Estatística Computacional

Métodos de otimização - Parte 1

Prof. Paulo Cerqueira Jr
Faculdade de Estatística - FAEST
Programa de Pós-graduação em Matemática e Estatística - PPGME

https://github.com/paulocerqueirajr

Introdução

Introdução

- Nessa unidade estaremos interessados no seguinte:

> Problema 1: Seja $f: \Theta \to \mathrm{R}$. Encontre um ponto $\theta \in \Theta$ que minimiza a função f.

- É importante observar que o problema de encontrar um ponto $\theta \in \Theta$ que maximiza uma função $g: \Theta \to \mathrm{R}$, recai no problema anterior, basta ver que maximizar g é o mesmo que minimizar $f = -g$.
- Problemas de otimização (ou seja, de minimização ou maximização) ocorrem com frequência em diversas áreas das Ciências Exatas, em particular, na Estatística.

Método de Newton-Raphson

Caso unidimensional - Descrição do Método.

- O método de Newton-Raphson é um algoritmo apropriado para encontrar raízes (ou zeros) de funções.
- Formalmente, estamos interessados em encontrar um ponto $\hat{\theta}$ no domínio de uma função $h : \Theta \rightarrow \mathrm{R}$ tal que $h(\hat{\theta}) = 0$.
- Inicialmente vamos considerar o caso onde h é uma função de uma única variável.

Caso unidimensional - Descrição do Método.

- Nessa situação, o método pode ser descrito nos seguintes passos:

1. Fixe um número real $\epsilon > 0$;

2. Dê uma aproximação inicial θ_0 para $\hat{\theta}$;

3. Para $k \geq 0$, faça

$$\theta_{k+1} = \theta_k - \frac{h(\theta_k)}{h^{'}(\theta_k)}.$$

4. Pare o processo iterativo se $|\theta_{k+1} - \theta_k| < \epsilon$. Caso contrário, volte para o passo anterior.

Caso unidimensional - Descrição do Método

- O método de Newton-Raphson possui uma interpretação geométrica simples.
- Basta ver que para todo $k > 0$:

$$h^{'}(\theta_k) = \frac{h(\theta) - 0}{\theta_k - \theta_{k+1}} \quad \Rightarrow \quad \theta_{k+1} = \theta_k - \frac{h(\theta_k)}{h^{'}(\theta_k)}$$

dado alguma aproximação inicial criteriosa θ_0.

- É possível provar que a sequência $(\theta_k)_{k \geq 0}$ converge para $\hat{\theta}$ quando $k \to \infty$, se θ_0 é escolhido próximo de $\hat{\theta}$.

Exemplo

> A função $h(\theta) = 2\theta - \cos(\theta)$ possui uma raiz real $\hat{\theta}$ isolada no intervalo $[0, \pi/4]$. Encontre um valor aproximado de $\hat{\theta}$ usando o método de Newton-Raphson.

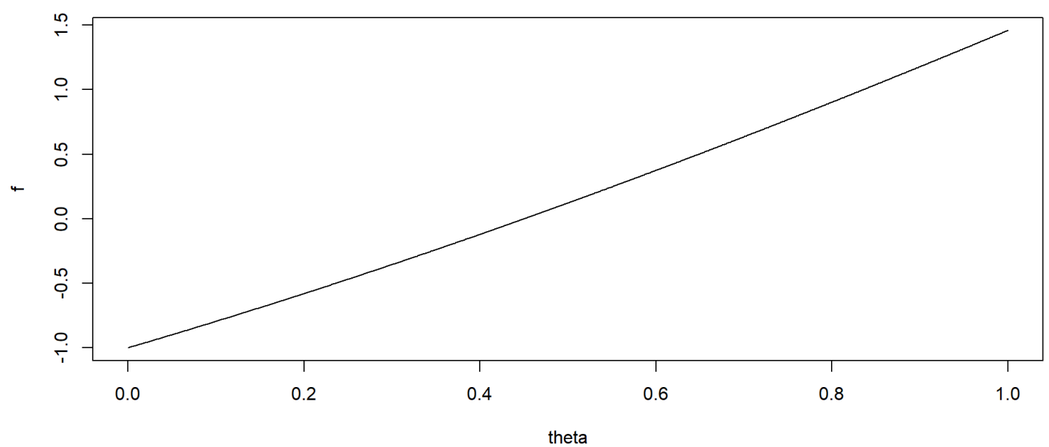
`Solução:` Primeiramente temos sabemos que:

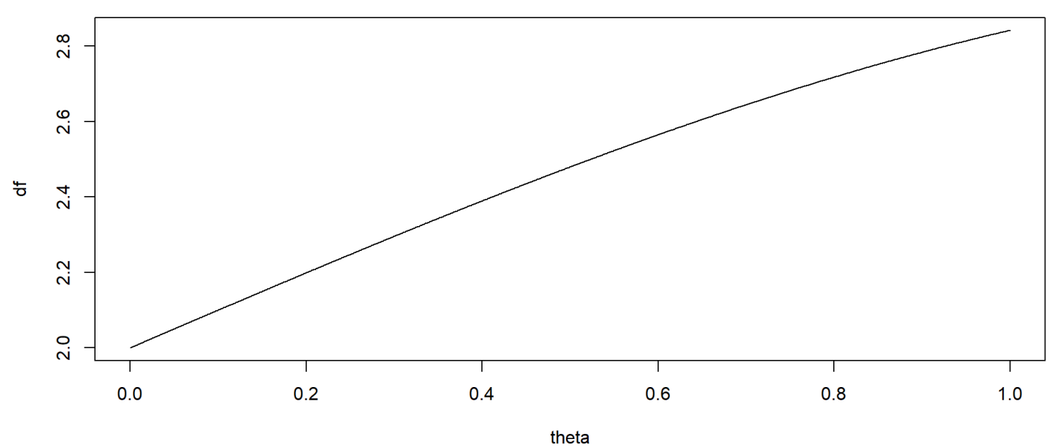
$$h^{'}(\theta) = 2 + \sin(\theta).$$

- Fixe $\epsilon = 0,0001$ e $\theta_0 = \pi/8$.
- Agora itere e para $k \geq 0$,

$$\theta_{k+1} = \theta_k - \frac{2\theta_k - \cos(\theta_k)}{2 + \sin(\theta_k)}$$

Exemplo


f
-1.0
-0.5
0.0
0.5
1.0
1.5
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
theta


df
2.0
2.2
2.4
2.6
2.8
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
theta

Exemplo:

- Código em R:

```r
theta.0 <- pi/8
theta.0
```

```
[1] 0.3926991
```

```r
precisao <- 0.0001
dif <- 1
while(dif > precisao){
  razao <- (2*theta.0 - cos(theta.
                            sin(
  theta.1 <- theta.0 - razao
  dif <- abs(theta.1 - theta.0)
  theta.0 <- theta.1
  cat("Valor de theta=",theta.0, "
}
```

```
Valor de theta= 0.450819
Valor de theta= 0.4501837
Valor de theta= 0.4501836
```

```r
raiz <- theta.0
raiz
```

```
[1] 0.4501836
```

```r
h <- 2*raiz - cos(raiz)
h
```

```
[1] 2.553513e-15
```

Newton-Raphson para Otimização

Newton-Raphson para Otimização

- Considere o problema 1 para o caso em que f é uma função de uma única variável.
- O método de Newton-Raphson é apropriado para resolver numericamente este problema de otimização, basta encontrar as raízes de $h = f^{'}$.
- Neste caso o mínimo θ pode ser encontrado seguindo os seguintes passos:

1. Fixe um número real $\epsilon > 0$;
2. Dê uma aproximação inicial θ_0 para $\hat{\theta}$;
3. Para $k \geq 0$, faça

$$\theta_{k+1} = \theta_k - \frac{f^{'}(\theta_k)}{f^{''}(\theta_k)}.$$

4. Pare o processo iterativo se $|\theta_{k+1} - \theta_k| < \epsilon$. Caso contrário, volte para o passo anterior.

Exemplo

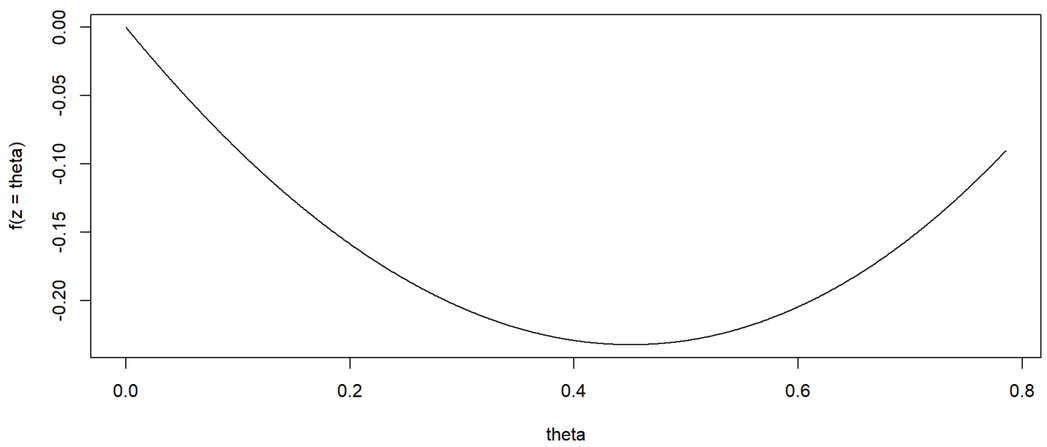
> Utilize o método de Newton-Raphson para encontrar o mínimo da função $f(\theta) = \theta^2 - \sin(\theta)$.

`Solução:`

- Fixe $\epsilon = 0,0001$ e $\theta_0 = \pi/8$, itere e para $k \geq 0$

$$\theta_{k+1} = \theta_k - \frac{2\theta_k - \cos(\theta_k)}{2 + \sin(\theta_k)}$$

Exemplo:



- O R também possui funções prontas para pesquisar, dentro de um intervalo, um ponto de mínimo (ou de máximo) de uma função.
- Veja o código abaixo aplicado para o exemplo em questão:

```
optimize(f, c(0,pi/4),
         tol=0.000001) # Otimizaçã
```

```
$minimum
[1] 0.4501836

$objective
[1] -0.2324656
```

Newton-Raphson em Estatística

Newton-Raphson em Estatística

- Seja $(X_1, \ldots, X_n)$ uma a.a. de tamanho n da distribuição de uma v.a. X com densidade $f(x; \theta)$ onde θ pertence ao espaço paramétrico Θ (por enquanto, considere que Θ é unidimensional).
- A função de verossimilhança de θ $(L : \Theta \to \mathrm{R})$ associada à a.a. observada $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_n)$ é definida por

$$L(\theta) = L(\theta, \mathbf{x}) = \prod_{i=1}^{n} f(x_i; \theta)$$

- Seja a função de log verossimilhança dada por:

$$\ell(\theta) = \ln(L(\theta)).$$

e a função escore:

$$U(\theta) = \frac{d \ln L(\theta)}{d\theta} = \frac{d\ell(\theta)}{d\theta} = \ell'.$$

Newton-Raphson em Estatística

- Portanto o estimador de máxima verossimilhaça, denotado por $\hat{\theta}$, satisfaz as seguintes equações:

$$U(\hat{\theta}) = 0 \quad \Rightarrow \quad \hat{\theta} = \max_{\theta \in \Theta} \ell(\theta).$$

- Em alguns casos pode ser difícil obter uma solução analítica explícita para as equações.
- Nesses casos, é possível obter uma soluçãao aproximada para $\hat{\theta}$ por meio de métodos numéricos.
- Um alternativa consiste em utilizar o método de Newton-Raphson para aproximar a raiz da função escore (ou maximizar a logverossimilhança).

Newton-Raphson em Estatística

1. Fixe um número real $\epsilon > 0$;

2. Dê uma aproximação inicial θ_0 para $\hat{\theta}$;

- Explicitamente, basta seguir o seguinte algoritmo: 3. Para $k \geq 0$, faça

$$\theta_{k+1} = \theta_k - \frac{U(\theta_k)}{U^{'}(\theta_k)} = \theta_k - \frac{\ell^{'}(\theta_k)}{\ell^{''}(\theta_k)}.$$

4. Pare o processo iterativo se $|\theta_{k+1} - \theta_k| < \epsilon$. Caso contrário, volte para o passo anterior.

- A sequência $(\theta_k)_{k \geq 0}$ converge para $\hat{\theta}$ quando $k \to \infty$, se θ_0 é escolhido próximo de $\hat{\theta}$

(Dica: um gráfico de $U(\theta)$ ou $\ell(\theta)$ pode ajudar nessa escolha inicial).

Método Escore

Método Escore

- Em alguns casos, a substituição de $U^{'}(\theta_k)$ por $E(U^{'}(\theta_k))$, apresenta significativa simplificação no procedimento.
- Esse método é conhecido como método do escore e pode ser descrito assim:

1. Fixe um número real $\epsilon > 0$;
2. Dê uma aproximação inicial θ_0 para $\hat{\theta}$;
3. Para $k \geq 0$, faça

$$\theta_{k+1} = \theta_k - \frac{U(\theta_k)}{E(U^{'}(\theta_k))} = \theta_k - \frac{U(\theta_k)}{I(\theta_k)}.$$

em que $I(\theta_k)$ é a informação de Fisher de θ.

Exemplo

Sejam $X_1, \ldots, X_n$ uma a.a. de X, com função densidade dada por

$$f(x \mid \theta) = \frac{1}{2}(1 + \theta x), \quad -1 \leq x \leq 1, \quad -1 \leq \theta \leq 1.$$

Determine o EMV para θ pelo método de Newton-Raphson e Escore.

Sol. Inicalmente temos que a função de verossimilhança é dada por

$$L(x \mid \theta) = \frac{1}{2^n} \prod_{i=1}^{n} (1 + \theta x_i),$$

de modo que

$$U(\theta) = \ell' = \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i}{1 + \theta x_i}$$

Exemplo

E dessa forma

$$U^{'}(\theta) = \ell^{''} = -\sum_{i=1}^{n} \frac{x_i^2}{(1+\theta x_i)^2}.$$

A informação de Fisher de θ é igual,

$$I(\theta) = \frac{1}{2\theta^3}\left\{\log\left(\frac{1+\theta}{1-\theta}\right) - 2\theta\right\}.$$

Gerou-se $n = 20$ valores, com $\theta = 0.4$ usando a função densidade do exemplo via método da transformação inversa, logo

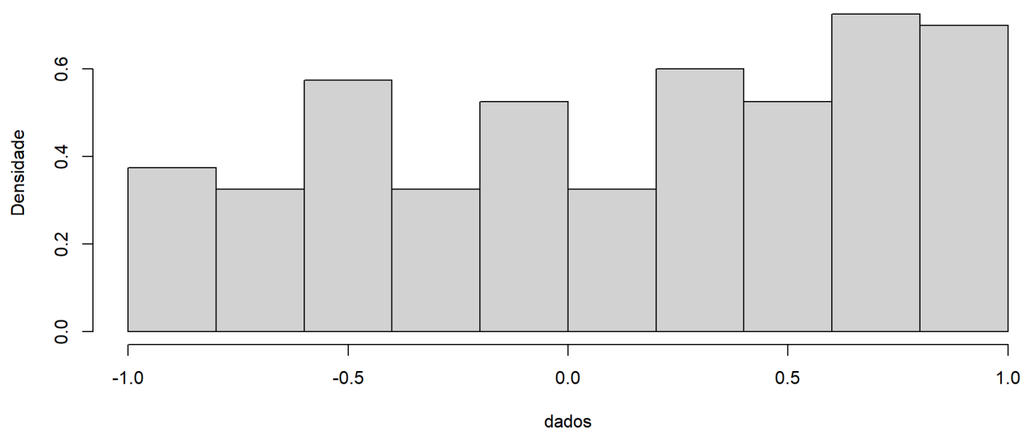
$$x = \frac{-1 + 2\sqrt{1/4 - \theta(1/2 - \theta/4 - u)}}{\theta}.$$

em que $U \sim U(0, 1)$.

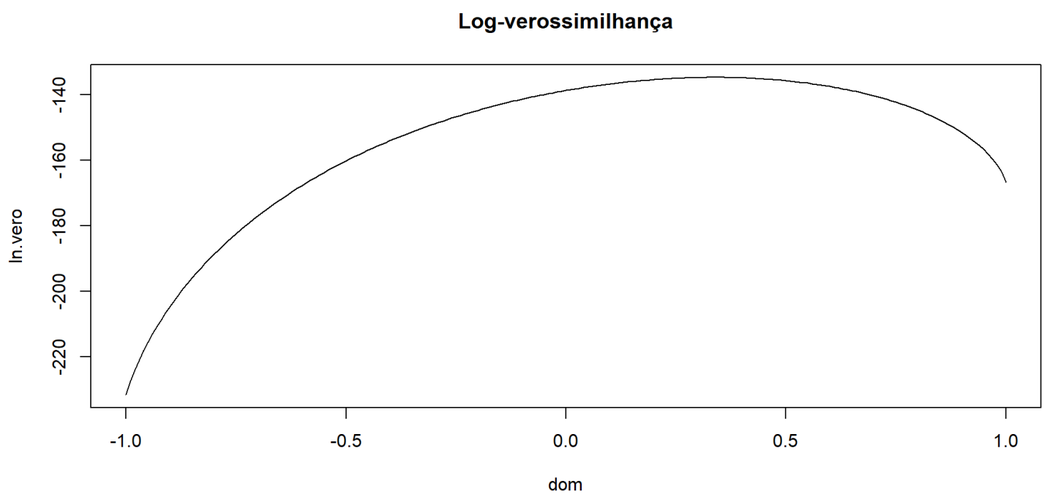
Exemplo

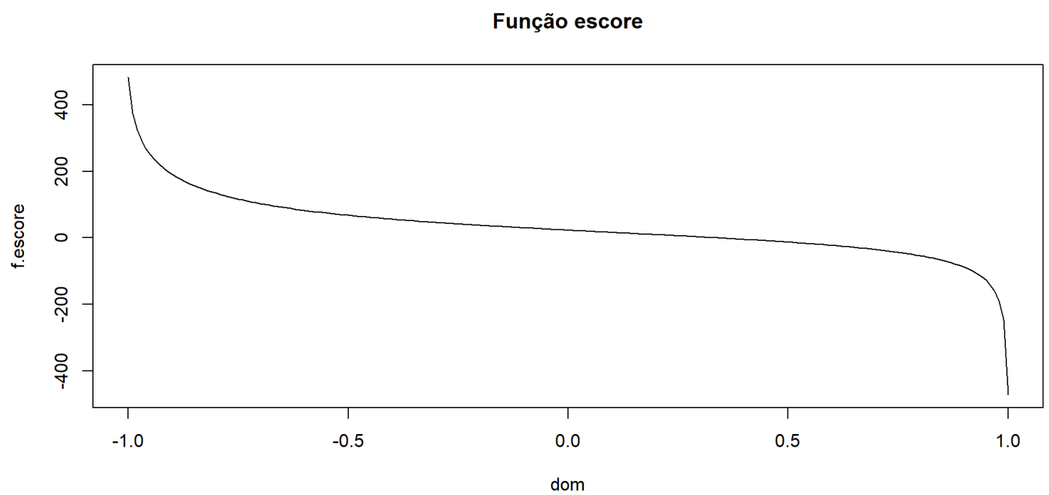
- Código em R:

```r
set.seed(123456)
n <- 200
theta <- 0.4
u <- runif(n,0,1)
raiz <- 1-(theta*(2-theta))+(4*the
dados <-(-1+sqrt(raiz))/(theta)
```



Exemplo


Log-verossimilhança
ln.vero
-140
-160
-180
-200
-220
-1.0
-0.5
0.0
0.5
1.0
dom


Função escore
f.escore
400
200
0
-200
-400
-1.0
-0.5
0.0
0.5
1.0
dom

Exemplo - Comparação dos métodos:

Newton-Raphson:

```r
theta.zero <- 0.15
precisao <- 0.000001
dif <- 1
while(dif > precisao){
 num <- S(theta.zero)
 den <- S.prime(theta.zero)
 theta.um <- theta.zero - (num/den
 dif <- abs(theta.um - theta.zero)
 theta.zero <- theta.um
 print(theta.zero)
}
```

```
[1] 0.3459363
[1] 0.3398386
[1] 0.3398224
[1] 0.3398224
```

```r
raiz.NR <- theta.zero
raiz.NR # Método NR.
```

```
[1] 0.3398224
```

Escore:

```r
theta.zero <- 0.15
dif <- 1
while(dif > precisao){
 num <- S(theta.zero)
 a <- 2*theta.zero
 b <- log((1+theta.zero)/(1-theta.
 den <- n*(1/(2*theta.zero^3))*b
 theta.um <- theta.zero + (num/den
 dif <- abs(theta.um - theta.zero)
 theta.zero <- theta.um
 print(theta.zero)
}
```

```
[1] 0.3433802
[1] 0.3397711
[1] 0.3398231
[1] 0.3398223
```

```r
raiz.E <- theta.zero
raiz.E # Método Escore
```

```
[1] 0.3398223
```

Caso Multidimensional

Método de Newton-Raphson

- Agora considere o problema de otimização quando Θ é um espaço multidimensional.
- Antes de apresentar o método de Newton-Raphson nesse caso, vejamos alguns conceitos básicos de Cálculo.

> Noções preliminares:

Seja n um inteiro positivo e seja $D \subseteq \mathrm{R}^n$. Considere uma função g que associa a cada $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_n) \in D$ um numero real $g(\mathbf{x})$, ou seja, $g : D \to \mathrm{R}$. O gradiente de g, denotado por

$$\nabla\, g(\mathbf{x}) = \left(\frac{\partial g}{\partial x_1}, \ldots, \frac{\partial g}{\partial x_n} \right).$$

Método de Newton-Raphson

- Seja $(X_1, \ldots, X_n)$ uma a.a. de tamanho n da distribuição de uma v.a. X com densidade $f(x; \theta)$ onde $\theta = (\theta_1, \ldots, \theta_n)$ pertence ao espaço paramétrico $\mathbf{\Theta}$.
- A função de verossimilhança de θ $(L : \Theta \longrightarrow \mathrm{R})$ associada à a.a. observada $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_n)$ é definida por

$$L(\theta) = L(\theta, \mathbf{x}) = \prod_{i=1}^{n} f(x_i; \theta)$$

- Seja a função de log verossimilhança dada por:

$$\ell(\theta) = \ln(L(\theta)).$$

Método de Newton-Raphson

- O i-ésimo elemento do vetor escore, denotado por $U(\theta)$, é dado por

$$U_i(\theta) = \frac{\partial \ell(\theta)}{\partial \theta^{(i)}}.$$

- O (i, j)-elemento da matriz Hessiana, denotada por $H(\theta)$, é dado por

$$H_{ij} = \frac{\partial^2 \ell}{\partial \theta^{(i)} \partial \theta^{(j)}}.$$

Portanto o estimador de máxima verossimilhança, denotado por $\hat{\theta}$, satisfaz as seguintes equações:

$$U(\hat{\theta}) = \nabla \ell(\hat{\theta}) = \mathbf{0} \qquad \hat{\theta} = \max_{\theta \in \Theta} \ell(\theta).$$

Newton-Raphson em Estatística

- Em alguns casos pode ser difícil obter uma solução analítica explícita para as equações.
- Nesses casos, é possível obter uma solução aproximada para $\hat{\theta}$ por meio de métodos numéricos.
- Um alternativa consiste em utilizar o método de Newton-Raphson para aproximar a raiz da função escore (ou maximizar a logverossimilhança).

Newton-Raphson em Estatística

1. Fixe um número real $\epsilon > 0$;

2. Dê uma aproximação inicial θ_0 para $\hat{\theta}$;

- Explicitamente, basta seguir o seguinte algoritmo: 3. Para $k \geq 0$, faça

$$\theta_{k+1} = \theta_k - [H(\theta_k)]^{-1} U(\theta_k).$$

4. Pare o processo iterativo se $|\theta_{k+1} - \theta_k| < \epsilon$. Caso contrário, volte para o passo anterior.

- A sequência $(\theta_k)_{k \geq 0}$ converge para $\hat{\theta}$ quando $k \to \infty$, se θ_0 é escolhido próximo de $\hat{\theta}$

Método Escore

- Por vezes substituir de $H(\theta_k)$ por $E(H(\theta_k))$ pode apresentar significativa simplificação no procedimento.
- Esse método é conhecido como método do escore e pode ser descrito assim:

1. Fixe um número real $\epsilon > 0$;
2. Dê uma aproximação inicial θ_0 para $\hat{\theta}$;
3. Para $k \geq 0$, faça

$$\theta_{k+1} = \theta_k - [E(H(\theta_k))]^{-1} U(\theta_k) = \theta_k - [-I(\theta_k)]^{-1} U(\theta_k),$$

onde $I(\theta_k)$ é a matriz de informação de Fisher de θ.

4. Pare o processo iterativo se $|\theta_{k+1} - \theta_k| < \epsilon$. Caso contrário, volte para o passo anterior.

- A sequência $(\theta_k)_{k \geq 0}$ converge para $\hat{\theta}$ quando $k \to \infty$, se θ_0 é escolhido próximo de $\hat{\theta}$

Monte Carlo Annealing

Monte Carlo Annealing

- Considere novamente o problema 1 que consiste em encontrar um ponto $\theta \in \Theta$ que minimiza uma função $f: \Theta \rightarrow \mathrm{R}$.
- A ideia fundamental do método de Monte Carlo Annealing (ou Simulated Annealing) para resolver esse problema é emprestada da física.
- Em física da matéria condensada, *annealing* é um processo térmico utilizado para minimizar a energia livre de um sólido.
- Informalmente o processo pode ser descrito em duas etapas:
  - Aumentar a temperatura do sólido até ele derreter;
  - Diminuir lentamente a temperatura até as partículas se organizarem no estado de mínima energia do sólido.

Monte Carlo Annealing

- Esse processo físico pode ser facilmente simulado no computador considerando o algoritmo de Metropolis (1994) cujos passos são:

  1. Fixe uma temperatura inicial T para sólido, um estado inicial θ (onde $\theta \in \Theta$) e a correspondente energia $H(\theta)$ (onde $H: \Theta \rightarrow \mathrm{R}$);

  2. Um estado candidato $\theta^{'}$ de energia $H(\theta^{'})$ é gerado aplicando uma pequena pertubação no estado θ. Aceite o estado candidato como o novo estado do sólido conforme a seguinte probabilidade

$$\alpha_T(\theta, \theta^{'}) = \begin{cases} 1, & \text{se } H(\theta^{'}) - H(\theta) \leq 0 \\ \exp\left(-\dfrac{H(\theta^{'}) - H(\theta)}{T}\right), & \text{se } H(\theta^{'}) - H(\theta) \leq 0 \end{cases}$$

Observe que podemos reescrever $\alpha_T(\theta, \theta^{'})$ da seguinte maneira

Monte Carlo Annealing

3. Repita o passo anterior muitas vezes, considerando sempre a mesma temperatura T;

4.Diminua a temperatura T e volte para o passo (2).

- Se o resfriamento é realizado lentamente, o sólido alcança o equilíbrio térmico a cada temperatura.
- Do ponto de vista da simulação, isso significa gerar muitas transições a uma certa temperatura T.

Monte Carlo Annealing

Para o nosso problema de otimização, faremos a seguinte analogia:

Monte Carlo Annealing

- A sequência $(c_k)_{k\geq 0}$ deve ser escolhida tal que $c_k \to 0$ lentamente quando $k \to \infty$.
- Uma boa escolha para c_k, consiste em fazer

$$c_k = \frac{a}{\ln(k+1)}.$$

para alguma constante a apropriada.

- A sequência $(L_k)_{k\geq}$ deve ser escolhida tal que para cada valor do parâmetro c_k as soluções (após um transiente inicial) sejam escolhidas de acordo com a seguinte distribuição de probabilidade

$$\pi_{c_k} \propto \exp\left(-f(\theta)/c_k\right).$$

Exemplo

Sejam $X_1, \ldots, X_n$ uma a.a. de X, com função densidade dada por

$$f(x \mid \theta) = \frac{1}{2}(1 + \theta x), \quad -1 \leq x \leq 1, \quad -1 \leq \theta \leq 1.$$

Determine o EMV para θ pelo método de Newton-Raphson e Escore.