

Modellen-sectie

NIET-LINEAIRE REGRESSIE

B. Niemöller

H.P.L. Seip

1. Inleiding

In de regressieanalyse gaat men vaak uit van een lineair verband tussen de variabelen

$$y = \alpha + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_k x_k + e$$

Volgens een of ander criterium, meestal het kleinste kwadraten criterium, worden dan de regressiecoëfficiënten α , β_1 t/m β_k geschat. De vraag rijst of dit gepostuleerde lineaire verband wel in overeenstemming is met de realiteit en, indien dit niet het geval is, wat dan de reden is dat niet-lineaire verbanden tussen variabelen zo weinig de aandacht krijgen in de literatuur.

Over de eerste vraag kunnen we kort zijn: algemeen wordt erkend dat de meeste relaties tussen variabelen van niet-lineaire aard zijn en dat daarom niet-lineaire regressie de meest voor de hand liggende onderzoekstechniek behoort te zijn.

De tweede vraag, waarom men zich bijna uitsluitend tot lineaire regressie beperkt kan men als volgt beantwoorden.

1. Vele niet-lineaire verbanden zijn met behulp van eeneenduidige transformaties terug te voeren tot lineaire verbanden. Met andere woorden: niet-lineaire verbanden zijn te onderscheiden in intrinsieke- en niet-intrinsieke-niet-lineaire verbanden.
2. In het geval van intrinsiek-niet-lineaire verbanden worden de wiskundige problemen al snel zo complex dat men voor de uitvoering terugdeinst.

In dit artikel zullen we een overzicht geven van de technieken en de problemen die men bij, al of niet intrinsiek, niet-lineaire regressie tegenkomt.

2. Het transformatie probleem

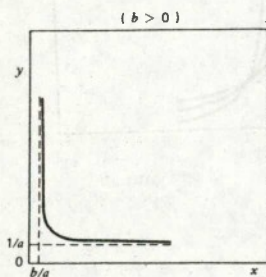
In het voorgaande stelden wij al, dat vele niet-lineaire verbanden niet intrinsiek-niet-lineair zijn en dus tot lineaire verbanden te transformeren zijn. Helaas ontbreekt een criterium om na te gaan of een verband nu wel of niet intrinsiek-niet-lineair is. In de literatuur worden transformatie-problemen veelal exemplarisch behandelt waarbij een formeel kader ontbreekt. Het lijkt ons daarom zinnig het ordenend werk van Hald (1952) en Hoerl (1954) hier in een korte samenvatting te presenteren, daarbij gebruik makend van de illustraties uit Daniel en Wood (1971).

Een grote groep niet-lineaire vergelijkingen kan tot lineariteit getransformeerd worden door middel van het transformatie-systeem van Hald. Dit systeem ontstaat door het combineren van elk van de drie functies van y (y , $\frac{1}{y}$ en $\ln y$) met elk van de overeenkomstige functies van x .

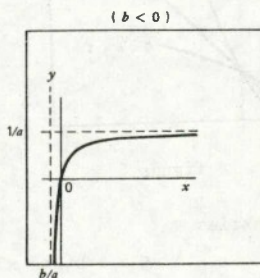
Belangrijkste vertegenwoordigers uit deze groep, met de bijbehorende transformaties zijn:

$$\text{- hyperbolen } y = \frac{x}{(ax-b)} \quad \rightarrow \quad \frac{1}{y} = a - \frac{b}{x}$$

Afhankelijk van de waarde van b zijn dat grafieken als in figuur 1 ($b > 0$) en figuur 2 ($b < 0$)



figuur 1

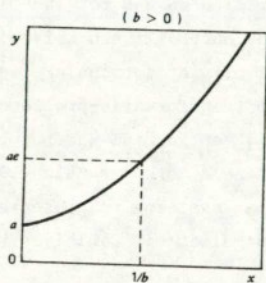


figuur 2

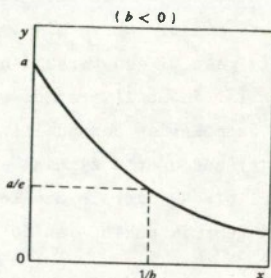
- exponentiële functies

$$y = a e^{bx} \rightarrow \ln y = \ln a + bx$$

Zie figuur 3 ($b > 0$) en figuur 4 ($b < 0$)



figuur 3

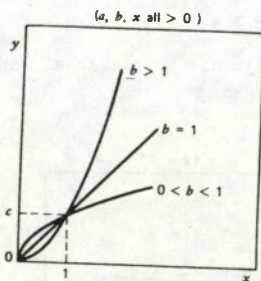


figuur 4

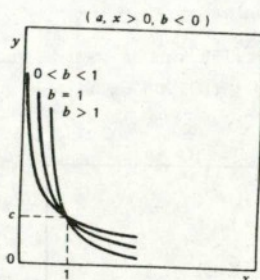
- machtsfuncties

$$y = ax^b \rightarrow \ln y = \ln a + b(\ln x)$$

Zoals in figuur 5 en figuur 6 geïllustreerd, zijn hier twee mogelijkheden waarbinnen echter nog differentiatie bestaat.



figuur 5

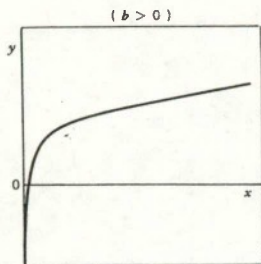


figuur 6

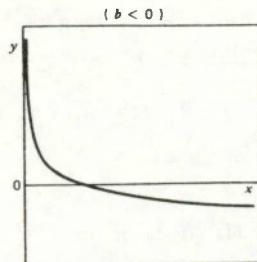
- log functies

$$y = a + b(\log x) \rightarrow y = a + b(\log x)$$

Figuur 7 ($b > 0$) en figuur 8 ($b < 0$)



figuur 7

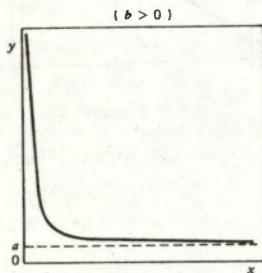


figuur 8

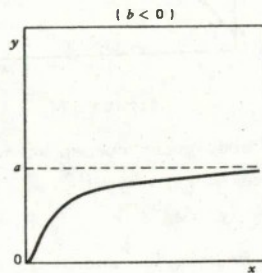
- speciale functies

$$y = a e^{b/x} \quad \rightarrow \quad \ln y = \ln a + \frac{b}{x}$$

Zie figuur 9 ($b > 0$) en 10 ($b < 0$)



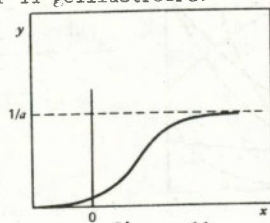
figuur 9



figuur 10

$$y = \frac{1}{(a + b e^{-x})} \quad \rightarrow \quad \frac{1}{y} = a + b e^{-x}$$

Zoals in figuur 11 geïllustreerd.



figuur 11

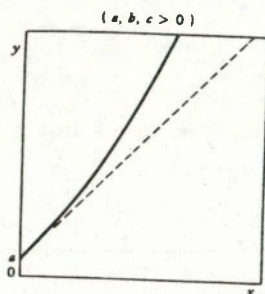
Een andere verzameling te linearizeren vergelijkingen bestaat uit polynomen met integer machten van x , dus

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_1^2 + b_3 x_1^3 + \dots$$

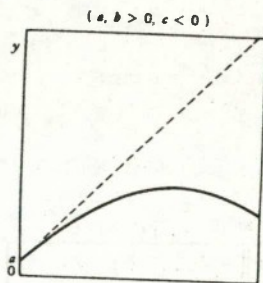
waarbij

$$- \quad y = a + bx + cx^2 \quad \rightarrow \quad y = a + bx + cx^2$$

Zie figuur 12 en 13



figuur 12

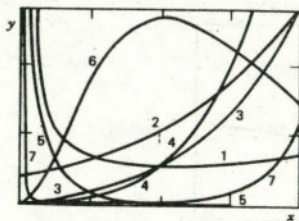


figuur 13

Als derde groep noemen we nog een verzameling grafieken, alle met de vergelijking

$$- \quad y = ax^b e^{cx} \quad \rightarrow \quad \ln y = \ln a + b \ln x + cx$$

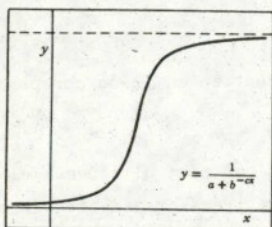
Deze functie is, zoals uit figuur 14 blijkt, moeilijk te 'herkennen' omdat de grafiek sterk afhangt van de waarden van de verschillende coëfficiënten. Voorwaarde tot lineariseerbaarheid is dat a en x groter dan nul zijn.



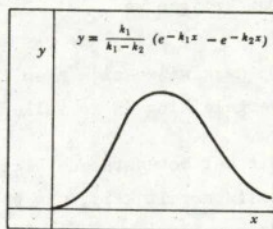
figuur 14

Curve	coëfficiënten		
	a	b	c
1	10	-1	0.1
2	2	0	0.1
3	0.1	1	0.1
4	0.01	2	0.1
5	10	-1	-0.2
6	1	2	-0.2
7	0.1	-2	0.5

Zowel bij de groep van de polynomen als bij Hoerls functie moeten wij bedenken dat iedere term in de gelineariseerde vergelijking als een aparte onafhankelijke variabele moet worden geteld om tot schatting van de konstanten te komen; bijv. in de vergelijking $y = a + bx + cx^2$ stellen wij: $z = x^2$ en krijgen dan: $y = a + bx + cz$ dus een vergelijking met 2 onafhankelijke variabelen x en z . Tot slot nog twee voorbeelden van intrinsiek niet-lineaire vergelijkingen in figuur 15 en 16, die, met vele andere niet te linearizeren vormen, uitvoerig door Hoerl besproken zijn (Hoerl, 1954, p. 56-77)



figuur 15



figuur 16

Zoals echter al eerder opgemerkt, hebben wij niet de beschikking over een criterium op grond waarvan wij te linearizeren en niet te linearizeren vormen kunnen onderscheiden. Het bovenstaande geeft, voor een aantal niet al te gekompliceerde en in de praktijk herkenbare niet-lineaire verbanden, een aanknopingspunt. Inventiviteit en inzicht bij de individuele onderzoeker blijft echter de meest veelbelovende basis.

We illustreren dit nog met een voorbeeld waarbij de linearisering niet direkt voor de hand ligt, maar wel mogelijk is:

$$Q = A \cdot L^{\beta} K^{1-\beta}$$

We moeten bedenken, dat het doel is het schatten volgens een of ander criterium van A en β uit de waarnemingen van de variabelen Q en L en K .

Logarithmeren geeft

$$\log Q = \log A + \beta \log L + (1-\beta) \log K$$

dus

$$\log Q - \log K = \log A + \beta (\log L - \log K)$$

Noem verder

$$(\log Q - \log K) = y$$

en

$$(\log L - \log K) = x$$

Dan krijgen we

$$y = \log A + \beta x$$

Op deze wijze zijn A en β te schatten en in de oorspronkelijke vergelijking in te vullen.

Uit het bovenstaande blijkt dat het niet altijd makkelijk (of zelfs mogelijk) is, een geschikte transformatie te vinden.

Maar zelfs in het geval dat men deze klip heeft omzeild, dreigen er nog een aantal problemen. Deze zullen in sectie 4 worden behandeld. Allereerst echter zullen wij nog stilstaan bij de intrinsieke niet-lineaire regressie.

3. Niet-lineaire regressie in eigenlijke zin

Stel dat een verband intrinsiek niet-lineair is. We kunnen dan de kleinste kwadratenmethode geheel analoog aan de lineaire regressie hanteren. We nemen aan dat het verband wordt gegeven door de volgende functie: $y = f(x_1, \dots, x_m, \beta_1, \dots, \beta_r) + \underline{e}$; dus met m verklarende variabelen en r parameters.

Verder hebben we een steekproef van n waarnemingen van deze variabelen tot onze beschikking

$$\begin{array}{ccc} y^1 & x_1^1 & \dots x_m^1 \\ y^2 & x_1^2 & \dots x_m^2 \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ y^n & x_1^n & \dots x_m^n \end{array}$$

x_j^i is hierbij dus de score van de i^e persoon op de j^e variabele. De kwadratensom wordt nu:

$$S^2(\beta_1, \dots, \beta_r) = \sum_{i=1}^n \{y^i - f(x_1^i, x_2^i, \dots, x_m^i, \beta_1, \dots, \beta_r)\}^2$$

We zoeken nu die waarden voor β_1 t/m β_r die S^2 minimaliseren, dit geeft:

$$\frac{\partial S^2}{\partial \beta_j} = 0 ; \quad j = 1 \text{ t/m } p$$

ofwel

$$\sum_{i=1}^n \{y^i - f(x_1^i, \dots, x_m^i, \beta_1, \dots, \beta_r)\} \frac{\partial f}{\partial \beta_j} = 0$$

Neem bijv. de funktie

$$y = f(x_1, x_2, \beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4) = \beta_1 e^{\beta_2 x_1} + \beta_3 e^{\beta_4 x_2}$$

We krijgen dan als S^2 :

$$S^2 = \sum_{i=1}^n (y^i - \beta_1 e^{\beta_2 x_1^i} - \beta_3 e^{\beta_4 x_2^i})^2$$

en dit geeft als normaalvergelijkingen

$$\frac{\partial S^2}{\partial \beta_1} = 2 \cdot \sum_{i=1}^n (y^i - \beta_1 e^{\beta_2 x_1^i} - \beta_3 e^{\beta_4 x_2^i}) (-e^{\beta_2 x_1^i}) = 0$$

$$\frac{\partial S^2}{\partial \beta_2} = 2 \cdot \sum_{i=1}^n (y^i - \beta_1 e^{\beta_2 x_1^i} - \beta_3 e^{\beta_4 x_2^i}) (-\beta_1 e^{\beta_2 x_1^i} \cdot x_1^i) = 0$$

$$\text{enz. } \frac{\partial S^2}{\partial \beta_3} = 0 \quad \text{en} \quad \frac{\partial S^2}{\partial \beta_4} = 0$$

Men ziet dat zelfs bij betrekkelijk eenvoudige niet-lineaire verbanden de resulterende normaal-vergelijkingen zeer gecompliceerd worden. In de praktijk gebruikt men daarom benaderingsmethoden om de lokatie van het minimum van S^2 te vinden.

We noemen er 3.

1. de z.g. lineariseringsmethode.

Hierbij gebruikt men de Taylor reeksontwikkeling van $f(x_1, \dots, x_m, \beta_1, \dots, \beta_r)$.

Uitgegaan wordt van een stel waarden voor β_1 t/m β_r waarvan men reeds een indicatie heeft of vermoedt dat ze in de buurt van het minimum liggen en gaat dan de Taylorontwikkeling van $f(x_1, \dots, x_m, \beta_1, \dots, \beta_r)$ opschrijven die men afkapt na de eerste afgeleiden.

Deze Taylorontwikkeling gebruikt men i.p.v. de oorspronkelijke functie om S^2 en de normaalvergelijkingen te vormen. Dit geeft dan verbeterde waarden voor β_1 t/m β_r . Hierna start de procedure opnieuw. Hierop gebaseerde computerprogramma's worden o.a. besproken door Harley (1961).

2. De methode van de diepste daling ("gradient" of "steepest descent method")

Hierbij stelt men niet de normaalvergelijkingen op doch men tast rechtstreeks het oppervlak van S^2 als functie van β_1 t/m β_r af om het minimum te vinden. Marquardt (1959) gebruikte deze methode in een door hem ontwikkeld computerprogramma.

3. De "maximum neighborhood" methode.

Deze door Marquardt (1962 en 1963) ontwikkelde methode bestaat uit een interpolatie tussen de eerste twee methoden, zodat zowel de grootte als de richting van de iteratiestappen gelijktijdig bepaald worden. Een hierop gebaseerd bekend computerprogramma is dat van Wood (1971) genaamd N.L. WOOD (Hiervan bestaan verschillende versies, bv. in VIM library number G_2 CALN.L WOOD of het C.D.C. programma N.L. WOOD.)

Voor een uitgebreide mathematische samenvatting van bovenstaande methoden verwijzen we naar het boek van Draper en Smith.

Uit de hier beschreven methoden zal het duidelijk zijn dat het construeren van betrouwbaarheidsintervallen bij intrinsiek niet-lineaire regressie zeer gecompliceerd kan worden.

Deze gecompliceerdheid is natuurlijk afhankelijk van het betreffende niet-lineaire verband dat men postuleert en daarom is het minder zinvol om hierover algemene uitspraken te doen.

Bovendien kan men de normaliteitsassumpties - die in de lineaire regressie een essentiële rol spelen bij de constructie van betrouwbaarheidsintervallen - hier verwerpen. Dit laatste heeft dan meestal tot gevolg dat wij niet meer over bekende schattingsmethoden beschikken. Algemeen kan gezegd worden dat niet-lineaire regressie weinig gebruikt wordt omdat 1. het moeilijk is om de juiste niet-lineaire relatie te vinden, 2. dergelijke niet-lineaire relaties rekentechnisch moeilijk hanteerbaar zijn en 3. als de niet-lineaire relatie bekend is de computerprogramma's niet tot de meest toegankelijke behoren.

We beperken ons hier daarom verder tot een aantal opmerkingen over schattingsmethoden bij niet-intrinsiek niet-lineaire relaties.

4. Schattingen, autocorrelatie en multicollineariteit bij niet-intrinsiek niet-lineaire regressie

4.1. Schattingen

Wij veronderstellen dat de lineaire relatie, die wij na transformatie verkregen hebben, voldoet aan de gebruikelijke assumpties bij lineaire regressie; en wel in het bijzonder veronderstellen wij dat de errorterm normaal verdeeld is.

Enkele voorbeelden:

$$1. \quad y = \alpha + \beta x + \gamma x^2 + \underline{e}$$

We transformeren $x^2 = z$ en krijgen dan een lineaire regressie met 2 onafhankelijke variabelen:

$$\underline{y} = \alpha + \beta x + \gamma z + \underline{e}$$

Aangenomen wordt: $\underline{e} \sim N(0, \sigma^2)$; de errorterm na transformatie is hier dus dezelfde als in het oorspronkelijk niet-lineaire verband. Uit de scores op de variabelen y , x en z kunnen wij dan schattingen $\hat{\alpha}$, $\hat{\beta}$ en $\hat{\gamma}$ voor α , β en γ afleiden. Er ontstaat zo een vergelijking die het niet-lineaire verband aangeeft tussen y en x :

$$y = \hat{\alpha} + \hat{\beta} x + \hat{\gamma} x^2.$$

Betrouwbaarheidsintervallen voor de afhankelijke variabele y en de parameters α , β en γ kunnen nu met de methoden van lineaire regressie geconstrueerd worden.

Interessant is hier het toetsen van de hypothese $H_0 : \gamma = 0$ hiermee toetst men dus of het veronderstelde verband lineair is of niet.

$$2. Q = A \cdot L^{\beta} \cdot K^{1-\beta} \cdot v$$

hierbij is v de errorterm; Q , L en K de variabelen.

Logarithmeren geeft:

$$\log Q = \log A + \beta \log L + \log K - \beta \log K + \log v.$$

$$\implies \log Q - \log L = \log A + \beta(\log L - \log K) + \log v$$

$$\begin{array}{ll} \text{Noem nu: } \log Q - \log L & : y \\ & \log L - \log K : x \\ & \text{en } \log A : \alpha \\ & \log v : e \end{array}$$

dan staat hier:

$$y = \alpha + \beta x + e$$

We veronderstellen $E(e) = 0$

$$\rightarrow E(\log v) = 0$$

$$\text{dus } \log(E(v)) = 0 \rightarrow E(v) = 1.$$

De assumptie dat de relatie die wij na transformatie krijgen lineair is met $e \sim N(0, \sigma^2)$ impliceert dus o.a. dat de errorterm v in de oorspronkelijke relatie multiplicatief is met $E(v)=1$

Hoe vinden wij betrouwbaarheidsintervallen voor de onafhankelijke variabele y en de parameter β in dit laatste voorbeeld? Voor β is er geen probleem; deze parameter is niet getransformeerd bij de bewerkingen die tot een lineaire relatie moesten leiden. Wij kunnen derhalve met de gebruikelijke procedure uit de lineaire regressie een betrouwbaarheidsinterval construeren voor β uit de relatie $y = \alpha + \beta x + e$

Dit betrouwbaarheidsinterval is dan natuurlijk ook geldig voor de oorspronkelijke relatie:

$$Q = A.L^{\beta}.K^{1-\beta}.v.$$

Hetzelfde geldt ook voor de parameters uit voorbeeld I. Indien wij een betrouwbaarheidsinterval voor de afhankelijke variabele Q willen construeren zullen we de uitgevoerde transformaties in omgekeerde richting moeten toepassen.

We willen een betrouwbaarheidsinterval voor Q bij opgegeven waarden voor L en K. We berekenen eerst $x = \log L - \log K$. Vervolgens construeren we een betrouwbaarheidsinterval voor y bij deze waarde van x met behulp van de methoden van lineaire regressie. Stel bijv. dat met c% zekerheid geldt:

$$a < y < b.$$

Substitutie van $y = \log Q - \log L$ levert dan grenzen voor log Q en vervolgens grenzen voor Q. De constructies van deze intervallen leveren nooit moeilijkheden indien wij uitsluitend ééneen-duidige transformaties hebben toegepast.

4.2. Autocorrelatie in de errorterm

Op een mogelijk misverstand moeten wij hier nog wijzen. In dit artikel wordt bij alle gepostuleerde niet-lineaire relaties aangenomen dat zij het juiste verband tussen de variabelen beschrijven. We hebben ons niet bezig gehouden met de vraag wat de gevolgen zijn van het feit dat wij een lineaire relatie postuleren terwijl in werkelijkheid het verband niet-lineair is.

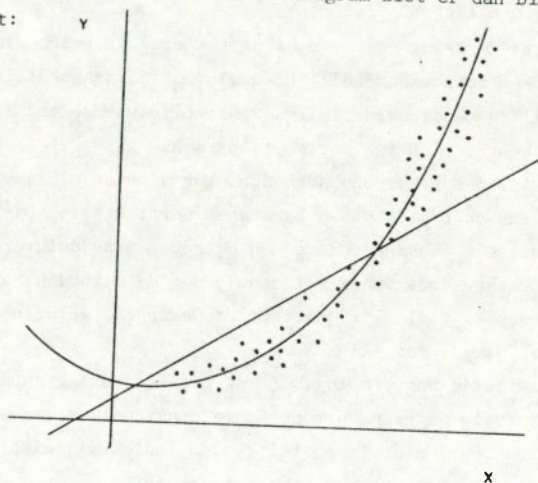
In dit geval waarin wij een onjuist verband postuleren kunnen wij o.a. autocorrelatie in de errorterm verwachten wat tot gevolg heeft dat wij de gebruikelijke schattingsmethoden in de lineaire regressie niet meer of niet effectief kunnen toepassen.

Een voorbeeld kan dit verduidelijken:

Stel het verband is in werkelijkheid niet-lineair

$$y = \alpha + \beta x + \gamma x^2 + \underline{e}$$

Verder nemen we aan dat $E(\underline{e}) = 0$ en er geen autocorrelatie in de errorterm optreedt. Een scatterdiagram ziet er dan bijv. als volgt uit:



Indien wij nu een lineair verband zouden postuleren (zie rechte lijn in de grafiek) dan is het duidelijk dat de punten niet meer random om deze rechte lijn gestrooid liggen, dus autocorrelatie optreedt. De foutieve schattingen van y worden als het ware in de errorterm gestopt.

Wat hierboven geschetst is, is echter niet het probleem in dit artikel; immers wij houden juist wel rekening met deze niet-lineariteit en gaan daarom de term x^2 transformeren: De geschatte y -waarden met de lineaire relatie die wij na transformatie krijgen zijn dezelfde als de geschatte y waarden met de oorspronkelijke niet-lineaire relatie.

4.3. Multicollineariteit

Bij sommige van de transformaties die toegepast moeten worden om niet-lineaire verbanden om te zetten in lineaire relaties

kan het gevaar van multicollineariteit ontstaan.

Met name is dit o.a. het geval bij de relatie:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_1 x_2$$

Hierbij gaan wij dan $x_3 = x_1 x_2$ stellen en een lineaire regressie met 3 onafhankelijke variabelen nl. x_1, x_2 en x_3 uitvoeren.

Het is duidelijk dat x_3 afhankelijk is van x_1 en x_2 . Iets dergelijks krijgen wij ook bij de relatie:

$y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2$ door te stellen $x^2 = z$ en dan een lineaire regressie met 2 onafhankelijke variabelen x en z uit te voeren:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 z; z \text{ is duidelijk afhankelijk van } x.$$

Betekent dit nu ook dat wij met multicollineariteit te maken hebben?

Multicollineariteit betekent dat er tussen de onafhankelijke variabelen een of meer lineaire relaties bestaan en dat is hier niet het geval.

Desondanks is het niet uitgesloten dat er multicollineariteitsmoeilijkheden ontstaan, nl. indien een niet-lineair functioneel verband tussen onafhankelijke variabelen bij benadering toch wel als lineair aangemerkt kan worden.

We wijzen nog op het artikel van R.P. Althauser; in dit artikel wordt de relatie $y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_1 x_2$ nauwkeurig op multicollineariteit onderzocht.

5. Literatuur

Althauser, R.P. Multicollinearity and non additive regression models. In Causal models van H.M. Blalock (ed.)

Daniel, C. and Wood, F.S. Fitting equations to data.
Wiley-Interscience, New York, 1971

Draper, N.R. and Smith, H. Applied regression analyses.
Wiley, New York, 1966

Hartley, H. The modified Gauss-Newton method for the fitting of non-linear regression functions by least-squares.
Technometrics 3, no. 2, 1961, pag. 269-280

- Klein, L.R. A text book of econometrics. Prentice Hall, 1974
- Marquardt, D.W. Solution of non-linear chemical engineering models.
Chem. Eng. Progr., 55, no. 6, 1959, 65-70
- Marquardt, D.W. en Baumeister, T. Least-squares estimation of non-linear parameters. IBM share program no. 1428, 1962
- Marquardt, D.W. An algorithm for least-squares estimation of non-linear parameters. J. Soc. Ind. Appl. Math., 11, no.2, 1963, 431-441
- Hald, A. Statistical theory and engineering applications.
Wiley, New York, 1952
- Hoerl, A.E. Fitting curves to data. Chemical Business Handbook
(J.H. Perry, ed.) Section 20, 55-77. McGraw-Hill, 1954
- Wonnacott, R.J. en Wonnacott, T.H. Econometrics. Wiley, New York, 1970