

# Instability in nonlinear regression model

Pyeng-Mu Bark<sup>a</sup> · Youngil Kim<sup>b</sup> · Dae-Heung Jang<sup>c,1</sup>

<sup>a</sup>Graduate School of Management of Technology, Pukyong National University;

<sup>b</sup>School of Business and Economics, ChungAng University;

<sup>c</sup>Department of Statistics, Pukyong National University

(Received January 17, 2017; Revised January 20, 2017; Accepted January 20, 2017)

---

## Abstract

We can sometimes find instability against numerical solutions in nonlinear regression. All iterative procedures in nonlinear regression require initial parameter values to be selected. Poor starting values may result in convergence to an unwanted stationary point of the error sum of squares surface. Starting values can sometimes cause the chaos effect in the nonlinear regression model. We can find the chaos phenomena with the convergence plot of starting values in the parameter space.

Keywords: nonlinear regression model, starting values, chaos

---

## 1. 서론

비선형회귀모형은 다음과 같은 형태로 표현된다.

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_k; \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_p) + \epsilon, \quad (1.1)$$

여기서  $y$ 는 반응변수,  $x_1, x_2, \dots, x_k$ 는 설명변수들,  $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_p$ 는 모수들, 그리고  $\epsilon$ 은 오차항이다. 비선형회귀모형은 다음과 같이 행렬 형태로 표현된다.

$$y = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) + \epsilon, \quad (1.2)$$

여기서  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_k)'$ 이고  $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_p)'$ 이다.

최소제곱추정량  $\hat{\theta}$ 는 다음과 같이 오차제곱합을 최소화함으로써 얻어진다.

$$S(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{u=1}^n [y_u - f(\mathbf{x}_u, \boldsymbol{\theta})]^2, \quad (1.3)$$

여기서  $n$ 은 표본의 크기이다.

비선형회귀분석에서는 오차제곱합을 최소화하기 위한 정규방정식의 일반해를 해석적으로 풀기 어려우므로 통상 수치해를 이용한다. 이 때 초기추정값(initial estimates)을 요구한다. 그러나,  $S(\boldsymbol{\theta})$ 에 복수개

---

This work was supported by a Research Grant of Pukyong National University (2015).

<sup>1</sup>Corresponding author: Department of Statistics, Pukyong National University, 45, Yongso-ro, Nam-gu, Busan 48513, Korea. E-mail: dhjang@pknu.ac.kr

의 국소최소값이 존재하면 잘못된 초기추정값은 원하지 않는 정상점(stationary point)에 수렴하게 되고 비선형 모형의 함수 형태에 따라 수치적인 방법이 가끔 카오스 현상을 나타내게 된다. 오차제곱합을 최소화하기 위한 정규방정식의 일반해를 수치적으로 풀 때 통상 통계패키지에서는 다음과 같은 수치해법들을 이용한다.

1. Gradient method
2. Newton method
3. Gauss-Newton method
4. Marquardt method
5. Doesn't use derivatives(DUD) method

이러한 수치해법들 중 일부가 비선형 모형이 특수한 함수 형태일 때 카오스 현상을 일으킨다. 2절에서 한 가지 사례를 통하여 이러한 비선형회귀모형에서의 불안정성을 제시하고 3절에서 결론을 내렸다.

## 2. 비선형회귀에서의 불안정성

카오스 동역학은 다음과 같은 성질을 가져야 한다 (Strogatz, 1994).

1. 초기조건에 대한 민감성(sensitivity to initial conditions)
2. 위상적 혼합(topological mixing)
3. 조밀한 주기궤도(dense periodic orbits)

또한 Lynch (2001)에 의하면 카오스는 다음과 같은 세 가지의 특징들을 갖는다.

1. 장기 비주기 행태(longterm nonperiodic behavior)
2. 초기조건에 대한 민감성(sensitivity to initial conditions)
3. 프랙탈 구조(fractal structure)

비선형회귀분석에서 모든 반복처리 방법들은 초기추정값을 요구한다. 그러나  $S(\theta)$ 에 복수개의 국소최소값이 존재하면 잘못된 초기추정값은 원하지 않는 정상점에 수렴하게 된다. 이런 경우 가끔 초기추정값은 카오스 현상을 일으킨다. 다음 예는 Seber와 Wild (1989)에 나오는 예제로서 비선형회귀분석에서 카오스 현상을 볼 수 있는 흥미로운 예제이다.

예제 2.1: 4개의 관측값  $(x_u, y_u)$ 가  $(-2, 0)$ ,  $(-1, 1)$ ,  $(1, -0.9)$ ,  $(2, 0)$ 인 비선형회귀모형에서 다음과 같은 오차제곱합을 고려하여 보자.

$$S(\theta) = \sum_{u=1}^n [y_u - \alpha e^{-\beta x_u}]^2.$$

오차제곱합을 최소화시키는 국소점으로서 우리는 두 개의 국소점을 찾을 수 있다. 첫 번째 국소점은  $(\alpha, \beta) = (0.087, 0.620)$ 에서  $S(\alpha, \beta) = 1.690152$ 를 갖는  $M1$ 이고 두 번째 국소점은  $(\alpha, \beta) = (-0.063, -0.699)$ 에서  $S(\alpha, \beta) = 1.726795$ 를 갖는  $M2$ 이다.

Figure 2.1은 초기추정값 범위를  $-1.5 \leq \alpha \leq 1.5$ ,  $-6.0 \leq \beta \leq 6.0$ 로 설정하였을 때 랜덤하게 뽑은 156,145개의 초기추정값의 수렴, 발산 여부를 알 수 있는 수렴그림이다. 통계패키지 R의 nls() 함수를 사용하였다. 두 개의 검은 점은 두 개의 국소점  $M1$ (원형 검은 점)과  $M2$ (사각형 검은 점)을 나타낸다.

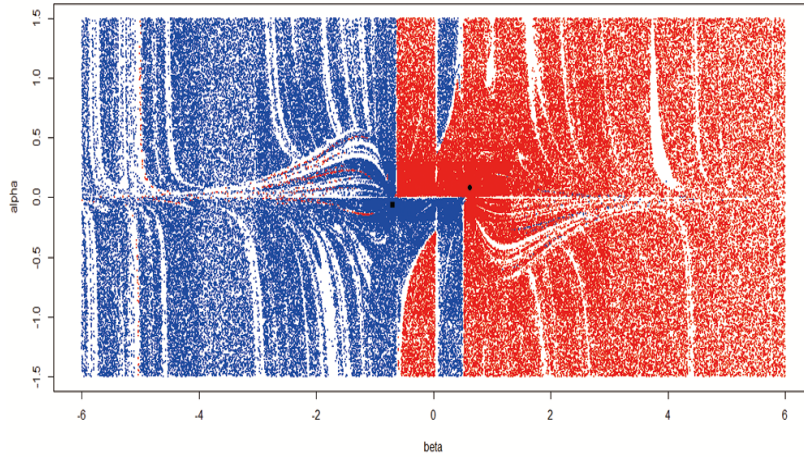


Figure 2.1. The convergence plot of starting values.

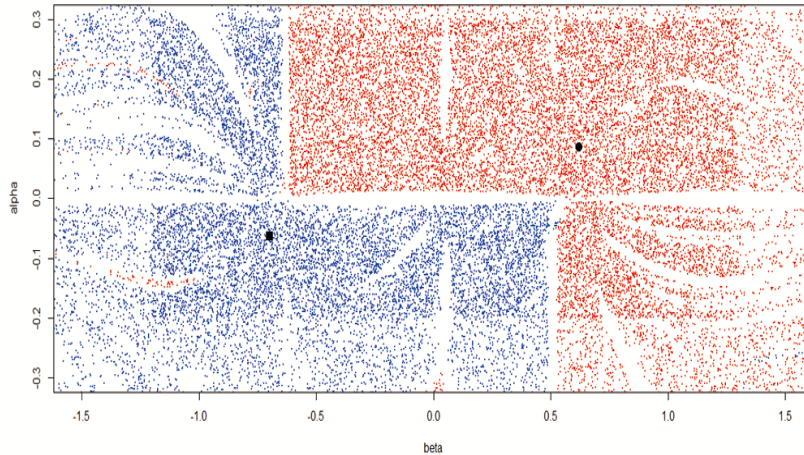


Figure 2.2. The expanded convergence plot of starting values with the center  $(\alpha, \beta) = (0, 0)$ .

이 두 개의 국소점은 끌개(attractor)가 된다. 마치 블랙홀처럼 주변의 초기추정값들을 빨아들여 수렴시킨다. 수렴그림은 전체적으로는 두 개의 영역으로 나뉜다. 빨간색 영역은 국소점  $M1$ 에 수렴하고 파란색 영역은 국소점  $M2$ 에 수렴한다. 흰색은 발산 영역을 나타낸다. 두 개의 영역은 각각 크게 물결치는 모양(swirls)의 특이한 패턴을 만든다. 두 개의 영역 모두 발산 영역이 수렴 영역과 특이한 패턴으로 혼재되어 있다. 또한 빨간색 영역에 파란색 영역이 특이한 패턴으로 혼재되어 있는 부분이 있고 파란색 영역에 빨간색 영역이 특이한 패턴으로 혼재되어 있는 부분이 있다. 즉 카오스 현상이 일어나고 있음을 알 수 있다. 이 그림을 통하여 초기추정값에 따른 회귀계수의 수렴이 매우 불안정함을 확인할 수 있다.

Figure 2.2는  $(\alpha, \beta) = (0, 0)$ 을 중심으로 Figure 2.1을 확대한 그림이다.  $(\alpha, \beta) = (0, 0)$  주변의 카오

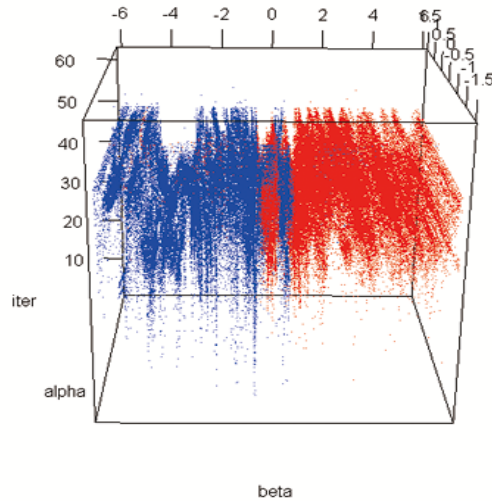


Figure 2.3. 3-D convergence plot of starting values.

스 현상을 좀 더 자세히 볼 수 있다. 국소점  $M1$ 에 수렴하는 빨간색 영역의 오른쪽 상단에 파란색 점 두 개가 나타남을 알 수 있다. 빨간색 영역에 둘러싸인 발산 영역 내에서도 특정 초기추정값들은 국소점  $M2$ 에 수렴한다. 국소점  $M2$ 에 수렴하는 파란색 영역 왼쪽 상단과 하단에 빨간색 띠가 나타남을 알 수 있다. 파란색 영역 내에서도 특정 초기추정값들은 국소점  $M1$ 에 수렴한다.

Figure 2.3은 초기추정값 범위를  $-1.5 \leq \alpha \leq 1.5$ ,  $-6.0 \leq \beta \leq 6.0$ 로 설정하였을 때 랜덤하게 뽑은 156,145개의 초기추정값에 대하여  $(\alpha, \beta)$ 를 X와 Y축에, 수렴할 때까지의 반복 횟수(수렴속도)를 Z축에 표시한 삼차원 그림이다. Figure 2.1에서처럼 첫 번째 그룹은 첫 번째 국소점  $M1$ 에 수렴하는  $(\alpha, \beta)$  값들로 빨간점으로 수렴을 표시하였다. 두 번째 그룹은 두 번째 국소점  $M2$ 에 수렴하는  $(\alpha, \beta)$  값들로 파란점으로 수렴을 표시하였다. 각각의 그룹 내에서 수렴속도가 다양함을 알 수 있다. 우리는 이 Figure 2.3에서도 Figure 2.1에서처럼 초기 조건에 민감하다는 관점에서 카오스 현상을 목격할 수 있다.

Figures 2.1–2.3을 통하여  $S(\theta)$ 에 복수 개의 국소최소값이 존재하면 잘못된 초기추정값은 원하지 않는 정상점에 수렴하게 되고 초기추정값은 카오스 현상을 일으켜 초기추정값에 따라 회귀계수의 수렴성이 불안정함을 알 수 있다.

랜덤하게 뽑은 1,312개의 초기값  $(\alpha, \beta)$  ( $-0.2 \leq \alpha \leq 0.3$ ,  $-1.2 \leq \beta \leq 1.3$ )에 대하여 Ralston과 Jennrich (1978)이 제안한 DUD 방법을 이용하여 최적해를 구하면 두 개의 국소점에 수렴하는 점들과 수렴에 실패하는 점들( $\alpha$ 가 0에 아주 가까운 점들), 즉 세 개의 그룹으로 나뉘어 짐을 Figure 2.4를 통하여 알 수 있다. 첫 번째 그룹은 첫 번째 국소점  $M1$ 에 수렴하는  $(\alpha, \beta)$  값들로 실선으로 수렴을 표시하였다. 두 번째 그룹은 두 번째 국소점  $M2$ 에 수렴하는 값들로 점선으로 수렴을 표시하였다. 세 번째 그룹은 수렴에 실패하는 값들로 원형 심볼로 표시하였다. 세 번째 그룹은  $\alpha$ 가 0에 아주 가까운 점들로 구성되어  $\alpha = 0$ 을 중심으로 띠를 이룸을 알 수 있다. 우리는 이 Figure 2.4에서 초기 조건에 민감하다는 관점에서 카오스 현상을 목격할 수 있다.

Figure 2.5는 랜덤하게 뽑은 1,312개 초기값  $(\alpha, \beta)$  ( $-0.2 \leq \alpha \leq 0.3$ ,  $-1.2 \leq \beta \leq 1.3$ )에 대하여  $(\alpha, \beta)$ 를 X와 Y축에, 수렴할 때까지의 반복 횟수(수렴속도)를 Z축에 표시한 삼차원 그림이다. 수렴에 실패하는 경우는 반복횟수를 0으로 놓았다. Figure 2.4에서처럼 첫 번째 그룹은 첫 번째 국소점  $M1$ 에

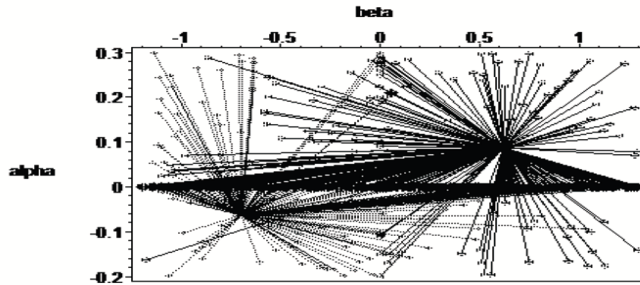


Figure 2.4. The convergence plot of starting values with does not use derivatives (DUD) (1).

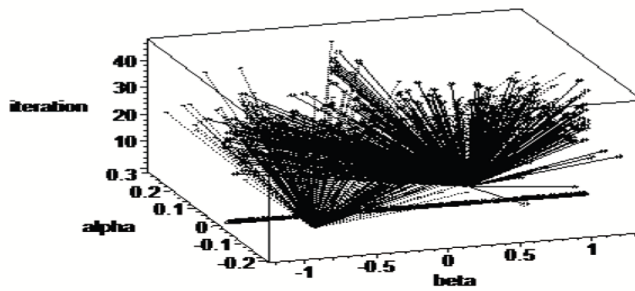


Figure 2.5. 3-D convergence plot of starting values with does not use derivatives (DUD).

수렴하는  $(\alpha, \beta)$  값들로 실선으로 수렴을 표시하였다. 두 번째 그룹은 두 번째 국소점  $M2$ 에 수렴하는  $(\alpha, \beta)$  값들로 점선으로 수렴을 표시하였다. 각각의 그룹 내에서 수렴속도가 다양함을 알 수 있다. 세 번째 그룹은 수렴에 실패하는  $(\alpha, \beta)$  값들로 원형 심볼로 표시하였다. 세 번째 그룹은  $\alpha$ 가 0에 아주 가까운 점들로 구성되어  $\alpha = 0$ 을 중심으로 띠를 이룸을 알 수 있다. 우리는 이 Figure 2.5에서도 Figure 2.4에서처럼 초기 조건에 민감하다는 관점에서 카오스 현상을 목격할 수 있다.

$\alpha$ 가 0에 아주 가까운 점들로 구성되어  $\alpha = 0$ 을 중심으로 띠를 이루는 세 번째 그룹을 더 자세히 보기 위하여 랜덤하게 뽑은 1,040개 초기값  $(\alpha, \beta)$  ( $-0.001 \leq \alpha \leq 0.001, -1.2 \leq \beta \leq 1.3$ )에 대하여 수렴성을 조사하면 Figure 2.6과 같다. 첫 번째 그룹은 첫 번째 국소점  $M1$ 에 수렴하는  $(\alpha, \beta)$  값들로 다이아몬드 심볼로 표시하였다. 두 번째 그룹은 두 번째 국소점  $M2$ 에 수렴하는  $(\alpha, \beta)$  값들로 십자가 심볼로 표시하였다. 세 번째 그룹은 수렴에 실패하는  $(\alpha, \beta)$  값들로 원형 심볼로 표시하였다. 우리는 이 Figure 2.6에서 카오스 현상을 적나라하게 목격할 수 있다. 초기값으로서 서로 매우 인접하여 있는  $(\alpha, \beta)$  값들이라도 세 개의 그룹으로 나뉘어져 감을 알 수 있다. 즉, 초기값으로서 서로 매우 인접하여 있는  $(\alpha, \beta)$  값들임에도 불구하고 어떤 점은 첫 번째 국소점  $M1$ 에, 어떤 점은 두 번째 국소점  $M2$ 에, 어떤 점은 수렴에 실패함을 알 수 있다. 이런 카오스 현상은 그림 곳곳에서 발견된다. 그래서 세 개의 그룹의 경계선이 모호하여 혼재되어 있음을 알 수 있다. 물론 Figure 2.4와 Figure 2.5에서도 이런 카오스 현상을 볼 수 있으나 Figure 2.6에서 이런 카오스 현상을 더 확실하게 확인할 수 있다.

이런 카오스 현상을 더 자세히 관찰하기 위하여 두 가지 경우를 보자. 첫 번째 경우로서 서로 매우 인접하여 있는 3개의 초기값  $(\alpha, \beta)$ 에 대하여 DUD 방법을 이용하여 최적해를 구하면 결과는 Table 2.1과 같다.

Figure 2.7은 Table 2.1의 3개의 초기값  $(\alpha, \beta)$ 에 대하여 반복되는 궤적과 그 때의 오차제곱합을 나타내는 3차원 그림이다. A점의 궤적은 상자 심볼을 쇠선으로 연결하였고, B점의 궤적은 실선으로 연결하

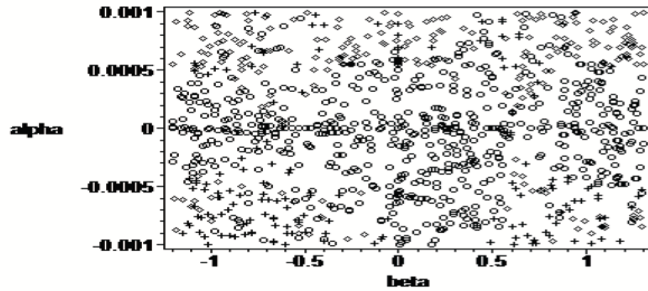


Figure 2.6. The convergence plot of starting values with does not use derivatives (DUD) (2).

Table 2.1. Check of the convergence (1)

$(\alpha, \beta)$	Check of the convergence
A (0.000550, -0.25017)	Diverge
B (0.000550, -0.25018)	Converge to $M1$ after 36 iterations
C (0.000550, -0.25053)	Converge to $M2$ after 40 iterations

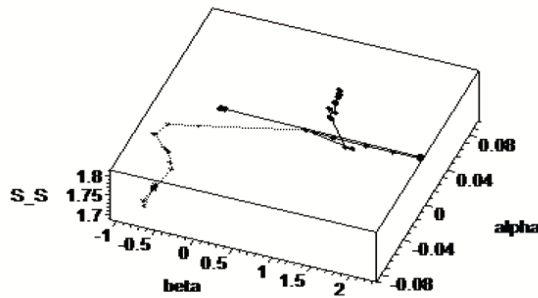


Figure 2.7. The iteration trace of three points of Table 2.1.

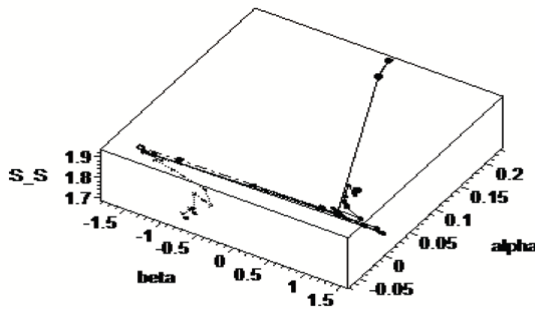
였고, C점은 점선으로 연결하였다. 세 점의 궤적은 처음 5번의 반복까지는 매우 비슷한 패턴을 이루다가 A점은 수렴에 실패하고 B점과 C점은 처음 10번의 반복까지는 매우 비슷한 패턴을 이루다가 B점은 36회 반복 후 첫 번째 국소점  $M1$ 에 수렴하고, C점은 40회 반복 후 두 번째 국소점  $M2$ 에 수렴하게 된다. 두 번째 경우로서 서로 매우 인접하여 있는 3개의 초기값  $(\alpha, \beta)$ 에 대하여 DUD 방법을 이용하여 최적해를 구하면 결과는 Table 2.2와 같다.

Figure 2.8은 Table 2.2의 3개의 초기값  $(\alpha, \beta)$ 에 대하여 반복되는 궤적과 그 때의 오차제곱합을 나타내는 3차원 그림이다. A점의 궤적은 상자 심볼을 쇠선으로 연결하였고, B점의 궤적은 실선으로 연결하였고, C점은 점선으로 연결하였다. 세 점의 궤적은 처음 5번의 반복까지는 매우 비슷한 패턴을 이루다가 A점은 수렴에 실패하고 B점은 45회 반복 후 첫 번째 국소점  $M1$ 에 수렴하고, C점은 33회 반복 후 두 번째 국소점  $M2$ 에 수렴하게 된다.

1절에서 언급한 다섯 가지 수치방법들을 이용하여 Table 2.1에서 언급한 3개의 초기값  $(\alpha, \beta)$ 에 대하여 최적해를 구하면 결과는 Table 2.3과 같다. 수치방법들에 따라 수렴 여부 및 최적해가 달라짐을 알 수 있다. 우리는 이를 통하여 비선형회귀모형  $y = \alpha e^{-\beta x} + \epsilon$ 은 4개의 관측값  $(x_u, y_u)$ 이  $(-2, 0)$ ,  $(-1, 1)$ ,  $(1, -0.9)$ ,  $(2, 0)$ 가 주어지면 수치방법들을 이용하여 최적해를 구할 때 매우 불안정한 계가됨을 알 수 있다.

**Table 2.2.** Check of the convergence (2)

$(\alpha, \beta)$	Check of the convergence
A (0.207905, 0.052)	Diverge
B (0.207905, 0.053)	Converge to $M1$ after 45 iterations
C (0.207905, 0.054)	Converge to $M2$ after 33 iterations



**Figure 2.8.** The iteration trace of three points of Table 2.2.

**Table 2.3.** The check of the convergence for five numerical methods in SAS

Points	DUD	Gauss-Newton	Marquardt	Newton	Gradient
A (0.000550, -0.25017)	Diverge	$M1$	$M1$	Diverge	$M2$
B (0.000550, -0.25018)	$M1$	$M1$	$M1$	Diverge	$M2$
C (0.000550, -0.25053)	$M2$	$M1$	$M1$	Diverge	$M2$

DUD = does not use derivatives.

### 3. 결론

비선형회귀분석에서 수치해를 이용하여 최적해를 구할 때 비선형 모형의 함수 형태에 따라 이러한 수치적인 방법이 카오스라는 성질을 나타내게 되는 경우가 있음을 한 예를 통하여 살펴 보았다. 또한, 여러 수치해법들을 비교하여 계의 불안정성을 살펴보았다.

추후 과제는 비선형회귀모형 분석시 오차제곱합에 복수 개의 국소최소값이 존재하여 카오스 현상을 일으킬 때 이 카오스 현상을 더 자세히 탐구하고 프락탈구조를 밝히는 작업이 될 것이다.

### References

- Lynch, S. (2001). *Dynamical Systems with Applications Using MAPLE*, Birkhäuserm, Boston, 129–130.
- Ralston, M. L. and Jennrich, R. I. (1978). DUD, a derivative-free algorithm for nonlinear least squares, *Technometrics*, **20**, 7–14.
- Seber, G. A. F. and Wild, C. J. (1989). *Nonlinear Regression*, Wiley, New York.
- Strogatz, S. H. (1994). *Nonlinear Dynamics and Chaos*, West View Press, Cambridge.

# 비선형회귀모형에서의 불안정성

박병무<sup>a</sup> · 김영일<sup>b</sup> · 장대흥<sup>c,1</sup>

<sup>a</sup>부경대학교 기술경영전문대학원, <sup>b</sup>중앙대학교 경영학부, <sup>c</sup>부경대학교 통계학과

(2017년 01월 17일 접수, 2017년 01월 20일 수정, 2017년 01월 20일 채택)

---

## 요약

가끔 비선형회귀분석에서 수치해를 사용시 불안정성을 보게 된다. 비선형회귀분석에서 모든 반복처리 방법들은 초기추정값을 요구한다. 그러나, 오차제곱합에 복수 개의 국소최소값이 존재하면 잘못된 초기추정값은 원하지 않는 정상점에 수렴하게 된다. 이런 경우 초기추정값은 카오스 현상을 일으킨다.

주요용어: 비선형회귀모형, 초기추정값, 카오스

---

---

이 논문은 부경대학교 자율창의학술연구비(2015년)에 의하여 연구되었음.

<sup>1</sup>교신저자: (48513) 부산광역시 남구 용소로 45, 부경대학교 통계학과. E-mail: dhjang@pknu.ac.kr