

Statističke metode u teoriji krivulja rasta

Dragić, Adriana

Master's thesis / Diplomski rad

2023

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **Josip Juraj Strossmayer University of Osijek, Faculty of Applied Mathematics and Informatics / Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku, Fakultet primijenjene matematike i informatike**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:126:801146>

Rights / Prava: [In copyright](#) / [Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2024-10-20**



Repository / Repozitorij:

[Repository of School of Applied Mathematics and Computer Science](#)



Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku

Odjel za matematiku

Sveučilišni diplomski studij

Financijska matematika i statistika

Adriana Dragić

Statističke metode u teoriji krivulja rasta

Diplomski rad

Osijek, 2023.

Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku

Odjel za matematiku

Sveučilišni diplomski studij

Financijska matematika i statistika

Adriana Dragić

Statističke metode u teoriji krivulja rasta

Diplomski rad

Mentor: doc. dr. sc. Ivan Papić

Osijek, 2023.

Sadržaj

1	Uvod	1
2	Eksponecijalne i monomolekularne krivulje rasta	2
2.1	Eksponecijalni model rasta	2
2.2	Model opće potencije	4
2.3	Monomolekularni model	6
3	Sigmoidalni modeli rasta	7
3.1	Logistički model	8
3.2	Gompertzov model	10
3.3	Von Bertalanffyev model	12
3.4	Richardsova krivulja	14
3.5	Weibullov model	17
4	Primjer procjene parametara nelinearnih modela rasta u šumar-	19
	stvu	
4.1	Uvod u metodu procjene parametara nelinearnih modela rasta	19
4.2	Reparametrizirani prikazi modela rasta	21
4.3	Marquardtova metoda za nelinearan problem najmanjih kvadrata	22
4.4	Metode procjene i parcijalne derivacije modela rasta	24
4.5	Određivanje početnih vrijednosti parametara modela rasta	28
4.6	Procjena i analiza parametara modela rasta	30
4.7	Prikaz modela rasta sa procijenjenim parametrima	34
4.8	Mogući problemi prilikom procjene parametara nelinearnih modela rasta korištenjem SAS NLIN procedure	36
4.9	Dodatak - SAS NLIN kod za procjenu parametara modela	37
	Literatura	39
	Sažetak	40
	Životopis	42

1 Uvod

Krivulje rasta raznih modela pokazale su se od velikog značaja u raznim znanstvenim područjima kao što su biologija, medicina, ekonomija, poljoprivreda, kemija, demografija, ekonomija te razna druga. Naime biolozi su zainteresirani za temeljne mehanizme koji opisuju rast, dok kemičare zanima formula proizvoda kemijske reakcije tijekom vremena. Iz ekonomskih razloga, u poljoprivredi su korisne za opisivanje rasta biljaka te otkrivanja kako faktori poput vremena ili raznih tretmana utječu na njihov rast. Nadalje, u medicini najčešće se koriste za promatranje rasta tumora i kako određeni tretmani prilikom liječenja utječu na njih. Kao što vidimo postoji široki spektar primjene krivulja modela rasta u svakodnevnom životu. Postoje dva pristupa modeliranja vrijednosti podataka, a to su empirijski i mehanički modeli. Empirijski modeli, uglavnom parametarski, opisani su familijom funkcija koja je dovoljno prilagodljiva tako da član familije dobro odgovara podacima. S druge strane, mehanički modeli opisani su familijom funkcija koje su izvedene iz matematičkih mehanizama generiranja podataka. U stvarnosti razlika između ova dva pristupa nije baš jasna. Također dva su temeljna pristupa za analizu krivulja rasta takozvani statistički i biološki pristup. Čisto empirijski pristup koji uključuje odgovarajuće polinomijalne krivulje podataka koristeći multivarijatne modele predstavlja statistički pristup. Modeli temeljeni na ovom pristupu korisni su za predviđanje informacija te u slučaju kada su podatci o rastu prikupljeni u ograničenom rasponu ciklusa rasta ovaj pristup pokazao se kao najprikladniji. Nedostatak modela s ovakvim pristupom je nepostojanje fizičke interpretacije njihovih parametara te nemaju sposobnost modeliranja znanja o procesu rasta. Kao primjer možemo uzeti činjenicu da se tijekom određene životne dobi veličina životinje stabilizira. S druge strane biološki pristup, koji se često naziva mehanički, uglavnom se bazira na modelima koji imaju biološku osnovu te parametre koji se mogu biološki interpretirati. U nastavku rada uglavnom ćemo se baviti empirijskim modelima čiji su parametri od fizičkog značaja te koji pokazuju nelinearno ponašanje.

2 Eksponencijalne i monomolekularne krivulje rasta

Eksponencijalna jednadžba temelj je velike većine modela rasta. Još rane 1798. godine engleski ekonomist i demograf Thomas Malthus koristio je eksponencijalnu jednadžbu u svojoj teoriji o rastu populacije. U ovom poglavlju upoznat ćemo se s nekim modelima koji se temelje na eksponencijalnoj jednadžbi čiji graf prati oblik eksponencijalne krivulje te ćemo vidjeti njihovu primjenu u svakodnevnom životu.

2.1 Eksponencijalni model rasta

Kao što smo ranije dali naslutiti, najjednostavnija i najstarija jednadžba rasta je upravo eksponencijalna jednadžba te ćemo se stoga prvo upoznati sa modelom eksponencijalnog rasta. Eksponencijalnom jednadžbom opisujemo razmnožavanje jednostavnih organizama koji se razmnožavaju binarnim dijeljenjem stanica. Ukoliko sa t označimo vrijeme, a sa Y_t broj organizama u trenutku t dolazimo do jednadžbe eksponencijalnog modela za rast oblika

$$\frac{dY_t}{dt} = \beta Y_t, \quad (2.1.1)$$

pri čemu $\beta \in \mathbb{R}$ predstavlja koeficijent rasta za koji pretpostavljamo da je konstantan. Prethodno spomenuta jednadžba nam govori da je brzina kojom se razmnožavaju organizmi u određenom vremenu proporcionalna trenutnom broju organizama u trenutku t . U slučaju kada je β pozitivan realan broj dolazimo do modela sa neograničenim rastom. Rješenje jednadžbe (2.1.1) je oblika

$$Y_t = e^{\beta t}.$$

Kako bi dobili cjelovito rješenje prethodne jednadžbe potrebno je postaviti početni uvjet. Pretpostavimo da u trenutku $t = 0$ imamo Y_0 organizama. Iz toga slijedi da je rješenje jednadžbe (2.1.1)

$$Y_t = Y_0 e^{\beta t}. \quad (2.1.2)$$

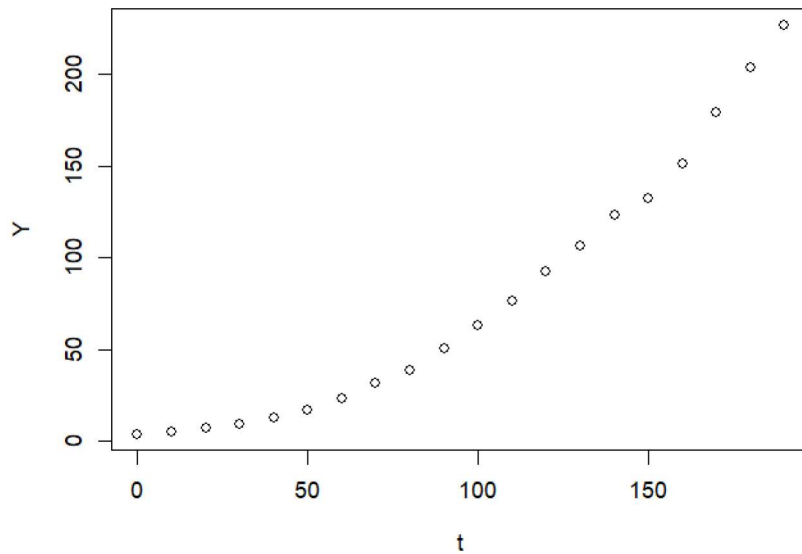
Jednadžba (2.1.2) često se identificira sa Malthusovom jednadžbom rasta. Eksponencijalni rast od velikog je značaja za mnoge modele rasta u slučaju kada je t neko malo vrijeme. Fenomen eksponencijalnog rasta možemo vidjeti u sljedećem primjeru.

Primjer 2.1.1. (preuzeto iz [1]) *Populacija Sjedinjenih Američkih Država.*
Primjer koji prikazuje eksponencijalni rast je porast stanovništva Sjedinjenih Američkih Država u razdoblju od 1790. do 1980. godine. U tablici 1 je prikazana populacija Sjedinjenih Američkih Država, po desetljećima, u spomenutom razdoblju.

Godina	t - broj godina od početka promatranja	Y - populacija (u milijunima)
1790	0	3.929
1800	10	5.308
1810	20	7.240
1820	30	9.638
1830	40	12.861
1840	50	17.064
1850	60	23.192
1860	70	31.443
1870	80	38.558
1880	90	50.189
1890	100	62.980
1900	110	76.212
1910	120	92.228
1920	130	106.021
1930	140	123.203
1940	150	132.165
1950	160	151.326
1960	170	179.323
1970	180	203.302
1980	190	226.546

Tablica 1: Populacija Sjedinjenih Američkih Država po desetljećima u razdoblju od 1790. do 1980. godine.

Grafički prikaz podataka iz Tablice 1 može se vidjeti na Slici 1.



Slika 1: Grafički prikaz podataka Tablice 1

Iz Slike 1 uočavamo kako porast populacije Sjedinjenih Američkih Država u promatranom vremenskom razdoblju prati eksponencijalnu krivulju rasta.

2.2 Model opće potencije

Još jedan koristan model s kojim ćemo se upoznati je model opće potencije. Sličan je eksponencijalnom modelu, no brzina rasta je nešto manja, a dan je sljedećom jednačinom

$$Y_t = Y_0 t^k,$$

pri čemu je $k = Y_0$ početna vrijednost, to jest vrijednost Y_t u trenutku $t = 0$. Oba modela, eksponencijalni i model opće potencije, dovode do neograničenog rasta, međutim biološki rast se tijekom vremena gotovo uvijek stabilizira, odnosno on se usporava približavanjem trenutne veličine svojoj maksimalnoj veličini koja je oblika

$$Y_\infty = \lim_{t \rightarrow \infty} Y_t.$$

Ukoliko pretpostavimo da je stopa rasta proporcionalna preostalom broju organizama dolazimo do pretpostavke o ograničenom rastu, odnosno traženo svojstvo postiže se ako vrijedi

$$\frac{dY_t}{dt} = \beta(Y_\infty - Y_t), \quad \beta > 0. \quad (2.2.1)$$

Opće rješenje jednadžbe (2.2.1) možemo parametrizirati na sljedeći način

$$Y_t = Y_\infty - (Y_\infty - k)e^{-\beta t}, \quad t > 0, \quad \beta > 0. \quad (2.2.2)$$

U slučaju kada krivuljom želimo opisati rast, odnosno povećanje, mora vrijediti da su Y_∞ i k pozitivni realni brojevi strogo veći od nule. Koristeći ovu parametrizaciju Y_∞ je konačna veličina, k predstavlja početnu veličinu, odnosno vrijednost Y_t u trenutku $t = 0$, dok je β parametar koji modelira stopu rasta. Jednadžbu (2.2.2) češće prikazujemo u obliku

$$Y_t = Y_\infty - ke^{-\beta t},$$

pri čemu parametrom k zamjenjujemo izraz $Y_\infty - k$ iz jednadžbe (2.2.2). Primjer modela opće potencije pogledajmo u primjeru koji slijedi.

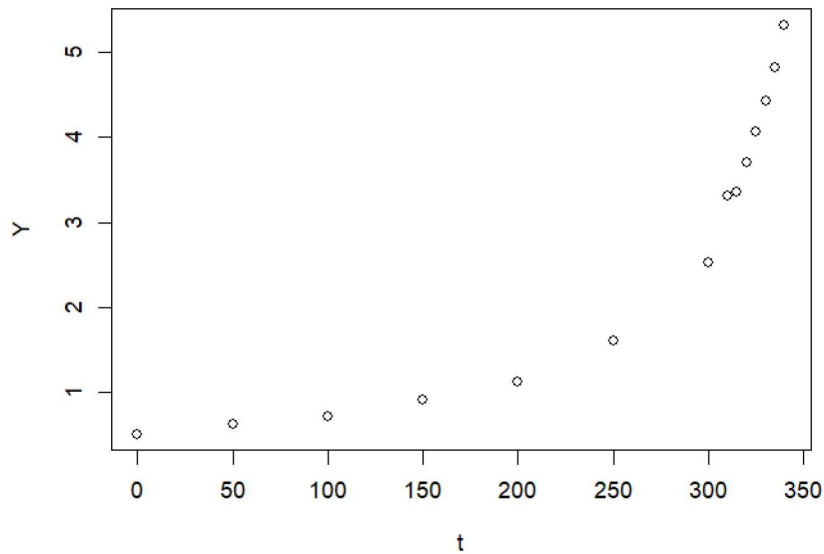
Primjer 2.2.1. (preuzeto iz [1]) *Svjetska populacija*

U ovom primjeru dana je tablica sa podacima svjetske populacije u razdoblju od 1650. godine do 1990. godine.

Godina	t - broj godina od početka promatranja	Y - populacija (u bilijunima)
1650	0	0.510
1700	50	0.625
1750	100	0.710
1800	150	0.0910
1850	200	1.130
1900	250	1.600
1950	300	2.525
1960	310	3.307
1965	315	3.354
1970	320	3.969
1975	325	4.066
1980	330	4.432
1985	335	4.822
1990	340	5.318

Tablica 2: Svjetska populacija u razdoblju od 1650. godine do 1990. godine.

Pogledajmo na Slici 2 grafički prikaz podataka iz Tablice 2.



Slika 2: Grafički prikaz podataka Tablice 2

Iz Slike 2 vidi se da je u prvih 300 godina promatranja porast populacije vrlo mal, no sredinom dvadesetog stoljeća uočavamo nagli porast svjetske populacije.

2.3 Monomolekularni model

Još jedan model koji je povezan sa eksponencijalnim modelom je monomolekularni model. Ukoliko jednadžbu (2.2.1) iz potpoglavlja 2.2 zapišemo kao

$$Y_t = Y_\infty(1 - e^{-\beta t}), \quad Y_\infty > 0, \quad \beta > 0,$$

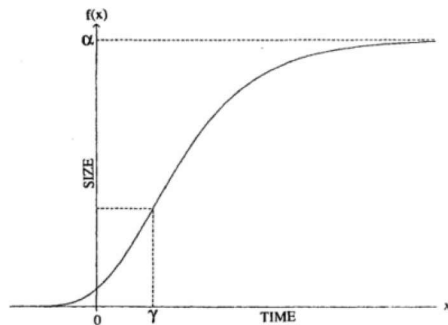
dobivamo jednadžbu monomolekularnog modela. Nadalje, reparametriziranjem jednadžbe (2.2.2) na način da izraz $Y_\infty - k$ zamijenimo sa $-k$, a $e^{-\beta}$ sa ρ dolazimo do jednadžbe

$$Y_t = Y_\infty + k\rho^t, \quad 0 < \rho < 1, \quad k > 0,$$

koja je još poznata kao asimptotski regresijski model. Također, prethodno spomenutu jednadžbu povezujemo i sa Newtonim zakonom hlađenja tijela tijekom vremena, no ako se koristi za modeliranje prinosa usjeva u odnosu na količinu gnojiva poznata je kao Mitcherlichov zakon.

3 Sigmoidalni modeli rasta

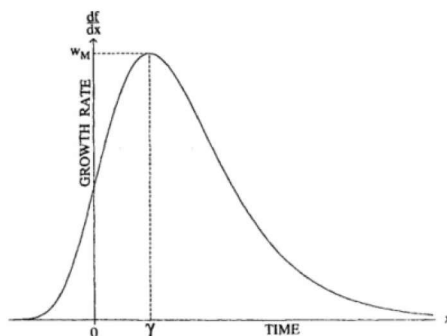
U ovom poglavlju upoznat ćemo se sa nekoliko vrsta sigmoidalnih modela rasta kao što su logistički, Gompertzov, von Bertalanffyev, Richardsov te Weibullov model. Za većinu vrsta modela rasta, stopa rasta ne opada ravnomjerno nego se povećava do maksimuma prije nego se ravnomjerno smanji u nulu. Spomenuto obilježje reprezentira time da su krivulje rasta svih tih modela oblika slova S po čemu su ovi modeli dobili ime. Slikovit prikaz oblika takvih krivulja može se vidjeti na Slici 3.



Slika 3: Krivulja rasta gdje je α konačna veličina, a γ točka infleksije

Prethodna Slika 3 preuzeta je iz [6].

Još jedno obilježje sigmoidalnih krivulja je da je položaj točke infleksije upravo vrijeme kada je stopa rasta najveća što je vidljivo na Slici 4. U nastavku rada $f(x)$ u našim oznakama predstavljat će Y_t dok ćemo za γ odnosno točku infleksije imati različite oznake ovisno o modelu koji obrađujemo. Maksimalnu stopu rasta što je na Slici 4 označeno sa ω_M mi ćemo označavati sa Y_∞ .



Slika 4: Krivulja brzine rasta gdje je ω_M maksimalna stopa rasta

Slika 4 preuzeta je iz [6].

Prethodno spomenuti modeli, koje ćemo u nastavku detaljnije opisati, postižu to sigmoidalno ponašanje. Naime, modeliranjem trenutne stope rasta kao produkta funkcija trenutne veličine i preostalog vremena dolazimo do sljedeće formule

$$\frac{dY_t}{dt} \propto {}^1g(Y_t)[h(Y_\infty) - h(Y_t)],$$

pri čemu su funkcije g i h rastuće te vrijedi $g(0) = h(0) = 0$.

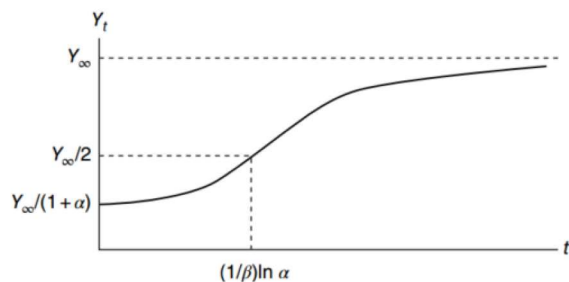
3.1 Logistički model

Prvi sigmoidalni model sa kojim ćemo se поближе upoznati je logistički model, a dan je jednadžbom oblika

$$Y_t = \frac{Y_\infty}{1 + \alpha e^{-\beta t}}, \quad t \geq 0, \quad (3.1.1)$$

pri čemu su parametri brzine rasta α i β kao i Y_∞ svi pozitivni. Prethodna jednadžba (3.1.1) izvedena je 1838. godine, a izveo ju je belgijski matematičar Pierre Francois Verhulst kako bi opisao rast populacije ili organa. Također, koristi se i za opisivanje brzine potrošnje monomolekularne kemijske tvari prilikom njene razgradnje u autokatalitičkoj reakciji. Kao i svi sigmoidalni modeli, krivulja rasta ovog modela je oblika slova S što se može vidjeti na Slici 5.

¹ α - oznaka za proporcionalne veličine



Slika 5: Logistički model

Slika 5 preuzeta je iz [3].

U početnom trenutku, odnosno kada je $t = 0$, krivulja ovog modela počinje u $Y_0 = \frac{Y_\infty}{1+\alpha}$, a kada $t \rightarrow \infty$, $Y_t \rightarrow Y_\infty$. Gornja horizontalna asimptota logističke funkcije Y_∞ naziva se zasićenje ili granica parametra rasta. S ciljem ispitivanja oblika logističke funkcije odredimo prvu i drugu derivaciju jednadžbe (3.1.1). Nakon deriviranja dobivamo sljedeće

$$\frac{dY_t}{dt} = \frac{\beta}{Y_\infty} Y_t (Y_\infty - Y_t), \quad (3.1.2)$$

$$\frac{d^2Y_t}{dt^2} = \frac{\beta}{Y_\infty} Y_t (Y_\infty - 2Y_t) \frac{dY_t}{dt}. \quad (3.1.3)$$

Iz jednadžbe (3.1.3) vidimo da ukoliko je $Y_t = \frac{Y_\infty}{2}$, odnosno ako imamo polovicu razine zasićenja, tada je $\frac{d^2Y_t}{dt^2} = 0$. Ukoliko Y_t iz jednadžbe (3.1.1) zamijenimo ovom vrijednosti Y_t , odnosno sa $Y_t = \frac{Y_\infty}{2}$, dobivamo da je t sljedećeg oblika $t = \frac{\ln \alpha}{\beta}$, pri čemu pretpostavljamo da vrijedi $\alpha > 1$. Dakle, logistička funkcija ima točku infleksije

$$(t_{inf}, Y_{t_{inf}}) = \left(\frac{\ln \alpha}{\beta}, \frac{Y_\infty}{2} \right)$$

te je simetrična u odnosu na tu točku. U slučaju kada je $t < \frac{\ln \alpha}{\beta}$ i $\frac{d^2Y_t}{dt^2} > 0$ krivulja je konveksnog oblika okrenuta prema gore. U suprotnom, odnosno kada je $t > \frac{\ln \alpha}{\beta}$ i $\frac{d^2Y_t}{dt^2} < 0$ krivulja je konkavnog oblika okrenuta prema dolje. Dakle, zaključujemo da je krivulja rasta jednadžbe (3.1.1) oblika slova S. Nadalje, iz jednadžbi (3.1.2) i (3.1.3) slijedi

$$\frac{dY_t}{dt} = \frac{\beta}{Y_\infty} (Y_\infty - Y_t) Y_t,$$

odnosno trenutna stopa rasta Y_t u trenutku t je proporcionalna iznosu za koji Y_t pada ispod gornje granice parametra zasićenja Y_∞ . Relativna stopa promjene Y_t

između vremena $t - 1$ i t dana je jednačbom oblika

$$R_t = \frac{Y_t}{Y_{t-1}} - 1,$$

to jest

$$R_t = \frac{e^{\beta-1}}{Y_\infty}(Y_\infty - Y_t).$$

Dakle, možemo primijetiti kako je stopa rasta proporcionalna $(Y_\infty - Y_t)$.

3.2 Gompertzov model

Model koji se često koristi za proučavanje populacije i rasta životinja u slučaju kada rast nije simetričan s obzirom na točku infleksije naziva se Gompertzov model. Jednačbu modela izveo je 1825. godine engleski matematičar Benjamin Gompertz te je model dan jednačbom

$$Y_t = Y_\infty e^{-\alpha e^{-\beta t}}, \quad t \geq 0, \quad (3.2.1)$$

gdje su α i β parametri rasta te su kao i Y_t pozitivni. U početnom trenutku, odnosno kada je $t = 0$ početna vrijednost iznosi $Y_0 = Y_\infty$, dok za $t \rightarrow \infty$, $Y_t \rightarrow Y_\infty$. Kao i kod logističkog modela Y_∞ predstavlja horizontalnu asimptotu ili gornju granicu rasta. Kako bismo ispitali oblik krivulje Gompertzovog modela derivirajmo jednačbu (3.2.1).

$$\frac{dY_t}{dt} = \alpha\beta e^{-\beta t} Y_t. \quad (3.2.2)$$

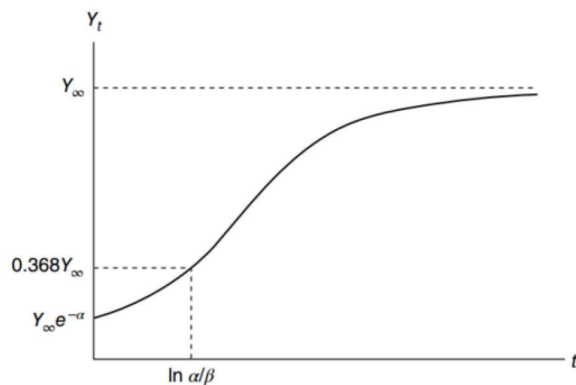
Potom, ukoliko deriviramo jednačbu (3.2.2) dobivamo jednačbu

$$\frac{d^2 Y_t}{dt^2} = \alpha\beta^2 e^{-\beta t} (\alpha e^{-\beta t} - 1) Y_t \quad (3.2.3)$$

iz koje vidimo da za $t = \frac{\ln \alpha}{\beta}$ jednačba poprima vrijednost nula, to jest vrijedi $\frac{d^2 Y_t}{dt^2} = 0$. Nadalje, ako ovu vrijednost t zamijenimo sa vrijednošću t iz jednačbe (3.2.1) dobivamo da je $Y_t = 0.36788 Y_\infty$. Iz spomenutog slijedi da Gompertzova funkcija ima točku infleksije

$$(t_{inf}, Y_{t_{inf}}) = \left(\frac{\ln \alpha}{\beta}, 0.36788 Y_\infty \right)$$

čiji se slikoviti prikaz može vidjeti na Slici 6.



Slika 6: Gompertzov model.

Slika 6 preuzeta je iz [3].

Dakle, krivulja Gompertzovog modela također je S oblika. Nadalje, dijeljenjem jednadžbe (3.2.2) sa $Y_t \neq 0$ slijedi

$$\frac{dY_t/dt}{Y_t} = \alpha\beta e^{-\beta t}. \quad (3.2.4)$$

Iz prethodne jednadžbe (3.2.4) vidimo da je trenutna stopa rasta Y_t u trenutku t opadajuća eksponencijalna funkcija vremena. Preko jednadžbe (3.2.1) lako možemo prikazati jednadžbu (3.2.4) na sljedeći način

$$\frac{dY_t/dt}{Y_t} = \beta(\ln Y_\infty - \ln Y_t). \quad (3.2.5)$$

Iz nje uočavamo da postoji linearna veza između trenutne stope rasta i prirodnog logaritma od Y_t . Dakle, stopa rasta proporcionalna je razlici $\ln Y_\infty - \ln Y_t$. Ukoliko jednažbu (3.2.4) logaritmujemo dobivamo

$$\ln \left(\frac{dY_t/dt}{Y_t} \right) = \ln(\alpha\beta) - \beta t \quad (3.2.6)$$

te možemo vidjeti da između logaritma trenutne stope rasta i trenutka t postoji linearna veza. Iz Gompertzovog modela možemo dobiti monomolekularni model ukoliko logaritmujemo Y_t . Također, svaka potencija Y_t je Gompertzova funkcija što je još jedno svojstvo ovog modela. Drugim riječima, neke mjere veličina poput težine, dužine i površine mogu dovesti do krivulja rasta istog oblika. Nadalje, za relativnu stopu promjene između vremenskih trenutaka $t - 1$ i t vrijedi

$$R_t = \frac{Y_t}{Y_{t-1}} - 1,$$

odnosno

$$R_t = \left(\frac{Y_t}{Y_\infty} \right)^{e^\beta - 1} - 1. \quad (3.2.7)$$

3.3 Von Bertalanffyev model

Jednadžbu ovoga modela 1938. godine izveo je austrijski biolog Karl Ludwig von Bertalanffy te ga je predložio kao mehanički model za rast životinja. Smatrao je da je brzina rasta životinja težine Y zapravo razlika između metaboličkih sila anabolizma i katabolizma. U ovom slučaju anabolizam predstavlja sintezu novog materijala te se smatra da je proporcionalan težini. Katabolizam predstavlja kontinuirani gubitak gradivnog materijala kao što se događa u bilo kojem živom organizmu te sa težinom ima alometrijski odnos. Nadalje, 1957. godine, kako bi opisao proces neto rasta von Bertalanffy ustvrdio je da anabolička stopa mora biti veća od kataboličke stope. U slučaju kada je katabolička stopa proporcionalna s Y_t , a anabolička stopa višekratnik k -te potencije Y_t dobivamo jednadžbu von Bertalanffyevog modela rasta oblika

$$\frac{dY_t}{dt} = \eta Y_t^k - \lambda Y_t, \quad (3.3.1)$$

pri čemu su η i λ realne konstante različite od nule. Također je empirijski otkrio da alometrijska snaga za brzinu metabolizma većine klasa životinja iznosi $\frac{2}{3}$ iz čega slijedi

$$\frac{dY_t}{dt} = \eta Y_t^{\frac{2}{3}} - \lambda Y_t. \quad (3.3.2)$$

Jednadžba (3.3.2) često se koristi u istraživanju ribarstva. Općenito, u svrhu prilagodbe mogućnosti eksponencijalnog rasta, von Bertalanffy dopustio je da k bude iz intervala $[\frac{2}{3}, 1]$. Ukoliko jednadžbu (3.3.1) integriramo dobivamo von Bertalanffyev model rasta oblika

$$Y_t = Y_\infty \left[1 - \beta e^{-\lambda(1-k)t} \right]^{\frac{1}{1-k}}, \quad (3.3.3)$$

gdje je

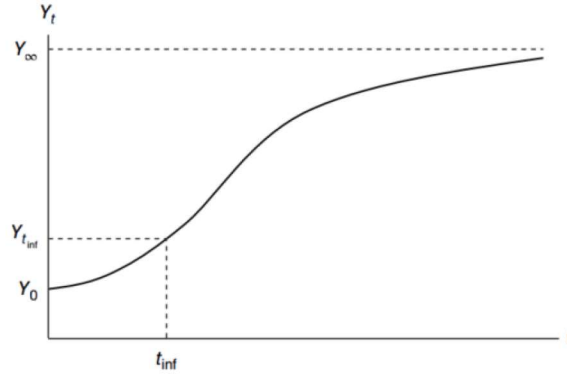
$$Y_\infty = \lim_{t \rightarrow \infty} Y_t = \left(\frac{\eta}{\lambda} \right)^{\frac{1}{1-k}}.$$

U jednadžbi (3.3.2) Y_∞ predstavlja granicu parametra rasta, $\beta = \frac{\alpha}{\eta}$, pri čemu je α konstanta integracije, λ je parametar stope rasta, a izraz $1 - k$ je parametar oblika. U početnom trenutku, odnosno kada je $t = 0$, početna vrijednost Y_t iznosi

$$Y_0 = \left(\frac{\eta}{\lambda} - \frac{\alpha}{\lambda} \right)^{\frac{1}{1-k}}.$$

Krivulja ovog modela, to jest jednadžbe (3.3.2), sigmoidalnog je oblika u slučaju kada je $k > 1$ te kada su oba parametra η i λ negativna. U tom slučaju Y_0 predstavlja donju asimptotu, a Y_∞ gornju asimptotu te kada je $\frac{d^2 Y_t}{dt^2} = 0$ postoji točka

infleksije $(t_{inf}, Y_{t_{inf}})$ čiji se grafički prikaz može vidjeti na Slici 7 koja je preuzeta iz [3].



Slika 7: Von Bertalanffyev model.

U suprotnom, odnosno kada je $k < 1$, a oba parametra η i λ pozitivna donja asimptota ne postoji.

Nadalje, deriviranjem jednadžbe (3.3.2) dobivamo

$$\frac{dY_t}{dt} = \beta \lambda Y_{\infty}^{1-k} e^{-\lambda(1-k)t} = \lambda Y_t \left[\left(\frac{Y_{\infty}}{Y_t} \right)^{1-k} - 1 \right]. \quad (3.3.4)$$

Kako bismo pronašli točku infleksije derivirajmo prethodnu jednadžbu (3.3.4).

$$\frac{d^2 Y_t}{dt^2} = \beta \lambda Y_{\infty}^{1-k} e^{-\lambda(1-k)t} Y_t^k \left[\lambda(k-1) + k Y_t^{-1} \frac{dY_t}{dt} \right].$$

Sređivanjem prethodnog izraza dobivamo

$$\frac{d^2 Y_t}{dt^2} = \lambda \frac{dY_t}{dt} \left[k \left(\frac{Y_{\infty}}{Y_t} \right)^{1-k} - 1 \right]. \quad (3.3.5)$$

Ukoliko stavimo da je $\frac{d^2 Y_t}{dt^2} = 0$, slijedi da je točka infleksije oblika

$$(t_{inf}, Y_{t_{inf}}) = \left(\frac{1}{\lambda(k-1)} \ln \frac{1-k}{\beta}, Y_{\infty} k^{\frac{1}{1-k}} \right).$$

Proporcionalnost stope rasta i takozvanog "povratnog pojma" $\left(\frac{Y_{\infty}}{Y_t} \right)^{1-k} - 1$ možemo vidjeti iz jednadžbe (3.3.4). Naime, trenutna stopa rasta Y_t u trenutku t iznosi

$$\begin{aligned} \frac{dY_t/dt}{Y_t} &= \beta \lambda Y_{\infty}^{1-k} e^{-\lambda(1-k)t} Y_t^{k-1} \\ &= \lambda (Y_t^{k-1} Y_{\infty}^{1-k} - 1), \end{aligned}$$

odnosno

$$\frac{dY_t/dt}{Y_t} = \lambda \left[\left(\frac{Y_\infty}{Y_t} \right)^{1-k} - 1 \right]. \quad (3.3.6)$$

Primijetimo da se maksimum trenutne stope rasta Y_t postiže upravo u točki infleksije te u toj točki iznosi

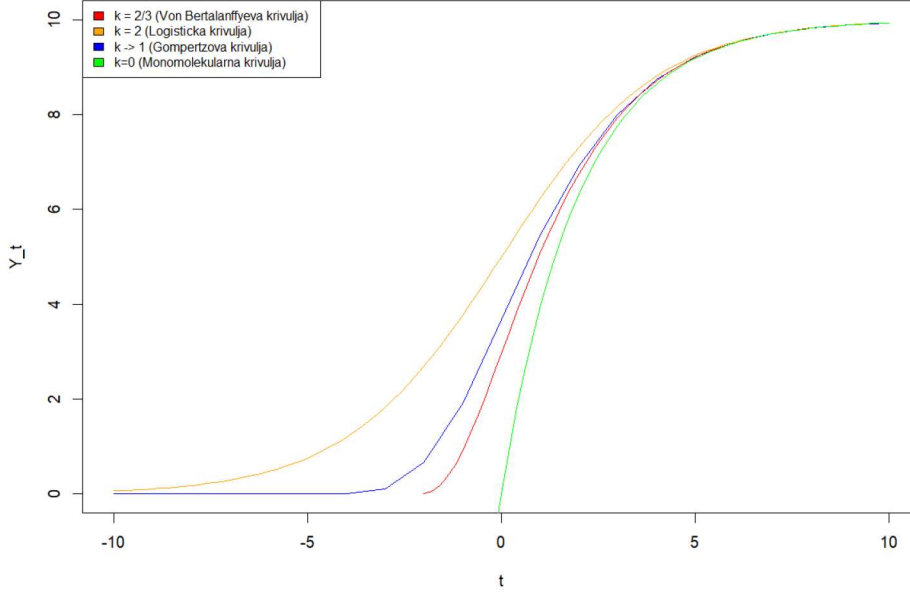
$$\frac{dY_t/dt}{Y_t} = \frac{\lambda(1-k)}{k}.$$

3.4 Richardsova krivulja

Engleski fiziolog biljaka Francis John Richards prvi je 1959. godine opisao generaliziranu logističku funkciju. Naime, Richardsu je bila sumnjiva teorijska valjanost i korisnost von Bertalanffyevog modela koji se koristi za opis rasta mehanizama. U jednadžbi (3.3.1) von Bertalanffyevog modela primijetio je da ukoliko se parametar k tretira kao slobodni parametar dovodi do fleksibilnosti familije krivulja s proizvoljnom točkom infleksije. Kao što smo spomenuli ranije u potpoglavlju 3.3, ukoliko želimo pozitivnu stopu rasta koja je konačna i ograničena za parametre jednadžbe (3.3.1) mora vrijediti da su oba parametra η i λ negativna te $k > 1$. Nadalje, postavimo li da je $Y_t = Y_\infty$ slijedi da je $\frac{dY_t}{dt} = 0$ te spomenutu jednadžbu (3.3.1) možemo zapisati kao

$$\frac{dY_t}{dt} = \frac{\beta}{1-k} Y_t \left[\left(\frac{Y_t}{Y_\infty} \right)^{k-1} - 1 \right], \quad k \neq 1, \quad (3.4.1)$$

pri čemu je $\beta = \eta(1-k)Y_\infty^{k-1}$. Za različite vrijednosti parametra k iz ove jednadžbe možemo dobiti neke jednadžbe ranije spomenutih modela. Tako, u slučaju kada je $k = 0$ dobivamo jednadžbu monomolekularnog modela, za $k = 2$ jednadžbu logističkog modela, kada $k \rightarrow 1$ jednadžbu Gompertzovog modela te za $k = \frac{2}{3}$ jednadžbu von Bertalanffyevog modela rasta. Grafički prikaz familija krivulja za razne vrijednosti parametra k može se vidjeti na Slici 8.



Slika 8: Richardsova familija krivulja rasta za različite vrijednosti parametra k .

Nadalje kako bismo došli do rješenja jednadžbe (3.4.1) uvedimo sljedeću supstituciju

$$y = \begin{cases} Y_\infty^{1-k} - Y_t^{1-k}, & k < 1, \\ Y_\infty^{k-1} - Y_t^{k-1}, & k > 1. \end{cases}$$

U oba slučaja, to jest i u slučaju kada je $k < 1$ i kada je $k > 1$, rješenje jednadžbe (3.4.1) oblika je $y = e^{-\beta(t-c)}$ te ono slijedi iz činjenice da je $\frac{dy}{dt} = -\beta y$. Uz pomoć toga dobivamo da je

$$Y_t = \begin{cases} [Y_\infty^{1-k} - e^{-\beta(t-c)}]^{1/(1-k)}, & k < 1, \\ [Y_\infty^{k-1} + e^{-\beta(t-c)}]^{1/(1-k)}, & k > 1. \end{cases}$$

Za svaki $k \neq 1$, prethodni izraz možemo zapisati pomoću sljedeće jednadžbe

$$Y_t = Y_\infty [1 + (k-1)e^{-\beta(t-\gamma)}]^{1/(1-k)}. \quad (3.4.2)$$

U slučaju kada je $k < 1$, kako bi osigurali da vrijedi $0 \leq Y_t \leq Y_\infty$, uvodimo sljedeću restrikciju $(1-k)e^{\beta\gamma} \leq 1$. Nadalje deriviranjem jednadžbe (3.4.1) dolazimo do izraza

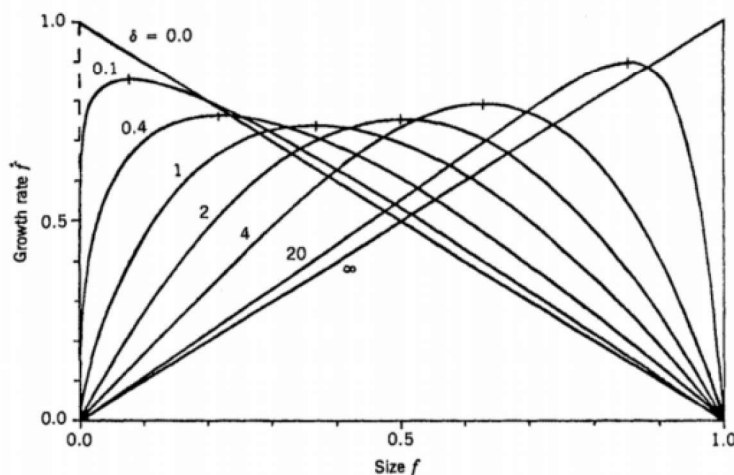
$$\frac{d^2 Y_t}{dt^2} = \frac{\beta}{1-k} \left[k \left(\frac{Y_t}{Y_\infty} \right)^{k-1} - 1 \right] \frac{dY_t}{dt} \quad (3.4.3)$$

čija je vrijednost nula kada je $k > 0$ i $Y_t = \frac{Y_\infty}{k^{(k-1)^{-1}}}$. Na temelju tog možemo doći do točke infleksije krivulje koja je neizravno određena parametrom k na ordinatnoj osi u omjeru $p = k^{\frac{1}{1-k}}$ konačne veličine. Na taj način k kontrolira oblik krivulje. Uz pomoć parametara γ dobivamo vrijednost točke infleksije na osi apscisa te maksimalna stopa rasta iznosi $\beta Y_\infty k^{\frac{k}{1-k}}$. U slučaju kada $k \rightarrow \infty$ krivulja jednadžbe (3.4.2) teži obliku krnje eksponencijalne krivulje.

U suprotnom, odnosno za $k \leq 0$ točka infleksije ne postoji. Kako za krivulje različitih oblika ne postoji jednostavan, to jest jednoparametarski način za uspoređivanje stope rasta, 1959. godine Richards je izveo formulu za prosječnu stopu rasta koja je oblika

$$\frac{1}{Y_\infty} \int_0^{Y_\infty} \frac{\beta Y_t}{1-k} \left[\left(\frac{Y_t}{Y_\infty} \right)^{k-1} - 1 \right] dY_t = \frac{Y_\infty \beta}{2(k+1)}. \quad (3.4.4)$$

Na temelju prethodne formule Richards je uspio dobiti traženo, odnosno uspio je naći grubu mjeru stope rasta oblika $\frac{\beta}{2(k+1)}$ te se ona koristi za usporedbu kod krivulja različitih oblika. Na Slici 9 prikazana je veza između stope rasta i veličine za Richardsove familije krivulja sa naznačenim vrijednostima parametra k pri čemu za svaku krivulju vrijedi $Y_\infty = 1$ te je gruba mjera stope rasta konstantna.



Slika 9: Veza između stope rasta i veličine za Richardsove familije krivulja s naznačenim maksimalnim vrijednostima. U terminima naših oznaka δ predstavlja parametar k , Size f je Y_t , a Growth rate \dot{f} je stopa rasta dY_t/dt .

Slika 9 preuzeta je iz [6].

Iz spomenute slike možemo uočiti da je maksimalna stopa rasta za krivulje s istom vrijednošću grube mjere stope rasta $\frac{\beta}{2(k+1)}$ te za $k \in [0.4, 4]$ vrlo slična, što ukazuje na to da za različite krivulje rasta gruba mjera stope rasta nije korisna.

3.5 Weibullov model

Jednadžbu ovog modela izveo je švedski matematičar Ernst Hjalmar Waloddi Weibull 1959. godine. Primjene ovog modela su razne pa tako njihovu primjenu možemo pronaći u opisivanju rasta populacije, rasta u poljoprivredi, rastu visine. Također se koristi i za opisivanje preživljavanja u slučaju ozljeda ili bolesti te za opisivanje u istraživanjima populacijske dinamike. Weibullov model dan je jednadžbom

$$Y_t = Y_\infty - \alpha e^{-\beta t^\gamma}, \quad t \geq 0. \quad (3.5.1)$$

Parametri Y_∞ , α , β i γ su pozitivni te β predstavlja parametar rasta za fiksnu vrijednost γ , dok je γ parametar oblika. Jednadžba modela nastala je kao generalizacija, odnosno proširenje, Weibullove funkcije distribucije

$$F(t; \alpha, \theta) = 1 - e^{-\left(\frac{t}{\alpha}\right)^\theta}, \quad t \geq 0,$$

u kojoj su α i θ pozitivni realni parametri, pri čemu α ne smije biti nula. Nadalje, uvođenjem dodatnih parametara, sa svrhom smanjenja restriktivne gornje granice, "1" je zamjenjen sa Y_∞ odnosno, vrijedi $\lim_{t \rightarrow \infty} Y_t = Y_\infty$. I u ovom modelu Y_∞ predstavlja granicu parametra rasta. U početnom trenutku, to jest kada je $t = 0$, početna vrijednost Y_t iznosi $Y_0 = Y_\infty - \alpha$. Nadalje, kako bismo ispitali oblik krivulje ovog modela te našli točku infleksije nađimo prvu i drugu derivaciju jednadžbe (3.5.1).

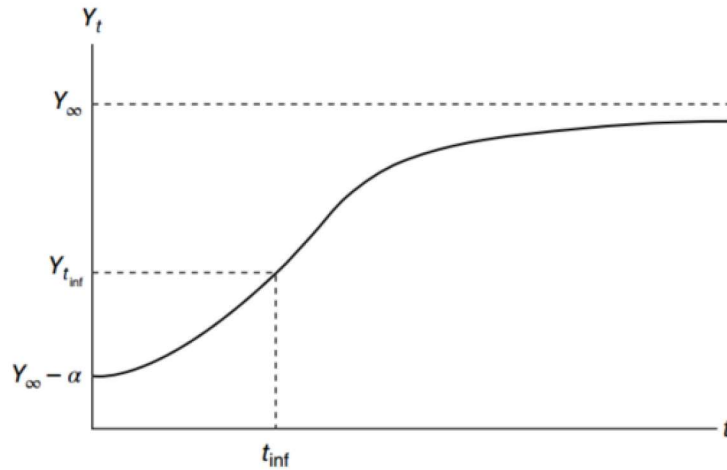
$$\frac{dY_t}{dt} = \beta \gamma t^{\gamma-1} (Y_\infty - Y_t), \quad (3.5.2)$$

$$\frac{d^2Y_t}{dt^2} = \beta \gamma t^{\gamma-1} \left[(\gamma - 1)t^{-1} (Y_\infty - Y_t) - \frac{dY_t}{dt} \right]. \quad (3.5.3)$$

Ukoliko postavimo da je $\frac{d^2Y_t}{dt^2} = 0$ iz jednadžbe (3.5.3) slijedi da je t oblika $t_{inf} = \left[\frac{\gamma-1}{\beta\gamma} \right]^{\frac{1}{\gamma}}$. Potom, zamjenom vrijednosti t iz jednadžbe (3.5.1) ovom vrijednosti t dobivamo da je Y_t oblika $Y_{t_{inf}} = Y_\infty - \alpha e^{-(\gamma-1)/\gamma}$ te je točka infleksije ovog modela

$$(t_{inf}, Y_{t_{inf}}) = \left(\left[\frac{\gamma-1}{\beta\gamma} \right]^{\frac{1}{\gamma}}, Y_\infty - \alpha e^{-(\gamma-1)/\gamma} \right).$$

Iz opisanog slijedi da je krivulja Weibullovog modela također S oblika što je vidljivo na Slici 10.



Slika 10: Weibullov model.

Slika 10 preuzeta je iz [3].

Nadalje, dijeljenjem jednačbe (3.5.2) sa $Y_t \neq 0$ dobivamo

$$\frac{dY_t/dt}{Y_t} = \beta\gamma t^{\gamma-1} \left(\frac{Y_\infty}{Y_t} - 1 \right), \quad (3.5.4)$$

iz čega slijedi da se trenutna stopa rasta Y_t u trenutku t približava nuli kada $t \rightarrow +\infty$. Spomenuto svojstvo vrijedi i ukoliko $Y_t \rightarrow Y_\infty$. Logaritmiranjem jednačbe (3.5.4) slijedi

$$\ln \frac{dY_t/dt}{Y_t} - \ln \left(\frac{Y_\infty}{Y_t} - 1 \right) = \ln(\beta\gamma) + (\gamma - 1)t,$$

gdje možemo uočiti postojanje linearne veze razlike logaritma trenutne stope rasta i logaritma takozvanog "povratnog termina".

4 Primjer procjene parametara nelinearnih modela rasta u šumarstvu

4.1 Uvod u metodu procjene parametara nelinearnih modela rasta

U ovom potpoglavlju dat ćemo kratki uvid u metode procjene parametara nelinearnih modela. Najčešće metode koje se koriste za procjenu parametara takvih modela su

- i) metoda nelinearnih najmanjih kvadrata (NLS),
- ii) metoda maksimalne vjerodostojnosti (ML).

Metodom nelinearnih najmanjih kvadrata minimiziramo sumu kvadrata odstupanja opaženih i predviđenih vrijednosti što je ustvari nelinearna funkcija sa ograničenim parametrima, dok metodom maksimalne vjerodostojnosti maksimiziramo funkciju vjerodostojnosti uzorka uzimajući u obzir ograničene parametre. Ukoliko vrijedi pretpostavka da su greške u modelu nezavisne i jednako distribuirane slučajne varijable iz $\mathcal{N}(0, \sigma_\varepsilon^2)$ tada procjenu parametara možemo izvršiti metodom maksimalne vjerodostojnosti. U suprotnom koristimo metodu nelinearnih najmanjih kvadrata. Zanimljivo je da je asimptotska distribucija NLS procjenitelja normalna te ima isto očekivanje i varijancu kao ML procjenitelj čak i u slučaju kada ε nije normalno distribuirana. U stvarnosti za svaku od ove dvije spomenute metode teško je dobiti eksplicitno rješenje za procjenu parametara. Zato se u primjeni za procjenu parametara nelinearnih modela rasta koriste odgovarajuće SAS² procedure jer je ručno računanje vrlo zahtjevno i često nemoguće. Za procjenu parametara modela ovoga rada korištena je SAS NLIN³ procedura. Spomenuta procedura procjenjuje parametre nelinearnih modela koristeći metodu najmanjih kvadrata i metodu ponderiranih najmanjih kvadrata. Kako smo i ranije dali naslutiti parametre nelinearnih modela puno je teže procijeniti i odrediti nego parametre linearnih modela. Iz tog razloga prilikom procjene parametara nelinearnih modela, ne možemo samo navesti popis regresijskih varijabli, već je potrebno napisati regresijski izraz, odrediti nazive parametara te zadati njihove početne vrijednosti. Međutim, ukoliko pri procjeni parametara modela koristimo ovu proceduru možemo naići na problem da se neki nelinearan model teško prilagođava ovoj proceduri i u tom slučaju ne možemo biti sigurni da se ovaj postupak može uspješno prilagoditi modelu te samim time ne možemo biti sigurni u ispravnost dobivenih rezultata. Dakle, koristeći ovu proceduru za svaki nelinearni model prilikom procjene parametara potrebno je navesti model

²SAS - programski jezik

³NLIN - nelinearna regresija

koristeći jednu zavisnu varijablu te imena i početne vrijednosti parametara koji se procjenjuju. NLIN procedura radi na način da ona najprije ispituje specifikacije početnih vrijednosti parametara. Nadalje, nakon što je skup vrijednosti parametara određen, PROC NLIN procedura računa zbroj kvadrata reziduala za svaki skup vrijednosti parametara s ciljem određivanja skupa vrijednosti parametara koji daje najmanji zbroj kvadrata reziduala. Upravo se te vrijednosti parametara koriste kao početne vrijednosti prvog koraka iteracije. Prilikom procjene parametara nelinearnih modela PROC NLIN procedura koristi jednu od sljedećih iterativnih metoda:

- i) metodu gradijenta,
- ii) Newtonovu metodu,
- iii) modificiranu Gauss - Newtonovu metodu,
- iv) Marquardtovu metodu.

Ove metode koriste derivacije ili procjene derivacije SSE^4 uzimajući u obzir parametre s ciljem pronalaska parametara koji proizvode najmanju SSE. Detaljnije o ovoj proceduri može se vidjeti u [4, (str. 2999-3043)].

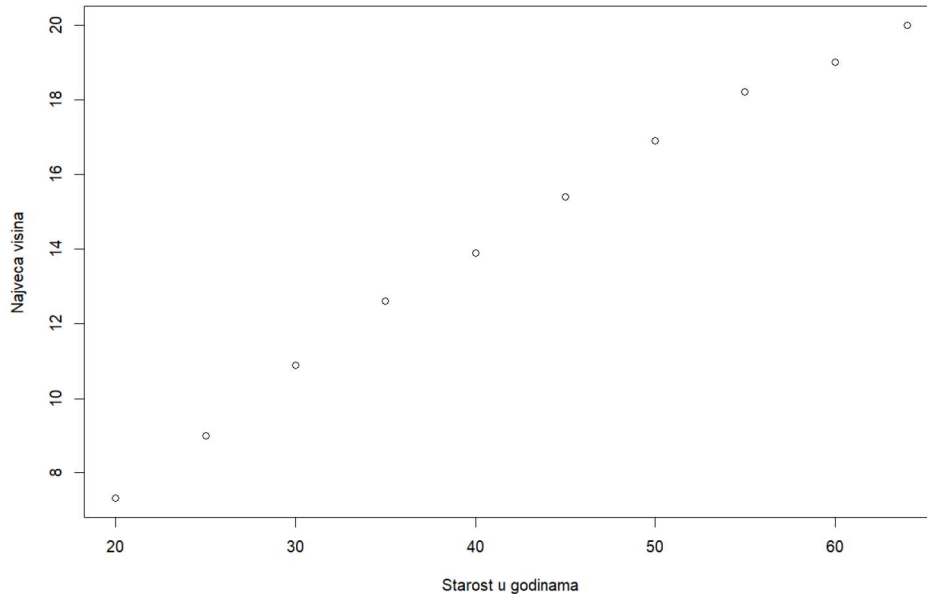
U nastavku rada dani su primjeri procjene parametara monomolekularnog, logističkog, Gompertzovog, von Bertalanffyevog, Richardsovog te Weibullovog modela rasta u šumarstvu pri čemu je korištena ranije spomenuta NLIN procedura. Parametri modela procijenjeni su pomoću Marquardtove iterativne metode nelinearne regresije na podacima najveće visine i starost norveške smreke iz Browmontovog eksperimenta prorjeđivanja norveške smreke. Browmontov eksperiment prorjeđivanja norveške smreke proveden je u razdoblju od 1930. do 1974 godine u okrugu Roxburghu u graničnoj regiji Škotske. Cilj eksperimenta bio je istražiti utjecaj četiri tretmana prorjeđivanja na rast i prinos norveške smreke. Svaki tretman ponovljen je četiri puta te je svaki put mjereno šesnaest istih oglednih ploha čija površina iznosi 0.04 hektara. Sva mjerenja, osim zadnjega koje je provedeno u razmaku od četiri godine, provedena su svakih pet godina. Prilikom prvog mjerenja, 1930. godine, norveške smreke su bile stare 20 godina te je lokalni prinos iznosio 15 kubnih metara po hektaru godišnje. Norveške smreke sa ogledne plohe 3661 koje su bile podvrgnute prorjeđivanju B razreda, koji se koristio samo za uklanjanje mrtvih i umirućih stabala, pokazao se kao prikladan za demonstraciju procjene parametara nelinearnih modela rasta. Spomenuti podaci, korišteni za ilustraciju procjene parametara modela, omogućeni su od Komisije za šumarstvo Ujedinjenog Kraljevstva, a prikazani su u Tablici 3.

⁴U engleskoj terminologiji SSE označava sum of squares error.

Najveća visina (m)	7.3	9.0	10.9	12.6	13.9	15.4	16.9	18.2	19.0	20.0
Starost (godine)	20	25	30	35	40	45	50	55	60	64

Tablica 3: Preuzeto iz [2].

Podaci rasta najveće visine iz Browmontovog eksperimenta prorjeđivanja norveške smreke u razdoblju od 1930. do 1974. godine, podaci sa ogleadne plohe 3661.



Slika 11: Grafički prikaz podataka iz Tablice 3.

4.2 Reparametrizirani prikazi modela rasta

Prilikom procjene parametara nelinearnih modela često je potrebno model reparametrizirati. S obzirom na podatke iz Tablice 3, pomoću kojih vršimo procjenu parametara, neke od ranije opisanih modela bilo je potrebno reparametrizirati te su oni prikazani u Tablici 4.

Model	Integralni oblik modela
Monomolekularni	$Y_t = Y_\infty (1 - \alpha e^{-\beta t}) + \varepsilon$
Logistički	$Y_t = \frac{Y_\infty}{(1 + \alpha e^{-\beta t})} + \varepsilon$
Gompertzov	$Y_t = Y_\infty e^{-\alpha e^{-\beta t}} + \varepsilon$
Von Bertalanffyev	$Y_t = (Y_\infty^{1-k} - \alpha e^{-\beta t})^{\frac{1}{1-k}} + \varepsilon$
Richardsov	$Y_t = \frac{Y_\infty}{(1 + \alpha e^{-\beta t})^{\frac{1}{k}}} + \varepsilon$
Weibullovo	$Y_t = (Y_\infty - \alpha e^{-\beta t^k}) + \varepsilon$

Tablica 4: Preuzeto iz [2].

Prikaz nelinearnih modela koji se koriste za procjenu parametara.

Nadalje, u svakom navedenom modelu iz Tablice 4 Y_t predstavlja zavisnu varijablu rasta, t nezavisnu varijablu koja predstavlja starost norveške smreke izražene u godinama, Y_∞ , α , β i k parametre koje želimo procijeniti, a ε standardnu grešku. Kako smo ranije spomenuli za procjenu parametara modela korištena je Marquardtova iterativna metoda jer ponekad nelinearni modeli niti nakon reparametrizacije ne pokazuju niti približno, poželjno, linearno ponašanje. Ukoliko se dogodi takav slučaj, procijenjeni parametri nemaju željena svojstva kao što su nepristranost, normalnost i minimalna varijanca pa su složene tehnike za procjenu parametara poput Marquardtove metode nužne. Navedena metoda za procjenu parametara koristi parcijalne derivacije modela. Iz tog ćemo razloga u nastavku rada pomoću parcijalnih derivacija modela prikazanih u Tablici 5 ilustrirati metodu procjene parametara koristeći eksperimentalne podatke o visini rasta danih u Tablici 3.

4.3 Marquardtova metoda za nelinearan problem najmanjih kvadrata

Pretpostavimo da imamo zavisnu varijablu y koja ovisi o nezavisnoj varijabli t po funkcionalnom zakonu

$$y = f(t; \mathbf{B}),$$

pri čemu funkciju f nazivamo model-funkcija, a $\mathbf{B} = (\beta_1, \dots, \beta_n)^T \in \mathbb{R}^n$ je vektor parametara. Nadalje neka je \mathbf{r} vektor reziduala s komponentama

$$r_i(\mathbf{B}) = f(t_i; \mathbf{B}) - y_i, \quad i = 1, \dots, n.$$

Želimo pronaći procjenu $\hat{\mathbf{B}} = (\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \dots, \hat{\beta}_n) \in \mathbb{R}^n$ u kojoj funkcija $SS_{Res}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ definirana s

$$SS_{Res}(\mathbf{B}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n r_i^2(\mathbf{B})$$

postiže globalni minimum. Drugim riječima, potrebno je riješiti problem globalne optimizacije

$$\arg \min_{\mathbf{B} \in \mathbb{R}^n} SS_{Res}(\mathbf{B}).$$

U svrhu analiziranja ekstrema funkcije SS_{Res} najprije ćemo izračunati njen gradijent koji je oblika

$$\text{grad}SS_{Res} = \mathbf{B}^T \mathbf{r},$$

pri čemu je

$$\text{grad}SS_{Res} = \begin{bmatrix} \frac{\partial SS_{Res}}{\partial \beta_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial SS_{Res}}{\partial \beta_n} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial r_1}{\partial \beta_1} & \cdots & \frac{\partial r_1}{\partial \beta_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial r_m}{\partial \beta_1} & \cdots & \frac{\partial r_m}{\partial \beta_n} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{r} = \begin{bmatrix} r_1 \\ \vdots \\ r_m \end{bmatrix}, \quad m \geq n.$$

S n je označen broj parametara, m je broj podataka, a matrica \mathbf{J} naziva se Jacobijan funkcije SS_{Res} . Nadalje, Hessijan funkcije SS_{Res} možemo zapisati na sljedeći način

$$\mathbf{H}_{SS_{Res}} = \mathbf{J}^T \mathbf{J} + \sum_{k=1}^m r_k \mathbf{H}_k,$$

pri čemu su \mathbf{H}_k matrice reda n sa elementima oblika

$$(\mathbf{H}_k)_{ij} = \frac{\partial^2 r_k}{\partial \beta_i \partial \beta_j}.$$

Nadalje, izjednačavanjem gradijenta funkcije SS_{Res} s nulom dobivamo sustav od n jednažbi s nepoznicama β_1, \dots, β_n , a oblika su

$$\mathbf{J}^T \mathbf{r} = \mathbf{0},$$

to jest

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^m r_i \frac{\partial r_i}{\partial \beta_1} &= 0, \\ &\vdots \\ \sum_{i=1}^m r_i \frac{\partial r_i}{\partial \beta_n} &= 0. \end{aligned}$$

Ukoliko je funkcija SS_{Res} nelinearna u barem jednom od svojih parametara tada imamo sustav nelinearnih jednažbi. Nadalje, ukoliko je $\mathbf{J}(\mathbf{B}^k) < n$ za neki k u tom slučaju je matrica $\mathbf{J}^T(\mathbf{B}^k)\mathbf{J}(\mathbf{B}^k)$ singularna i tada Hessijan $\mathbf{H}(\mathbf{B}^k)$ aproksimiramo na sljedeći način

$$\mathbf{H}_{SS_{Res}}(\mathbf{B}) = \mathbf{J}(\mathbf{B})^T \mathbf{J}(\mathbf{B}) + \mu \mathbf{I}, \quad \mu > 0,$$

pri čemu je \mathbf{I} jedinična matrica reda n . Vektor smjera kretanja \mathbf{s}^k dobivamo rješavanjem sustava jednadžbi oblika

$$(\mathbf{J}^T(\mathbf{B}^k)\mathbf{J}(\mathbf{B}^k) + \mu_k\mathbf{I})\mathbf{s}^k = -\mathbf{J}^T(\mathbf{B}^k)\mathbf{r}(\mathbf{B}^k).$$

Taj sustav jednadžbi možemo shvatiti kao sustav normalnih jednadžbi za linearan problem najmanjih kvadrata oblika

$$\begin{bmatrix} \mathbf{J}(\mathbf{B}^k) \\ \sqrt{\mu_k}\mathbf{I} \end{bmatrix} \mathbf{s}^k \simeq \begin{bmatrix} -\mathbf{r}(\mathbf{B}^k) \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}.$$

Parametar μ biramo na način da uvijek bude ispunjen uvjet

$$SS_{Res}(\mathbf{B}^k + \lambda\mathbf{s}^k) - SS_{Res}(\mathbf{B}^k) \geq \tau\lambda(\text{grad}SS_{Res}(\mathbf{B}^k), \mathbf{s}^k),$$

gdje je $\tau \in \langle 0, \frac{1}{2} \rangle$, a λ predstavlja duljinu koraka u smjeru vektora \mathbf{s}^k . Također, pri biranju parametra μ , osim što pazimo da prethodni uvjet bude zadovoljen, nastojimo se zadržati na što manjoj vrijednosti parametra μ . Opis ove metode preuzet je iz [5].

4.4 Metode procjene i parcijalne derivacije modela rasta

U prethodnom poglavlju 4.3 dan je općeniti opis Marquardtove metode za nelinearni problem najmanjih kvadrata koji u nastavku koristimo za procjenu parametara modela. Nadalje, neka je dan nelinearan model

$$Y_i = f(t_i, \mathbf{B}) + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, m,$$

pri čemu je Y_i zavisna varijabla, t_i nezavisna varijabla, $\mathbf{B} = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n)$ vektor parametara koje želimo procijeniti gdje je n broj nepoznatih parametara, a i broj observacija. ε_i su standardne greške za koje pretpostavljamo da su nezavisne te da su normalno distribuirane sa očekivanjem 0 i varijancom σ^2 . Procjene $\hat{\beta}_j$ parametara β_j , $j = 1, \dots, n$, pronalaze se minimiziranjem funkcije $SS_{Res}(\mathbf{B})$ koja nakon minimiziranja predstavlja sumu kvadrata reziduala, odnosno

$$SS_{Res}(\mathbf{B}) = \sum_{i=1}^m [y_i - f(t_i, \mathbf{B})]^2, \quad (4.4.1)$$

Budući da su y_i i t_i fiksne observacije, suma kvadrata reziduala je funkcija po \mathbf{B} . Nadalje, deriviranjem jednadžbe (4.4.1) s obzirom na svaki parametar β_j , $j = 1, \dots, n$, i izjednačavanjem tih jednadžbi s nulom dobivamo sustav jednadžbi na temelju kojeg dobivamo procjene za svaki parametar β_j , $j = 1, \dots, n$. Drugim riječima, na taj način dobivamo n normalnih jednadžbi koje se moraju riješiti, a oblika su

$$\sum_{i=1}^m \{y_i - f(t_i, \mathbf{B})\} \left[\frac{\partial f(t_i, \mathbf{B})}{\partial \beta_j} \right] = 0, \quad j = 1, \dots, n. \quad (4.4.2)$$

Spomenute procjene dobivene su metodom najmanjih kvadrata te nakon uvrštavanja njihovih vrijednosti u jednadžbu (4.4.1) one daju najmanju $SS_{Res}(\mathbf{B})$. U slučaju kada je model nelinearan u parametrima takve su i normalne jednadžbe. Kod takvih nelinearnih modela nemoguće je dobiti procjenu parametara metodom najmanjih kvadrata rješavanjem n normalnih jednadžbi oblika (4.4.2) te se u tom slučaju primjenjuje iterativna metoda za minimiziranje $SS_{Res}(\mathbf{B})$. Stoga je u svrhu prilagodavanja modela s obzirom na podatke iz Tablice 3 te za procjenu parametara modela korištena NLIN SAS procedura. Kao što smo i ranije spomenuli za procjenu parametara modela korištena je Marquardtova iterativna metoda jer se pokazala kao najbolja od svih prethodno navedenih metoda. Odnosno, pokazalo se kako ova metoda najbolje objedinjuje Gauss-Newtonovu metodu i metodu gradijenta, a pri tome izbjegava njihova stroga ograničenja. Međutim, Marquardtova iterativna metoda zahtjeva specifikaciju naziva i početne vrijednosti parametara koji se procjenjuju, odnosno model koji koristi jednu zavisnu varijablu i parcijalne derivacije modela s obzirom na svaki parametar. Uobičajeni statistički testovi koji su prikladni kod linearnih modela općenito nisu prikladni kod nelinearnih modela i F statistika se ne može koristiti za donošenje zaključaka na bilo kojoj razini značajnosti. Stoga se usporedba modela temelji na omjeru sume kvadrata reziduala.

Nadalje, radi lakšeg razumijevanja, parametre modela iz Tablice 4 Y_∞ , α , β i k redom ćemo zamijeniti simbolima $\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_3$. Ovi parametri u svakom modelu prilikom opisivanja primjera imaju sljedeća značenja:

- β_0 - asimptota ili potencijalni maksimum zavisne varijable,
- β_1 - biološka konstanta,
- β_2 - parametar koji upravlja brzinom kojom se zavisna varijabla približava svom maksimumu,
- β_3 - alometrijska konstanta.

Time modeli iz Tablice 4 poprimaju sljedeći oblik prikazan u Tablici 5.

Model	Integralni oblik modela
Monomolekularni	$Y_t = \beta_0 (1 - \beta_1 e^{-kt}) + \varepsilon$
Logistički	$Y_t = \frac{\beta_0}{(1 + \beta_1 e^{-\beta_2 t})} + \varepsilon$
Gompertzov	$Y_t = \beta_0 e^{-\beta_1 e^{-\beta_2 t}} + \varepsilon$
Von Bertalanffyev	$Y_t = \left(\beta_0^{1-\beta_3} - \beta_1 e^{-\beta_2 t} \right)^{\frac{1}{1-\beta_3}} + \varepsilon$
Richardsov	$Y_t = \frac{\beta_0}{(1 + \beta_1 e^{-\beta_2 t})^{\frac{1}{\beta_3}}} + \varepsilon$
Weibullovo	$Y_t = \left(\beta_0 - \beta_1 e^{-\beta_2 t^{\beta_3}} \right) + \varepsilon$

Tablica 5: Preuzeto iz [2].

Prikaz nelinearnih modela iz Tablice 4 pomoću novih oznaka.

Budući da NLIN procedura u SAS-u zahtjeva da se integralni oblici i parcijalne derivacije nelinearnih modela moraju unijeti u program korištenjem odgovarajuće SAS sintakse u sljedećim tablicama 6 - 11 prikazane su parcijalne derivacije modela iz Tablice 5.

Parcijalna derivacija	Izraz
$\partial Y_t / \partial \beta_0$	$1 - \beta_1 e^{-\beta_2 t}$
$\partial Y_t / \partial \beta_1$	$-\beta_0 e^{-\beta_2 t}$
$\partial Y_t / \partial \beta_2$	$\beta_0 \beta_1 t e^{-\beta_2 t}$

Tablica 6: Preuzeto iz [2].

Parcijalne derivacije monomolekularnog modela.

Parcijalna derivacija	Izraz
$\partial Y_t / \partial \beta_0$	$\frac{1}{1 + \beta_1 e^{-\beta_2 t}}$
$\partial Y_t / \partial \beta_1$	$\frac{-\beta_0 e^{-\beta_2 t}}{(1 + \beta_1 e^{-\beta_2 t})^2}$
$\partial Y_t / \partial \beta_2$	$\frac{\beta_0 \beta_1 t e^{-\beta_2 t}}{(1 + \beta_1 e^{-\beta_2 t})^2}$

Tablica 7: Preuzeto iz [2].

Parcijalne derivacije logističkog modela.

Parcijalna derivacija	Izraz
$\partial Y_t / \partial \beta_0$	$e^{-\beta_1 e^{-\beta_2 t}}$
$\partial Y_t / \partial \beta_1$	$-\beta_0 e^{-\beta_2 t} e^{-\beta_1 e^{-\beta_2 t}}$
$\partial Y_t / \partial \beta_2$	$\beta_0 \beta_1 t e^{-\beta_2 t} e^{-\beta_1 e^{-\beta_2 t}}$

Tablica 8: Preuzeto iz [2].
Parcijalne derivacije Gompertzovog modela.

Parcijalna derivacija	Izraz
$\partial Y_t / \partial \beta_0$	$\beta_0^{-\beta_3} \left(\beta_0^{1-\beta_3} - \beta_1 e^{-\beta_2 t} \right)^{\frac{1}{1-\beta_3}-1}$
$\partial Y_t / \partial \beta_1$	$\frac{-e^{-\beta_2 t}}{1-\beta_3} \left(\beta_0^{1-\beta_3} - \beta_1 e^{-\beta_2 t} \right)^{\frac{1}{1-\beta_3}-1}$
$\partial Y_t / \partial \beta_2$	$\frac{\beta_1 t}{1-\beta_3} e^{-\beta_2 t} \left(\beta_0^{1-\beta_3} - \beta_1 e^{-\beta_2 t} \right)^{\frac{1}{1-\beta_3}-1}$
$\partial Y_t / \partial \beta_3$	$\frac{e^{\frac{1}{1-\beta_3} \ln(\beta_0^{1-\beta_3} - \beta_1 e^{-\beta_2 t})}}{1-\beta_3} \cdot \left[\frac{\ln(\beta_0^{1-\beta_3} - \beta_1 e^{-\beta_2 t})}{1-\beta_3} - \frac{\ln(\beta_0) \beta_0^{1-\beta_3}}{\beta_0^{1-\beta_3} - \beta_1 e^{-\beta_2 t}} \right]$

Tablica 9: Preuzeto iz [2].
Parcijalne derivacije von Bertalanffyevog modela.

Parcijalna derivacija	Izraz
$\partial Y_t / \partial \beta_0$	$\frac{1}{(1 + \beta_1 e^{-\beta_2 t})^{\frac{1}{\beta_3}}}$
$\partial Y_t / \partial \beta_1$	$\frac{-\beta_0 e^{-\beta_2 t}}{\beta_3} \cdot (1 + \beta_1 e^{-\beta_2 t})^{\frac{-1}{\beta_3}-1}$
$\partial Y_t / \partial \beta_2$	$\frac{\beta_0 \beta_1 t e^{-\beta_2 t}}{\beta_3} \cdot (1 + \beta_1 e^{-\beta_2 t})^{\frac{-1}{\beta_3}-1}$
$\partial Y_t / \partial \beta_3$	$\beta_0 \beta_3^{-2} (1 + \beta_1 e^{-\beta_2 t})^{\frac{-1}{\beta_3}} \ln(1 + \beta_1 e^{-\beta_2 t})$

Tablica 10: Preuzeto iz [2].
Parcijalne derivacije Richardsovog modela.

Parcijalna derivacija	Izraz
$\partial Y_t / \partial \beta_0$	1.0
$\partial Y_t / \partial \beta_1$	$-e^{-\beta_2 t^{\beta_3}}$
$\partial Y_t / \partial \beta_2$	$\beta_1 t^{\beta_3} e^{-\beta_2 t^{\beta_3}}$
$\partial Y_t / \partial \beta_3$	$\beta_1 \beta_2 \ln(t) t^{\beta_3} e^{-\beta_2 t^{\beta_3}}$

Tablica 11: Preuzeto iz [2].
Parcijalne derivacije Weibullovog modela.

4.5 Određivanje početnih vrijednosti parametara modela rasta

Prilikom procjene parametara modela, ukoliko koristimo Marquardtovu iterativnu metodu, moramo navesti procijenjenu vrijednost početne vrijednosti ili početne vrijednosti svakog parametra. Jedan od najvećih problema s kojim se susrećemo prilikom procjene parametara nelinearnih modela je upravo određivanje početnih vrijednosti. Međutim, problem zadavanja početnih vrijednosti je rješiv ako dobro poznamo definicije parametara u kontekstu pojave koja se modelira. Pogrešne početne vrijednosti dovode do dulje iteracije, dužeg vremena izvršenja, nekonvergencije iteracije i moguće konvergencije prema neželjenom lokalnom minimumu zbroja kvadrata reziduala. Kako bismo to izbjegli, razvijeni su izrazi koji daju dobre početne vrijednosti za neke od parametara te se najučinkovitiji pokazao sljedeći poredak određivanja početnih vrijednosti β_0 , β_2 , β_3 i na kraju β_1 . Jedini parametar koji je lako odrediti, zbog jasnoće njegove definicije, je β_0 . Naime, von Bertalanffy i Richards su parametar β_0 definirali kao maksimalnu moguću vrijednost zavisne varijable koja je određena proizvodnim kapacitetom. Stoga je prilikom procjene parametara modela na podacima iz Tablice 3 β_0 definirana kao maksimalna vrijednost zavisne varijable s obzirom na dane podatke. Nadalje, za sve ranije spomenute modele parametar β_2 definiran je kao konstanta brzine kojom se zavisna varijabla približava svojoj maksimalnoj vrijednosti β_0 . Na temelju toga utvrđeno je da se pomoću izraza

$$\frac{Y_2 - Y_1}{t_2 - t_1} = \beta_{0s} \quad (4.5.1)$$

mogu odrediti dobre početne vrijednosti parametara β_2 . Y_1 i Y_2 iz izraza (4.5.1) predstavljaju vrijednosti zavisne varijable koje odgovaraju širokom rasponu vrijednosti predikcijskih varijabli t_1 i t_2 , dok je β_{0s} početna vrijednost parametra β_0 . Nadalje, za alometrijsku konstantu β_3 pri modeliranju varijabli biološkog rasta kod von Bertalanffyevog i Weibullovog modela mora vrijediti da je ona pozitivan realan broj strogo veći od nule. Početna vrijednost biološke konstante β_1 određena je procjenom modela na početku rasta kada vrijednost prediktivne varijable iznosi nula. U Tablici

12 prikazani su izrazi koji se koriste za određivanje početnih vrijednosti parametra β_1 za svaki od ranije spomenutih modela.

Model	Izraz
Monomolekularan	$Y_0 = \beta_{0s}(1 - \beta_1)$
Logistički	$Y_0 = \frac{\beta_{0s}}{1 + \beta_1}$
Gompertzov	$Y_0 = \beta_{0s}e^{-\beta_1}$
Von Bertalanffyev	$Y_0 = \beta_{0s}(1 - \beta_1)^{\frac{1}{1 - \beta_3}}$
Richardsov	$Y_0 = \frac{\beta_{0s}}{(1 + \beta_1)^{\frac{1}{\beta_3}}}$
Weibullov	$Y_0 = \beta_{0s} - \beta_1$

Tablica 12: Preuzeto iz [2].

Izrazi korišteni za određivanje početne vrijednosti biološke konstante β_1 .

U Tablici 12 Y_0 predstavlja početnu vrijednost zavisne varijable te ona u idealnim uvjetima iznosi nula. U slučaju kada ona ne iznosi nula za početnu vrijednost zavisne varijable Y_0 izabire se relativno mali pozitivan broj. Nadalje, u Tablicama 13 i 14 prikazane su početne vrijednosti parametara svakog modela.

Parametar	Model		
	Monomolekularni	Logistički	Gompertzov
β_0	20	20	20
β_1	0.635	1.74	1.008
β_2	0.019	0.019	0.019

Tablica 13: Početne vrijednosti parametara za procjenu parametara monomolekularnog, logističkog i Gompertzovog modela.

Parametar	Model		
	Von Bertalanffyev	Richardsov	Weibullov
β_0	20	20	20
β_1	1.604	153.360	12.7
β_2	0.019	0.019	0.019
β_3	0.5	5	1

Tablica 14: Početne vrijednosti parametara za procjenu parametara von Bertalanffyevog, Richardsovog i Weibullovog modela.

Iz Tablica 13 i 14 vidljivo je kako početna vrijednost parametra β_0 za svaki model iznosi 20, a to je kao što smo i ranije rekli posljedica same definicije parametra β_0 koji za početnu vrijednost prilikom procjene uzima najveću vrijednost zavisne varijable koja u našem slučaju iznosi 20. Početna vrijednost parametra β_2 također je ista kod svih modela te iznosi 0.019. Tu vrijednost dobili smo uvrštavajući podatke iz Tablice 3 u izraz (4.5.1), pri čemu smo uzeli sljedeće vrijednosti $Y_1 = 9.0$, $Y_2 = 10.9$, $t_1 = 25$, $t_2 = 30$, dok je vrijednost $\beta_{0s} = \beta_0$, to jest $\beta_{0s} = 20$. Drugim riječima,

$$\beta_2 = \frac{10.9-9.0}{\frac{30-25}{20}} = 0.019.$$

Vrijednosti parametra β_3 kod von Bertalanffyevog, Richardosvog i Weibullovog modela uzeli smo na temelju ograničenja koja moraju vrijediti, a spomenuli smo ih ranije. Odnosno, za parametar β_3 kod von Bertalanffyevog modela uzeli smo 0.5, a kod Weibullovog modela 1, budući da smo morali uzeti pozitivne realne brojeve strogo veće od nule, a upravo ove početne vrijednosti pokazale su se kao dobre. Za početnu vrijednost β_3 kod Richardosvog modela uzeli smo 5 što se također pokazalo kao dobar odabir. Početnu vrijednost parametra β_1 svakog modela dobili smo koristeći izraze iz Tablice 12, pri čemu β_{0s} iznosi 20, a Y_0 iznosi 7.3.

4.6 Procjena i analiza parametara modela rasta

Za procjenu i analizu parametara modela, kao što smo i ranije rekli korištena je SAS NLIN procedura te je odabrana Marquardtova iterativna metoda. Izgled algoritma može se vidjeti u Prilogu 4.9. Vrijednosti procijenjenih parametara dobivene metodom najmanjih kvadrata za koju su korišteni podaci odnosa najveće visine i starosti norveške smreke iz Tablice 3 dane su u Tablicama 15 i 16.

Parametar	Model		
	Monomolekularni	Logistički	Gompertzov
$\hat{\beta}_0$	34.4886	22.8643	25.4847
$\hat{\beta}_1$	1.0541	6.7094	2.5951
$\hat{\beta}_2$	0.0144	0.0591	0.0368

Tablica 15: Procjene parametara monomolekularnog, logističkog i Gompertzovog modela.

Parametar	Model		
	Von Bertalanffyev	Richardsov	Weibullov
$\hat{\beta}_0$	28.3482	25.4843	27.2234
$\hat{\beta}_1$	4.5682	0.000283	26.2443
$\hat{\beta}_2$	0.0254	0.0368	0.00517
$\hat{\beta}_3$	0.4902	0.000109	1.3263

Tablica 16: Procjene parametara von Bertalanffyevog, Richardsovog i Weibullovog modela.

Statistička značajnost parametara modela prilikom njihove procjene određena je 95% asimptotskim pouzdanim intervalom pri čemu je važno spomenuti da zbog malog broja podataka dobivene rezultate treba uzeti s oprezom. Spomenuti 95% asimptotski pouzdani interval interpretiramo na način da će se prava vrijednost parametra β u približno 95% svih realizacija tog intervala nalaziti u njegovim granicama, dok u približno 5% realizacija se neće nalaziti unutar njegovih granica. Ukoliko 95% pouzdani interval od β_j , $j = 0, 1, 2, 3$ ne sadržava nulu odbacujemo nul hipotezu $\mathcal{H}_0 : \beta_j = 0$ te zaključujemo da je na razini značajnosti 0.05 taj parametar statistički značajan. Nadalje, ukoliko se parametri nelinearnih modela prilagođenih skupu podataka biološkog rasta ne pokažu statistički značajni to može implicirati jedno od sljedećeg:

- i) jedan ili više parametara modela nisu korisni, ili točnije, reparametrizirani model koji uključuje manje parametara može biti prikladniji,
- ii) podaci o biološkom rastu korišteni za prilagođavanje modela nisu primjereni za procjenu svih parametara,
- iii) pretpostavke modela nisu u skladu s biološkim načinom kojim se modelira.

Na razini značajnosti 0.05 kod monomolekularnog, logističkog i Richardsovog modela svi parametri pokazali su se statistički značajni. Međutim, kod Weibullovog modela rasta na toj razini značajnosti parametar β_2 se nije pokazao statistički značajan, dok kod von Bertalanffyevog modela parametri β_1 , β_2 i β_3 nisu se pokazali statistički značajni. Upravo slučaj ii) pojavio se kod von Bertalanffyevog modela. Odnosno, statističku neznačajnost navedenih parametara von Bertalanffyevog modela možemo pripisati tomu da podaci o biološkom rastu korišteni za prilagođavanje modela nisu prikladni za procjenu parametara. Naime, proučavanjem različitih oblika i drugih derivacija von Bertalanffyevog modela pokazalo se da su pri njegovom modeliranju potrebni podatci cijelog životnog ciklusa zavisne biološke varijable, odnosno podatci početne, adolescentne, zrele i stare faze. Međutim, mjerenja iz Tablice 3

ne sadržavaju podatke o početnom i starom razdoblju rasta. Iz tog se razloga parametri β_1 , β_2 i β_3 nisu pokazali statistički značajni. S ciljem potkrepljivanja ovog argumenta preoblikovali smo von Bertalanffyev model te smo uključili početnu vrijednost podataka na način da smo za početnu vrijednost varijable starost i najveća visina uzeli nulu. Vrijednosti procijenjenih parametara, relativne standardne greške te donje i gornje granice 95% asimptotskog pouzdanog intervala von Bertalanffyevog modela dobivenih na temelju podataka iz Tablice 3 bez uključenih početnih vrijednosti mogu se vidjeti u Tablici 17, dok sa uključenim početnim vrijednostima se mogu vidjeti u Tablici 18.

Parametar	$\hat{\beta}_i$	RSE ⁵	95% ACI ⁶ donja granica	95% ACI gornja granica
β_0	28.3482	0.157	17.4815	39.2148
β_1	4.5682	2.506	-23.4450	32.5813
β_2	0.0254	0.492	-0.00518	0.0559
β_3	0.4902	1.125	-0.8590	1.8393

Tablica 17: Vrijednosti procijenjenih parametara, relativne standardne greške te donja i gornja granica 95% asimptotskog pouzdanog intervala von Bertalanffyevog modela bez uključene početne vrijednosti.

Parametar	$\hat{\beta}_i$	RSE	95% ACI donja granica	95% ACI gornja granica
β_0	30.9230	0.070	25.8238	36.0223
β_1	14.4896	0.311	3.8277	25.1516
β_2	0.0194	0.153	0.0124	0.0264
β_3	0.2205	0.329	0.0488	0.3922

Tablica 18: Vrijednosti procijenjenih parametara, relativne standardne greške te donja i gornja granica 95% asimptotskog pouzdanog intervala von Bertalanffyevog modela sa uključenim početnim vrijednostima ($t = 0, h = 0$).

Iz Tablice 17 može se vidjeti kako prilikom procjene parametara β_1 , β_2 i β_3 95% asimptotski pouzdani intervali sadržavaju nulu te iz tog razloga oni nisu statistički značajni na razini značajnosti 0.05. S druge strane, iz Tablice 18 može se vidjeti da

⁵RSE - relativna standardna greška, u engleskoj literaturi relative standard error

⁶ACI - asimptotski pouzdani interval, u engleskoj literaturi asymptotic confidence interval

nakon uključivanja početnih vrijednosti, odnosno postavljanjem varijable starost, oznaka t u Tablici 18, i najveća visina, oznaka h u Tablici 18, na nulu, parametri β_1 , β_2 i β_3 su se pokazali statistički značajni na razini značajnosti 0.05 jer u tom slučaju 95% asimptotski pouzdani intervali ne sadržavaju nulu. Dakle, možemo zaključiti da značajnost parametara von Bertalanffyevog modela ovisi o rasponu promatranih podataka rasta.

Nadalje, vrlo važno je napomenuti da monomolekularni model, budući da ne pripada sigmoidalnim modelima rasta, nema točku infleksije. Iz tog razloga on nije prikladan za modeliranje cijelog životnog ciklusa zavisne biološke varijable kao što je rast visine koji tijekom vremena poprima sigmoidalni oblik te to možemo poistovjetiti sa prethodno spomenutim razlogom iii). Drugim riječima, obrazac rasta većine živih organizama slijedi spore početne i završne stope rasta, pri čemu najbrži rast i maksimalnu konačnu veličinu postižu tijekom sredine životnog ciklusa. Procjenom druge derivacije monomolekularnog modela rasta pokazalo se da je ona negativna u cijelom rasponu zavisne varijable. Dakle, prema monomolekularnom modelu trenutni godišnji prirast $\frac{dY_t}{dt}$ biološke zavisne varijable opada tijekom cijelog promatranog vremena što je u kontradikciji s općim obrascem rasta biološkog sustava. Međutim, monomolekularni model rasta koristan je za kvantificiranje kasnijih faza rasta biološkog sustava. Iz tog razloga statistička značajnost parametara monomolekularnog modela ne mora nužno ukazivati na korisnost toga modela za simulaciju podataka o rastu najviše visine iz Tablice 3 ili za dobivanje informacija o biološkom rastu koji obuhvaćaju cijeli životni ciklus zavisne varijable koja se proučava. S druge strane, preostali modeli su sigmoidalni i imaju točku infleksije pa su ti modeli prikladni za kvantificiranje fenomena rasta koji tijekom vremena poprima sigmoidalni oblik. U sljedećoj Tablici 19 prikazane su stvarne i predviđene vrijednosti najveće visine tijekom razdoblja promatranja, a koje smo dobili metodom procjene najmanjih kvadrata izvedene iz Marquardtovog iterativnog algoritma za procjenu parametara.

Dob (u godinama)	Najveća visina(m)	Monomolekularni	Logistički	Gompertzov	Von Bertalanffyev	Richardsov	Weibullov
20	7.3	7.23	7.48	7.35	7.29	7.35	7.29
25	9.0	9.12	9.03	9.06	9.09	9.06	9.06
30	10.9	10.89	10.69	10.78	10.84	10.78	10.83
35	12.6	12.53	12.37	12.46	12.50	12.45	12.49
40	13.9	14.05	14.02	14.05	14.06	14.05	14.05
45	15.4	15.47	15.56	15.53	15.51	15.52	15.50
50	16.9	16.79	16.94	16.88	16.84	16.87	16.83
55	18.2	18.02	18.15	18.09	18.06	18.08	18.05
60	19.0	19.17	19.16	19.16	19.17	19.16	19.16
64	20.0	20.02	19.83	19.92	19.98	19.92	19.97
RSE		0.12	0.23	0.12	0.11	0.12	0.11

Tablica 19: Stvarne i predviđene vrijednosti najveće visine te pripadajuće relativne standardne greške pojedinog modela.

Iz Tablice 19 vidimo da je relativna standardna greška kod von Bertalanffyevog i We-

ibullovog modela najmanja te iznosi 0.11. Kod monomolekularnog, Gompertzovog i Richardsovog modela je nešto veća i iznosi 0.12, dok logistički model ima najveću relativnu standardnu grešku koja iznosi 0.23. Također, iz spomenute tablice može se vidjeti da su svi modeli, za cijelo promatrano razdoblje, dali dobro prilagođene vrijednosti.

4.7 Prikaz modela rasta sa procijenjenim parametrima

Nakon procjene parametara nelinearnih modela rasta na temelju podataka iz Tablice 3 ranije opisani modeli sljedećega su oblika:

$$\text{Monomolekularni: } Y_t = 34.49(1 - 1.05e^{-0.01t}) + 0.12,$$

$$\text{Logistički: } Y_t = \frac{22.86}{1+6.71e^{-0.06t}} + 0.23,$$

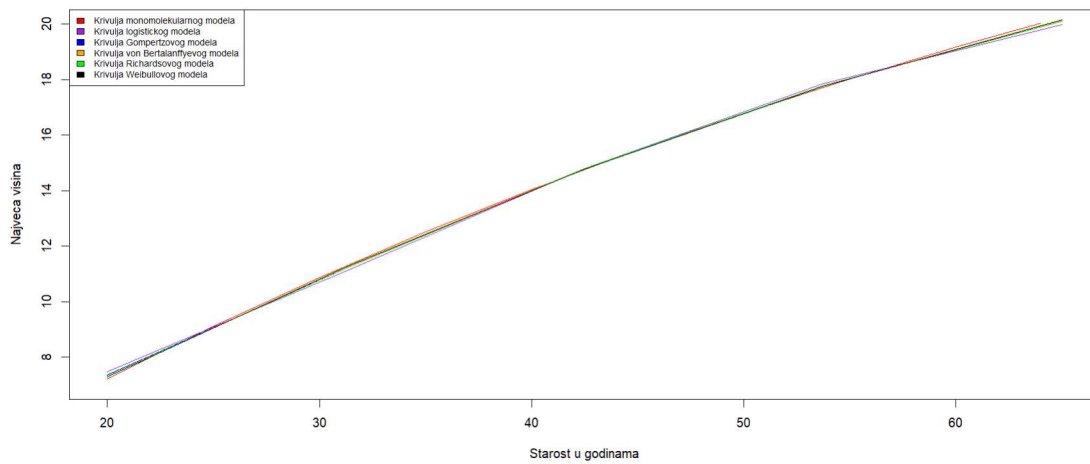
$$\text{Gompertzov: } Y_t = 25.48e^{-2.60e^{-0.04t}} + 0.12,$$

$$\text{Von Bertalanffyev: } Y_t = (28.35^{1-0.49} - 4.57e^{-0.03t})^{\frac{1}{1-0.49}} + 0.11 ,$$

$$\text{Richardsov: } Y_t = \frac{25.48}{(1+0.00028e^{-0.04t})^{\frac{1}{0.00011}}} + 0.12,$$

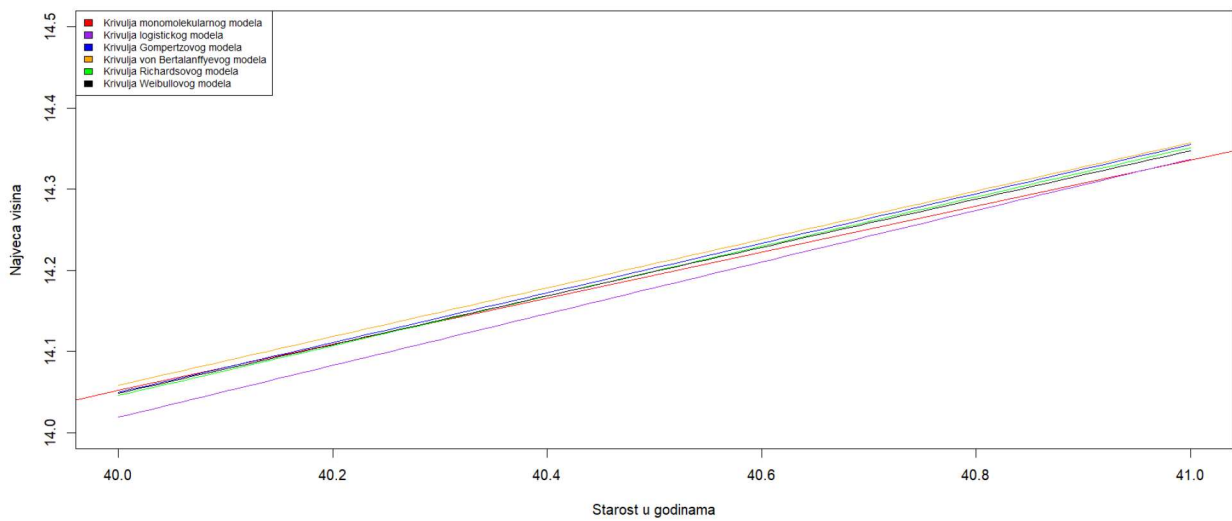
$$\text{Weibullov: } Y_t = (27.22 - 26.24e^{-0.005t^{1.33}}) + 0.11.$$

Grafički prikaz opisanih modela, što je ujedno i grafički prikaz podataka iz Tablice 19, može se vidjeti na Slici 12. Također, na spomenutoj slici je vidljivo kako su krivulje svih modela vrlo sličnog oblika.



Slika 12: Grafički prikaz modela sa procijenjenim parametrima.

Na Slici 12 izgleda da su u nekim vremenskim intervalima krivulje identične kao što je na primjer u vremenskom intervalu od 40. do 41. godine. Ukoliko detaljnije pogledamo prikaz krivulja modela u tom vremenskom razdoblju što je prikazano na Slici 13 može se vidjeti da ipak postoje razlike u izgledu krivulja modela.



Slika 13: Grafički prikaz modela sa procijenjenim parametrima u vremenskom intervalu od 40. do 41. godine.

4.8 Mogući problemi prilikom procjene parametara nelinearnih modela rasta korištenjem SAS NLIN procedure

Ukoliko za procjenu parametara nelinearnih modela koristimo SAS NLIN proceduru ne možemo biti sigurni da će iteracija konvergirati prema globalnom minimumu zbroju kvadrata reziduala. U svrhu izbjegavanja problema nekonvergencije ili konvergencije prema neželjenom lokalnom minimumu zbroja kvadrata reziduala potrebno je odrediti skup početnih vrijednosti za svaki parametar. Nakon što je skup vrijednosti određen, NLIN procedura procjenjuje zbroj kvadrata reziduala za svaku kombinaciju vrijednosti kako bi dobili najbolje početne vrijednosti prvog koraka iteracije. Početne vrijednosti parametara mogu biti preliminarne procjene temeljene na dostupnim podacima ili vrijednosti dobivene smislenim nagađanjima. Nadalje, one pak mogu biti i vrijednosti dobivene prilagođavanjem slične jednadžbe korištene u nekom laboratoriju ili vrijednosti koje je netko predložio, kao otprilike točne, na temelju osobnog znanja i iskustva u radu. Izrazi za određivanje početnih vrijednosti asimptote i biološke konstante razvijeni su na temelju smislene biološke definicije parametara nelinearnih modela. Spomenuti izrazi pokazali su se kao korisni pri određivanju početnih vrijednosti parametara za modeliranje podataka o najvećoj visini korištenih i u primjeru procjene parametara modela ovog rada. Ukoliko je poznato značenje parametara modela i pojave koja se modelira moguće je odrediti kada iteracijski postupak konvergira lokalnom minimumu zbroja kvadrata reziduala. Takvo neoptimalno rješenje može se dobiti proučavanjem veličine i predznaka procijenjenih parametara te veličine asimptotske korelacijske matrice procijenjenih parametara. Ukoliko su vrijednosti asimptotske korelacijske matrice procijenjenih parametara nelinearnih modela velike to može ukazivati na to da neki od parametara nisu važni ili da je model preparametriziran. Međutim, ne mora nužno značiti da velike korelacije procijenjenih parametara ukazuju da izvorni model nije prikladan za modeliranje fizičke pojave koja se proučava. Na primjer, u slučaju linearnog modela, kada se čini da se određeni parametar β ne razlikuje od nule, to ne znači nužno da je u tom slučaju zavisna varijabla neučinkovita. Može se dogoditi da se zavisna varijabla ne mijenja dovoljno da bi njegov učinak bio vidljiv s obzirom na promatrani skup podataka. Općenito, učinkovita procjena parametara najbolje se može postići ukoliko dobro razumijemo značenje parametra, dobrim matematičkim razumijevanjem modela, uključujući i njihove parcijalne derivacije, te sustava koji se modelira.

4.9 Dodatak - SAS NLIN kod za procjenu parametara modela

09/06/2023, 09:17

Code: Program 1.sas~.sas~

```
data norveskasmreka;
  input t h;
datalines;

20 7.3
25 9.0
30 10.9
35 12.6
40 13.9
45 15.4
50 16.9
55 18.2
60 19.0
64 20.0

/*monomolekularni */

proc nlin data=norveskasmreka method=marquardt; /*data = norveskasmreka označuje da se procjenjuju parametri
temeljeni na podacima norveskasmreka, dok method = marquardt označava da je prilikom procjene
korištena Marquardtova iterativna metoda*/
  parms beta0=20 /*parms deklarira parametre koji se procjenjuju te nakon njihovog deklariranja zadajemo njihove
početne vrijednosti*/
    beta1=0.635
    beta2=0.019;
  model h = beta0*(1-beta1*exp(-beta2*t)); /* model označava oblik modela kojem želimo procijeniti parametre*/
run;

/*logisticki */
proc nlin data=norveskasmreka method=marquardt;
  parms beta0=20
    beta1=1.74
    beta2=0.019;
  model h = beta0/(1+beta1*exp(-beta2*t));
run;

/*gompertzov*/
proc nlin data=norveskasmreka method=marquardt;
  parms beta0=20
    beta1=1.008
    beta2=0.017;
  model h = beta0*exp(-beta1*exp(-beta2*t));
run;

/*von bertalanffyev*/
proc nlin data=norveskasmreka method=marquardt;
  parms beta0vb=20
    beta1vb=1.604
    beta2vb=0.019
    beta3vb=0.5;
  model h = (beta0vb**((1-beta3vb)-beta1vb*exp(-beta2vb*t))**(1/(1-beta3vb)));
run;

/*richardsov*/
proc nlin data=norveskasmreka method=marquardt;
  parms beta0r=20
    beta1r=153.36
    beta2r=0.019
    beta3r=5;
  model h = beta0r*(1+beta1r*exp(-beta2r*t))**(-1/beta3r);
run;

/*weibullovo*/
proc nlin data=norveskasmreka method=marquardt;
  parms beta0w=20
    beta1w=12.7
    beta2w=0.019
    beta3w=1;
  model h = beta0w-beta1w*exp(-beta2w*(t**beta3w));
run;
```

about:blank

1/1

```
/*procijena sa ukljucenim pocetnim vrijednostima t=0, h=0*/
data norveskasmreka1;
  input t h;
  datalines;

0 0
20 7.3
25 9.0
30 10.9
35 12.6
40 13.9
45 15.4
50 16.9
55 18.2
60 19.0
64 20.0

/*von bertalanffyev*/
proc nlin data=norveskasmreka1 method=marquardt;
  parms beta0vb=20
        beta1vb=1.604
        beta2vb=0.019
        beta3vb=0.5;
  model h = (beta0vb**(1-beta3vb)-beta1vb*exp(-beta2vb*t))*(1/(1-beta3vb));
run;
```

Literatura

- [1] R. B. Banks, *Growth and Diffusion Phenomena: Mathematical Frameworks and Applications*, Springer - Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, London, Paris, Tokyo, Hong Kong, Barcelona, Budapest, 2010.
- [2] D. Fekedulegn, M. P. Mac Siurtain, J. J. Colbert, *Parameter Estimation of Nonlinear Growth Models in Forestry*, *Silva Fennica*33(1999), 327-336.
- [3] M. J. Panik, *Growth Curve Modeling: Theory and Applications*, John Wiley and Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2014.
- [4] SAS Institute Inc., *SAS/STAT 9.1 User's Guide*, SAS Institute Inc. 2004.
- [5] R. Scitovski, *Numerička matematika*, Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku, Osijek, 2015.
- [6] G. A. F. Seber, C. J. Wild, *Nolinear Regression*, John Wiley and Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2003.

Sažetak

U ovom diplomskom radu upoznali smo se sa nekim nelinearnim modelima krivulja rasta kao što su eksponencijalni i monomolekularni modeli, te razni sigmoidalni modeli. Osim što smo se upoznali sa njihovim općim jednadžbama također smo dali i kratki uvid u primjenu tih modela. Svi oni pokazali su se vrlo značajni u raznim područjima znanosti kao što su medicina, šumarstvo, ekonomija, demografija, poljoprivreda, kemija i druge. Neke od modela kao što su eksponencijalni i model opće potencije potkrijepili smo konkretnim primjerima iz svakodnevnog života. Eksponencijalni modeli uglavnom se koriste u demografiji dok se sigmoidalni modeli često koriste u poljoprivrednim znanostima, šumarstvu, medicini i kemiji. Grafički smo prikazali svaki obrađeni sigmoidalni model te uvidjeli da je krivulja svakog modela oblika slova S odakle i potječe naziv za takve modele. Na kraju rada dali smo uvid u metodu procjene parametara nelinearnih modela na primjeru iz šumarstva na temelju podataka odnosa starosti i najveće visine norveške smreke. Općenito se procjena parametara nelinearnih modela vrši metodom najmanjih kvadrata, no zbog složenosti nelinearnih modela ručno računanje procjene parametara je vrlo zahtjevno i često nemoguće. Stoga se za procjenu parametara nelinearnih modela rasta koriste odgovarajuće procedure od kojih je jedna korištena u ovom radu. Preciznije, procjena parametara modela na primjeru podataka o starosti i najvećoj visini norveške smreke u razdoblju od 1930. do 1974. godine izvršena je pomoću SAS NLIN procedure izvedene iz Marquardtovog iterativnog algoritma. Uvidjeli smo kako su se na razini značajnosti 0.05 parametri kod monomolekularnog, logističkog i Richardsovog modela rasta pokazali statistički značajni, dok se na toj razini značajnosti parametar β_2 , koji upravlja brzinom kojom se zavisna varijabla približava svom maksimumu, kod Weibullovog modela nije pokazao statistički značajan. Kod von Bertalanffyevog modela niti jedan parametar, osim parametra β_0 , se nije pokazao statistički značajan na razini značajnosti 0.05. Razlog tome je što je za procjenu parametara važan podatak o početnoj visini koja nije dana u podacima pomoću kojih smo vršili procjenu parametara modela. Nakon procjene parametara modela, modeli su zapisani pomoću procijenjenih parametara te je dan i njihov grafički prikaz. Na kraju rada navedeni su mogući problemi prilikom procjene parametara nelinearnih modela ukoliko se koristi SAS NLIN procedura te kako izbjeći iste.

Ključne riječi: eksponencijalna jednadžba, eksponencijalni model rasta, model opće potencije, monomolekularni model rasta, sigmoidalni modeli, logistički model, Gompertzov model, von Bertalanffyev model, Richardsova krivulja, Weibullov model, metoda najmanjih kvadrata, metoda maksimalne vjerodostojnosti, Marquardtova iterativna metoda, SAS NLIN procedura, parcijalne derivacije, početne vrijednosti, statistička značajnost parametara, 95% asimptotski pouzdani interval

Statistical methods in the theory of growth curves

Abstract

In this thesis we got acquainted with some of the nonlinear growth curve models such as exponential and monomolecular models and variations of sigmoidal models. Besides familiarizing with their general equations, we gave a short insight in applications of those models. All the models proved to be very significant in different fields of science such as medicine, forestry, economics, demography, agriculture, chemistry and other. We provided real-life examples for some of the models such as exponential and power law models. Exponential models are generally applied in demographics, while sigmoidal models often find their use in agricultural sciences, forestry, medicine and chemistry. We plotted the graph of each sigmoidal model and shown that the curve of each model is S-shaped, hence the name sigmoidal. In the last chapter we provided an example of the application of one of the methods for estimation of nonlinear growth model parameters based on the age to maximum height of Norway spruce data. Usually, the estimation of nonlinear model parameters is done using the least squares method. However, due to the complexity of nonlinear models their parameters are very difficult and often impossible to estimate analytically. Therefore, we use adequate iterative procedures for that purpose, one of which is covered in this paper. Precisely, model parameter estimation in the example of age to maximum height of Norway spruce ratio for the period 1930-1974 is done by applying the SAS NLIN procedure derived from the Marquardt iterative algorithm. We noted that the parameters of monomolecular, logistic and Richards models are statistically significant with significance level of 0.05. However, using the same significance level, Weibull model parameter β_2 , which affects the speed of the dependent variable reaching its maximum, did not prove to be statistically significant. None of the von Bertalanffy model parameters proved to be statistically significant on the significance level of 0.05, except for the parameter β_0 . This is because the data used for estimation does not contain the information about the initial height, which is of great importance for accurate parameter estimation. By estimating the model parameters, we arrived to model equations and plotted their graphs. To conclude this paper, we listed potential problems that could occur in the estimation using the SAS NLIN procedure and how to avoid them.

Key words: exponential equation, exponential growth model, power law model, monomolecular growth model, sigmoidal models, logistic model, Gompertz model, von Bertalanffy model, Richards curve, Weibull model, least squares method, maximum likelihood estimation, Marquardt iterative method, SAS NLIN procedure, partial derivatives, initial values, statistical significance of parameters, 95% asymptotic confidence interval

Životopis

Rođena sam 07.02.1997. godine u Našicama gdje sam 2011. godine završila osnovnu školu "Dore Pejačević Našice". Nakon završene osnovne škole upisujem se u matematičku gimnaziju u srednjoj školi "Isidora Kršnjavoga Našice" koju završavam 2015. godine. Iste te godine upisujem preddiplomski studij matematike na Odjelu za matematiku na sveučilištu Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku. Preddiplomski studij završavam 2019. godine i stječem naziv sveučilišne prvostupnice Matematike pod mentorstvom izv.prof.dr.sc. Dragane Jankov Maširević s temom "Povezani topološki prostori i povezanost putevima". Iste godine, također na Odjelu za matematiku, upisujem diplomski studij matematike smjer Financijska matematika i statistika. Od studenog 2021. godine do veljače 2022. godine predavala sam u srednjoj školi Isidora Kršnjavoga Našice kao nastavnica matematike u općoj i jezičnoj gimnaziji. Od ožujka 2022. godine, sa prekidima, radim kao nastavnica matematike u Osnovnoj školi Dore Pejačević Našice. U rujnu 2022. godine upisujem Pedagoško-psihološko-didaktičko-metodičku izobrazbu na Filozofskom fakultetu u Osijeku te istu završavam u veljači 2023. godine.