考察三种 Residual Functions。

对于直线我们有:

$$f(x) = kx + b$$

$$J_f[i] = [\frac{\partial f}{\partial k}, \frac{\partial f}{\partial b}] = [x_i, 1].$$

其中 $J_f[i]$ 是第 i 行 Jacobi 矩阵。

对于圆来说，我们使用参数方程生成:

$$f(\theta) = \begin{bmatrix} a + r * cos(\theta) \\ b + r * sin(\theta) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \end{bmatrix}$$

其中 ϵ_1, ϵ_1 是随机的误差。

对应的求导有:

$$\nabla f(a, b, r) = \begin{bmatrix} -2 * (x - a) \\ -2 * (y - b) \\ -2 * r \end{bmatrix}$$

对于椭球方程我们有生成的参数方程:

$$f(\theta, \varphi) = \begin{bmatrix} Asin(\theta)cos(\varphi) \\ Bsin(\theta)sin(\varphi) \\ Ccos(\theta) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \epsilon_3 \end{bmatrix}$$

同样的我们有对应的梯度:

$$\nabla f(A, B, C) = \begin{bmatrix} -2x^2/A^3 \\ -2y^2/B^3 \\ -2z^2/C^3 \end{bmatrix}$$

残差则是:

$$R(x, y, z, A, B, C) = \frac{x^2}{A^2} + \frac{y^2}{B^2} + \frac{z^2}{C^2} - 1$$

4. 实验细节

Gauss-Newton 迭代优化

Gauss-Newton 的核心算法如下, 只要按照公式给出的写，用 OpenCV 的矩阵操作即可。

```
double solve(
        ResidualFunction* pf,
        double* pX,
        GaussNewtonParams param = GaussNewtonParams(),
        GaussNewtonReport* report = nullptr
    ) override
    {
```

```
        auto& f = *pf;
        int n = 0;

        int nX = f.nX();
        int nR = f.nR();

        cv::Mat1d R(nR, 1); // Residual
        cv::Mat1d J(nR, nX); // Jacobi
        cv::Mat1d JT(nX, nR); // transpose of Jacobi
        cv::Mat1d JT_J(nX, nX); // JT * J
        cv::Mat1d Dx(nX, 1); // \Delta x, direction of descent
        cv::Mat1d X(nX, 1, pX); // paramters to be optimized
        cv::Mat1d b(nX, 1); // bias

        while (n < param.max_iter)
        {
            f.eval(data(R), data(J), data(X));
            cv::transpose(J, JT);
            JT_J = JT * J;
            b = -JT * R;
            if (!cv::solve(JT_J, b, Dx))
                error("Numerical Failure, cannot solve linear system\n");

            auto max_res = maxabs(R);
            auto max_grad = maxabs(Dx);

            if (max_res < param.residual_tolerance ||
                max_grad < param.gradient_tolerance )
                break;
            if (n == param.max_iter)
                error("Failed to converge\n");

            // damped newton parameter
            double alpha = param.exact_line_search ?
                linear_search_algo(f, R, J, X, Dx, max_res)
                : backtracking_algo(f, R, J, JT, X, Dx);
            X += alpha * Dx;

            if (alpha == 0)
                error("Search stopped at local minimum\n")

            ++n;
        }

        memcpy(pX, X.data, nX * sizeof(double));
        return sum(R)[0];
    }
```

在 Verbose Mode 下面我们模仿了 Google Ceres 库的输出:

```
printf("iter\tcost\t\tcost_change\tgradient\tstep\titer_time\ttotal_time\n");
//...
FPrints(max_res, last_res == inf? 0.0 : max_res - last_res, max_grad, alpha,
                    total_time - last_time, total_time);
```

Line Search

Exact Line Search

大致思路是循环十次，每次如果残差下降的话我们就知道我们可以继续扩大我们的 Step, 但是如果 残差没有下降，我们需要减小 Step, 因此我们后退回原来的位置，把步长的变化率缩减为原来的十分之一。

设置了最大的迭代次数是 1000次，防止无限循环。

```
static double linear_search_algo(ResidualFunction& f, cv::Mat1d& R, cv::Mat1d& J, const cv::Mat1d& X, const cv::Mat& Dx, double min)
    {
        cv::Mat1d mX = X.clone();
        double min_alpha = 0;
        int i = 1; // step
        double denominator = 1; // step size
        double alpha = 0; // result
        int n = 0; // iteration counter
        bool reached = false; // if reach a place smaller than original

        // If we completed 10 iterations, and at least one iteration
        // found a suitable step size alpha
        // Otherwise we will keep iterate for 1000 times waiting for the
        // step that can minimize Residual
        while (n < 10 || (!reached && n < 1000))
        {
            // step forward, compute new residual
            alpha += i / denominator;
            mX = X + alpha * Dx;
            f.eval(data(R), data(J), data(mX));

            // if the next step makes residual lesser , that is good
            // we record the alpha(step size) as min_alpha
            if (double eps = maxabs(R); eps < min)
            {
                min = eps;
                min_alpha = alpha;
                reached = true;
            }
            // The reisudal is larger than min, that means
            // we may overstepped, therefore we withdraw the
            // step, shrink our step size by factor of 10
            else
            {
                alpha -= i / denominator;
                denominator *= 10;
                i = 0;
            }
            ++n;
            ++i;
        }
        return min_alpha;
    }
```

Backtracking Line Search

根据公式我们的伪代码如下:

```
double gamma, beta, alpha; // parameters
double phi = dot(dx, dx)
while F(x+alpha*dx) < F(x) + alpha * phi * gamma
    alpha *= beta
```

然后我们检查小于的时候使用如下函数:

```
// check all elements in R is larger or equal to L
auto one_greater = [](const double* L, const double* R, int count)
{
    for (int i = 0; i < count; ++i, ++L, ++R)
        if (*L > *R)
            return true;
    return false;
};
```

Residual Functions

Residual Functions 我们可以根据在前一章提到的公式来写，类和构造函数的签名如下:

```
class LineResidual : public ResidualFunction{
    // ...
    LineResidual(double k, double b, int num_dots,
                 bool perturb_x = false, bool perturb_y = false); // will we add noise
    // ...
}

class CircleResidual : public ResidualFunction
{
    // ...
    // (x-A)^2+(y-B)^2=R^2
    CircleResidual(double A, double B, double R);
    // ...
}

class EclipseResidual : public ResidualFunction
{
    // ...
    EclipseResidual(double A, double B, double C);
    EclipseResidual(std::string filename);
}
```

而噪音的生成如下:

```
double noise(scale){
    return (rand() % 256 - 256)/512.0) * scale;
}
```

Python Plotting

最后是 Python 绘制, 它从文件里读入两类数据: 优化后的参数和数据点，然后用参数绘制拟合后的函数图像，用数据点绘制散点图。

5. 结果展示与分析

结果展示

在程序里依次测试了直线、圆形和椭球的拟合，其中椭球是从文件中读入，实验指导书给的测试样例:

首先是使用 Backtracking:

```
iter    cost            cost_change     gradient        step    iter_time       total_time
0       1.07e+03        0.00e+00        4.10e+00        1.00e+00        3.49e+00        3.49e+00
truth: k 2.100000, b -3.100000
solved: k 2.099998, b -3.096921

iter    cost            cost_change     gradient        step    iter_time       total_time
0       2.25e+02        0.00e+00        6.63e+01        1.00e+00        1.88e-01        1.88e-01
1       4.25e+03        4.03e+03        3.26e+01        1.00e+00        6.14e-01        8.02e-01
2       1.06e+03        -3.19e+03       1.62e+01        1.00e+00        6.00e-01        1.40e+00
3       2.65e+02        -7.98e+02       7.97e+00        1.00e+00        7.07e-01        2.11e+00
4       6.53e+01        -1.99e+02       3.73e+00        1.00e+00        7.25e-01        2.83e+00
5       1.57e+01        -4.97e+01       1.45e+00        1.00e+00        7.77e-01        3.61e+00
6       3.89e+00        -1.18e+01       3.15e-01        1.00e+00        2.32e+00        5.94e+00
7       1.94e+00        -1.95e+00       1.64e-02        1.00e+00        9.40e-01        6.88e+00
8       2.04e+00        9.90e-02        4.47e-05        1.00e+00        7.25e-01        7.60e+00
circle truth: A 8.000000, B 9.000000, R 3.000000
circle solved: A 8.007536, B 9.003249, R -3.009540

iter    cost            cost_change     gradient        step    iter_time       total_time
0       1.53e+01        0.00e+00        5.50e-01        1.00e+00        5.61e-01        5.61e-01
1       6.67e+00        -8.65e+00       5.38e-01        1.00e+00        1.26e+00        1.82e+00
2       2.96e+00        -3.70e+00       3.84e-01        1.00e+00        1.12e+00        2.94e+00
3       1.41e+00        -1.55e+00       2.77e-01        1.00e+00        8.49e-01        3.79e+00
4       8.26e-01        -5.82e-01       1.11e-01        1.00e+00        8.65e-01        4.65e+00
5       6.72e-01        -1.54e-01       1.24e-02        1.00e+00        8.59e-01        5.51e+00
6       6.57e-01        -1.52e-02       1.30e-04        1.00e+00        8.60e-01        6.37e+00
truth: A nan, B nan, C nan
solved: A 2.944047, B 2.305035, C 1.797825
```

然后是使用 Exact Line Search:

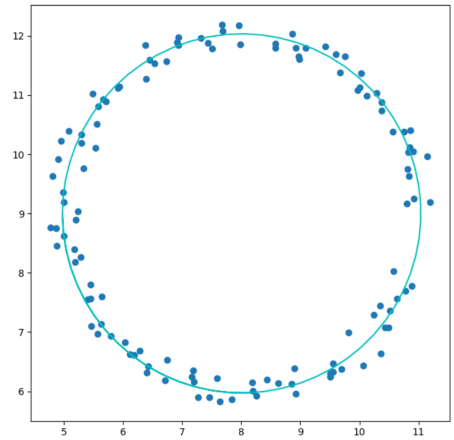
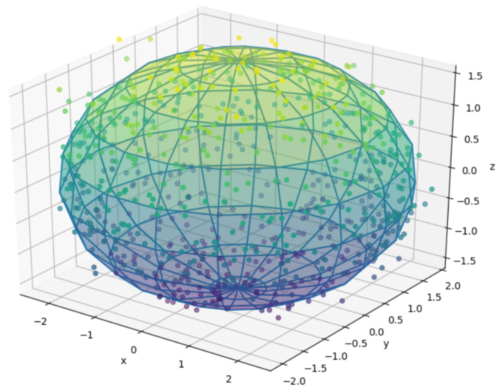
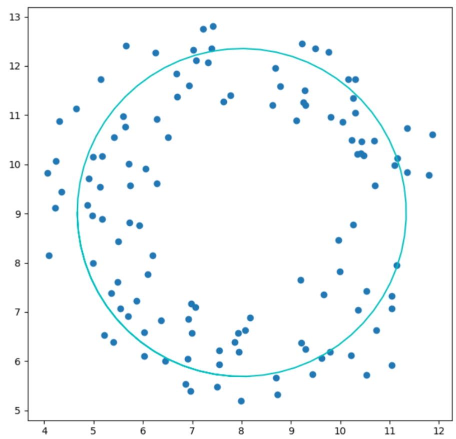
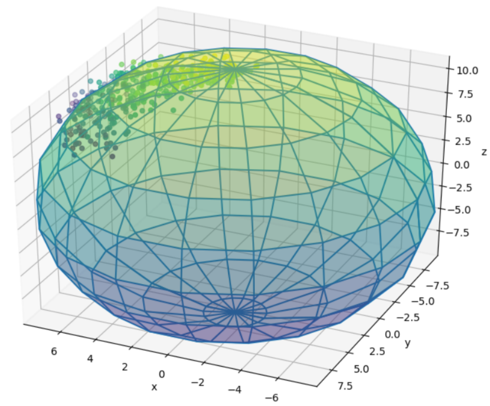
```
iter    cost            cost_change     gradient        step    iter_time       total_time
0       1.07e+03        0.00e+00        4.10e+00        1.00e+00        3.72e+00        3.72e+00
truth: k 2.100000, b -3.100000
solved: k 2.099998, b -3.096921

iter    cost            cost_change     gradient        step    iter_time       total_time
0       2.25e+02        0.00e+00        6.63e+01        1.66e-01        6.31e-01        6.31e-01
1       7.08e+01        -1.54e+02       9.47e+00        1.00e+00        9.16e-01        1.55e+00
2       1.08e+01        -6.00e+01       8.34e+00        3.00e-01        7.57e-01        2.30e+00
3       1.91e+00        -8.91e+00       2.22e-02        3.60e-02        8.05e-01        3.11e+00
Search stopped at local minimum
circle truth: A 8.000000, B 9.000000, R 3.000000
circle solved: A 8.007536, B 9.003249, R -3.031022

iter    cost            cost_change     gradient        step    iter_time       total_time
0       1.53e+01        0.00e+00        5.50e-01        6.00e+00        3.15e+00        3.15e+00
1       7.24e-01        -1.46e+01       3.82e+00        4.50e-01        3.59e+00        6.74e+00
Search stopped at local minimum
truth: A nan, B nan, C nan
solved: A 3.035086, B 2.534716, C 1.856544
```

可以发现 Exact Line Search 每次迭代速度比较慢，但需要迭代的次数比较小，相反，Backtracking 每次迭代非常快，但是需要更多次迭代，除此之外 Backtracking 在 拟合 Circle 上更加接近 Truth。

Python 可视化如下:

<table>
<tr><th>圆</th><th>椭球</th></tr>
<tr><td>
</td><td>
</td></tr>
<tr><th>圆 高噪声</th><th>椭球 局部数据点</th></tr>
<tr><td>
</td><td>
</td></tr>
</table>

在局部数据点的情况下，如果初值给得太大，回导致优化时收敛到一个非常大的参数上。

6. 编译运行

编译说明

本次实验需要支持 C++17 的编译器。

需要用到 OpenCV. 请把 `bin/OpenCV411.dll` 拷贝到 `src/OpenCVHW1/` 目录下

对于 Python 来说, 需要 `matplotlib` 和 `numpy` 这两个包。

运行说明

提供了测试时编译的好的 Release 文件，在命令行内可以运行。

Python 文件也可以直接运行。