

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

M. Prague<sup>a</sup>, A. Diakite<sup>a</sup> and D. Commenges<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Épidémiologie-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 l’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. Proche 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 divisé 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 inférieure à 1 pour assurer la convergence. Nous présenterons ce nouveau critère en insistant sur sa signification et ses propriétés d’invariance.

Ce package ne remplace pas tout autre package d’optimisation. Il vient en complément comme une alternative ayant droit de cité. 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*