现代外国统计学优秀著作译丛

非线性回归分析及其应用

NONLINEAR REGRESSION ANALYSIS AND ITS APPLICATIONS

[美　国] Douglas M. Bates
[加拿大] Donald G. Watts　著

韦博成
万方焕　译
朱宏图

张尧庭　校

中国统计出版社

现代外国统计学优秀著作译丛

非线性回归分析及其应用

［美　国］Douglas M. Bates
［加拿大］Donald G. Watts　著

韦博成　万方焕　朱宏图　译
张尧庭　校

中国统计出版社

（京）新登 5 字 041 号

图书在版编目（CIP）数据

非线性回归分析及其应用/（美）D. M. 贝茨（Bates，D. M.），（加拿大）D. G. 沃茨（Watts，D. G.）著；韦博成等译。-北京：中国统计出版社，1997.9

书名原文：Nonlinear Regression Analysis and Its Applications

ISBN 7-5037-2294-0

Ⅰ. 非…

Ⅱ. ①贝… ②沃… ③韦…

Ⅲ. 非线性回归-回归分析

Ⅳ. O212. 1

中国版本图书馆 CIP 数据核字（96）第 19451 号

著作权合同登记：图字 01-97-0381 号

中国统计出版社出版

（北京三里河月坛南街 75 号 100826）

新华书店经销

科伦克三莱印务（北京）有限公司印刷

*

850×1168 毫米 32 开本 13.5 印张 33 万字

1997 年 11 月第 1 版 1997 年 11 月北京第 1 次印刷

印数：1—4000 册

*

定价：29.40 元

版权公告：

Copyright notice：

非线性回归分析及其应用

Nonlinear Regression Analysis
and Its Applications

［美　国］Douglas M. Bates
［加拿大］Donald G. Watts

现代外国统计学优秀著作译丛专家委员会

出 版 说 明

为了加强对国外统计理论与实践的研究和了解，全面反映国外统计科研和教学的发展，促进我国统计教学改革和教材内容更新，在国家统计局领导的大力支持下，全国统计教材编审委员会组织翻译出版了这套“现代外国统计学优秀著作译丛”。

随着我国社会主义市场经济体系的逐步建立，统计教育正面临着十分严峻的挑战。一方面，在社会主义市场经济条件下，不论国家的宏观经济调控还是企业的生产经营管理，都要求准确地把握市场运行的态势，科学地分析经济中各种错综复杂的关系，因而，对统计信息的需求越来越大，对统计人才的业务素质提出了更高的要求；另一方面，我国过去的统计教育模式是按为高度集中的计划经济管理体制服务的要求建立的，培养的统计人才的知识结构比较单一，难以适应经济体制、统计体制改革的需要。为使统计人才的培养适应建立社会主义市场经济体制的需要，满足二十一世纪现代化建设的要求，缩小与国际先进水平的差距，基础在教育，关键在教材。在继续组织有关专家、学者编写一批反映国内统计科学和统计

实践发展的新教材的同时，必须尽快引进并翻译出版一批外国先进统计教材。这是学习外国先进统计知识的一种直接而且十分有效的方式，对于推动国内统计教材内容更新和教学改革，造就一大批具有渊博知识和多方面业务技能的复合型人才，具有十分重要的意义。

为了做好这套丛书的翻译出版工作，全国统计教材编审委员会成立了现代外国统计学优秀著作译丛专家委员会，对国外统计著作的出版和使用情况进行了调查研究，分析了国内对外国统计教材的需求，在此基础上制定了翻译著作选题规则。在这套丛书的翻译出版过程中，我们得到了国内外有关专家、有关院校统计系和国外有关出版公司的大力帮助和支持，在此表示衷心的谢意。

全国统计教材编审委员会
1995 年 7 月

译 者 序

回归分析是数理统计学中与实际问题联系最为密切，应用范围最为广泛，也是收效最大的统计方法之一。近年来，以最小二乘估计为核心的线性回归已经在我国各行各业得到广泛的应用，取得可喜的成绩。但是，现实世界中严格的线性模型并不多见，它们或多或少都带有某种程度的近似；在不少情况下，非线性模型可能更加符合实际。由于人们在传统上常把“非线性”视为畏途，非线性回归的应用在我国还不够普及。事实上，在计算机与统计软件十分发达的今天，非线性回归的基本统计分析已经与线性回归一样切实可行。在常见的软件包中（诸如 Minitab，SAS，SPSS 等等），人们已经可以像线性回归一样，方便的对非线性回归进行统计分析。因此译者认为，在我国回归分析方法的应用中，已经到了“更上一层楼”，线性回归与非线性回归同时并重的时候。

现在，国家统计局统计教育中心组织我们翻译并出版 Bates 和 Watts 的名著“非线性回归分析及其应用”是非常及时的。这必将有力的促进非线性回归分析方法在我国的普及、推广和应用。Bates 和 Watts 是 80 年代以来国外非线性回归分析理论与应用研究的先驱。他们不但在非线性回归的几何理论方面有卓越的贡献；而且对于许多实际数据与模型进行过深入的分析与研究，本书就是他们这方面研究的总结。本书的重要特点在于深入细致地介绍了模型研究和案例分析（case study）的方法。国内不乏优秀的理论著作，但是像本书这样，结合特定模型和基本理论，对于案例分析方法进行深入细致的总结的著作，还未曾见到过。译者特别向读者推荐第 3 章，这是作者专门开设的一章。该章告诉读者，你拿到一组数据后，如何一步一步地进行分析和处理的全过

程。其中包括：数据的预处理，参数和自变量的取舍（包括是否做变换等），模型函数的确定与修正，初值的选取方法和经验，拟合效果的评估（包括诊断）；以及根据拟合效果对模型如何进行修正、化简与重新拟合，重新拟合的再评估、再修正等等；直到最后，还告诉读者如何提交一份合格的数据分析报告。第三章介绍的程序贯穿全书的诸多案例分析，并且时有进一步的发挥，十分精彩。译者认为，这是本书的精华所在，愿与读者共享。

本书在国家统计局统计教育中心的统一组织和领导下，由我们三人共同翻译完成。其中朱宏图负责第 1、2、6 三章及部份附录；万方焕负责第 3、7 二章及部份附录和数据；韦博成负责 4、5 二章及部份附录，以及初稿的修改和总纂工作。最后，译稿由张尧庭教授审校。由于我们水平有限，难免有不妥和误译之处，恳请同行专家和广大读者批评指正。

译者

1996 年 9 月于东南大学

序　言

读书使人充实，讨论使人机智，作文使人准确。

——弗兰西斯·培根

本书力求平衡地论述非线性回归的理论和应用。

本书要求读者具备线性模型的基本知识，大体相当于Draper和Smith (1981)，或者Montgomery和Peck (1982) 的水平。为了提供背景材料和建立有关记号，第一章扼要地回顾了线性最小二乘方法及其几何意义，以帮助读者更好地理解线性和非线性最小二乘。此外，我们从实用的角度讨论了线性最小二乘的现代计算方法，并介绍了如何检验回归模型基本假设的合理性以及当基本假设不成立时，应当对拟合的模型如何进行修正和改进。第二章讨论如何建立非线性模型，并阐述了如何应用线性回归方法进行迭代，以估计未知参数。我们也介绍了如何应用线性回归的方法，对有关参数和非线性模型函数进行近似推断，并再一次强调了几何方法的运用。第三章详细讨论了非线性回归在实际上的考虑，包括初始值的选取，参数变换，无导数的方法，相关残差和累积数据的处理，以及模型的比较。

第四章论述了处理多元响应数据的特殊方法。第五章讨论响应函数为某一线性微分方程组解的分部模型，以及处理它的技巧。

第六章讨论了描述非线性分析推断的改进方法，其中应用了截面迹图和截面t图。最后，第七章介绍了特定模型和数据集非线

性强度的度量。这对读者理解线性与非线性最小二乘的几何是非常有益的。

全书采用了大量的几何图示以利于读者的理解。我们也采用了大量连续的例子，使读者在熟悉的内容中逐步了解思路的发展。

本书的所有数据集都是真实可靠的，它们来源于物理、化学和生物的实验。对允许我们引用有关数据的作者，研究人员和出版商在此表示衷心地感谢。我们要特别感谢 Don de Bethizy, Rick Eliott, Steve Havriliak, Nico Linssen, Dave Pierson, Rob Stiratelli, Marg Treloar 和 Eric Ziegel。还要感谢本书在 Dalhouse 大学、Queen 大学和 Wisconsin 大学的试用期间，有关人员提出的宝贵意见。

我们对 David Hamilton 启发性的讨论和合作，Gunseog Kong 在校样中杰出的工作，以及校样过程中 Steve Czarniak, Mary Lindotrom 和 Dennis Wolf 给予的帮助表示衷心的感谢。

在 Wisconsin-Madison 大学的统计研究计算机上，本书的电子排版采用了 Troff 文本格式化语言。图表的处理采用了处理统计和图形的 S 语言，而正文和图形的排版在 Linotronic L 300 上采用了 Post Script 语言。我们非常感谢 Bea Shube 及其在 Wiley 的同事出色的工作，和 Bill Kasdorf 出色的印刷效果。

本书大量的材料取自于我们长期的研究工作，并就此感谢加拿大自然科学与工程研究协会和美国自然科学基金的资助。

最后，我们要感谢我们妻子给予的爱护和鼓励。

Douglas M. Bates
Donald G . Watts
1 9 8 8 年 6 月

1
线性回归的回顾

存在的实体在没有必要增加数量时，就不能增加数量。

——威廉·奥克海姆

对于理解非线性回归来说，切实地掌握线性模型是必要的，所以本书首先简要地回顾线性模型的基本知识。关于线性模型的系统阐述，读者可以参阅有关文献，例如，Draper 和 Smith (1981)，Montgomery 和 Peck (1982)，或者 Seber (1977)。有关回归诊断的详尽论述可以参阅 Belsley，Kuh 和 Welsh (1980)，或者 Cook 和 Weisberg (1982)，而关于贝叶斯方法的论述参阅 Box 和 Tiao (1973)。

本章强调两个专题——现代数值方法和线性最小二乘的几何。读者可以体会到，注重有效的计算方法将增强我们对线性模型的了解，而几何方法可以开阔人们的视野，使读者更深刻地认识线性最小二乘方法，方差分析以及后面的非线性回归。

1.1 线性回归模型

给定模型

$$Y_n = \beta_1 x_{n1} + \beta_2 x_{n2} + \cdots + \beta_P x_{nP} + Z_n$$

$$= (x_{n1},\cdots,x_{nP})\beta + Z_n \tag{1.1}$$

线性回归提供了参数$\beta=(\beta_1,\cdots,\beta_P)^T$的估计以及其它推断结果。在模型（1.1）中，随机变量Y_n表示第n个响应变量，$n=1$，2，…，N，它可分为确定性部分和随机性部分。确定性部分（$x_{n1},\cdots$，x_{nP}）β依赖于参数β和预测变量或回归变量x_{np}，$p=1$，…，P。随机变量Z_n表示随机部分，它是干扰相应响应变量的一个随机扰动。上标"T"表示矩阵的转置。

上述模型可以表示为

$$\boldsymbol{Y} = \mathbf{X}\beta + \boldsymbol{Z} \tag{1.2}$$

其中$\boldsymbol{Y}$为观察数据的随机向量，$\mathbf{X}$为$N\times P$阶的回归变量矩阵，

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13}\cdots x_{1P} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23}\cdots x_{2P} \\ \vdots & \vdots & \vdots\ \cdots\ \vdots \\ x_{N1} & x_{N2} & x_{N3}\cdots x_{NP} \end{bmatrix}$$

而随机向量$\boldsymbol{Z}$表示随机扰动。（本书用黑斜体字母表示随机向量。）

确定性部分$\mathbf{X}\beta$是参数和回归变量的函数，它确定了响应变量的数学模型或模型函数。因为Z_n的非零期望值可以并入模型函数，我们假定

$$\mathrm{E}[\boldsymbol{Z}] = \mathbf{0} \tag{1.3}$$

这等价于

$$\mathrm{E}[\boldsymbol{Y}] = \mathbf{X}\beta$$

所以我们称$\mathbf{X}\beta$为回归模型的期望函数。矩阵$\mathbf{X}$称为导数矩阵，因为矩阵$\mathbf{X}$的第n行第p列元素是期望函数第n行相对于第p个参数的导数。

注意：在线性模型中，关于任何参数的导数都与参数无关。

若进一步假定$\boldsymbol{Z}$服从正态分布，且

$$\mathrm{Var}[\boldsymbol{Z}] = \mathrm{E}[\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}]^T = \sigma^2\mathbf{I} \tag{1.4}$$

这里$\mathbf{I}$表示$N\times N$阶单位矩阵，于是，在给定β和方差σ^2的条件下，$\boldsymbol{Y}$的联合概率密度函数为

$$p(\mathbf{y}|\boldsymbol{\beta},\sigma^2) = (2\pi\sigma^2)^{-N/2}\exp\left[\frac{-(\mathbf{y}-\mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^{\mathrm{T}}(\mathbf{y}-\mathbf{X}\boldsymbol{\beta})}{2\sigma^2}\right]$$

$$= (2\pi\sigma^2)^{-N/2}\exp\left[\frac{-\|\mathbf{y}-\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}\|^2}{2\sigma^2}\right] \tag{1.5}$$

其中两竖“‖”表示向量的长度。如果已知导数矩阵 $\mathbf{X}$ 和响应向量 $\mathbf{y}$ 的观察数据，我们希望进行方差 σ^2 和 P 维参数 $\boldsymbol{\beta}$ 的推断。

例：PCB 之 1

作为线性回归模型的简单实例，我们考虑 Cayuga 湖中鲑鱼体内聚氯丁烯二苯基(PCB)的浓度与年龄之间的函数关系(Bache 等，1972)。该数据集录于本书附录 1，A.1.1 节。图 1.1 为 PCB

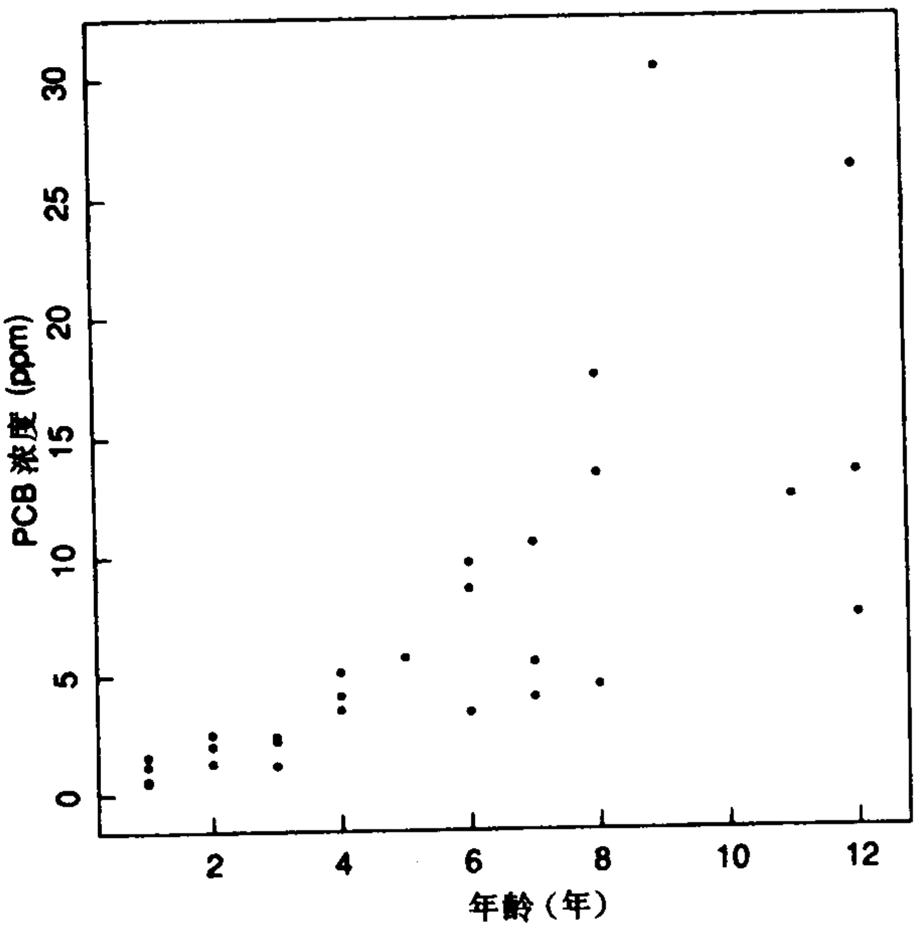

图 1.1 鲑鱼的 PCB 浓度与年龄的散点图

浓度关于年龄的散点图，它显示了两者之间的曲线关系。此外，PCB 的方差随着浓度的增加而增加。因为假设条件 (1.4) 要求随机扰动具有方差齐性，所以我们寻求对 PCB 浓度进行适当的变换，使得变换后的随机扰动具有方差齐性（参看 1.3.2 节）。作

PCB 浓度的对数关于年龄的点图，见图 1.2a，该图表现出很好的方差齐性以及近似的线性关系。因此，形式为

$$\ln(\mathrm{PCB}) = \beta_1 + \beta_2 \cdot 年龄$$

的线性期望函数是适合的，其中 ln 表示自然对数（底数为 e）。继续变换回归变量可使其线性趋势更好，见图 1.2b，这里采用了年龄的立方根变换（Box 和 Tidwell，1962）。因此，一个简单的期望函数可拟合为

$$\ln(\mathrm{PCB}) = \beta_1 + \beta_2 \cdot \sqrt[3]{年龄}$$

（**注意**：若模型的形式为

$$f\ (\mathbf{x},\ \boldsymbol{\beta},\ \boldsymbol{\alpha})\ = \beta_0 + \beta_1 x_1^{\alpha_1} + \beta_2 x_2^{\alpha_2} + \cdots + \beta_P x_P^{\alpha_P}$$

采用第二章的方法可以拟合模型并同时估计条件线性参数 $\boldsymbol{\beta}$ 和变换参数 $\boldsymbol{\alpha}$。若以 $x_1^{\alpha_1}, \cdots, x_P^{\alpha_P}$ 为回归因子的线性模型是适合的，这时应该对各因子进行 $\alpha_1, \cdots, \alpha_P$ 的幂变换。对于 PCB 数据来说，对年龄变量进行幂变换的最优值为 0.20，但本书选取 $\alpha = 0.33$。）

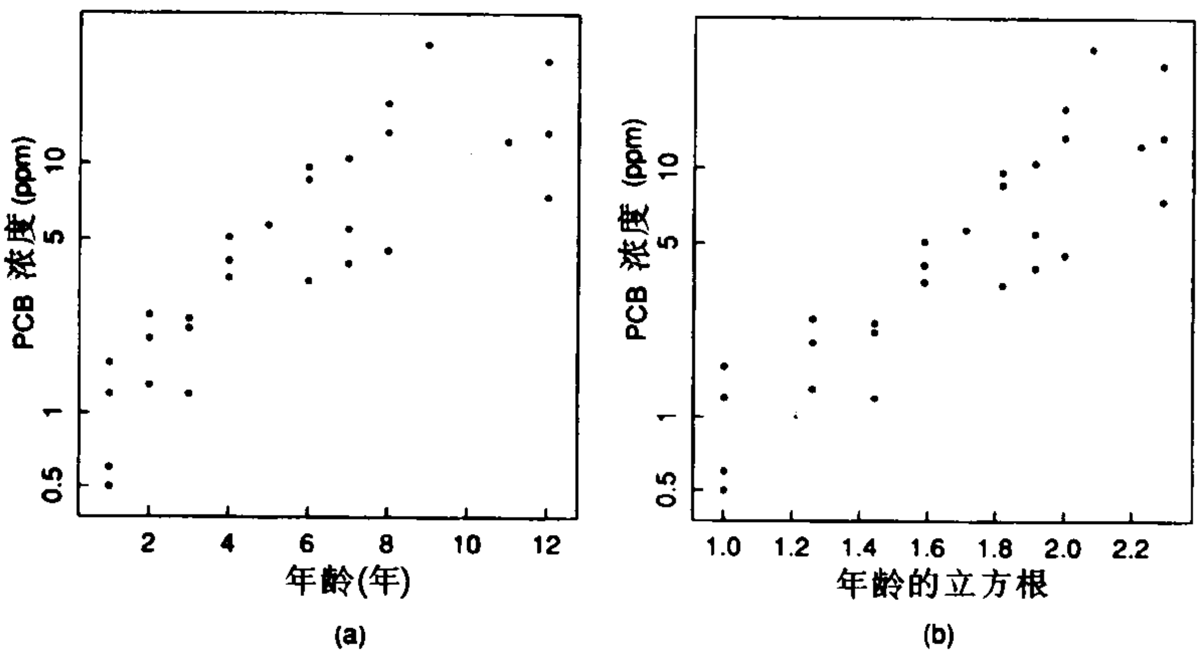

图 1.2　鲑鱼的 PCB 浓度关于年龄的散点图。图 a，b 分别为 PCB 浓度的对数关于年龄和 $\sqrt[3]{年龄}$ 的散点图

1.1.1 最小二乘估计

关于 $\boldsymbol{\beta}$ 和 σ 的似然函数，或简称为似然，l（$\boldsymbol{\beta}$，$\sigma|\mathbf{y}$）与联合概率密度（1.5）有相同的形式。它们之间的区别仅在于，前者把 l（$\boldsymbol{\beta}$，$\sigma|\mathbf{y}$）看作给定数据条件下关于参数的函数，而后者可以看作固定参数条件下关于响应变量的函数。忽略常数项$(2\pi)^{-N/2}$，似然函数可以表示为

$$l(\boldsymbol{\beta},\sigma|\mathbf{y})\propto\sigma^{-N}\exp\left[\frac{-\|\mathbf{y}-\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}\|^2}{2\sigma^2}\right] \tag{1.6}$$

当残差平方和

$$\begin{aligned} S(\boldsymbol{\beta}) &= \|\mathbf{y}-\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}\|^2 \\ &= \sum_{n=1}^{N}\left[y_n-\left[\sum_{P=1}^{P}x_{nP}\beta_P\right]\right]^2 \end{aligned} \tag{1.7}$$

取到最小值时，似然函数关于 $\boldsymbol{\beta}$ 达到最大值。因而使 S（$\boldsymbol{\beta}$）达到最小值的统计量 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$，称为 $\boldsymbol{\beta}$ 的极大似然估计。这个 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 也称为 $\boldsymbol{\beta}$ 的最小二乘估计，并可表示为

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}=(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{y} \tag{1.8}$$

因为最小二乘估计是 $\boldsymbol{\beta}$ 的最小方差无偏估计量，所以最小二乘估计可以通过样本方法导出，或者亦可假设 $\boldsymbol{\beta}$ 和 σ 服从无信息先验密度，采用贝叶斯方法导出。在贝叶斯方法中，$\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 为 $\boldsymbol{\beta}$ 的后验边缘密度函数的众数。

上述三种推断方法：似然方法，样本方法和贝叶斯方法，都导出了 $\boldsymbol{\beta}$ 相同的点估计。正如我们将看到的，它们导出了类似的“合理”参数值所在的区域。首先，重要的是要认识到，对于模型（1.2）来说，如果随机扰动满足假设条件（1.3）和（1.4），那么最小二乘估计是唯一适当的方法。换一种方式来表达，在最小二乘估计的应用中，我们假设：

（1）正确的期望函数。

（2）响应变量等于期望函数与随机扰动的和。

(3) 随机扰动独立于期望函数。

(4) 随机扰动服从正态分布。

(5) 随机扰动具有零均值。

(6) 随机扰动具有方差齐性。

(7) 各随机扰动项之间相互独立。

当上述假设是合理的，并且用 1.3.2 节所述的诊断图方法进行检验是合适的，这时才能对回归模型进行进一步的推断。

详细研究上述三种推断方法，我们就能刻划最小二乘估计的特征。

1.1.2 样本理论的推断结果

正如 Seber (1977) 所指出的，最小二乘估计有许多良好的性质：

(1) 最小二乘估计量 $\hat{\beta}$ 服从正态分布。这因为 $\hat{\beta}$ 是 Y 的线性函数，从而 $\hat{\beta}$ 亦是 $\mathbf{Z}$ 的线性函数。因为已假定 $\mathbf{Z}$ 服从正态分布，故 $\hat{\beta}$ 服从正态分布。

(2) $\mathrm{E}[\hat{\beta}]=\beta$：最小二乘估计量是无偏的。

(3) $\mathrm{Var}[\hat{\beta}]=\sigma^2(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})^{-1}$：最小二乘估计量的协方差阵依赖于随机扰动的方差和导数矩阵 $\mathbf{X}$。

(4) 对于参数 β，其置信水平为 $1-\alpha$ 的联合置信区域是椭球

$$(\beta-\hat{\beta})^{\mathrm{T}}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}(\beta-\hat{\beta})\leqslant Ps^2F(P,N-P;\alpha) \tag{1.9}$$

其中

$$s^2=\frac{S(\hat{\beta})}{N-P}$$

是自由度为 $N-P$ 的均方残差，即方差的估计，而 $F(P,N-P;\alpha)$ 是自由度为 P 与 $N-P$ 的费歇 F 分布的上侧 α 分点。

(5) 对于参数 β_p，其置信水平为 $1-\alpha$ 的边缘置信区间为

$$\hat{\beta}_p\pm \mathrm{se}(\hat{\beta}_p)\mathrm{t}(N-P;\alpha/2) \tag{1.10}$$

其中 $t(N-P;\alpha/2)$ 是自由度为 $N-P$ 的学生化 t 分布的上侧 $\alpha/2$