



HAL
open science

Package 'marqLevAlg' - Algorithme de Levenberg-Marquardt en R : Une alternative à 'optimx' pour des problèmes de minimisation.

Mélanie Prague, Amadou Diakite, Daniel Commenges

► To cite this version:

Mélanie Prague, Amadou Diakite, Daniel Commenges. Package 'marqLevAlg' - Algorithme de Levenberg-Marquardt en R : Une alternative à 'optimx' pour des problèmes de minimisation.. 1ères Rencontres R, Jul 2012, Bordeaux, France. hal-00717566

HAL Id: hal-00717566

<https://hal.science/hal-00717566v1>

Submitted on 13 Jul 2012

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Package ‘marqLevAlg’ - Algorithme de Levenberg-Marquardt en R : Une alternative à ‘optimx’ pour des problèmes de minimisation

M. Prague^a, A. Diakite^a and D. Commenges^a

^aÉpidémiologie-Biostatistique
Univ. Bordeaux, ISPED
INSERM, Centre INSERM U897
F-33000 Bordeaux, France
melanie.prague@isped.u-bordeaux2.fr

Mots clefs : Optimisation, Minimisation, Algorithme de Marquardt-Levenberg, RDM (Distance Relative au Minimum), Package ‘optimx’.

La méthode d’optimisation de Levenberg-Marquardt est particulièrement robuste et efficace. Elle est devenue un algorithme de référence pour la minimisation de fonctions. Cependant, aucune implémentation en R n’existait. Nous proposons le package ‘marqLevAlg’ implémentant l’algorithme de Levenberg-Marquardt sans contrainte [1]. Nous présenterons les spécificités de son utilisation ainsi qu’une comparaison avec les algorithmes existants (Nelder-mead, BFGS ...).

L’algorithme itératif de Levenberg-Marquardt permet de trouver un minimum local (éventuellement global) d’une fonction continue dérivable deux fois. Lorsque l’estimation à l’itération courante est loin du minimum, la matrice hessienne est souvent non inversible, l’algorithme de Levenberg-Marquardt permet de gonfler la diagonale pour proposer malgré tout une direction. À proximité du minimum, il correspond à l’algorithme de Newton-Raphson. L’implémentation du package ‘marqLevAlg’ ne comporte aucune variante particulière quant à l’algorithme lui-même.

Concernant les critères de convergence, deux critères secondaires (stabilisation des estimations et de la valeur de la fonction) et un critère principal (la Distance Relative au Minimum - RDM) sont implémentés. Leurs valeurs seuils sont modifiables par l’utilisateur. Le RDM [3] est un critère original correspondant à la norme des gradients dans la métrique des paramètres à estimer divisée par le nombre de paramètres à estimer pour s’adapter à la dimension du problème. Il est aussi interprétable comme le ratio entre l’erreur numérique et l’erreur statistique commise. Ainsi, sa valeur doit être aussi proche de zéro que possible et en tout cas inférieure à 1. Nous présenterons ce nouveau critère en insistant sur sa signification et ses propriétés d’invariance.

Nous comparerons les résultats obtenus avec ‘marqLevAlg’ avec ceux du package ‘optimx’ [2] qui fait référence dans le domaine. Nous utiliserons plusieurs exemples dont ceux disponibles dans le manuel d’ ‘optimx’. Avec des temps de calculs comparables, les estimations s’avèrent parfois meilleures en particulier pour des points de départ loin du minimum ou des surfaces non strictement convexes ou éloignées d’une forme quadratique. Les critères de comparaison principaux seront la valeur des estimations et de la fonction au point de convergence ainsi que la stabilité et la reproductibilité de ce minimum.

Références

- [1] Marquardt, D.W. (1963). An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters. *Journal of the society for Industrial and Applied Mathematics*, **11**(2), 431-441
- [2] Nash, J.C. and Varadhan, R. (2011). Unifying Optimization Algorithms to Aid Software System Users: optimx for R. *Journal of Statistical Software*, **49**(3), 1-14
- [3] Commenges, D., Jacqmin-Gadda, H., Proust, C. and Guedj, J. (2006). A newton-like algorithm for likelihood maximization: The robust-variance scoring algorithm. *Arxiv preprint math/0610402*