Tag.-Ber. Akad. Landwirtsch.-Wis. DDR, Berlin (1985) 233, S. 5-11

Zur Methodik der Modellwahl und Parameterschätzung in der nichtlinearen Regressionsanalyse

Klaus-Dieter Feige

Wachstumsfunktionen dienen der Analyse des Wachstums von Organismen und Populationen und spielen in den biologischen Wissenschaften eine immer größere Rolle. Sie dienen einerseits der zeitabhängigen Darstellung eines Zielmerkmals an sich, ermöglichen darüber hinaus aber auch anhand konkreter Parameter, Entscheidungen vorzubereiten oder Erträge und Grenzwerte von Entwicklungen vorherzusagen. Im Unterschied zur quasilinearen Regressionsanalyse zeichnet sich die eigentlich nichtlineare Regression meist durch eine geringere Parameterzahl sowie der direkten oder durch einfache Umrechnungen mittelbaren Interpretation der Parameter aus. Diese Vorteile zahlen sich aber wiederum erst dann aus, wenn der Nutzer eine große Übereinstimmung zwischen biologischem und mathematischem Modell annehmen kann. Eine derartige Voraussetzung ist nicht immer einzuhalten, doch es sollte in jedem Fall ein Modell gewählt werden, das zumindest in seinen Grundzügen nicht sofort dem biologischen Sachverhalt widerspricht. Derartige „Grundzüge“ sind natürlich auch zur Systematisierung verschiedener nichtlinearer Grundmodelle geeignet:

- die Wachstumsfunktion geht durch den Koordinatenursprung (oder nicht),
- der Anstieg der Funktion zum Zeitpunkt $t = 0$,
- die Existenz von Wendepunkten,
- die Lage der Wendepunkte der Wachstumsfunktion,
- die Beschränktheit des Wachstums,
- die Monotonie-Eigenschaften der Regressionsmodelle (Maxima) u.a.

Um mit den Regressionsmodellen effektiver arbeiten zu können, muß der Anwender die speziellen Eigenschaften der ausgewählten Modelle kennen. Dazu ist oftmals auch eine Auseinandersetzung mit den Ableitungen der Wachstumsfunktionen erforderlich. Die 1. Ableitung ist dabei im Sinne einer Zuwachsfunktion plausibel, die 2. Ableitung, praktisch der Zuwachs des Zuwachses, stellt die zeitabhängige Krümmung der Regressionsbeziehung dar.

Gelegentlich liegen dem Fachwissenschaftler auch Datenpunktwolken vor, die bereits erkennen lassen, daß das betrachtete Wachstum nicht monoton voranschreitet. In solchen Fällen liegt der Verdacht auf sich gegenseitig überlagernde Wachstumsverläufe bzw. auch Absterbeprozesse nahe. Im Forschungszentrum für Tierproduktion (FZT) konnten hierzu in erster Linie Erfahrungen mit tanh-Summen-Funktionen gewonnen werden. Die so vorgenommene Zerlegung des Wachstumsprozesses in einzelne Wachstumsphasen (oder -schübe) stellt u. a. PEIL (1974) dar. Einen umfangreichen Überblick über den aktuellen Stand der Forschungsarbeiten zur nichtlinearen Regressionsanalyse geben RASCH U. a. (1984). Auch die dort gewonnenen Erkenntnisse werden in ein entsprechendes Hilfsprogramm zur Modellwahl für einen K 1630-Computer eingehen, das gegen Ende 1985 im FZT bereitstehen wird.

Das entsprechende Projekt sieht auch die Bestimmung einer geeigneten Anfangslösung für die iterative Parameterschätzung vor. Derartige Anfangs- oder Basislösungen sind Voraussetzung für die Anwendung der von PAUL (1975) veröffentlichten FORTRAN-Programme.

Die PAULschen Verfahren wurden für die K 1630-Programmversion im FZT zunächst um die zufällige Suche von „besten“ Lösungen in zwei Variationen ergänzt. Trotzdem geht eine nur ungenügende Vorschätzung der Parameter vielfach auf Kosten einer erhöhten Rechenzeit. Eine oberflächige Basislösungssuche ist umso unverständlicher, wenn man weiß, wie einfach graphische Verfahren zu guten Näherungen führen können.

Eigenschaften spezieller Wachstumsfunktionen: $(b_i > 0)$

GOMPERTZ

$$Y = b_1 e^{-b_2 e^{-b_3 t}} \qquad (\text{bzw. } Y = b'_1 e^{b'_2 (1 - e^{-b'_3 t})})$$

$$-\infty < t < +\infty$$

$$Y(\text{„}-\infty\text{“}) = 0 \qquad t_w = \frac{\ln b_2}{b_3}$$

$$Y(0) = b_1 e^{-b_2}$$

$$Y(\text{„}+\infty\text{“}) = b_1 \qquad Y(t_w) = b_1 e^{-1}$$

$$Y' = b_1 b_2 b_3 e^{(-b_2 e^{-b_3 t} - b_3 t)}$$

$$Y'' = b_1 b_2 b_3^2 \left[b_2 e^{(-b_2 e^{-b_3 t} - 2 b_3 t)} - e^{(-b_2 e^{-b_3 t} - b_3 t)} \right]$$

t_w = Wendepunkt

JOHNSON

$$Y = b_1 b_2^{\frac{t}{b_3 (t + b_3)}}$$

$$-b_3 \leqq t < \infty$$

$$Y(0) = b_1 \qquad t_w = \frac{\ln b_2 - 2 b_3}{2}$$

$$Y(\text{„}\infty\text{“}) = b_1 b_2^{\frac{1}{b_3}} \qquad Y(t_w) = b_1 b_2^{\left(\frac{\ln b_2 - 2 b_3}{b_3 \ln b_2}\right)}$$

$$Y' = b_1 \ln b_2 \quad \frac{b_2^{\frac{t}{b_3 (t + b_3)}}}{(t + b_3)^2}$$

$$Y'' = b_1 \ln b_2 \quad \frac{b_2^{\frac{t}{b_3 (t + b_3)}} \left[\ln b_2 - 2 (t + b_3) \right]}{(t + b_3)^4}$$

MITSCHERLICH, RICHARDS

$$Y = b_1 (1 - b_2 e^{-b_3 t})^{b_4}$$

Spezialfälle:

$$Y = b_1 (1 - e^{-b_2 t})^{b_3}$$

$$Y = b_1 e^{b_2 t}$$

$$Y = b_1 (1 - e^{-b_2 (t - b_3)})^{-1}$$

$$Y = (b_1 - b_2 e^{-b_3 t})^{b_4}$$

$$Y = b_1 \left(\frac{1 - b_2 e^{-b_3 t}}{1 - b_2} \right)^{b_4}$$

$$0 \leqq t < \infty$$

$$Y(0) = b_1 (1 - b_2)^{b_4} \qquad b_2 = 1 \rightarrow Y(0) = 0$$

$$Y(„\infty“) = b_1$$

$$t_w = \frac{\ln (b_2 b_4)}{b_3}$$

$$Y(t_w) = b_1 \left(\frac{b_4 - 1}{b_4} \right)^{b_4}$$

$$Y' = b_1 b_2 b_3 b_4 e^{-b_3 t} (1 - b_2 e^{-b_3 t})^{b_4 - 1}$$

$$Y'' = -b_1 b_2 b_3^2 b_4 e^{-b_3 t} [((1 - b_2 e^{-b_3 t})^{b_4 - 1} - (b_4 - 1) b_2 e^{-b_3 t} (1 - b_2 e^{-b_3 t})^{b_4 - 2}]$$

KORF

$$Y = b_1 e^{-b_2 t^{-b_3}}$$

$$0 < t < \infty$$

$$Y(„+\infty“) = b_1 \qquad t_w = \left(\frac{b_2 b_3}{1 + b_3} \right)^{\frac{1}{b_3}}$$

$$Y(t_w) = b_1 e^{-\frac{1 + b_3}{b_3}}$$

$$Y' = b_1 b_2 b_3 t^{-b_3 - 1} e^{-b_2 t^{-b_3}}$$

$$Y'' = b_1 b_2 b_3 \left(t^{-b_3 - 2} (-b_3 - 1) e^{-b_2 t^{-b_3}} + b_2 b_3 t^{-2 b_3 - 2} e^{-b_2 t^{-b_3}} \right)$$

JANOSCHEK, RICHARDS, SAGER

$$Y = b_1(1 - b_2 e^{-b_3 t^{b_4}})^{b_5}$$

Spezialfälle:

$$Y = b_1(1 - b_2 e^{-b_3 t})^{b_4}$$

$$0 \leqq t < \infty$$

$$Y(0) = b_1(1 - b_2)^{b_5}$$

$$Y(„\infty“) = b_1$$

$$b_5 = 1 \qquad t_w = \left(\frac{b_4 - 1}{b_3 b_4}\right)^{\frac{1}{b_4}}$$

$$Y(t_w) = b_1\left(1 - b_2 e^{-\frac{b_4 - 1}{b_4}}\right)$$

$$b_4 = 1 \qquad t_w = \frac{\ln(b_2 b_5)}{b_3}$$

$$Y(t_w) = b_1\left(1 - \frac{1}{b_5}\right)^{b_5}$$

$$Y' = b_1 b_2 b_3 b_4 b_5 e^{-b_3 t^{b_4}} t^{b_4 - 1}(1 - b_2 e^{-b_3 t^{b_4}})^{b_5 - 1}$$

$$Y'' = b_1 b_2 b_3 b_4 b_5 t^{b_4 - 2} e^{-b_3 t^{b_4}}(1 - b_2 e^{-b_3 t^{b_4}})^{b_5 - 2}\left[(b_4 - 1 - b_3 b_4 t^{b_4})(1 - b_2 e^{-b_3 t^{b_4}}) + (b_5 - 1) b_2 b_3 b_4 t^{b_4} e^{-2 b_3 t^{b_4}}\right]$$

SLOBODA

$$Y = b_1 e^{b_2(1 - e^{b_3 t^{-b_4}})}$$

$$0 \leqq t < \infty$$

$$Y(0) = 0$$

tw **folgt aus:**

$$Y(„+\infty“) = b_1 \qquad b_2 b_3 b_4 e^{b_3 t_w^{-b_4}} = b_3 b_4 + (b_4 + 1) t_w^{b_4}$$

$$Y' = b_1 b_2 b_3 b_4 e^{b_2(1 - e^{b_3 t^{-b_4}})} e^{b_3 t^{-b_4}} t^{-b_4 - 1}$$

$$Y'' = b_1 b_2 b_3 b_4 e^{b_2(1 - e^{b_3 t^{-b_4}})} e^{b_3 t^{-b_4}} t^{-b_4 - 1}\left[-(b_4 + 1) t^{-1} - b_3 b_4 t^{-b_4 - 1} + b_2 b_3 b_4 e^{b_3 t^{-b_4}} t^{-b_4 - 1}\right]$$

THOMASIUS

$$Y = b_1(1 - e^{-b_2 t(1 - e^{-b_3 t})})^{b_4}$$

$$0 \leqq t < \infty$$

$$Y(0) = 0$$

$$Y(„+\infty“) = b_1$$

$$Y' = -b_1 b_2 b_4(1 - e^{-b_2 t(1 - e^{-b_3 t})})^{b_4 - 1} e^{-b_2 t(1 - e^{-b_3 t})}$$

$$b_4 = 1$$

$$Y'' = -b_1 b_2 e^{-b_2 t(1 - e^{-b_3 t})}(1 + (b_3 t - 1) e^{-b_3 t})$$

KÖVESSI, PESCHEL (zusammengesetztes Modell)

$$Y = b_1 - b_2 e^{-b_3 t} - b_4 e^{-b_5 t}$$

$0 \leqq t < \infty$

$Y(0) = b_1 - b_2 - b_4$

$Y(„+\infty“) = b_1$

t_w (nur wenn $b_2 > 0$, $b_4 < 0$ oder umgekehrt)

$b_4 < 0$

$$t_w = \frac{\ln(b_2 b_3^2) - \ln(-b_4 b_5^2)}{b_3 - b_5}$$

$b_4 > 0$

$$t_w = \frac{\ln(-b_2 b_3^2) - \ln(b_4 b_5^2)}{b_3 - b_5}$$

$$Y' = b_2 b_3 e^{-b_3 t} + b_4 b_5 e^{-b_5 t}$$

$$Y'' = -b_2 b_3^2 e^{-b_3 t} - b_4 b_5^2 e^{-b_5 t}$$

SCHARF, HOFFMANN, PEIL, HELLWIN

$$Y_1 = b_1 - b_2 (1 - \tanh(b_3 (t - b_4)))$$

$$Y_2 = b_1 - b_2 \left(1 - \frac{2}{\pi} \arctan(b_3 (t - b_4))\right)$$

$$Y_3 = b_1 - b_2 \left(2 - \frac{4}{\pi} \arctan(e^{b_3 (t - b_4)})\right)$$

$-\infty < t < \infty$

$Y(„-\infty“) = b_1 - 2b_2$

$Y_1(0) = b_1 - b_2 (1\text{-}\tanh(-b_3 b_4))$

usw.

$Y(b_4) = b_1 - b_2$

$Y(„+\infty“) = b_1$

$t_w = b_4$

$Y(t_w) = b_1 - b_2$

$Y_1' = b_2 b_3 (1\text{-}\tanh^2(b_3 (t - b_4)))$

$$Y_2' = \frac{2 b_2 b_3}{\pi (1 + (b_3 (t - b_4))^2)}$$

$$Y_3' = \frac{4 b_2 b_3 e^{b_3 (t - b_4)}}{\pi (1 + e^{2 b_3 (t - b_4)})}$$

$$Y_1'' = 2 b_2 b_3^2 \tanh(b_3 (t - b_4)) \; (1\text{-}\tanh^2(b_3 (t - b_4)))$$

$$Y_2'' = -\frac{4 b_2 b_3^3 (t - b_4)}{\pi (1 + (b_3 (t - b_4))^2)^2}$$

$$Y_3'' = \frac{4 b_2 b_3^2 e^{b_3 (t - b_4)} (1 - e^{2 b_3 (t - b_4)})}{\pi (1 + e^{2 b_3 (t - b_4)})^2}$$

Tag.-Ber. Akad. Landwirtsch.-Wis. DDR, Berlin (1985) 233, S. 5-11

Zusammenfassung

Wachstumsmodelle sind in vielen Fragestellungen den quasilinearen Regressionspolynomen vorzuziehen. Die effektive Anwendung dieser setzt jedoch eine gute Kenntnis der Eigenschaften des Modells voraus. Es werden die Möglichkeiten eines EDV-Projekts zur Modellwahl und Anfangswertschätzung der Modell-Parameter vorgestellt. Die Charakterisierung verschiedener, häufig verwendeter Modelle der Wachstumsanalyse soll auf modellspezifische Besonderheiten hinweisen.

Summary

Title of the paper: Methodology of model choice and parameter estimation in non-linear regression analysis

For the solution of many problems growth models are to be preferred to quasi linear regression polynominals. The efficient use of these growth models requires, however, a good knowledge of the model properties. The possibilities are outlined of establishing a computer project for model choice and estimation of the initial values of the model parameters. A description is given of various growth models which are frequently used, pointing especially to their model-specific peculiarities.

Literatur

PAUL, W. (1975): Ein direktes numerisches Verfahren zur Bestimmung der Parameter nichtlinearer Ausgleichsfunktionen. Biom. Z., Berlin 17, S. 487-500

PEIL, O. J. (1974): Mathematische Beschreibung von Wachstumsvorgängen I. Gegenbauers morphol. Jahrb., Leipzig 120, S. 832-853

RASCH, D. (1984): Wachstum: Arbeitsmaterial zum Forschungsthema Wachstum. - Dummerstorf- Rostock: Forschungszentrum für Tierproduktion (Probleme der angewandten Statistik; 1/1984)

Anschrift des Verfassers
DR. KLAUS-DIETER FEIGE
Forschungszentrum für Tierproduktion Dummerstorf-Rostock der Akademie der Landwirtschaftswissenschaften der DDR
DDR - 2551 Dummerstorf, Kreis Rostock