MAT-468: Sesión 5, Ecuaciones no lineales y Optimización

Felipe Osorio

http://fosorios.mat.utfsm.cl

Departamento de Matemática, UTFSM



Introducción

El objetivo de esta sección es resolver problemas del tipo:

Ecuaciones no lineales: Suponga que estamos interesados en obtener una raíz \widehat{x} para el sistema de k ecuaciones en k incógnitas:

$$g(x) = 0$$
,

 $\mathsf{donde}\; \boldsymbol{g}: \mathbb{R}^k \to \mathbb{R}^k.$

▶ Optimización no restringida: Considere $\phi: S \to \mathbb{R}$, donde $S \subset \mathbb{R}^k$. Entonces, deseamos obtener \widehat{x} , solución del problema:

$$\min_{\boldsymbol{x} \in S} \ \phi(\boldsymbol{x}) \qquad \text{o} \qquad \max_{\boldsymbol{x} \in S} \ \phi(\boldsymbol{x})$$



Sea $\phi:S o\mathbb{R}$ una función real-valuada definida en S y sea $c\in S\subset\mathbb{R}^k$. Decimos que

 $ightharpoonup \phi$ tiene un mínimo local en c si existe una bola B(c) tal que

$$\phi(\mathbf{x}) \ge \phi(\mathbf{c}), \quad \forall \mathbf{x} \in S \cap B(\mathbf{c}).$$

lacktriangledown ϕ tiene un mínimo local estricto en c si podemos escoger B(c) tal que

$$\phi(\mathbf{x}) > \phi(\mathbf{c}), \quad \forall \mathbf{x} \in S \cap B(\mathbf{c}), \mathbf{x} \neq \mathbf{c}.$$

 \triangleright ϕ tiene un mínimo absoluto en c si

$$\phi(\mathbf{x}) \ge \phi(\mathbf{c}), \quad \forall \mathbf{x} \in S.$$

 \blacktriangleright ϕ tiene un mínimo absoluto estricto en c si

$$\phi(\mathbf{x}) > \phi(\mathbf{c}), \quad \forall \mathbf{x} \in S, \mathbf{x} \neq \mathbf{c}$$



$${}^{1}B(c) = \{x : x \in \mathbb{R}^{k}, ||x - c|| < r\}$$

Sea $\phi:S o\mathbb{R}$ una función real-valuada definida en S y sea $c\in S\subset\mathbb{R}^k$. Decimos que

lacktriangledown ϕ tiene un mínimo local en c si existe una bola B(c) tal que

$$\phi(\boldsymbol{x}) \ge \phi(\boldsymbol{c}), \quad \forall \, \boldsymbol{x} \in S \cap B(\boldsymbol{c}).$$

lacktriangledown ϕ tiene un mínimo local estricto en c si podemos escoger B(c) tal que

$$\phi(\boldsymbol{x}) > \phi(\boldsymbol{c}), \quad \forall \, \boldsymbol{x} \in S \cap B(\boldsymbol{c}), \, \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{c}.$$

 $ightharpoonup \phi$ tiene un mínimo absoluto en c si

$$\phi(\boldsymbol{x}) \ge \phi(\boldsymbol{c}), \quad \forall \, \boldsymbol{x} \in S.$$

lacktriangledown ϕ tiene un mínimo absoluto estricto en c si

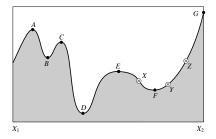
$$\phi(\mathbf{x}) > \phi(\mathbf{c}), \quad \forall \mathbf{x} \in S, \mathbf{x} \neq \mathbf{c}.$$



 $^{{}^{1}}B(c) = \{x : x \in \mathbb{R}^{k}, ||x - c|| < r\}$

- lacktriangle Si ϕ tiene un mínimo en $oldsymbol{c}$, entonces $\psi:=-\phi$ tiene un máximo en $oldsymbol{c}$
- \blacktriangleright Si c está en el interior de S y ϕ es diferenciable en c, entonces c es un punto crítico de ϕ si

$$\left. \frac{\partial \phi(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} \right|_{x=c} = \mathbf{0}.$$





- lacktriangle La existencia de extremos de ϕ esta asegurada por el Teorema de Weierstrass.
- ▶ Condición necesaria para un mínimo local: Sea $\phi: S \to \mathbb{R}$ función real-valuada definida en $S \subset \mathbb{R}^k$ y asuma que ϕ tiene un mínimo local en un punto interior $c \in S$. Si ϕ es diferenciable en c, entonces

$$\left. \frac{\partial \phi(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} \right|_{x=c} = \mathbf{0}.$$

Además, si ϕ es dos veces diferenciable en c, entonces

$$\mathsf{H}\,\phi(\boldsymbol{c}) = \frac{\partial^2 \phi(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x} \partial \boldsymbol{x}^\top} \Big|_{x=c}$$

es matriz definida positiva.

Observación: Si ϕ tiene un máximo local, la condición anterior es substituída por H $\phi(c) \leq 0$.



Ejemplo de ecuaciones no lineales: Método de momentos

El método de momentos es basado en resolver el sistema de ecuaciones:

$$\mathsf{E}(X^r) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^r, \qquad r = 1, \dots, k.$$

Por ejemplo, podemos considerar obtener estimadores para α y β como solución del sistema 2×2 :

$$\alpha\beta = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i,$$

$$\alpha \beta^2 (1 - \alpha) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^2.$$

Que puede ser planteado como obtener una raíz de la ecuación (no lineal) g(heta)=0.



Suponga que se desea resolver g(x)=0. De este modo, suponiendo que g es función suficientemente suave,

$$g(x) = g(x^{(0)}) + \dot{g}(x^{(0)})(x - x^{(0)}) + r(x - x^{(0)}),$$
 (1)

donde $\dot{\boldsymbol{g}}(\boldsymbol{x}^{(0)}) = \partial \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})/\partial \boldsymbol{x}^{\top}|_{x=x^{(0)}}$ y $\boldsymbol{r}(\boldsymbol{u})$ debe satisfacer,

$$\lim_{u\to 0}\frac{\boldsymbol{r}(\boldsymbol{u})}{\|\boldsymbol{u}\|}=\mathbf{0}.$$

De este modo, basándose en la aproximación de primer orden en (1), tenemos

$$egin{aligned} m{0} &= m{g}(m{x}) \ &pprox m{g}(m{x}^{(0)}) + \dot{m{g}}(m{x}^{(0)}) (m{x} - m{x}^{(0)}), \end{aligned}$$

Es decir, $\dot{m g}(m x^{(0)})(m x-m x^{(0)})=-m g(m x^{(0)})$ y, si $\dot{m g}(m x^{(0)})$ tiene inversa. Entonces,

$$x = x^{(0)} - {\dot{g}(x^{(0)})}^{-1}g(x^{(0)}).$$
 (2)



Suponga que se desea resolver g(x)=0. De este modo, suponiendo que g es función suficientemente suave,

$$g(x) = g(x^{(0)}) + \dot{g}(x^{(0)})(x - x^{(0)}) + r(x - x^{(0)}),$$
 (1)

donde $\dot{\boldsymbol{g}}(\boldsymbol{x}^{(0)}) = \partial \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})/\partial \boldsymbol{x}^{\top}|_{x=x^{(0)}}$ y $\boldsymbol{r}(\boldsymbol{u})$ debe satisfacer,

$$\lim_{u\to 0}\frac{\boldsymbol{r}(\boldsymbol{u})}{\|\boldsymbol{u}\|}=\mathbf{0}.$$

De este modo, basándose en la aproximación de primer orden en (1), tenemos

$$egin{aligned} \mathbf{0} &= oldsymbol{g}(oldsymbol{x}) \ &pprox oldsymbol{g}(oldsymbol{x}^{(0)}) + \dot{oldsymbol{g}}(oldsymbol{x}^{(0)})(oldsymbol{x} - oldsymbol{x}^{(0)}), \end{aligned}$$

Es decir, $\dot{\boldsymbol{g}}(\boldsymbol{x}^{(0)})(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^{(0)}) = -\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^{(0)})$ y, si $\dot{\boldsymbol{g}}(\boldsymbol{x}^{(0)})$ tiene inversa. Entonces,

$$x = x^{(0)} - {\dot{g}(x^{(0)})}^{-1}g(x^{(0)}).$$
 (2)



La ecuación anterior motiva el esquema iterativo:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \{-\dot{g}(x^{(k)})\}^{-1}g(x^{(k)}).$$
 (3)

que define el Método de Newton.

La convergencia del algoritmo es local (ver, por ejemplo, Dennis y Schnabel, 1996). Esto significa que la estimación inicial $x^{(0)}$ es cercana a la solución.

La convergencia local requiere de los siguientes supuestos

- La ecuación g(x) = 0 tiene una solución \widehat{x} .
- La función $\dot{\boldsymbol{g}}(\cdot)$ es Lipschitz continua cerca de $\widehat{\boldsymbol{x}}$.
- $ightharpoonup \dot{m{g}}(\widehat{m{x}})$ es no singular.

Continuidad Lipschitz cerca de $oldsymbol{x}^*$ indica que existe $\gamma>0$ (constante Lipschitz) tal que

$$\|\dot{g}(x) - \dot{g}(y)\| \le \gamma \|x - y\|$$

para todo $oldsymbol{x},oldsymbol{y}$ suficientemente cerca de $oldsymbol{x}^*$



La ecuación anterior motiva el esquema iterativo:

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \{-\dot{\mathbf{g}}(\mathbf{x}^{(k)})\}^{-1}\mathbf{g}(\mathbf{x}^{(k)}). \tag{3}$$

que define el Método de Newton.

La convergencia del algoritmo es local (ver, por ejemplo, Dennis y Schnabel, 1996). Esto significa que la estimación inicial $x^{(0)}$ es cercana a la solución.

La convergencia local requiere de los siguientes supuestos:

- La ecuación g(x) = 0 tiene una solución \widehat{x} .
- La función $\dot{\boldsymbol{g}}(\cdot)$ es Lipschitz continua cerca de $\widehat{\boldsymbol{x}}$.
- $ightharpoonup \dot{q}(\widehat{x})$ es no singular.

Continuidad Lipschitz cerca de $m{x}^*$ indica que existe $\gamma>0$ (constante Lipschitz) tal que

$$\|\dot{\boldsymbol{g}}(\boldsymbol{x}) - \dot{\boldsymbol{g}}(\boldsymbol{y})\| \le \gamma \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|,$$

para todo x, y suficientemente cerca de x^* .



Método de Newton: Algoritmo básico

Algoritmo 1: Método de Newton.

```
Entrada: Estimación inicial x^{(0)} y nivel de tolerancia 	au
    Salida: Solución \hat{x}.
1 begin
           Hacer k \leftarrow 0
2
          Evaluar \dot{\boldsymbol{g}}(\boldsymbol{x}^{(k)}) y \gamma = \|\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^{(k)})\|^2
3
          while \gamma > \tau do
                  Resolver, para p, el sistema de ecuaciones:
                                                          \dot{\boldsymbol{g}}(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{p} = -\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^{(k)})
                    Actualizar \boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \lambda \boldsymbol{p}
                  k \leftarrow k + 1
6
          end
7
           \mathbf{return} \ \widehat{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{x}^{(k+1)}
9 end
```



Método de Newton: Algunas consideraciones

lacktriangle El paso Newton $m{p}$ usualmente es calculado mediante $\dot{m{g}}(m{x}^{(k)}) = m{L}m{U}$ y resolver

$$\boldsymbol{LUp} = -\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^{(k)})$$

Note que podemos aproximar la matriz Jacobiana $\dot{g}(x) = \partial g(x)/\partial x^{\top}$ por diferencias divididas. En efecto la j-ésima columna de $\dot{g}(x)$ es dada por:

$$\dot{m{g}}_{j}(m{x})pprox rac{m{g}(m{x}+hm{e}_{j})-m{g}(m{x})}{h},$$

para h "pequeño" y e_j un vector unidad.



Método de Broyden: Ecuaciones no lineales

Para resolver la ecuación

$$g(x) = 0,$$

Podemos usar un algoritmo Newton, cuya derivada $g^{\prime}(x)$ en $x^{(k)}$ es aproximada por la diferencia

$$b_k = \frac{g(x^{(k)}) - g(x^{(k-1)})}{x^{(k)} - x^{(k-1)}},$$
(4)

y entonces hacer la iteración

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - b_k^{-1} g(x^{(k)}).$$

Extensiones para dimensiones mayores debe imitar la aproximación en (4).



Método de Broyden: Ecuaciones no lineales

El método de Broyden se basa en obtener una matriz ${m B}_k$ tal que satisfaga la ecuación secante:

$$B_k(x^{(k)} - x^{(k-1)}) = g(x^{(k)}) - g(x^{(k-1)}).$$

Considere $\pmb{x}^{(k)}$ y \pmb{B}_k aproximaciones actuales de la solución y matriz Jacobiana, respectivamente, entonces

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda_k \{ -B_k^{-1} g(x^{(k)}) \},$$

donde λ_k es un largo de paso y $m{p}_k = - m{B}_k^{-1} m{g}(m{x}^{(k)})$ es la dirección Broyden.



Método de Broyden: Ecuaciones no lineales

Luego del cálculo de $m{x}^{(k+1)}$, $m{B}_k$ es actualizada a $m{B}_{k+1}$ usando la actualización Broyden

$$\boldsymbol{B}_{k+1} = \boldsymbol{B}_k + \frac{(\boldsymbol{y}_k - \boldsymbol{B}_k \boldsymbol{s}_k) \boldsymbol{s}_k^\top}{\boldsymbol{s}_k^\top \boldsymbol{s}_k},$$

donde

$$y_k = g(x^{(k+1)}) - g(x^{(k)}), \qquad s_k = x^{(k+1)} - x^{(k)}.$$

Note además que para una implementación eficiente del procedimiento podemos obtener B_{k+1}^{-1} usando la fórmula de Sherman-Morrison.



Aplicación: Estimación máximo verosímil

Estimación máximo verosímil: Considere el modelo estadístico:

$$\mathcal{P} = \{ P_{\theta} : \boldsymbol{\theta} \in \Theta \subset \mathbb{R}^p \},$$

tal que, tenemos la función de densidad conjunta $f(y; \theta)$. Entonces, se define la función de log-verosimilitud como

$$\ell_n(\boldsymbol{\theta}) = \log f(\boldsymbol{y}; \boldsymbol{\theta}).$$

El objetivo es obtener el estimador ML como solución del problema:

$$\max_{\theta \in \Theta} \ \ell_n(\boldsymbol{\theta}),$$

y denotamos a este estimador como $\widehat{\boldsymbol{\theta}}$.



Estimación ML: Supuestos

Es habitual realizar los siguientes supuestos:

- A1 (compacidad) Es espacio paramétrico $\Theta \in \mathbb{R}^p$ es cerrado y acotado.
- A2 (identificabilidad) El parámetro $m{ heta}$ es identificado, es decir para $m{ heta}_1
 eq m{ heta}_2$, se tiene

$$f(\boldsymbol{y};\boldsymbol{\theta}_1) \neq f(\boldsymbol{y};\boldsymbol{\theta}_2).$$

A3 (acotamiento) Sea θ_* el valor verdadero para θ . Entonces $\mathsf{E}_{\theta_*}\{|\log f({\pmb y};{\pmb \theta})|\}$ $<\infty$ y para todo θ ,

$$\mathsf{E}_{\theta_*}\{(\log f(\boldsymbol{y};\boldsymbol{\theta}))_+\}<\infty.$$

A4 (continuidad) La densidad es continua en θ , es decir

$$\lim_{\theta_k \to \theta} f(\boldsymbol{y}; \boldsymbol{\theta}_k) = f(\boldsymbol{y}; \boldsymbol{\theta})$$



Estimación ML: Algunos resultados

Resultado 1 (consistencia)

Bajo los supuestos A1-A4, el MLE $\widehat{m{ heta}}_n$ converge a $m{ heta}_*.$

Resultado 2

Bajo condiciones apropiadas

$$\frac{1}{\sqrt{n}}\boldsymbol{U}(\boldsymbol{\theta}_*) \stackrel{\mathsf{D}}{\longrightarrow} \mathsf{N}_p(\boldsymbol{0},\boldsymbol{\mathcal{F}}(\boldsymbol{\theta}_*))$$

donde $oldsymbol{U}(oldsymbol{ heta}) = \partial \ell_n(oldsymbol{ heta})/\partial oldsymbol{ heta}$ y la matriz de covarianza

$${\mathcal F}({\boldsymbol \theta}) = {\sf Cov}({\boldsymbol U}({\boldsymbol \theta}))$$



Estimación ML: Algunos resultados

Considere

$$\ell_n(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^n \log f(\boldsymbol{y}_i; \boldsymbol{\theta}).$$

y de este modo, tenemos el siguiente resultado.

Resultado 3

Sea
$$H_n(\theta) = \ddot{\ell}_n(\theta) \ (= \partial^2 \ell(\theta) / \partial \theta \partial \theta^{\top})$$
. Entonces

$$\frac{1}{n}\operatorname{H}_n(\boldsymbol{\theta}) \stackrel{\mathrm{a.s.}}{\longrightarrow} \operatorname{E}(\operatorname{H}(\boldsymbol{\theta})),$$

y
$$\mathsf{E}(-\mathsf{H}(\pmb{\theta})) = \pmb{\mathcal{F}}(\pmb{\theta})$$
, donde

$$\mathcal{F}(\boldsymbol{\theta}) = \mathsf{E}\left\{-\frac{\partial^2 \log f(\boldsymbol{y}; \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta} \partial \boldsymbol{\theta}^{\top}}\right\}.$$



Estimación ML: Algunos resultados

Resultado 4 (normalidad asintótica)

Bajo condiciones apropiadas, tenemos

$$\sqrt{n}(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n - \boldsymbol{\theta}_*) \stackrel{\mathsf{D}}{\longrightarrow} \mathsf{N}_p(\mathbf{0}, \boldsymbol{\mathcal{F}}^{-1}(\boldsymbol{\theta}_*).$$

Resultado 5

Asintóticamente, para heta en una vecindad de $\widehat{ heta}_n$, tenemos que la log-verosimilitud es cuadrática.

Note que

$$\frac{1}{n}\ell_n(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{n}\ell_n(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n) + \frac{1}{n}\dot{\ell}_n^{\top}(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n)(\boldsymbol{\theta} - \widehat{\boldsymbol{\theta}}_n) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{\theta} - \widehat{\boldsymbol{\theta}}_n)^{\top} \left\{ \frac{1}{n}\ddot{\ell}_n(\boldsymbol{z}) \right\}(\boldsymbol{\theta} - \widehat{\boldsymbol{\theta}}_n),$$

para z en la misma vecindad, y como $\dot{\ell}_n(\widehat{m{ heta}}_n) = m{U}(\widehat{m{ heta}}_n) = m{0}$ el resultado sigue.



Algoritmos Newton y Fisher-scoring

Algoritmo Newton-Raphson

La etapa (k+1)-ésima del algoritmo es dada por

$$\boldsymbol{\theta}^{(k+1)} = \boldsymbol{\theta}^{(k)} + \lambda_k \{ -\ddot{\ell}(\boldsymbol{\theta}^{(k)}) \}^{-1} \boldsymbol{U}(\boldsymbol{\theta}^{(k)}).$$

Algoritmo Fisher-scoring

El procedimiento iterativo es definido mediante:

$$\boldsymbol{\theta}^{(k+1)} = \boldsymbol{\theta}^{(k)} + \lambda_k \boldsymbol{\mathcal{F}}^{-1}(\boldsymbol{\theta}^{(k)}) \boldsymbol{U}(\boldsymbol{\theta}^{(k)}).$$



Otra variante quasi-Newton

Algoritmo BHHH

Recuerde que $\ell_n({\boldsymbol \theta}) = \sum_i \log f({\boldsymbol y}_i;{\boldsymbol \theta})$. De este modo,

$$\dot{\ell}_n(\boldsymbol{\theta}) = \boldsymbol{U}_n(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^n \boldsymbol{U}_i(\boldsymbol{\theta}),$$

donde $U_i(\theta) = \partial \log f(y_i; \theta)/\partial \theta$. Así, podemos usar la aproximación

$$\frac{1}{n}\ddot{\ell}_n(\boldsymbol{\theta}) \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \boldsymbol{U}_i(\boldsymbol{\theta}) \boldsymbol{U}_i^{\top}(\boldsymbol{\theta}).$$

Lo que lleva al algoritmo de Berndt-Hall-Hall-Hausman:

$$\boldsymbol{\theta}^{(k+1)} = \boldsymbol{\theta}^{(k)} + \lambda_k \left\{ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \boldsymbol{U}_i(\boldsymbol{\theta}^{(k)}) \boldsymbol{U}_i^{\top}(\boldsymbol{\theta}^{(k)}) \right\}^{-1} \boldsymbol{U}_n(\boldsymbol{\theta}^{(k)}).$$

