

基于拟牛顿法的梯度追踪算法研究

刘艳,李雷

(南京邮电大学非结构化数据计算理论与应用研究中心,江苏南京 210046)

摘要:为了解决传统迭代算法中需要计算正交投影的问题,将拟牛顿法与梯度追踪算法(Gradient Pursuit)相结合,提出了基于拟牛顿法的梯度追踪算法(Quasi-Newton Method based Gradient Pursuit, QNMGP)。拟牛顿法是解决无约束最优化问题的有效方法,其避免了牛顿法需要求解 Hesse 矩阵的问题,降低了计算量,提高了收敛速度,新提出的算法通过限域拟牛顿法来求解更新方向,并将其运用到梯度追踪算法中。为验证新提出算法的可行性与有效性,基于 MATLAB 仿真平台,从重构时间、均方误差和峰值信噪比三个方面对 QNMGP 算法与其他贪婪算法进行了仿真对比实验验证。仿真实验结果表明,在同等的测试环境下,新提出的 QNMGP 算法重构效果远优于其他算法,且在重构时间上也具有一定的优势。

关键词:拟牛顿法;梯度追踪;最优化问题;重构算法

中图分类号:TP301.6

文献标识码:A

文章编号:1673-629X(2017)04-0113-04

doi:10.3969/j.issn.1673-629X.2017.04.025

Investigation on Gradient Tracking Algorithm with Quasi Newton Method

LIU Yan, LI Lei

(Unstructured Data Calculation Theory and Application Research Center, Nanjing University of Posts and Telecommunications, Nanjing 210046, China)

Abstract: It's necessary to compute the orthogonal projection in the traditional iteration algorithms. In order to solve this problem, the Quasi-Newton Method-based Gradient Pursuit (QNMGP) has been proposed, in which Quasi-Newton method is an effective one to solve unconstrained optimization problems without need of the Hesse matrix at the same time. The amount of calculation has been reduced and the convergence speed has been raised. The proposed algorithm can change the direction for solution of Quasi-Newton method in limitation domain and then be applied in the gradient tracking algorithm. Based on MATLAB simulation platform, experiment tests for verification, in which the proposed QNMGP is compared with other greedy algorithms on three performances like reconstruction time, mean square error and peak signal to noise ratio. The simulation results show that the proposed QNMGP algorithm is more effective than other algorithms in the same test environment and has advantage in reconstruction time.

Key words: Quasi-Newton method; gradient tracking; optimization problem; reconstruction algorithm

1 概述

压缩感知^[1-3](Compressive Sensing, CS)理论是近年来出现的一种新型压缩采样方法。该理论指出,如果信号可压缩或者在某个变换域上是稀疏的,就能用一个与变换基不相关的观测矩阵将高维信号投影到一个低维空间上,接着通过求解一个优化问题就能够从这些少量的投影中高概率地重构出原信号。

假设 $\mathbf{b} \in R^n$ 为一个已知的向量, \mathbf{A} 为 $m \times n$ 维的观测矩阵且满足 $m < n$, \mathbf{A} 的列向量 \mathbf{A}_i 记作原子。找出满足式(1)的 N 维信号 $\mathbf{x} \in R^n$, 若测量误差 $\varepsilon = 0$,

则该问题是精确的信号表示;若 $\varepsilon \neq 0$, 那么该问题则是一个信号估计问题。

$$\mathbf{b} = \mathbf{A}\mathbf{x} + \varepsilon \quad (1)$$

CS 主要分为三个阶段^[4]: 信号的稀疏表示、观测矩阵的设计、信号的重构。信号的重构是压缩感知三个阶段中最为核心的一步,设计出计算复杂度小,能够快速收敛同时重建效果好的重构算法对于压缩感知理论有着重要的意义。目前关于压缩感知的重构算法已有很多,求解模型^[5] $\begin{cases} \min \|\mathbf{x}\|_0 \\ \text{s. t. } \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \end{cases}$ 是重构出 \mathbf{x} 最简单的

收稿日期:2016-06-02

修回日期:2016-09-08

网络出版时间:2017-03-07

基金项目:国家自然科学基金资助项目(61070234, 61071167, 61373137, 61501251);南京邮电大学引进人才科研启动基金资助项目(214191)

作者简介:刘艳(1991-),女,硕士,研究方向为非线性分析及其应用;李雷,教授,研究方向为智能信号处理和非线性科学及其在通信中的应用。

网络出版地址: <http://cnki.net/kcms/detail/61.1450.TP.20170307.0922.062.html>

方法,但实践证明,该 l_0 问题是一个 NP-hard 难题^[6],因此需要通过其他方法解决该问题。目前常用的算法有 SL_0 (Smooth l_0 Norm)^[6-8] 算法、基追踪算法(Basis Pursuit, BP)^[9-11](将 l_0 范数最小化问题转化为 l_1 范数问题,即求解满足 $\begin{cases} \min \|x\|_1 \\ \text{s. t. } Ax = b \end{cases}$, $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$, 在满足一定条件时与 l_0 优化问题是等价的)、匹配追踪算法^[12-13](Matching Pursuit, MP)以及正交匹配追踪算法(Orthogonal Matching Pursuit, OMP)^[14-15]。

由于贪婪迭代算法的迭代过程比较简单,因此目前应用比较广泛,其主要是解决式(2)这类子空间优化问题,但是此类算法都需要通过计算量很大的正交投影来估计信号,在一定程度上增加了重构计算量,降低了收敛速度。

$$\min_x \|Ax = b\|_2 \text{ s. t. } x_i = 0 \quad \forall i \notin T \quad (2)$$

针对此类问题,Thomas Blumensath 和 Mike E. Davies 提出了梯度追踪(gradient pursuit)算法。该算法通过计算梯度来代替贪婪迭代算法中的正交投影,这在一定程度上可以减少计算量,提高收敛速度。

为此,将最优化方法中的拟牛顿法^[16-17]与梯度追踪算法相结合,提出了基于拟牛顿法的梯度追踪的重构算法,并在重构时间、均方误差和峰值信噪比三个方面通过与其他算法的仿真对比证明了新提出算法的优越性。

2 梯度追踪算法

梯度追踪算法不是通过求解式(2)来估计 $x_{T_n}^n$,而是提出用式(3)来估计 $x_{T_n}^n$ 。

$$x_{T_n}^n = x_{T_n}^{n-1} + \beta_n d_{T_n}^n \quad (3)$$

其中, T_n 为包含 n 次迭代的选定元素的索引集合; x_{T_n} 为在 T_n 中所对应的 x 的子向量; $\beta^n = \frac{\langle r_n, A_{T_n}^n \rangle}{\|A_{T_n}^n d_{T_n}^n\|_2}$ 为步长; $d_{T_n}^n$ 为更新方向。

通过最速下降法、共轭梯度法以及牛顿法等不同的最优化方法求解 $d_{T_n}^n$ 可以得到不同的梯度追踪算法,每种算法都有各自的优缺点,在下面的实验中将进行详细的分析比较。

3 拟牛顿法相关知识

牛顿法是通过求解式(4)来确定搜索方向的,但在求解过程中需要计算 $\nabla^2 f(x_k)$,因此,牛顿法存在计算量大,同时会出现矩阵奇异的缺陷。

$$\nabla^2 f(x_k) d = -\nabla f(x_k) \quad (4)$$

为了避免这些问题,Davidon 提出了拟牛顿法^[18]。该方法是假设有某种方式已得到的目标函数在 x_k

点处的 Hesse 矩阵逆的近似 H_k ,并通过式(5)进行线搜索产生下一代点,即用式(5)来替代式(4)。

$$-H_k \nabla f(x_k) = d_k \quad (5)$$

将目标函数 $f(x)$ 在 x_{k+1} 点进行泰勒展开,并取二阶近似,即:

$$f(x) \approx f(x_{k+1}) + \nabla f(x_{k+1})(x - x_{k+1}) + \frac{1}{2} (x - x_{k+1})^T \nabla^2 f(x_{k+1})(x - x_{k+1}) \quad (6)$$

两边关于 x 求梯度并令 $x = x_k$ 得到:

$$\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k) \approx \nabla^2 f(x_{k+1})(x_k - x_{k+1}) \quad (7)$$

令

$$s_k = x_{k+1} - x_k, y_k = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k) \quad (8)$$

同时设 Hesse 矩阵可逆,则式(7)可以转化为:

$$y_k \approx [\nabla^2 f(x_{k+1})]^{-1} s_k \quad (9)$$

用 n 阶方阵 H_{k+1} 表示 $\nabla^2 f(x_{k+1})$ 逆的近似,将式(10)的“ \approx ”改成“ $=$ ”得:

$$y_k = H_{k+1} s_k \quad (10)$$

式(10)称作拟牛顿方程。显然,方程中变量的个数远大于方程的个数,因此不能唯一地求解出 H_{k+1} ,所以需要通过对 H^k 进行修正来求解出 H_{k+1} ,令

$$H_{k+1} = H_k + \Delta H_k \quad (11)$$

当 H_{k+1} 是正定矩阵时, $d_k = -H_k \nabla f(x_k)$ 是搜索方向。

为了确定第 k 次的搜索方向,需要求解 N 维的对称正定矩阵 H_k ,存储区间至少需要 $\frac{N(N+1)}{2}$,对于大规模的数量计算是一个缺陷。因此,由 Nocedal 提出的限域牛顿法^[19-21]很好地弥补了这一缺点。它的基本思想是通过存储有限的次数 m 来求解 ΔH_k ,如果 $k+1 > m$,就舍弃 m 次以前的 ΔH_{k-m+1} 。

令 $\rho_k = \frac{1}{y_k^T s_k}, V_k = (I - \rho_k y_k s_k^T)$,得到:

$$H_{k+1} = V_k^T H_k V_k + \rho_k s_k s_k^T \quad (12)$$

当 $k+1 \leq m$ 时,有:

$$H_{k+1} = V_k^T V_{k-1}^T \cdots V_0^T H^0 V_0^T \cdots V_{k-1} V_k + V_k^T \cdots V_1^T \rho_0 s_0 s_0^T V_1 \cdots V_k + \cdots + V_k^T V_{k-1}^T \rho_{k-2} s_{k-2} s_{k-2}^T V_{k-1} V_k + V_k^T \rho_{k-1} s_{k-1} s_{k-1}^T V_k + \rho_k s_k s_k^T \quad (13)$$

当 $k+1 > m$ 时,有:

$$H_{k+1} = V_k^T V_{k-1}^T \cdots V_{k-m+1}^T H^0 V_{k-m+1}^T \cdots V_{k-1} V_k + V_k^T \cdots V_{k-m+2}^T \rho_{k-m+1} s_{k-m+1} s_{k-m+1}^T V_{k-m+1} V_k + \cdots + V_k^T \rho_{k-1} s_{k-1} s_{k-1}^T V_k + \rho_k s_k s_k^T \quad (14)$$

限域拟牛顿法步骤如下:

- (1) 给定初始点 $x_0, k = 0$, 设置正整数 m 。
- (2) 设初始矩阵为 $H_0 = I$, 求出目标函数 $f(x)$ 在 x_k 处的梯度 $\nabla f(x_k)$ 。

(3) 求解方程组 $-\mathbf{H}_k \nabla f(x_k) = d_k$, 得到 d_k 。

(4) 求解 $f(x_k + \beta_k d_k) = \min_{\beta \geq 0} f(x_k + \beta d_k)$, 令 $x_{k+1} = x_k + \beta_k d_k$ 。

(5) 若 $\|\nabla f(x_k)\| \leq \varepsilon$, 停止迭代; 若 $\|\nabla f(x_k)\| > \varepsilon$, 则进行步骤(6)。

(6) 令 $m = \min\{k + 1, m\}$ 。

(7) 令 $s_k = x_{k+1} - x_k, y_k = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)$, 利用式(13)、式(14)更新 m 次 \mathbf{H}_0 求解 \mathbf{H}_{k+1} 。

(8) $k = k + 1$, 返回步骤(3)。

(7) $y_{T_n}^n = g_{T_n}^{n-1} - g_{T_n}^n$;

(8) 通过式(18)计算 $H_{T_n}^n$;

(9) $x_{T_n}^n = x_{T_n}^{n-1} + \beta_n d_{T_n}^n$;

(10) $c^n = A_{T_n} d_{T_n}^n$;

(11) $r_n = r_{n-1} - \beta_n c^n$ 。

3) 输出 r_n, x_n , 当满足 $\|r_n - r_{n-1}\| \leq 10^{-6}$ 停止。

拟牛顿法在计算复杂度方面要小于牛顿法, 加快了重构时间, 同时该算法具有二次有限终止性以及最速下降法的下降性等一系列优良性质; 因此, 拟牛顿法与梯度追踪法的结合从理论上优于其他的追踪算法。

4 QNMGP 算法

拟牛顿法是基于拟牛顿条件利用目标函数的梯度构造目标函数 Hesse 矩阵的近似, 此类算法不仅具有下降性, 同时还拥有二次终止性、收敛速度快等优点。将拟牛顿法的思想与梯度追踪算法相结合, 形成基于拟牛顿法的梯度追踪算法 (Quasi-Newton Method based Gradient Pursuit, QNMGP)。

QNMGP 的核心问题是在 n 次的迭代中构造矩阵 $\mathbf{H}_{T_n}^n$, 因此 QNMGP 算法选择原子的策略将和 OMP 算法一致, 即在第 n 次迭代时, 计算 $g^n = \langle r_{n-1}, A \rangle$, 选取 i_n 满足 $i_n = \operatorname{argmax}_i |g_i^n|$, 并将其添加到索引集 T_n 中。

因此, QNMGP 通过求解式(15) 确定更新方向 $d_{T_n}^n$ 。

$$\mathbf{H}_{T_n}^{n-1} d_{T_n}^n = g^n \tag{15}$$

令

$$s_{T_n}^n = x_{T_n}^n - x_{T_n}^{n-1} = \beta^n d_{T_n}^n \tag{16}$$

$$y_{T_n}^n = g_{T_n}^{n-1} - g_{T_n}^n =$$

$$\begin{aligned} & (A_{T_n})^T (b - A_{T_n} x_{T_n}^{n-1}) - (A_{T_n})^T (b - A_{T_n} x_{T_n}^n) = \\ & (A_{T_n})^T A_{T_n} (x_{T_n}^n - x_{T_n}^{n-1}) = (A_{T_n})^T A_{T_n} s_{T_n}^n \end{aligned} \tag{17}$$

在 QNMGP 算法中设置 $m = N$, 那么更新方向 $\mathbf{H}_{T_n}^n$ 为:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{T_n}^n = & \mathbf{H}_{T_n}^{n-1} + \left(1 + \frac{(y_{T_n}^n)^T \mathbf{H}_{T_n}^{n-1} y_{T_n}^n}{(y_{T_n}^n)^T s_{T_n}^n} \right) \cdot \frac{s_{T_n}^n (s_{T_n}^n)^T}{(s_{T_n}^n)^T y_{T_n}^n} - \\ & \frac{\mathbf{H}_{T_n}^{n-1} y_{T_n}^n (s_{T_n}^n)^T + s_{T_n}^n (y_{T_n}^n)^T \mathbf{H}_{T_n}^{n-1}}{(s_{T_n}^n)^T y_{T_n}^n} \end{aligned} \tag{18}$$

QNMGP 算法步骤如下:

1) 设置初始误差 $r_0 = y, x_n = 0, T_n$ 是空集, $H_0 = 1$ 。

2) 令 $n = 1, n = n + 1$ 。

(1) $g^n = \langle r_{n-1}, A \rangle$;

(2) $i_n = \operatorname{argmax}_i |g_i^n|$;

(3) $T_n = T_{n-1} \cup i_n$;

(4) 通过式(15) 计算 $d_{T_n}^n$;

(5) $\beta^n = \frac{\langle r_n, A_{T_n} d_{T_n}^n \rangle}{\|A_{T_n} d_{T_n}^n\|_2^2}$;

(6) 平方数据 $x_{T_n}^{n-1} = \beta^n d_{T_n}^n$;

5 实验与仿真

为了说明提出算法的优越性, 用 Matlab 进行仿真。选取图片“house”作为实验素材, 压缩比 $M/N = 0.5$, 分别用 NP, OMP, GP, CGP 与 QNMGP 进行比较, 实验效果如图 1 所示。

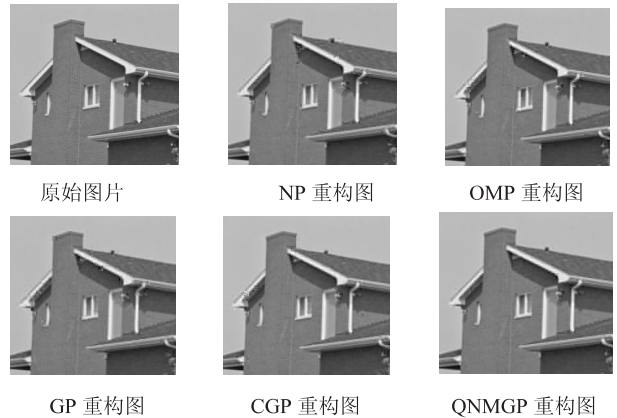


图 1 不同算法重构效果图

由图 1 可知, QNMGP 算法重构出的图像相较于 NP, OMP, GP, CGP 四种算法重构出的图像更加清晰。为了更加准确地说明 QNMGP 具有较好的重构性能, 表 1 显示了五种重构算法在重构时间、均方误差以及峰值信噪比方面的比较。

表 1 各算法重构性能比较

算法	时间/s	均方误差	峰值信噪比
NP	2.389 0	4.003 2e+006	30.271 6
OMP	2.762 2	3.671 6e+006	30.900 9
GP	1.807 5	3.693 1e+006	30.621 7
CGP	2.456 9	3.936 3e+006	30.529 3
QNMGP	2.350 8	2.955 1e+006	31.589 9

由表 1 可知, 在重构时间方面, QNMGP 低于 CGP 和 NP, 因此说明 QNMGP 在重构时间方面具有一定的优势。在均方误差方面, QNMGP 远远低于其他四种算法, NP 的最大, 由均方误差越小重构性能越好可知, QNMGP 重构效果是最好的。从峰值信噪比看, QN-

MGP 为 31.589 9,其余四种重构算法均比 QNMGP 低,由峰值信噪比越高重构效果越好可知,QNMGP 重构效果最好。

表 2 显示了在压缩比为 0.1 至 0.7 时各算法的峰值信噪比。

表 2 不同压缩比下各算法重构的峰值信噪比

M/N	NP	OMP	GP	CGP	QNMGP
0.1	5.224 2	5.224 2	5.399 5	4.903 2	5.222 7
0.2	10.465 6	10.465 6	11.040 9	10.427 7	10.748 9
0.3	21.743 7	21.743 7	21.134 0	18.292 6	22.436 0
0.4	28.630 1	28.630 1	28.382 6	26.057 9	28.843 4
0.5	30.271 6	30.900 9	30.621 7	30.529 3	31.589 9
0.6	31.071 3	31.071 3	30.927 9	30.973 2	31.446 3
0.7	31.196 5	31.196 5	31.064 0	31.225 2	31.632 6

从表中可以发现,在同一压缩比时,QNMGP 的峰值信噪比均高于其他四种算法,因此其重构误差也均低于其他四种算法,因此可以说明新提出的 QNMGP 重构效果最好。

6 结束语

为了解决传统迭代算法中需要计算正交投影的问题,将拟牛顿法和梯度追踪法相结合,基于 Matlab 仿真平台对 QNMGP 与 NP,OMP,GP,CGP 四种算法分别从重构时间、均方误差和峰值信噪比三个方面进行了仿真对比实验。结果表明,QNMGP 的重构效果远高于其他几种算法,在重构时间上也具有一定的优势。此外,还对不同压缩比下图像重构的峰值信噪比进行了对比分析,实验及其结果表明,在同一压缩比下,QNMGP 均高于其他算法,表明 QNMGP 在重构方面具有较好的性能。

参考文献:

[1] 石光明,刘丹华,高大化,等. 压缩感知理论及其研究进展[J]. 电子学报,2009,37(5):1070-1081.

[2] 尹宏鹏,刘兆栋,柴毅,等. 压缩感知综述[J]. 控制与决策,2013,28(10):1441-1445.

[3] Donoho D L. Compressed sensing[J]. IEEE Transaction on Information Theory,2006,52(4):1289-1306.

[4] Candes E. Compressive sampling[C]//Proceedings of the international congress of mathematicians. Madrid, Spain: [s. n.],2006:1433-1452.

[5] 林婉娟,赵瑞珍,李浩. 用于压缩感知信号重建的 NSLO 算法[J]. 新型工业化,2011,1(7):78-84.

[6] Zheng D,Wang Y,Wang L U,et al. Reconstruction algorithm for compressed sensing based on smoothed l0 norm and gaussian conjugate gradient method[J]. Journal of Computational Information Systems,2015,11:16.

[7] Mohimani H,Babaie-Zadeh M,Jutten C. A fast approach for overcomplete sparse decomposition based on smoothed l0 norm[J]. IEEE Transactions on Signal Processing,2009,57(1):289-301.

[8] 齐焕芳,徐源浩. 用于压缩感知信号重建的 SL_0 改进算法[J]. 电子科技,2015,28(4):27-30.

[9] Wang J,Zhang J,Chen C,et al. Basic pursuit of an adaptive impulse dictionary for bearing fault diagnosis[C]//International conference on mechatronics and control. [s. l.]:IEEE,2014.

[10] Yang J,Zhang Y,Yin W. A fast alternating direction method for TVL1-L2 signal reconstruction from partial Fourier data[J]. IEEE Journal of Selected Topics in Signal Processing,2010,4(2):288-297.

[11] Kirolos S,Laska J,Wakin M,et al. Analog-to-information conversion via random demodulation[C]//Proceedings of the IEEE Dallas circuits and systems workshop. Dallas:IEEE,2006.

[12] Monro D M. Matching pursuits basis selection:US,US8184921[P]. 2012.

[13] Kwon S,Wang J,Shim B. Multipath matching pursuit[J]. IEEE Transactions on Information Theory,2014,60(5):2986-3001.

[14] Tropp J. Greed is good:algorithmic results for sparse approximation[J]. IEEE Transactions on Information Theory,2004,50(10):2231-2342.

[15] 李 珅,马彩文,李 艳,等. 压缩感知重构算法综述[J]. 红外与激光工程,2013,42(S1):225-232.

[16] 刘明敏,刘栋良. 基于 BFGS 的遗传算法在数控机床故障识别研究系统中的应用[J]. 工业控制计算机,2015,28(6):38-39.

[17] 解可新,韩 健,林友联. 最优化方法[M]. 天津:天津大学出版社,2004.

[18] 王宜举,修乃华. 非线性最优化理论与方法[M]. 北京:科学出版社,2012.

[19] Nocedal J. Updating quasi-Newton matrices with limited storage[J]. Mathematics of Computation,1980,35(151):773-782.

[20] Blumensath T,Davies M E. Gradient pursuits[J]. IEEE Transactions on Signal Processing,2008,56(6):2370-2382.

[21] 乔现伟,乔 蕾. 基于限域拟牛顿法的混沌类电磁学机制算法及其在路径寻优中的应用[J]. 计算机应用,2015,35(3):696-699.