

MASTERARBEIT

Prognose von Risswachstum via stochastischer Differentialgleichungen

29.03.2016

Verfasser: Manuel Keller Erster Gutachter: Prof. Dr. C. Müller

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung			2	
2	Datengrundlage			3	
3	Met	thoden	zur Prognose von Risswachstum	4	
	3.1	Paris-l	Erdogan-Gleichung	5	
	3.2	Linear	e Modelle	8	
	3.3	Nichtl	ineare Modelle	10	
		3.3.1	Gau B-Newton-Verfahren 	11	
		3.3.2	Box-Tidwell-Transformation	12	
	3.4	Stocha	stische Differentialgleichungen	14	
		3.4.1	Parameterschätzung	16	
	3.5	Interva	allscore	25	
4	Risswachstumsprognose				
	4.1	Progn	ose bei gegebener Risslänge von 35mm	27	
		4.1.1	Ermittlung der Startschätzungen	27	
		4.1.2	Ergebnisse der Rastersuche	32	
		4.1.3	Scores	44	
	4.2	Progn	ose bei gegebener Risslänge von 25mm	51	
		4.2.1	Ermittlung der Startschätzungen	52	
		4.2.2	Ergebnisse der Rastersuche	54	
		4.2.3	Scores	62	
5	Zus	ammei	nfassung	65	
Literaturverzeichnis					
\mathbf{A}	Anł	nang		70	

1 Einleitung

Prognosen von Risswachstum sind in den verschiedensten Bereichen der Technometrie von Interesse. Dabei ist meist vor allem der Sicherheitsaspekt von Bedeutung, zum Anderen sollen aber auch möglichst Kosten eingespart werden. Daher ist es zum Beispiel von Interesse, wann Brücken oder Gebäude repariert bzw. saniert werden müssen, oder aber auch, wann Reparaturen an Flugzeugen und Ähnlichem durchgeführt werden müssen. Im Folgenden werden Versuchsdaten von Virkler u. a. 1979 genutzt. Hier werden Versuche an 2024-T3 Aluminiumprüfkörpern durchgeführt. Dieses Material wird zum Beispiel bei Flugzeugen, insbesondere bei den Flügeln und am Rumpf verwendet. Gründe dafür sind insbesondere die hohe Stärke des Materials und seine Widerstandskraft gegenüber Rissen. Im Folgenden werden zunächst die genutzten Daten näher beschrieben. Im Anschluss wird auf die verwendeten statistischen Verfahren eingegangen. Dazu wird zunächst die Paris-Erdogan-Gleichung beschrieben, welche eine Möglichkeit zur Modellierung von Risswachstum bildet. Außerdem werden veschiedene Umformungen dieser Gleichung dargestellt. Dann wird auf lineare Modelle eingegangen, welche insbesondere in Bezug auf die Box-Tidwell-Transformation eine gute Möglichkeit bilden, Startparameter für nichtlineare Modelle zu bestimmen. Diese werden wiederum eingesetzt um Startparameter für die in dieser Arbeit genutzten stochastischen Differentialgleichungen zu bestimmen. Im Anschluss wird grundlegend auf solche stochastischen Differentialgleichungen eingegangen. Dabei wird unter anderem die in dieser Arbeit genutzte Euler-Approximation eingeführt. Die zugrundeliegende stochastische Differentialgleichung kann nicht analytisch gelöst werden, weswegen eine Rastersuche durchgeführt wird. Für diese Rastersuche werden verschiedene Verteilungsannahmen benötigt. Dabei werden in dieser Arbeit zwei mögliche Verfahren unterschieden. Zunächst wird eine Methodik basierend auf den Residualmomenten hergeleitet und im Anschluss eine Methode basierend auf der vereinfachten Datentiefe. Das Kapitel endet mit einer Darstellung des Intervallscores, welcher schließlich für den Vergleich der genutzten Methoden verwendet werden soll.

In einem weiteren Kapitel wird zunächst auf die Prognose des Risswachstums bei einer gegebenen Risslänge bis 35 Millimetern eingegangen. Es werden anfangs Startschätzungen nach dem Box-Tidwell-Verfahren dargestellt. Diese werden verglichen mit Schätzungen des zugrundeliegenden nichtlinearen Modells. Dann werden verschiedene Prognosen mit Hilfe der stochastischen Differentialgleichungen dargestellt und beschrieben. Anschließend wird der Intervallscore der verschiedenen genutzten Verfahren betrachtet und ihre Güte verglichen. Dabei wird neben den genutzten Verfahren auch auf eine mögliche Vergrößerung bzw. Verkleinerung des Suchrasters eingegangen und ebenso auf eine Reduktion der zugrundeliegenden Beobachtungen.

Im letzten Kapitel wird dann eine Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse gegeben. Außerdem wird auf mögliche weiterführende Untersuchungen eingegangen.

2 Datengrundlage

Die in dieser Arbeit genutzten Daten sind Virkler u.a. 1979 entnommen. Zur Datengewinnung wurden hier 68 Versuche unter identischen Bedingungen durchgeführt. Bei dem untersuchten Material handelt es sich um 2024-T3 Aluminiumprüfkörper. Die Beschaffenheit dieser Prüfkörper stellt sich Folgendermaßen dar. Sie sind 558,8 Millimeter lang, 152,4 Millimeter breit und 2,54 Millimeter dick.

Diese Prüfkörper wurden bei den Versuchen zyklischen Belastungen ausgesetzt und es wurde gemessen wieviele Belastungszyklen bis zu einer gegebenen Risslänge benötigt wurden. Die Schwingungsbreite wurde dabei mit zunehmender Risslänge reduziert und die Datenerfassung beginnt ab einer Risslänge von 9 Millimetern.

Die Belastungszyklen wurden so festgelegt, dass eine Zeiteinheit 10⁴ Belastungszyklen entspricht. Der Abstand zwischen den Messzeitpunkten ist abhängig von der Risslänge und in Tabelle 1 dargestellt.

Risslängenintervall	Abstände zwischen Messzeitpunkten
9mm bis 36,2mm	0,2mm
36,2mm bis 44,2mm	0,4mm
44,2mm bis 49,8mm	0,8mm

Tabelle 1: Abstände zwischen den Messzeitpunkten bei gegebenen Risslängenintervallen

Die Überwachung der Versuchsdurchführung geschieht durch ein Stereo Zoom Mikroskop mit einer 150-fachen Vergrößerung. Dieses wurde auf einem digitalen Verschiebesystem mit einer Rasterung von 0,001 Millimetern installiert. Virkler u. a. 1979 ermitteln einen mittleren Messfehler von 0,00141 Millimetern. Dadurch, dass keine fehlenden Werte existieren, lässt sich auf eine gute Datengrundlage schließen. Insgesamt wurden pro Messreihe 164 Datenpunkte erfasst.

Der Verlauf der Messreihen ist in Abbildung 1 dargestellt.



Abbildung 1: Verlauf des Risswachstums der betrachteten 68 Messreihen

Zu Beginn der Aufzeichnungen gestaltet sich der Rissverlauf recht ähnlich. Im weiteren Verlauf kristallisieren sich jedoch auch immer wieder Unterschiede heraus, welche mit der Zeit stärker zu werden scheinen. Ebenso kann festgestellt werden, dass verschiedene Messreihen einen recht glatten Verlauf, andere abrupte Wechsel in der Steigung aufzuweisen scheinen. Außerdem fällt auf, dass die Anzahl benötigter Belastungszyklen bis zu einer weiteren gemessenen Risslänge gegen einen Grenzwert zu konvergieren scheint.

3 Methoden zur Prognose von Risswachstum

Im Folgenden wird auf die genutzte Methodik zur Modellierung des Risswachstums und die Parameterschätzung im Modell eingegangen. Die Modellierung in dieser Arbeit geschieht via stochastischer Differentialgleichungen, die aus der Paris-Erdogan-Gleichung hergeleitet werden. Diese bietet nach Ortiz und Kiremidjian 1986 einen möglichen Ansatz zur Risswachstumsmodellierung. Alternativen zu stochastischen Differentialgleichungen ergeben sich zum Beispiel durch bekannte klassische Wachstumsfunktionen wie die Gompertzoder Richardsfunktion (vgl. Koya und Goshu 2013). Diese wurden bereits in einer anderen Arbeit betrachtet und sind somit nicht Gegenstand dieser Ausarbeitung. Da es sich bei der hergeleiteten Gleichung um eine nichtlineare stochastische Gleichung handelt, ist eine analytische Schätzung nicht ohne Weiteres möglich. Daher wird eine Rastersuche durchgeführt um die Parameter möglichst exakt zu bestimmen. Für diese Rastersuche müssen jedoch möglichst gute Startschätzungen bestimmt werden. Aus diesem Grund wird zunächst der nichtstochastische Teil der Differentialgleichung als nichtlineares Modell gelöst. Für die Lösung des nichtlinearen Modells wird wiederum eine Startschätzung benötigt. Dazu wird auf die Box-Tidwell-Transformation zurückgegriffen, welche aus einer Linearisierung des Modells hervor geht.

Aus diesem Grund werden zunächst die Paris-Erdogan-Gleichung und ihre in dieser Arbeit genutzten Umformungen dargestellt. Dann werden lineare Modelle vorgestellt und die Parameterschätzung in diesem Fall eingeführt. Anschließend erfolgt die Darstellung von nichtlinearen Modellen und deren Schätzung. In diesem Zusammenhang wird auch die Box-Tidwell-Transformation eingeführt. Im Anschluss werden stochastische Differentialgleichungen dargestellt. Es folgt ein Unterkapitel über die Art der Parameterschätzung bei stochastischen Differentialgleichungen, wie sie in dieser Arbeit durchgeführt wird.

3.1 Paris-Erdogan-Gleichung

Für die Modellierung von Risswachstum wird in der Literatur oft auf die Paris-Erdogan-Gleichung verwiesen. Diese ist gegeben durch

$$\frac{\partial l}{\partial t} = \theta_1 l^{\theta_2}.$$

Dabei beschreibt l die Risslänge und t den zugehörigen Zeitpunkt. Als zu schätzende Parameter sind hier θ_1 und θ_2 gegeben. Die Lösung dieser Differentialgleichung ist in Satz 1 in Abhängigkeit von θ_2 dargestellt.

Satz 1. Die Lösung der Paris-Erdogan-Gleichung ist in Abhängigkeit von θ_2 gegeben durch

$$l = \begin{cases} \alpha_0 \exp(\alpha_1 t) \ mit \ \alpha_0 > 0 \ und \ \alpha_1 = \theta_1, & wenn \ \theta_2 = 1 \\ \alpha_1 (t - \alpha_0)^{\alpha_2} \ mit \ \alpha_0 < t, \alpha_1 = (\theta_1 \ (1 - \theta_2))^{\frac{1}{1 - \theta_2}} \ und \ \alpha_2 = \frac{1}{1 - \theta_2} > 0, & wenn \ \theta_2 < 1 \\ \alpha_1 (\alpha_0 - t)^{-\alpha_2} \ mit \ \alpha_0 > t, \alpha_1 = (\theta_1 \ (\theta_2 - 1))^{\frac{-1}{\theta_2 - 1}} \ und \ \alpha_2 = \frac{1}{\theta_2 - 1} > 0, & wenn \ \theta_2 > 1 \end{cases}$$

Beweis. Es gilt für $\theta_2 = 1$:

$$\frac{\partial l}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_0 \exp(\alpha_1 t)) = \theta_0 \theta_1 \exp(\theta_1 t) = \theta_1 l(t)$$

mit $\alpha_0 > 0$ und $\alpha_1 = \theta_1$.

Ebenso ist für $\theta_2 < 1$ folgender Zusammenhang gegeben:

$$\begin{aligned} \frac{\partial l}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 (t - \alpha_0)^{\alpha_2}) \\ &= \alpha_1 \alpha_2 (t - \alpha_0)^{\alpha_2 - 1} \\ &= (\theta_1 (1 - \theta_2))^{\frac{1}{1 - \theta_2}} \frac{1}{1 - \theta_2} (t - \alpha_0)^{\frac{1}{1 - \theta_2} - 1} \\ &= \theta_1^{\frac{1 - \theta_2 + \theta_2}{1 - \theta_2}} (1 - \theta_2)^{\frac{1}{1 - \theta_2} - 1} (t - \alpha_0)^{\frac{1}{1 - \theta_2} - 1} \\ &= \theta_1 \theta_1^{\frac{\theta_2}{1 - \theta_2}} ((1 - \theta_2) (t - \alpha_0))^{\frac{1}{1 - \theta_2} - 1} \\ &= \theta_1 \theta_1^{\frac{\theta_2}{1 - \theta_2}} ((1 - \theta_2) (t - \alpha_0))^{\frac{1 - 1 + \theta_2}{1 - \theta_2}} \\ &= \theta_1 \theta_1^{\frac{\theta_2}{1 - \theta_2}} ((1 - \theta_2) (t - \alpha_0))^{\frac{1 - 1 + \theta_2}{1 - \theta_2}} \\ &= \theta_1 ((\theta_1 (1 - \theta_2))^{\frac{1}{1 - \theta_2}} (t - \alpha_0)^{\frac{1 - \theta_2}{1 - \theta_2}})^{\theta_2} \\ &= \theta_1 (\alpha_1 (t - \alpha_0)^{\alpha_2})^{\theta_2} \\ &= \theta_1 l(t)^{\theta_2} \end{aligned}$$

mit $\alpha_0 < t$, $\alpha_1 = (\theta_1 (1 - \theta_2))^{\frac{1}{1-\theta_2}}$ und $\alpha_2 = \frac{1}{1-\theta_2} > 0$. Für $\theta_2 > 1$ gilt

$$\begin{aligned} \frac{\partial l}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 (\alpha_0 - t)^{-\alpha_2}) \\ &= -\alpha_1 (-\alpha_2) (\alpha_0 - t)^{-\alpha_2 - 1} \\ &= \alpha_1 \alpha_2 (\alpha_0 - t)^{-\alpha_2 - 1} \\ &= (\theta_1 (\theta_2 - 1))^{\frac{-1}{\theta_2 - 1}} \frac{1}{\theta_2 - 1} (\alpha_0 - t)^{\frac{-1}{\theta_2 - 1} - 1} \\ &= \theta_1^{\frac{\theta_2 - 1 - \theta_2}{\theta_2 - 1}} (\theta_2 - 1)^{\frac{-1}{\theta_2 - 1} - 1} (\alpha_0 - t)^{\frac{-1}{\theta_2 - 1} - 1} \\ &= \theta_1 \theta_1^{\frac{-\theta_2}{\theta_2 - 1}} (\theta_2 - 1)^{\frac{-1 - (\theta_2 - 1)}{\theta_2 - 1}} (\alpha_0 - t)^{\frac{-1 - (\theta_2 - 1)}{\theta_2 - 1}} \\ &= \theta_1 \theta_1^{\frac{-\theta_2}{\theta_2 - 1}} (\theta_2 - 1)^{\frac{-\theta_2}{\theta_2 - 1}} (\alpha_0 - t)^{\frac{-\theta_2}{\theta_2 - 1}} \\ &= \theta_1 (\theta_1 (\theta_2 - 1))^{\frac{-1}{\theta_2 - 1}} (\alpha_0 - t)^{\frac{-1}{\theta_2 - 1}})^{\theta_2} \\ &= \theta_1 (\alpha_1 (\alpha_0 - t)^{-\alpha_2})^{\theta_2} \\ &= \theta_1 l(t)^{\theta_2} \end{aligned}$$

mit $\alpha_0 > t$, $\alpha_1 = (\theta_1 (\theta_2 - 1))^{\frac{-1}{\theta_2 - 1}}$ und $\alpha_2 = \frac{1}{\theta_2 - 1} > 0$.

In dieser Arbeit soll jedoch nicht das Risswachstum in Abhängigkeit von der Zeit modelliert werden, sondern die Zeit in Abhängigkeit vom Risswachstum. Daher werden die Umkehrfunktionen benötigt. Diese sind in Satz 2 gegeben.

Satz 2. Die Umkehrfunktion der Lösung der Paris-Erdogan-Gleichung ist in Abhängigkeit

von θ_2 gegeben durch

$$t(l) = \begin{cases} \beta_0 + \beta_1 \log(l) \ mit \ \beta_0 = -\frac{\log(\theta_0)}{\theta_1}, \beta_1 = \frac{1}{\theta_1}, & wenn \ \theta_2 = 1\\ \beta_0 + \beta_1 l^{\beta_2} \ mit \ \beta_0 = \alpha_0, \beta_1 = \left(\frac{1}{\alpha_1}\right)^{\frac{1}{\alpha_2}}, \beta_2 = \frac{1}{\alpha_2}, & wenn \ \theta_2 < 1\\ \beta_0 + \beta_1 l^{\beta_2} \ mit \ \beta_0 = \alpha_0, \beta_1 = -\left(\frac{1}{\alpha_1}\right)^{-\frac{1}{\alpha_2}}, \beta_2 = -\frac{1}{\alpha_2}, & wenn \ \theta_2 > 1 \end{cases}$$

Beweis.

Es gilt
$$l(t) = \theta_0 \exp(\theta_1 t)$$

 $\Leftrightarrow \log(l) = \log(\theta_0) + \theta_1 t$
 $\Leftrightarrow t = \frac{\log(l)}{\theta_1} - \frac{\log(\theta_0)}{\theta_1}$
 $\Leftrightarrow t = \beta_0 + \beta_1 \log(l)$
mit $\beta_0 = -\frac{\log(\theta_0)}{\theta_1}, \beta_1 = \frac{1}{\theta_1}.$

Außerdem gilt
$$l(t) = \alpha_1 (t - \alpha_0)^{\alpha_2}$$

 $\Leftrightarrow t = \left(\frac{1}{\alpha_1}\right)^{\frac{1}{\alpha_2}} l^{\frac{1}{\alpha_2}} + \alpha_0$
 $\Leftrightarrow t = \beta_0 + \beta_1 l^{\beta_2}$
mit $\beta_0 = \alpha_0, \beta_1 = \left(\frac{1}{\alpha_1}\right)^{\frac{1}{\alpha_2}}, \beta_2 = \frac{1}{\alpha_2}.$

Desweiteren
$$l(t) = \alpha_1(\alpha_0 - t)^{-\alpha_2}$$

 $\Leftrightarrow \alpha_0 - t = \left(\frac{1}{\alpha_1}\right)^{-\frac{1}{\alpha_2}} l^{-\frac{1}{\alpha_2}}$
 $\Leftrightarrow t = \alpha_0 - \left(\frac{1}{\alpha_1}\right)^{-\frac{1}{\alpha_2}} l^{-\frac{1}{\alpha_2}}$
 $\Leftrightarrow t = \beta_0 + \beta_1 l^{\beta_2}$
mit $\beta_0 = \alpha_0, \beta_1 = -\left(\frac{1}{\alpha_1}\right)^{-\frac{1}{\alpha_2}}, \beta_2 = -\frac{1}{\alpha_2}.$

Da sich der Rissverlauf einer Grenze anzunähern scheint (vgl. Abbildung 1) wird davon ausgegangen, dass es sich um begrenztes Wachstum in diesem Fall handelt. Um so ein begrenztes Wachstum in der Gleichung zu gewährleisten, wird von $\beta_1 < 0$ und $\beta_2 < 0$

ausgegangen. Um dies sicherzustellen muss dann aber bei obiger Gleichungen von $\theta_2 > 1$ ausgegangen werden. Denn angenommen

$$\theta_2 < 1 \Rightarrow \alpha_2 = \frac{1}{1 - \theta_2} > 0 \Rightarrow \beta_2 = \frac{1}{\alpha_2} > 0.$$

Dies steht im Widerspruch zu $\beta_2 < 0$. Auf der anderen Seite gilt für

$$\theta_2 > 1 \Rightarrow \alpha_2 = \frac{1}{\theta_2 - 1} > 0 \Rightarrow \beta_2 = -\frac{1}{\alpha_2} < 0.$$

Daher wird im Folgenden nur noch dieser Fall betrachtet.

Zu diesem nichtlinearen Modell wird im nächsten Schritt die zugehörige Differentialgleichung gebildet. Diese ist in Satz 3 dargestellt.

Satz 3. Die Differentialgleichung zur Umkehrfunktion ist gegeben durch

$$\frac{\partial t}{\partial l} = \theta_1 (\theta_0 - t)^{\theta_2} \text{ mit } \theta_0 = \beta_0, \theta_1 = -\beta_2 (-\beta_1)^{\frac{1}{\beta_2}} \text{ und } \theta_2 = 1 - \frac{1}{\beta_2}$$

Beweis.

Betrachte
$$t = \beta_0 + \beta_1 l^{\beta_2}$$

 $\Rightarrow \frac{\partial t}{\partial l} = \beta_1 \beta_2 l^{\beta_2 - 1}$
 $= -\beta_1 \cdot -\beta_2 l^{\beta_2 - 1}$
 $= -\beta_2 (-\beta_1)^{\frac{1}{\beta_2} + 1 - \frac{1}{\beta_2}} (l^{\beta_2})^{1 - \frac{1}{\beta_2}}$
 $= -\beta_2 (-\beta_1)^{\frac{1}{\beta_2}} (-\beta_1)^{1 - \frac{1}{\beta_2}} (l^{\beta_2})^{1 - \frac{1}{\beta_2}}$
 $= -\beta_2 (-\beta_1)^{\frac{1}{\beta_2}} (\beta_0 - \beta_0 - \beta_1 l^{\beta_2})^{1 - \frac{1}{\beta_2}}$
 $= -\beta_2 (-\beta_1)^{\frac{1}{\beta_2}} [\beta_0 - (\beta_0 + \beta_1 l^{\beta_2})]^{1 - \frac{1}{\beta_2}}$
 $= -\beta_2 (-\beta_1)^{\frac{1}{\beta_2}} (\beta_0 - t)^{1 - \frac{1}{\beta_2}}$
 $= -\beta_2 (-\beta_1)^{\frac{1}{\beta_2}} (\beta_0 - t)^{1 - \frac{1}{\beta_2}}$
 $= \theta_1 (\theta_0 - t)^{\theta_2}$
mit $\theta_0 = \beta_0, \theta_1 = -\beta_2 (-\beta_1)^{\frac{1}{\beta_2}}$ und $\theta_2 = 1 - \frac{1}{\beta_2}$

3.2 Lineare Modelle

Um einen linearen Zusammenhang zwischen endogener und exogenen Variable herzustellen wird das lineare Regressionsmodell verwendet. Dieses ist nach Groß 2010 definiert durch

$$y = X \cdot \beta + \epsilon$$

Dabei bezeichnet $y = (y_1, ..., y_n)^T \in \mathbb{R}^n$ den beobachteten Vektor der endogenen Variablen. Die Regressormatrix $X = (X_{ij})_{\substack{i=1,...,n \\ j=1,...,k}} \in \mathbb{R}^{n \times k}$ enthält die exogenen Variablen. Meist enthält die Regressormatrix ein Absolutglied. Dies ist auch im Folgenden der Fall. Deswegen wird im Weiteren nur das Modell mit Absolutglied betrachtet. Der Parametervektor $\beta = (\beta_1, ..., \beta_k)^T \in \mathbb{R}^k$ beschreibt die Einflüsse der exogenen Variablen. Außerdem enthält das Modell einen zufälligen Fehlervektor $\epsilon = (\epsilon_1, ..., \epsilon_n)^T \in \mathbb{R}^n$. Dieser beschreibt den Einflüss, der durch die Regressormatrix nicht erklärt wird. Das Modell kann sowohl Hauptals auch Wechselwirkungseffekte enthalten. Dabei bezeichnen Haupteffekte den alleinigen Effekt eines Faktors. Ein Wechselwirkungseffekt gibt den Effekt von Faktoren auf andere Faktoren an. Im Folgenden werden keine Wechselwirkungseffekte berücksichtigt.

Damit ein lineares Modell angewendet werden kann, muss ein linearer Zusammenhang zwischen den exogenen und der endogenen Variablen vorliegen. Außerdem werden folgende Annahmen an das Modell gestellt:

- A.1 X ist nicht stochastisch
- **A.2** Rang(X) = k, k < n
- **A.3** $\mathbb{E}(\epsilon) = 0$
- **A.4** $\mathbb{E}(\epsilon \epsilon^T) = \sigma^2 I_n$
- A.5 ϵ unabhängig und identisch normalverteilt.

Dabei bezeichnet $\mathbb{E}(\epsilon)$ den Schwerpunkt der Verteilung von ϵ . Der Ausdruck $\mathbb{E}(\epsilon\epsilon^T)$ bezeichnet die Varianz von ϵ . Mit $I_n \in \mathbb{R}^{n \times n}$ wird die Einheitsmatrix bezeichnet. Diese besteht aus Einsen auf der Hauptdiagonalen und Nullen sonst. Annahme A.1 besagt, dass es mehr Beobachtungen als Einflussfaktoren geben muss. X kann auch stochastisch sein. Dann wird die Schätzung jedoch schwieriger. Annahme A.2 besagt, dass X vollen Rang hat, also die Spalten von X nicht linear abhängig sind. Außerdem existiert $(X^T X)^{-1}$. Dadurch wird die Schätzung der Modellparameter vereinfacht. Aus Annahme A.3 kann gefolgert werden, dass $\mathbb{E}(y) = X\beta$. Somit gilt: X ist die richtige Designmatrix. Annahme A.4 schließt Heteroskedastizität und Autokorrelation aus. Heteroskedastizität bedeutet, dass die Fehlerterme unterschiedliche Varianz besitzen. Autokorrelation bedeutet, dass die Fehlerterme miteinander korreliert sind, also $cov(\epsilon_i, \epsilon_j) \neq 0, i \neq j$. Annahme A.5 besagt, dass die Fehlerterme unabhängig und identisch normalverteilt sind.

Es soll der Einfluss der exogenen Variablen geschätzt werden. Da y und X beobachtbar sind, muss nur der Parameter β geschätzt werden. Dazu wird der Kleinste-Quadrate-Schätzer (kurz: KQ-Schätzer) genutzt. Der KQ-Schätzer minimiert dabei den Fehlerterm. Es gilt:

$$\arg\min_{\beta\in\mathbb{R}^k} \epsilon^T \epsilon = \arg\min_{\beta\in\mathbb{R}^k} (y - X\beta)^T (y - X\beta)$$
$$= \arg\min_{\beta\in\mathbb{R}^k} \sum_{i=1}^n (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_{i1} - \dots - \beta_k x_{ik})^2.$$

Differenzieren führt zur Normalgleichung

$$X^T X \beta = X^T y.$$

Da X vollen Rang besitzt, folgt damit als Schätzer für β

$$\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T y.$$

Es gilt $Var(\hat{\beta}) = \sigma^2 (X^T X)^{-1}$. Der KQ-Schätzer ist nach dem Gauß-Markow-Theorem *BLUE (Best Linear Unbiased Estimator)*. Mit diesem Schätzer kann daraufhin eine Prognose für y geschätzt werden. Diese ist gegeben durch $\hat{y} = X\hat{\beta}$. Die Residuen können durch $\hat{\epsilon} = y - \hat{y}$ bestimmt werden.

3.3 Nichtlineare Modelle

Nichtlineare Modelle ergeben sich als Verallgemeinerung der zuvor vorgestellten linearen Modelle. Sie besitzen folgende Form:

$$y_t = f(x_t; \beta) + \epsilon_t, t = 1, ..., n.$$

Dabei bezeichnet $f(x_t; \beta)$ eine Funktion in Abhängigkeit von x_t bei gegebenem Parametervektor $\beta = (\beta_1, ..., \beta_k)^T$. Wie im linearen Modell wird vorausgesetzt, das die Fehlerterme unabhängig, normalverteilt sind, das also insbesondere gilt:

A.1
$$\mathbb{E}(\epsilon) = 0$$

A.2
$$\mathbb{E}(\epsilon \epsilon^T) = \sigma^2 I_n$$

Handelt es sich bei der zugrundeliegenden Funktion um eine lineare Gleichung, so ergibt sich der Spezialfall des linearen Modells. Ist es im Falle einer nichtlinearen Gleichung nicht möglich diese zu linearisieren, so ist die Parameterschätzung nicht mehr rein analytisch möglich. Zwar kann auch hier der kleinste-Quadrate-Ansatz herangezogen werden. So ist der geschätzte Parametervektor gegeben durch:

$$\arg\min_{\beta\in\mathbb{R}^{k}} \epsilon^{T}\epsilon = \arg\min_{\beta\in\mathbb{R}^{k}} (y - F(X;\beta))^{T} (y - F(X;\beta))$$
$$= \arg\min_{\beta\in\mathbb{R}^{k}} \sum_{i}^{n} (y_{i} - f(x_{i};\beta))^{2}$$
$$\operatorname{mit} F(X;\beta) = (f(x_{1},\beta), ..., f(x_{n};\beta))^{T} (\operatorname{vgl. Schlittgen 2013}).$$

Die Minimierung der Quadratsumme ist jedoch im Allgemeinen nicht analytisch herzuleiten. Aus diesem Grund werden iterative numerische Verfahren verwendet. Als Standardverfahren wird zumeist das Gauß-Newton-Verfahren eingesetzt.

3.3.1 Gauß-Newton-Verfahren

Das Gauß-Newton-Verfahren bestimmt zu gegebener Funktion $f(x_t; \beta)$, für die gilt $y_t = f(x_t; \beta) \forall t = 1, ..., n$, iterativ das zugehörige Optimum. Es kann sich bei β um einen einzelnen Parameter handeln oder aber auch um einen Parametervektor mit $\beta = (\beta_1, ..., \beta_k)^T$, $k \in \mathbb{N}$. Bei diesem Verfahren wird zunächst, die zur Funktion gehörende Residuumsfunktion $e = (e_1, ..., e_n)^T$ aufgestellt mit

$$e_i(\beta) = f(x_i; \beta) - y_i \; \forall i = 1, \dots, n.$$

Von dieser Residuumsfunktion werden nun im nächsten Schritt die partiellen Ableitungen bestimmt:

$$\frac{\partial e_i(\beta)}{\partial \beta_j} \ \forall i = 1, ..., n \ \forall j = 1, ..., k.$$

Durch die partiellen Ableitungen ergibt sich die Jacobi-Matrix des Residuenvektors als

$$D(\beta) = \begin{pmatrix} \frac{\partial e_1(\beta)}{\partial \beta_1} & \frac{\partial e_1(\beta)}{\partial \beta_2} & \dots & \frac{\partial e_1(\beta)}{\partial \beta_k} \\ \frac{\partial e_2(\beta)}{\partial \beta_1} & \frac{\partial e_2(\beta)}{\partial \beta_2} & \dots & \frac{\partial e_2(\beta)}{\partial \beta_k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial e_n(\beta)}{\partial \beta_1} & \frac{\partial e_n(\beta)}{\partial \beta_2} & \dots & \frac{\partial e_n(\beta)}{\partial \beta_k} \end{pmatrix}.$$

Uber die Taylerapproximation ergibt sich im folgenden Schritt eine Näherung der Residuumsfunktion als

$$e(\beta) \approx e(\tilde{\beta}) + D(\tilde{\beta})(\beta - \tilde{\beta}).$$

Einsetzen in die ursprüngliche Regressionsgleichung ergibt

$$y = F(X; \tilde{\beta}) + D(\tilde{\beta})(\beta - \tilde{\beta}) + \tilde{\epsilon}$$

$$\Leftrightarrow y - F(X; \tilde{\beta}) = D(\tilde{\beta})(\beta - \tilde{\beta}) + \tilde{\epsilon}$$

mit $\tilde{\epsilon} = F(X; \beta) - F(X, \tilde{\beta}) - D(\tilde{\beta})(\beta - \tilde{\beta}) + \epsilon.$

Setze nun $\beta^* = \beta - \tilde{\beta}$ als zu bestimmenden Parametervektor und löse obiges linearisiertes Regressionsproblem mit $\tilde{\beta} = \beta^{(0)}$. Dabei ist $\beta^{(0)}$ ein vorher festzulegender Startwert. Dadurch ergibt sich eine Korrektur β^* , welche zu einem verbesserten Wert $\beta^{(1)} = \beta^{(0)} + \beta^*$ führt. Mit diesem Wert wird nun wieder die Approximation gelöst und es ergibt sich $\beta^{(2)}$. Dieses iterative Vorgehen wird nun solange fortgeführt bis die Korrektur genügend klein und somit vernachlässigbar ist. Wann dies der Fall ist wird dabei vom Anwender festgelegt. Es kann bei diesem Verfahren nicht garantiert werden, dass das tatsächliche globale Minimum gefunden wird. Falls das Regressionsproblem mehrere lokale Minima enthält, findet das Verfahren nur das Minimum, welches sich dem Startparameter am nächsten befindet. Daher ist eine möglichst gute Wahl von diesem essentiell für eine gute Schätzung des Parametervektors.

Für eine gute Startschätzung existieren verschiedene Verfahren. Die hier verwendete Box-Tidwell-Transformation wird im Folgenden vorgestellt.

3.3.2 Box-Tidwell-Transformation

Um eine möglichst gute Startschätzung zu generieren, ist es sinnvoll, den nichtlinearen Zusammenhang zwischen erklärender und abhängiger Variable zu linearisieren. Ebenso sollte, wie in Kapitel 3.2 beschrieben, der Fehlervektor unabhängig und identisch normalverteilt mit konstanter, endlicher Varianz sein. Denn dann kann die Methode der kleinsten Quadrate angewandt werden um die Parameter analystisch zu bestimmen. Um aus einem nichtlinearen Zusammenhang einen solchen zu generieren, existieren verschiedene Transformationen. Zur Transformation der abhängigen Variablen wird oft auf die Box-Cox-Transformation verwiesen (vgl. Sachs und Hedderich 2009[S.389]). Im Folgenden soll jedoch die erklärende Variable transformiert werden. Dazu kann zum Beispiel die Box-Tidwell-Transformation herangezogen werden (vgl. Li u. a. 2001).

Box und Tidwell 1962 schlagen zum Beispiel die Power-Transformation vor.

Da im Folgenden jeweils eine erklärende Variable transformiert wird, wird in dieser Arbeit nur dieser Fall betrachtet.

Bei gegebenem Modell

$$y_t = f(x_t, \beta) + \epsilon_t = \beta_0 + \beta_1 x_t + \epsilon_t, t = 1, ..., n$$

ergibt sich das transformierte Modell

$$f(x_t; \beta, \alpha) = \beta_0 + \beta_1 x_t^{\alpha}, t = 1, \dots, n.$$

Dann kann dieses Modell über eine Taylor-Entwicklung an der Stelle $\alpha^{(0)} = 1$ unter Vernachlässigung aller Terme mit Ordnung größer eins dargestellt werden als

$$f(x_t; \beta, \alpha) \approx f(x_t; \beta) + (\alpha - 1) \left\{ \frac{\partial f(x_t; \beta, \alpha)}{\partial \alpha} \right\}_{\alpha = 1}$$

•

Es gilt

$$\frac{\partial f(x_t; \beta, \alpha)}{\partial \alpha} = \frac{\partial \beta_0 + \beta_1 x_t^{\alpha}}{\partial \alpha}$$
$$= \beta_1 \frac{\partial x_t^{\alpha}}{\partial \alpha}$$
$$= \beta_1 \frac{\partial \exp(\log(x_t))^{\alpha}}{\partial \alpha}$$
$$= \beta_1 \exp(\log(x_t))^{\alpha} \log(x_t)$$
$$= \beta_1 \log(x_t) x_t^{\alpha}.$$

Damit ergibt sich dann für die Taylorentwicklung

$$f(x_t; \beta, \alpha) \approx \beta_0 + \beta_1 x_t + (\alpha - 1) \beta_1 \log(x_t) x_t + \epsilon_t$$
$$= \beta_0 + \beta_1 x_t + \gamma z_t$$
$$\text{mit } \gamma = (\alpha - 1) \beta_1 \text{ und } z_t = \log(x_t) x_t.$$

Es gilt also $\alpha = \frac{\gamma}{\beta_1} + 1$. Die Schätzung für ein passendes α erfolgt nun iterativ nach Algorithmus 1.

Gegeben: Startpunkt $\alpha_0 = 1$, Konvergenz-Toleranz $\nu > 0$ $i \leftarrow 0$ Finde $\hat{\beta}_0$ und $\hat{\beta}_1$ durch Kleinste-Quadrate-Schätzung des Modells $\beta_0 + \beta_1 x_t^{\alpha_i} + \epsilon_t, \ t = 1, ..., n$ Setze $z_t = x_t^{\alpha_i} \log (x_t^{\alpha_i})$ Finde $\hat{\beta}_0^*, \hat{\beta}_1^*$ und $\hat{\gamma}$ durch Kleinste-Quadrate-Schätzung des Modells $\beta_0^*+\beta_1^*x_t^{\alpha_i}+\gamma z_t+\epsilon_t^*,\ t=1,...,n$ Setze $\alpha_{i+1} = \frac{\hat{\gamma}}{\hat{\beta}_1} + 1$ $i \leftarrow i + 1$ while $||\alpha_{i+1} - \alpha_i|| > \nu$ do Finde $\hat{\beta}_0$ und $\hat{\beta}_1$ durch Kleinste-Quadrate-Schätzung des Modells $\beta_0+\beta_1 x_t^{\alpha_i}+\epsilon_t,\ t=1,...,n$ Setze $z_t = x_t^{\alpha_i} \log (x_t^{\alpha_i})$ Finde $\hat{\beta}_0^*, \hat{\beta}_1^*$ und $\hat{\gamma}$ durch Kleinste-Quadrate-Schätzung des Modells $\beta_0^* + \beta_1^* x_t^{\alpha_i} + \gamma z_t + \epsilon_t^*, \ t = 1, ..., n$ $\alpha_{i+1} = \frac{\hat{\gamma}}{\hat{\beta}_1} + 1$ $i \leftarrow i + 1$ end

Algorithmus 1 : Box-Tidwell-Algorithmus

Die Schätzung des linearen Modells

 $\beta_0 + \beta_1 x_t^{\alpha} + \epsilon_t$

mit dem im Box-Tidwell-Verfahren gefundenen α ergibt nun die Startschätzungen für das nichtlineare Modell.

3.4 Stochastische Differentialgleichungen

Bei stochastischen Differentialgleichungen handelt es sich im Allgemeinen um Gleichungen der Form

$$dx(t) = b(t, x(t))dt + \sigma(t, x(t))dW(t)$$
(vgl. Iacus 2008).

Eine stochastische Differentialgleichung lässt sich dabei in zwei Teile aufspalten. Mit $b(s, x_s)dt$ wird der deterministische Teil und mit $\sigma(s, x_s)dW_t$ der stochastische Teil der Gleichung bezeichnet. Mit W_t wird im Allgemeinen ein stochastischer Prozess bezeichnet. Im Folgenden wird dieser Prozess als Wiener Prozess angesehen. Eine Definition mit den wichtigsten Eigenschaften ist in Definition 1 zu finden.

Definition 1 (Wiener Prozess). Ein Wiener Prozess $W = \{W(t), t \ge 0\}$ ist ein Gauß-Prozess mit fortschreitenden Pfaden und unabhängigen Inkrementen, so dass W(0) = 0mit Wahrscheinlichkeit 1 gilt. Ebenso muss gelten $\mathbb{E}(W(t)) = 0$ und Var(W(t) - W(s)) = $t - s \ \forall 0 \le s < t$. Damit gilt dann $W(t) - W(s) \sim \mathcal{N}(0, t - s)$. Für Wiener Prozesse gilt bei gegebenen Zeitpunkten $t_1 < t_2 < t_3 < t_4$, dass $W(t_2) - W(t_1)$ und $W(t_4) - W(t_3)$ unabhängig sind (vgl. Iacus, 2008, S.18)

Stochastische Differentialgleichung lassen sich auch in Integralform schreiben durch

$$x(t) = x(0) + \int_0^T b(u, x(u)) du + \int_0^T \sigma(u, x(u)) dW(u).$$

Dabei beschreibt $\int_0^T \sigma(u, x(u)) dW(u)$ ein Itô-Integral. Grundlegende Eigenschaften des Itô-Integrals sind in Bemerkung 1 zu finden. Weitere Eigenschaften sind z.B. in Iacus 2008 dargestellt.

Bemerkung 1 (Eigenschaften des Itô-Integrals). Falls x itô-integrierbar ist, dann gilt

$$\mathbb{E}\left(\int_0^T x(s)dW(s)\right) = 0$$

und

$$Var\left(\int_0^T x(s)dW(s)\right) = \int_0^T \mathbb{E}\left(x^2(t)\right)dt \ (It\hat{o}\text{-}Isometrie)$$

Auetaerdem gelten Linearitätseigenschaften, so dass für zwei itô-integrierbare Prozesse x und y und gegebenen Konstanten a und b

$$\int_0^T (ax(t) + by(t)) \, dW(t) = a \int_0^T x(t) dW(t) + b \int_0^T y(t) dW(t)$$

gilt (vgl. Iacus, 2008, S.32f).

Ein itô-integrierbarer Prozess wird auch Itô-Prozess genannt.

Es handelt sich bei stochastischen Differentialgleichungen um stetige Prozesse, welche sich so erstmal nicht darstellen lassen. Dazu können verschiedene Linearisierungen genutzt werden. In der Literatur wird zum Beispiel auf die Euler-Maruyama-Methode, auch Euler-Approximation genannt, verwiesen (vgl. z.B. M.Ahmed 2009).

Ursprünglich wurde die Euler-Approximation als Lösungsansatz für deterministische Differentialgleichungen entwickelt. Sie kann jedoch auch auf stochastische Differentialgleichungen erweitert werden. Die Idee hinter dieser Methode ist bei gegebenem Itô-Prozess ein stochastisches Pendant zur Taylor-Entwicklung ersten Grades durchzuführen. Eine Darstellung der Euler-Approximation ist in Satz 4 gegeben.

Satz 4 (Euler-Approximation). Gegeben sei ein Itô-Prozess $\{x_t, 0 \le t \le T\}$ als Lösung einer stochastischen Differentialgleichung $dx_t = b(t, x_t)dt + \sigma(t, x_t)dW_t$ mit Startlösung $x_{t_0} = x_0$ und eine Diskretisierung $\Pi_N = \Pi_N([0, T])$ des Intervalls [0, T] mit $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_N = T$. Die Euler-Approximation von x ist dann ein stochastischer Prozess y der $dem \ Iterations schema$

$$y_{i+1} = y_i + b(t_i, y_i)(t_{i+1} - t_i) + \sigma(t_i, y_i)(W_{i+1} - W_i), \ i = 0, \dots, N-1$$

mit $y_0 = x_0$ folgt. Dabei wurde die Notation mit $y_i = y(t_i)$ und $W_i = W(t_i)$ vereinfacht (vgl. Iacus, 2008, S.62).

3.4.1 Parameterschätzung

Gegeben ist die stochastische Differentialgleichung

$$\frac{\partial y(x)}{\partial x} = \theta_1 (\theta_0 - y(x))^{\theta_2} dx + \sigma \theta_1 (\theta_0 - y(x))^{\theta_2} dE(x)$$

mit $\theta_0 = \beta_0, \theta_1 = -\beta_2 (-\beta_1)^{\frac{1}{\beta_2}}, \theta_2 = 1 - \frac{1}{\beta_2}$
und $E(x) = W(x)$ als Wiener Prozess.

Diese stochastische Differentialgleichung wurde aus der gewöhnlichen Differentialgleichung aus Satz 3 durch hinzufügen eines stochastischen Terms gebildet und wird im Folgenden als zugrundeliegender Prozess des Risswachstums angenommen.

Setze dann für eine kürzere Schreibweise $b(\theta, y(x)) = \theta_1(\theta_0 - y(x))^{\theta_2}$ und erhalte

$$\frac{\partial y(x)}{\partial x} = b(\theta, y(x))dx + \sigma b(\theta, y(x))dW(x)$$

mit $\theta = (\theta_0, \theta_1, \theta_2)^T$.

Es handelt sich also um eine nichtlineare stochastische Differentialgleichung mit vier unbekannten Parametern und zu schätzdendem Parametervektor $\eta = (\theta_0, \theta_1, \theta_2, \sigma)^T$. Über die Euler-Maruyama-Approximation ergibt sich

$$y_n - y_{n-1} = b(\theta, y_{n-1})(x_n - x_{n-1}) + \sigma b(\theta, y_{n-1})(W_n - W_{n-1})$$

$$\Leftrightarrow (W_n - W_{n-1}) = \frac{y_n - y_{n-1} - b(\theta, y_{n-1})(x_n - x_{n-1})}{\sigma b(\theta, y_{n-1})}.$$

Da es sich um eine nichtlineare stochastische Differentialgleichung handelt, können die Schätzer nicht ohne Weiteres bestimmt werden. Die Idee in dieser Arbeit ist ein $(1 - \alpha)$ -Konfidenzintervall für den Parametervektor η über eine Rastersuche zu finden. Dazu ist es nötig einen α -Test so zu konstruieren, dass die Nullhypothese

$$H_0: \eta = \eta^*$$

nicht verworfen wird. Dabei bezeichnet η den wahren, aber unbekannten Parametervektor und η^* den geschätzten Parametervektor. Für eine solche Testkonstruktion existieren verschiedene Möglichkeiten. In dieser Arbeit werden zwei unterschiedliche Möglichkeiten betrachtet: Zum Einen ein Test hergeleitet über die Momente der Residuen und zum Anderen ein Test, der auf der Datentiefe beruht.

Zunächst sei die Verteilung der Residuen hergeleitet. Unter H_0 gilt

$$Res_{n}(\eta^{*}) = \frac{y_{n} - y_{n-1} - b(\theta^{*}, y_{n-1})(x_{n} - x_{n-1})}{\sqrt{x_{n} - x_{n-1}}\sigma^{*}b(\theta^{*}, y_{n-1})}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{x_{n} - x_{n-1}}}(W_{n} - W_{n-1}) \sim W_{0}.$$

Dabei sind die Residuen $Res_2(\eta^*), ..., Res_N(\eta^*)$ durch die Eigenschaften des Wiener-Prozesses unabhängig.

Für den Beweis von folgendem Satz wird der zentrale Grenzwertsatz benötigt. Dieser ist wie in Satz 5 gegeben (vgl. Fahrmeir u. a., 2010, S.317).

Satz 5 (Zentraler Grenzwertsatz). $X_1, ..., X_n$ seien unabhängig identisch verteilte Zufallsvariablen mit

$$\mathbb{E}(X_i) = \mu \text{ und } Var(X_i) = \sigma^2 > 0 \ \forall i = 1, ..., n.$$

Dann konvergiert die Verteilungsfunktion $F_n(z) = P(Z_n \leq z)$ der standardisierten Summe

$$Z_n = \frac{X_1 + \dots + X_n - n\mu}{\sqrt{n\sigma}} = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=1}^n \frac{X_i - \mu}{\sigma}$$

für $n \to \infty$ an jeder Stelle z gegen die Verteilungsfunktion $\Phi(z)$ der Standardnormalverteilung:

$$F_n(z) \to \Phi(z)$$

Schreibe dafür kurz

$$Z_n \to \mathcal{N}(0,1)$$
.

Damit lässt sich nun die Verteilung der Residualmomente, welche in Satz 6 zu finden sind, herleiten.

Satz 6 (Verteilung der Residualmomente). Es gelte $Res_n(\eta^*) \sim W_0$ und es seien folgende Annahmen für W_0 erfüllt: $\mathbb{E}(W_0) = 0$, $\mathbb{E}(W_0^2) = 1$, $\mathbb{E}(W_0^3) = 0$, $\mathbb{E}(W_0^4) = 3$, $\mathbb{E}(W_0^6) = 15$, $\mathbb{E}(W_0^8) = 105.$ Dann gilt:

$$S_{1}(\eta^{*}) = \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sum_{n=2}^{N} \operatorname{Res}_{n}(\eta^{*}) \to \mathcal{N}(0,1)$$

$$S_{2}(\eta^{*}) = \frac{1}{\sqrt{N-1}\sqrt{3-1}} \sum_{n=2}^{N} (\operatorname{Res}_{n}(\eta^{*})^{2} - 1) \to \mathcal{N}(0,1)$$

$$S_{3}(\eta^{*}) = \frac{1}{\sqrt{N-1}\sqrt{15}} \sum_{n=2}^{N} \operatorname{Res}_{n}(\eta^{*})^{3} \to \mathcal{N}(0,1)$$

$$S_{4}(\eta^{*}) = \frac{1}{\sqrt{N-1}\sqrt{105-3^{2}}} \sum_{n=2}^{N} (\operatorname{Res}_{n}(\eta^{*})^{4} - 3) \to \mathcal{N}(0,1)$$

Beweis. Nach Voraussetzung gilt:

$$\mathbb{E}(Res_n(\eta^*)) = \mathbb{E}(W_0) = 0.$$

Die Erwartungswerte des zweiten bis vierten Moments sind ebenso nach Voraussetzung gegeben. Außerdem gilt:

$$Var(Res_n(\eta^*)) \stackrel{Verschiebungssatz}{=} \mathbb{E}(Res_n(\eta^*)^2) - \mathbb{E}(Res_n(\eta^*))^2$$
$$\stackrel{n.V.}{=} 1 - 0$$
$$= 1$$

$$Var(Res_n(\eta^*)^2) = \mathbb{E}\left(\left(Res_n(\eta^*)^2 - \mathbb{E}\left(Res_n(\eta^*)^2\right)^2\right)\right)$$
$$\stackrel{n.V.}{=} \mathbb{E}\left(\left(Res_n(\eta^*)^2 - 1\right)^2\right)$$
$$= \mathbb{E}\left(Res_n(\eta^*)^4 - 2Res_n(\eta^*)^2 + 1\right)$$
$$= \mathbb{E}\left(Res_n(\eta^*)^4\right) - 2\mathbb{E}\left(Res_n(\eta^*)^2\right) + 1$$
$$\stackrel{n.V.}{=} 3 - 2 + 1$$
$$= 2$$

$$Var(Res_n(\eta^*)^3) = \mathbb{E}\left(\left(Res_n(\eta^*)^3 - \mathbb{E}\left(Res_n(\eta^*)^3\right)^2\right)\right)$$
$$\stackrel{n.V.}{=} \mathbb{E}\left(\left(Res_n(\eta^*)^3 - 0\right)^2\right)$$
$$= \mathbb{E}\left(Res_n(\eta^*)^6\right)$$
$$\stackrel{n.V.}{=} 15$$

und

$$Var\left(Res_{n}\left(\eta^{*}\right)^{4}\right) = \mathbb{E}\left(\left(Res_{n}\left(\eta^{*}\right)^{4} - \mathbb{E}\left(Res_{n}\left(\eta^{*}\right)^{4}\right)\right)^{2}\right)$$
$$\stackrel{n.V.}{=} \mathbb{E}\left(\left(Res_{n}\left(\eta^{*}\right)^{4} - 3\right)^{2}\right)$$
$$= \mathbb{E}\left(Res_{n}\left(\eta^{*}\right)^{8}\right) - 6\mathbb{E}\left(Res_{n}\left(\eta^{*}\right)^{4}\right) + 9$$
$$\stackrel{n.V.}{=} 105 - 18 + 9$$
$$= 96$$

Mit dem zentralen Grenzwertsatz (vgl. Satz 5) ergibt sich dann die Behauptung. $\hfill\square$

Durch die Verteilung der Residualmomente kann nun ein Test aufgestellt werden.

Satz 7 (Test basierend auf den Residualmomenten). Gegeben $\operatorname{Res}_n(\eta^*) \sim W_0$ seien folgende Annahmen erfüllt: $\mathbb{E}(W_0) = 0$, $\mathbb{E}(W_0^2) = 1$, $\mathbb{E}(W_0^3) = 0$, $\mathbb{E}(W_0^4) = 3$, $\mathbb{E}(W_0^6) = 15$, $\mathbb{E}(W_0^8) = 105$. Dann ist ein α -Test für $H_0: \eta = \eta^*$ durch die Teststatistiken $S_j(\eta^*), j = 1, ..., 4$ gegeben. Lehne die Nullhypothese ab, wenn

$$\exists j \in \{1, ..., 4\} : |S_j(\eta^*)| > q_{\mathcal{N}(0,1), 1-\frac{\alpha}{8}}.$$

Dabei bezeichnet $q_{\mathcal{N}(0,1),1-\frac{\alpha}{8}}$ das $1-\frac{\alpha}{8}$ -Quantil der Standardnormalverteilung.

Es ist bekannt, dass die Momente der Normalverteilung wie in Bemerkung 2 gegeben sind.

Bemerkung 2 (Momente der Normalverteilung). Die Zufallsvariable X sei normalverteilt mit Erwartungswert $\mu = 0$ und Varianz σ . Dann gilt für ihre Momente:

$$\mathbb{E} (X^3) = 0$$
$$\mathbb{E} (X^4) = 3\sigma^4$$
$$\mathbb{E} (X^6) = 15\sigma^6$$
$$\mathbb{E} (X^8) = 105\sigma^8$$

Damit ergibt sich, dass obiger Test insbesondere bei Annahme einer Normalverteilung zutreffend ist.

Eine weitere Möglichkeit einen Test herzuleiten bietet die Datentiefe. Die vereinfachte Datentiefe mit alternierenden Vorzeichen bei überlappenden Teilmengen ist nach Kustosz u. a. 2016 gegeben durch

$$d(\theta, z_1, ..., z_N) = \frac{1}{N - K} \sum_{n=1}^{N - K} \left(\prod_{k=1}^{K+1} \mathbb{1}_{\{res(z_{n-1+k}, \theta)(-1)^k > 0\}} + \mathbb{1}_{\{res(z_{n-1+k}, \theta)(-1)^{k+1} > 0\}} \right)$$

Dabei bezeichnet $res(z, \theta)$ die Residuumsfunktion einer Regression bei gegebenen Beobachtungen z = (y, x) und unbekanntem Parametervektor θ . Bei gegebenem nichtlinearen Modell

$$y_t = f(x_t; \theta) + \epsilon_t, t = 1, ..., n$$

ist die Residuumsfunktion dann gegeben durch

$$res(z_t, \theta) = y_t - f(x_t; \theta), t = 1, ..., n.$$

Im vorliegenden Fall ist die stochastische Differentialgleichung nach Euler-Maruyama-Approximation $y_t - y_{t-1} = b(\theta, y_{t-1})(x_t - x_{t-1}) + \sigma b(\theta, y_{t-1})(W_t - W_{t-1})$ gegeben. Nutze nun den nicht stochastischen Teil $y_t - y_{t-1} = b(\theta, y_{t-1})(x_t - x_{t-1})$ mit additivem Fehlerterm ϵ_t als zugrundeliegendes nichtlineares Modell. Dann ergibt sich die Residuumsfunktion $res(z_n, \theta) = R_n(\theta) = y_n - y_{n-1} - b(\theta, y_{n-1})(x_n - x_{n-1})$. Im Folgenden werden jeweils vier Residuen für die Datentiefe genutzt. Damit ergibt sich in der allgemeinen Gleichung K = 3. Einsetzen führt dann zu

$$d(\theta, y_1, ..., y_N) = \frac{1}{N-3} \sum_{n=1}^{N-3} \left(\prod_{k=1}^{4} \mathbb{1}_{\{R_{n-1+k}(\theta)(-1)^k > 0\}} + \mathbb{1}_{\{R_{n-1+k}(\theta)(-1)^{k+1} > 0\}} \right)$$
$$= \frac{1}{N-3} \sum_{n=1}^{N-3} \left(\mathbb{1}_{\{R_n(\theta) > 0, R_{n+1}(\theta) < 0, R_{n+2}(\theta) > 0, R_{n+3}(\theta) < 0\}} + \mathbb{1}_{\{R_n(\theta) < 0, R_{n+1}(\theta) > 0, R_{n+2}(\theta) < 0, R_{n+3}(\theta) > 0\}} \right).$$

Das erste Residuum kann jedoch nicht bestimmt werden – es exisitert kein y_0 oder x_0 – und wird nicht mit in die Rechnung mit einbezogen. Damit reduziert sich der Stichprobenumfang und es ergibt sich als vereinfachte Datentiefe

$$d(\theta, y_1, ..., y_N) = \frac{1}{N-4} \sum_{n=2}^{N-3} (\mathbb{1}_{\{R_n(\theta) > 0, R_{n+1}(\theta) < 0, R_{n+2}(\theta) > 0, R_{n+3}(\theta) < 0\}} + \mathbb{1}_{\{R_n(\theta) < 0, R_{n+1}(\theta) > 0, R_{n+2}(\theta) < 0, R_{n+3}(\theta) > 0\}}).$$

Die Residuen der stochastischen Differentialgleichung seien wie zuvor definiert durch

$$Res_n(\eta^*) = \frac{y_n - y_{n-1} - b(\theta^*, y_{n-1})(x_n - x_{n-1})}{\sqrt{x_n - x_{n-1}}\sigma^* b(\theta^*, y_{n-1})}.$$

Im nächsten Schritt wird dann die Verteilung der Datentiefe hergeleitet. Dazu sei zunächst der zentrale Grenzwertsatz für m-abhängige stationäre Prozesse aufgeführt.

Satz 8 (ZGWS für m-abhängige stationäre Prozesse). Für gegebenes $m \ge 0$ sei $X_1, X_2, ...$ eine stationäre m-abhängige Folge von Zufallsvariablen mit $\mathbb{E}(X_i) = \theta$ und $Var(X_i) = \sigma^2 < \infty$, dann gilt nach DasGupta 2008

$$\sqrt{n}\left(\bar{X}_n-\theta\right)\to\mathcal{N}\left(0,\tau^2\right)$$

mit

$$\tau^2 = \sigma^2 + 2\sum_{k=1}^m Cov(X_1, X_{1+k}).$$

Die Verteilung der Datentiefe ist dann gegeben durch

Satz 9 (Verteilung der Datentiefe). Gegeben sei $Res_n(\eta^*) \sim W_0$, $\eta^* = (\theta_0^*, \theta_1^*, \theta_2^*, \sigma^*)$. Dann gilt unter den Annahmen $med(W_0) = 0$, $\mathbb{E}(W_0^2) = 1$ und $\mathbb{E}(W_0^4) = 3$, dass

$$S_{1}^{*}(\eta^{*}) = \frac{\sqrt{N-4}}{\sqrt{\frac{15}{64}}} \left(d\left(\theta^{*}, y_{1}, ..., y_{N}\right) - \frac{1}{8} \right) \to \mathcal{N}(0, 1)$$

und

$$S_2^*(\eta^*) = S_2(\eta^*) = \frac{1}{\sqrt{N-1}\sqrt{3-1}} \sum_{n=2}^N (Res_n(\eta^*)^2 - 1) \to \mathcal{N}(0,1).$$

Beweis. Definiere zunächst

$$x_n = \mathbb{1}_{\{R_n(\theta) > 0, R_{n+1}(\theta) < 0, R_{n+2}(\theta) > 0, R_{n+3}(\theta) < 0\}} + \mathbb{1}_{\{R_n(\theta) < 0, R_{n+1}(\theta) > 0, R_{n+2}(\theta) < 0, R_{n+3}(\theta) > 0\}}, n = 2, ..., N - 3.$$

Dann ist $x_n, n = 2, ..., N - 3$ eine m = 3-abhängige Sequenz von Zufallsvariablen und es

$$\begin{split} \mathbb{E} (x_n) &= \mathbb{E} (\mathbb{1}_{\{R_n(\theta) > 0, R_{n+1}(\theta) < 0, R_{n+2}(\theta) > 0, R_{n+3}(\theta) < 0\} \\ &+ \mathbb{1}_{\{R_n(\theta) < 0, R_{n+1}(\theta) > 0, R_{n+2}(\theta) < 0, R_{n+3}(\theta) > 0\}) \\ &= P \left((R_n(\theta) > 0) \cap (R_{n+1}(\theta) < 0) \cap (R_{n+2}(\theta) > 0) \cap (R_{n+3}(\theta) < 0)) \\ &+ P \left((R_n(\theta) < 0) \cap (R_{n+1}(\theta) > 0) \cap (R_{n+2}(\theta) < 0) \cap (R_{n+3}(\theta) > 0)) \right) \\ & \overset{R_nunabh.}{=} P \left(R_n(\theta) > 0 \right) \cdot P \left(R_{n+1}(\theta) < 0 \right) \cdot P \left(R_{n+2}(\theta) > 0 \right) \cdot P \left(R_{n+3}(\theta) < 0 \right) \\ &+ P \left((R_n(\theta) < 0) \cdot P \left(R_{n+1}(\theta) > 0 \right) \cdot P \left(R_{n+2}(\theta) > 0 \right) \cdot P \left(R_{n+3}(\theta) > 0 \right) \right) . \end{split}$$

Es gilt $med(W_0) = 0$. Daher gilt $P(R_n(\theta) > 0) = P(R_n(\theta) < 0) = \frac{1}{2}$ fast sicher für alle $n \in \{2, ..., N-3\}$. Damit folgt

$$\mathbb{E}(x_n) = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2}$$
$$= \frac{1}{16} + \frac{1}{16}$$
$$= \frac{1}{8}.$$

Da die beiden Indikatorfunktionen in x_n sich gegenseitig ausschließen und das Produkt zweier Indikatorfunktionen eine Indikatorfunktion über den Schnitt der jeweiligen Ereignisse ergibt, gilt

$$x_n^2 = x_n$$

Damit gilt dann auch

$$Var(x_n) = \mathbb{E}(x_n^2) - \mathbb{E}(x_n)^2$$
$$= \frac{1}{8} - \frac{1}{64}$$
$$= \frac{7}{64}.$$

Mit der gleichen Überlegung zu Indikatorfunktionen wie oben gilt

$$\begin{split} x_n \cdot x_{n+1} &= \mathbb{1}_{\{R_n(\theta) > 0, R_{n+1}(\theta) < 0, R_{n+2}(\theta) > 0, R_{n+3}(\theta) < 0, R_{n+4}(\theta) > 0\} \\ &+ \mathbb{1}_{\{R_n(\theta) < 0, R_{n+1}(\theta) > 0, R_{n+2}(\theta) < 0, R_{n+3}(\theta) > 0, R_{n+4}(\theta) < 0\}} \\ x_n \cdot x_{n+2} &= \mathbb{1}_{\{R_n(\theta) > 0, R_{n+1}(\theta) < 0, R_{n+2}(\theta) > 0, R_{n+3}(\theta) < 0, R_{n+4}(\theta) > 0, R_{n+5}(\theta) < 0\} \\ &+ \mathbb{1}_{\{R_n(\theta) < 0, R_{n+1}(\theta) > 0, R_{n+2}(\theta) < 0, R_{n+3}(\theta) > 0, R_{n+4}(\theta) < 0, R_{n+5}(\theta) > 0\}} \\ x_n \cdot x_{n+3} &= \mathbb{1}_{\{R_n(\theta) > 0, R_{n+1}(\theta) < 0, R_{n+2}(\theta) > 0, R_{n+3}(\theta) < 0, R_{n+4}(\theta) > 0, R_{n+5}(\theta) < 0, R_{n+6}(\theta) > 0\} \\ &+ \mathbb{1}_{\{R_n(\theta) < 0, R_{n+1}(\theta) > 0, R_{n+2}(\theta) < 0, R_{n+3}(\theta) > 0, R_{n+4}(\theta) < 0, R_{n+5}(\theta) > 0, R_{n+6}(\theta) < 0\}} \\ \end{split}$$

gilt

Wie oben gilt auch hier, dass der Erwartungswert der Indikatorfunktionen gleich der Wahrscheinlichkeit des Schnittes der Ereignisse ist. Da die Ereignisse weiterhin unabhängig sind, ist auch die Wahrscheinlichkeit des Schnittes wieder das Produkt der Wahrscheinlichkeiten der Einzelereignisse.

Damit ergibt sich

$$\mathbb{E} (x_n \cdot x_{n+1}) = \left(\frac{1}{2}\right)^5 \cdot 2 = \frac{1}{16}$$
$$\mathbb{E} (x_n \cdot x_{n+2}) = \left(\frac{1}{2}\right)^6 \cdot 2 = \frac{1}{32}$$
$$\mathbb{E} (x_n \cdot x_{n+3}) = \left(\frac{1}{2}\right)^7 \cdot 2 = \frac{1}{64}.$$

Mit dem Verschiebungssatz für Kovarianzen

$$Cov(x_i, x_j) = \mathbb{E}(x_i x_j) - \mathbb{E}(x_i) \mathbb{E}(x_j)$$

ergibt sich dann

$$Cov (x_n, x_{n+1}) = \frac{1}{16} - \frac{1}{8} \cdot \frac{1}{8} = \frac{3}{64}$$
$$Cov (x_n, x_{n+2}) = \frac{1}{32} - \frac{1}{8} \cdot \frac{1}{8} = \frac{1}{64}$$
$$Cov (x_n, x_{n+3}) = \frac{1}{64} - \frac{1}{8} \cdot \frac{1}{8} = 0.$$

Mit Satz 8 ergibt sich weiter

$$\sqrt{N-4}\left(d\left(\theta^{*}, y_{1}, ..., y_{N}\right) - \frac{1}{8}\right) \rightarrow \mathcal{N}\left(0, \tau^{2}\right)$$

 mit

$$\tau^2 = \frac{7}{64} + 2 \cdot \frac{3}{64} + 2 \cdot \frac{1}{64} = \frac{15}{64}.$$

Damit folgt

$$\mathbb{E}\left(S_{1}^{*}\left(\eta^{*}\right)\right) = \mathbb{E}\left(\frac{\sqrt{N-4}}{\sqrt{\frac{15}{64}}}\left(d\left(\theta^{*}, y_{1}, ..., y_{N}\right) - \frac{1}{8}\right)\right)$$
$$= \sqrt{\frac{64}{15}}\mathbb{E}\left(\sqrt{N-4}\left(d\left(\theta^{*}, y_{1}, ..., y_{N}\right) - \frac{1}{8}\right)\right)$$
$$= 0$$

und

$$Var\left(S_{1}^{*}\left(\eta^{*}\right)\right) = Var\left(\frac{\sqrt{N-4}}{\sqrt{\frac{15}{64}}}\left(d\left(\theta^{*}, y_{1}, ..., y_{N}\right) - \frac{1}{8}\right)\right)$$
$$= \frac{64}{15}Var\left(\sqrt{N-4}\left(d\left(\theta^{*}, y_{1}, ..., y_{N}\right) - \frac{1}{8}\right)\right)$$
$$= \frac{64}{15} \cdot \frac{15}{64}$$
$$= 1.$$

Daraus ergibt sich der erste Teil der Behauptung. Der zweite Teil wurde bereits im Beweis zu Satz 6 gezeigt. $\hfill \Box$

Durch die Verteilung der Datentiefe kann nun wiederum ein Test aufgestellt werden.

Satz 10 (Test basierend auf der Datentiefe). Gegeben sei $Res_n(\eta^*) \sim W_0$, $\eta^* = (\theta_0^*, \theta_1^*, \theta_2^*, \sigma^*)$. Angenommen $med(W_0) = 0$, $\mathbb{E}(W_0^2) = 1$ und $\mathbb{E}(W_0^4) = 3$, dann ist ein α -Test für $H_0: \eta = \eta^*$ durch die Teststatistiken $S_j^*(\eta^*), j = 1, ..., 2$ gegeben. Lehne die Nullhypothese ab, wenn

$$\exists j \in \{1, ..., 2\} : |S_j^*(\eta^*)| > q_{\mathcal{N}(0,1), 1-\frac{\alpha}{4}}.$$

Dabei bezeichnet $q_{\mathcal{N}(0,1),1-\frac{\alpha}{4}}$ das $1-\frac{\alpha}{4}$ -Quantil der Standardnormalverteilung.

Durch die in Satz 6 und 9 hergeleiteten Zusammenhänge lässt sich nun eine Rastersuche durchführen. Dabei dienen die hergeleiteten Zusammenhänge zur Überprüfung, ob die gefundenen Parameter der zugrundeliegenden Verteilung genügen. Es wird im Folgenden davon ausgegangen, dass unter H_0

$$Res_{n}(\eta^{*}) = \frac{y_{n} - y_{n-1} - b(\theta^{*}, y_{n-1})(x_{n} - x_{n-1})}{\sqrt{x_{n} - x_{n-1}}\sigma^{*}b(\theta^{*}, y_{n-1})}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{x_{n} - x_{n-1}}}(W_{n} - W_{n-1}) \sim W_{0}$$

mit $W_0 = \mathcal{N}(0, 1)$ gilt. Damit sind insbesondere die Voraussetzungen in Satz 6 und 9 erfüllt.

Im nächsten Schritt müssen nun Grenzen für die Suche festgelegt werden. Wie bereits zuvor beschrieben wird in dieser Arbeit von begrenztem Wachstum ausgegangen. Also gilt $\beta_1 < 0$ und $\beta_2 < 0$. Damit ergibt sich dann in der stochastischen Differentialgleichung $\theta_1 = -\beta_2 (-\beta_1)^{\frac{1}{\beta_2}} > 0$ und $\theta_2 = 1 - \frac{1}{\beta_2} > 1$. Negatives Wachstum kann ebenso ausgeschlossen werden. Daher muss $\theta_0 > y$ gelten. Damit sind Grenzen von $\theta = (\theta_0, \theta_1, \theta_2)^T$ nach unten festgelegt. Nach oben können auf diese Art keine Grenzen gefunden werden, weswegen diese im Folgenden als Vielfaches der nichtlinearen Startschätzung festgelegt werden. Aufgrund der Normalverteilungsannahme gilt dann

$$\sum_{t=2}^{N} Res_t(\eta^*) \sim \chi^2_{(N-1)}.$$

Dann muss eine α -Adjustierung vorgenommen werden. Im Folgenden wird dabei die Bonferroni-Holm-Korrektur genutzt. Diese ist gegeben durch $\frac{\alpha}{k}$, wobei k die Anzahl Tests beschreibt (vgl. Fahrmeir u. a., 2010, S.428). Basierend auf den Residualmomenten gilt also k = 4 und basierend auf der Datentiefe k = 2. Dann können die obere und untere Konfidenzintervallgrenze von σ bestimmt werden durch

$$\sigma_{l} = \sqrt{\sum_{t=2}^{N} \frac{(y_{t} - y_{t-1} - \theta_{1}\Delta_{t}(\theta_{0} - y_{t-1})^{\theta_{2}})^{2}}{(\sqrt{\Delta_{t}}\theta_{1}(\theta_{0} - y_{t-1})^{\theta_{2}})^{2}q_{chisq(\frac{\alpha}{8}, N-1)}}} \text{ und}$$
$$\sigma_{u} = \sqrt{\sum_{t=2}^{N} \frac{(y_{t} - y_{t-1} - \theta_{1}\Delta_{t}(\theta_{0} - y_{t-1})^{\theta_{2}})^{2}}{(\sqrt{\Delta_{t}}\theta_{1}(\theta_{0} - y_{t-1})^{\theta_{2}})^{2}q_{chisq(1-\frac{\alpha}{8}, N-1)}}}}$$

bzw.

$$\sigma_{l} = \sqrt{\sum_{t=2}^{N} \frac{(y_{t} - y_{t-1} - \theta_{1}\Delta_{t}(\theta_{0} - y_{t-1})^{\theta_{2}})^{2}}{(\sqrt{\Delta_{t}}\theta_{1}(\theta_{0} - y_{t-1})^{\theta_{2}})^{2}q_{chisq(\frac{\alpha}{4},N-1)}}} \text{ und}$$
$$\sigma_{u} = \sqrt{\sum_{t=2}^{N} \frac{(y_{t} - y_{t-1} - \theta_{1}\Delta_{t}(\theta_{0} - y_{t-1})^{\theta_{2}})^{2}}{(\sqrt{\Delta_{t}}\theta_{1}(\theta_{0} - y_{t-1})^{\theta_{2}})^{2}q_{chisq(1-\frac{\alpha}{4},N-1)}}}.$$

Dabei bezeichnet $q_{chisq(\alpha,N-1)}$ das Chiquadrat-Quantil zum Niveau α mit N-1 Freiheitsgraden und es gilt $\Delta_t = x_t - x_{t-1}$.

3.5 Intervallscore

Um Prognosen miteinander zu vergleichen, wird eine möglichst aussagekräftige Kennzahl benötigt. Gneiting und Raftery 2007 schlagen dazu den Intervallscore vor. Dieser ist definiert durch

$$S_{\alpha}^{int}(l,u;x) = (u-l) + \frac{2}{\alpha}(l-x)\mathbb{1}_{\{x < l\}} + \frac{2}{\alpha}(x-u)\mathbb{1}_{\{x > u\}}.$$

Dabei werden mit l und u die untere bzw. obere Konfidenzintervallgrenze bezeichnet. Mit α wird das zugrundeliegende Testniveau beschrieben und mit x wird die wahre Beobachtung bezeichnet.

Der Score errechnet sich also aus der Intervallbreite und additivem Fehlerterm, falls das Prognoseintervall den wahren Parameter nicht überdeckt. Dieser Fehlerterm wird größer, je weiter die wahre Beobachtung von den Grenzen entfernt ist und wird je nach zugrundeliegendem Niveau gewichtet. Je höher dieser Score ist, desto schlechter ist die gegebene Prognose zu beurteilen.

4 Risswachstumsprognose

Im Folgenden wird die Zeit modelliert, die bis zu einer gewissen Risslänge benötigt wird. Dabei wird die stochastische Differentialgleichung $\frac{\partial y(x)}{\partial x} = \theta_1(\theta_0 - y(x))^{\theta_2} dx + \sigma \theta_1(\theta_0 - y(x))^{\theta_2} dW(x)$ mit W(x) als Wiener Prozess zugrunde gelegt. Eine Prognose unter Annahmen an diese Gleichung soll mit Hilfe einer Rastersuche gegeben werden. Dazu werden Startschätzungen für eine solche Rastersuche über die nichtlineare Gleichung $y_n = \beta_0 + \beta_1 x_n^{\beta_2} + \epsilon$ generiert. Wie in Kapitel 3 beschrieben können für diese nichtlineare Gleichung wiederum über die Box-Tidwell-Transformation Startwerte gefunden werden. Die Umrechnung der Parameter vom nichtlinearen Modell in die Parameter $\theta = (\theta_0, \theta_1, \theta_2)^T$ bei der stochastischen Differentialgleichung erfolgt über die Zusammenhänge

$$\theta_0 = \beta_0$$

$$\theta_1 = -\beta_2 (-\beta_1)^{\frac{1}{\beta_2}}$$

$$\theta_2 = 1 - \frac{1}{\beta_2}$$

wie in Kapitel 3 beschrieben. Konfidenzintervalle für den Parameter σ ergeben sich über die Gleichungen

$$\sigma_{l} = \sqrt{\sum_{t=2}^{N} \frac{(y_{t} - y_{t-1} - \theta_{1}\Delta_{t}(\theta_{0} - y_{t-1})^{\theta_{2}})^{2}}{(\sqrt{\Delta_{t}}\theta_{1}(\theta_{0} - y_{t-1})^{\theta_{2}})^{2}q_{chisq(\frac{\alpha}{8}, N-1)}}}$$
$$\sigma_{u} = \sqrt{\sum_{t=2}^{N} \frac{(y_{t} - y_{t-1} - \theta_{1}\Delta_{t}(\theta_{0} - y_{t-1})^{\theta_{2}})^{2}}{(\sqrt{\Delta_{t}}\theta_{1}(\theta_{0} - y_{t-1})^{\theta_{2}})^{2}q_{chisq(1-\frac{\alpha}{8}, N-1)}}},$$

unter den Annahmen an die Residualmomente und über

$$\begin{split} \sigma_l &= \sqrt{\sum_{t=2}^N \frac{(y_t - y_{t-1} - \theta_1 \Delta_t (\theta_0 - y_{t-1})^{\theta_2})^2}{(\sqrt{\Delta_t} \theta_1 (\theta_0 - y_{t-1})^{\theta_2})^2 q_{chisq(\frac{\alpha}{4}, N-1)}}}{\sigma_u} \\ \sigma_u &= \sqrt{\sum_{t=2}^N \frac{(y_t - y_{t-1} - \theta_1 \Delta_t (\theta_0 - y_{t-1})^{\theta_2})^2}{(\sqrt{\Delta_t} \theta_1 (\theta_0 - y_{t-1})^{\theta_2})^2 q_{chisq(1-\frac{\alpha}{4}, N-1)}}}, \end{split}$$

bei Annahmen an die Datentiefe, wobei σ_{α} die untere Grenze und $\sigma_{1-\alpha}$ die obere Grenze des Konfidenzintervalls bezeichnet und mit $q_{chisq}(\frac{\alpha}{2k}, N-1)$ bzw. $q_{chisq}(1-\frac{\alpha}{2k}, N-1)$ das $\frac{\alpha}{2k}$ - bzw. $1-\frac{\alpha}{2k}$ -Quantil der Chiquadrat-Verteilung bezeichnet wird und mit N die Anzahl Beobachtungen (vgl. Kapitel 3). Es gilt k = 4 bei der Methodik über die Residualmomente und k=2 bei der Methodik über die Datentiefe. Außerdem wird im Folgenden $\alpha=0,05$ gesetzt.

Es wird im Folgenden zunächst ein Überblick über die so gewonnenen Schätzungen gegeben. Dann wird auf die Ergebnisse der Rastersuche eingegangen. Dabei finden sowohl die Methode über Annahmen an die Residualmomente als auch die Methode über Annahmen an die Datentiefe Betrachtung. Abschließend wird der ebenso in Kapitel 3 vorgestellte Intervallscore betrachtet. Dies wird für zwei unterschiedliche Beobachtungszeiträume betrachtet. Zum Einen werden Beobachtungen bis zu einer Risslänge von 35mm und zum Anderen werden Beobachtungen bis zu einer Risslänge von 25mm zugrunde gelegt und miteinander verglichen.

Die Berechnungen in dieser Arbeit werden dabei mit dem Programm R Core Team 2015 durchgeführt.

4.1 Prognose bei gegebener Risslänge von 35mm

In diesem Unterkapitel werden Konfidenzintervalle und Prognosen für den weiteren Verlauf der Zeitreihen bei einer gegebenen Risslänge von 35mm betrachtet. Dabei wird zunächst auf die Startschätzungen eingegangen. Diese werden anfangs durch das Box-Tidwell-Verfahren angenähert und dann durch eine nichtlineare Schätzung versucht zu verbessern. Anschließend wird auf die Ergebnisse der Rastersuche eingegangen und die Intervallscores betrachtet.

4.1.1 Ermittlung der Startschätzungen

Zunächst werden die Startschätzungen des Modells durch das Box-Tidwell-Verfahren betrachtet. Um ein gewisses Maß an Übersichtlichkeit zu gewährleisten, werden die Schätzungen nicht für jede Messreihe dargestellt, sondern es werden verschiedene Kennzahlen gegeben. In Tabelle 2 sind die wichtigsten Kennzahlen zu finden.

Parameter	β_0	β_1	β_2
Minimum	29,90	-321,2	-1,0478
Unteres Quartil	33,54	-209,9	-0,8308
Median	36,20	-179,6	-0,7292
Mittelwert	36,79	-188,5	-0,7443
Oberes Quartil	38,96	-162,3	-0,6653
Maximum	58,89	-120,2	-0,3365

Tabelle 2: Kennzahlen der Box-Tidwell-Schätzungen bei gegebener Risslänge von 35mm

Während der Interquartilsabstand mit ungefähr 5 beim Parameter β_0 im Vergleich zur Höhe der Schätzung relativ gering zu sein scheint, fällt bei Betrachtung des Maximums auf, dass es mindestens einen Ausreißer nach oben zu geben scheint. Die Startschätzungen für den Parameter β_1 sind im Vergleich zu den anderen Parametern in einer recht hohen Größenordnung gegeben. Dennoch scheint bei Betrachtung der Höhe der Parameterschätzungen auch hier der Interquartilsabstand recht gering. Bei Betrachtung von Maximum und Minimum fällt auch hier auf, dass es wieder zumindest einen Ausreißer zu geben scheint. Bei diesem Parameter ist dieser jedoch am Minimum festzumachen.

Für den Parameter β_2 sind die Startschätzungen in einer recht kleinen Größenordnung gegeben. Dies macht jedoch auch Sinn, da es sich bei diesem Parameter um einen Exponenten im ursprünglichen nichtlinearen Modell handelt. Hier scheint es bei Betrachtung der Kennzahlen nicht zwangsweise Ausreißer zu geben.

Um den Eindruck von Ausreißern zu überprüfen werden in einem nächsten Schritt Boxplots der Parameterschätzungen betrachtet. Da sich die Größenordnungen der Parameter sehr unterscheiden, ist es sinnvoll, die drei Parameter in einzelnen Plots zu betrachten. Die jeweiligen Boxplots sind in den Abbildungen A.1-A.3 zu finden.

Die Boxplots erhärten den Verdacht, dass es Ausreißer gibt. Beim Parameter β_0 scheinen zwei Ausreißer zu existieren. Diese sind in den Messreihen 44 und 47 zu finden. Der Ausreißer beim Parameter β_1 ist in Messreihe 32 zu finden. Ebenso kann beim Parameter β_2 ein möglicher Ausreißer identifiziert werden. Dieser ist wiederum in Messreihe 47 zu finden. Da sich in Messreihe 47 zwei Ausreißer zu finden scheinen und der Ausreißer beim ersten Parameter recht extrem zu sein scheint, wird diese Reihe im Folgenden intensiver betrachtet, da es insbesondere hier zu Ungenauigkeiten kommen könnte in der Modellvorhersage.

Die Schätzungen des Box-Tidwell-Verfahrens können nun entweder über eine nichtlineare Schätzung weiter optimiert werden oder direkt, wie in Kapitel 3.1 beschrieben, umgeformt und als Startparameter für die Rastersuche genutzt werden. Die Kennzahlen dieser direkt umgeformten Schätzungen sind in Abbildung 3 zu finden.

Parameter	$ heta_1$	θ_0	θ_2
Minimum	$2,220\cdot 10^{-7}$	$29,\!90$	1,954
Unteres Quartil	$3,250\cdot10^{-4}$	$33,\!54$	2,204
Median	$6,187\cdot 10^{-4}$	36,20	2,371
Mittelwert	$9,376\cdot 10^{-4}$	36,79	2,387
Oberes Quartil	$1,365\cdot 10^{-3}$	$38,\!96$	2,503
Maximum	$4,246\cdot 10^{-3}$	$58,\!89$	3,971

Tabelle 3: Kennzahlen der für die stochastische Differentialgleichung umgerechneten Box-Tidwell-Schätzungen bei gegebener Risslänge von 35mm

Bei Betrachtung der Boxplots dieser umgeformten Parameter scheint sich in Bezug auf Ausreißer ein etwas anderes Bild zu ergeben (vgl. Abbildungen 2 und 3). Auf eine Grafik zum zweiten Parameter wird hier verzichtet, da dieser gleich dem Parameter β_0 ist. Die Ausreißer beim Parameter θ_2 sind bei den Messreihen 44 und 47 zu finden. Beim Parameter θ_0 sind sie in den Messreihen 32, 34, 42 und 57 zu finden. Insbesondere bei den Messreihen 32 und 57 sind die Ausreißer vergleichsweise extrem.

Probleme in der Vorhersage scheinen daher insbesondere bei den Messreihen 32, 44, 47 und 57 zu erwarten. Daher werden diese im Folgenden genauer betrachtet.



Abbildung 2: Boxplot der für die stochastische Differentialgleichung umgerechneten Box-Tidwell-Schätzungen bei gegebener Risslänge von 35mm für den Parameter θ_1



Abbildung 3: Boxplot der für die stochastische Differentialgleichung umgerechneten Box-Tidwell-Schätzungen bei gegebener Risslänge von 35mm für den Parameter θ_2

In einem nächsten Schritt wird nun versucht obige Schätzungen weiter zu verbessern. Daher wird nun das nichtlineare Modell angepasst. Als Startschätzungen dienen die Schätzungen des Box-Tidwell-Modells.

Ebenso wie oben werden auch die Schätzungen im nichtlinearen Modell so umgeformt, wie sie in der zugehörigen Differentialgleichung gegeben sind. Die so gewonnenen Parameterschätzungen sind in Tabelle 4 zu finden.

Parameter	$ heta_1$	θ_0	θ_2
Minimum	$2,220\cdot 10^{-7}$	29,90	1,954
Unteres Quartil	$3,250\cdot 10^{-4}$	33,54	2,204
Median	$6,187\cdot 10^{-4}$	36,20	2,371
Mittelwert	$9,376\cdot 10^{-4}$	36,79	2,387
Oberes Quartil	$1,365\cdot 10^{-3}$	38,96	2,503
Maximum	$4,246 \cdot 10^{-3}$	58,89	3,971

Tabelle 4: Kennzahlen der Schätzungen im nichtlinearen Modell bei gegebener Risslänge von 35mm mit Startschätzungen nach Box-Tidwell umgerechnet für die stochastische Differentialgleichung

Bei den betrachteten Nachkommastellen der Kennzahlen fällt auf, dass sich die Schätzungen im nichtlinearen Modell nicht von denen im Box-Tidwell-Modell zu unterscheiden scheinen.

Für einen genaueren Vergleich werden daher in einem nächsten Schritt die Differenzen der Schätzungen betrachtet. Die wichtigsten Kennzahlen dieser Differenzen sind in Tabelle 5 aufgeführt.

Parameter	θ_1	θ_0	θ_2
Minimum	$-1,318 \cdot 10^{-7}$	$-2,240\cdot 10^{-4}$	$-1,412\cdot 10^{-5}$
Unteres Quartil	$-1,010\cdot 10^{-8}$	0	0
Median	0	0	0
Mittelwert	$-7,304\cdot 10^{-9}$	$3,106\cdot 10^{-5}$	$1,975\cdot 10^{-6}$
Oberes Quartil	0	$7,185\cdot 10^{-5}$	$4,806\cdot 10^{-6}$
Maximum	$9,835 \cdot 10^{-8}$	$3,890 \cdot 10^{-4}$	$2,117 \cdot 10^{-5}$

Tabelle 5: Kennzahlen der Differenzen der Schätzungen im nichtlinearen und Box-Tidwell-Modell bei gegebener Risslänge von 35mm umgerechnet für die stochastische Differentialgleichung

Es fällt auf, dass sich die Schätzungen nur sehr geringfügig verändern. Dies macht zum Einen Sinn, da es sich beim Box-Tidwell-Modell um eine Taylorapproximation erster Ordnung handelt. Zum Anderen kann davon ausgegangen, dass eine Approximation erster Ordnung eine genügend genaue Annäherung an die wahre nichtlineare Funktion liefert. Eine grafische Betrachtung der Differenzen ist in Abbildung 4 zu finden.



Abbildung 4: Boxplots der Differenzen der Schätzungen im nichtlinearen und Box-Tidwell-Modell bei gegebener Risslänge von 35mm umgerechnet für die stochastische Differentialgleichung

Aufgrund dieser relativ guten Annäherung könnte aus numerischen Gründen auf die nichtlineare Schätzung verzichtet werden. Stattdessen könnten die Box-Tidwell-Schätzungen direkt für die Rastersuche verwendet werden.

Um eine möglichst hohe Genauigkeit zu gewährleisten werden numerische Gründe allerdings im Folgenden außen vor gelassen.

4.1.2 Ergebnisse der Rastersuche

Im nächsten Schritt wird nun die in Kapitel 3 dargestellte Rastersuche durchgeführt. Die untere Grenze des Rasters wird im Falle des Parametervektors $\theta = (\theta_0, \theta_1, \theta_2)^T$ wie zuvor analytisch bestimmt gewählt. Die obere Grenze des Rasters für diesen Parametervektor wird in Abhängikeit der Startschätzungen gewählt. Als ersten Ansatz wird für die Parameter θ_0 und θ_1 als obere Grenze das doppelte der jeweiligen Startschätzung gewählt. Für den Parameter θ_2 wird das dreifache der Startschätzung gewählt. Der Suchbereich des Parameters σ wird durch das $\frac{\alpha}{8}$ - bzw. $1 - \frac{\alpha}{8}$ -Quantil der angenommenen Verteilung festgelegt. Dabei ist α als 0,05 fest gewählt. Durch die Rastersuche ergeben sich zunächst Pfade, die im Bereich der Verteilungsannahmen möglich sind. Aus diesen werden dann empirisch 95%-Prognoseintervalle gebildet. Ebenso wird der Median der Pfade genutzt um eine Prognose des Verlaufs zu erstellen.

Besondere Betrachtung finden dabei die Messreihen 32, 44, 47 und 57 wie zuvor dargestellt. Bei den restlichen Messreihen gibt es bei den Startschätzungen keine oder nur geringe Ausreißer. Daher wird als weitere Schätzung die erste Messreihe betrachtet.

Abbildung 5 zeigt den wahren Verlauf der ersten Messreihe. Ebenso sind die möglichen Pfade, ihr empirisches 95%-Konfidenzband und die Prognose der Zeit in Abhängigkeit von der Risslänge dargestellt.



Abbildung 5: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode der Residualmomente bei gegebener Risslänge von 35mm für Messreihe 1

Das Konfidenzband überdeckt den wahren Verlauf und es fällt auf, dass das zugrundeliegende Verfahren die Zeit bis zu einer vorgegebenen Risslänge zu überschätzen scheint. Ebenso ist zu erkennen, dass das Konfidenzband mit steigendem Abstand zum zuletzt beobachtetem Wert breiter wird. Dies ist sinnvoll, da Beobachtungen, die weiter vom beobachteten Wert entfernt liegen, unsicherer vorherzusagen sind.

Im nächsten Schritt wird die Messreihe 32 betrachtet. Wie zuvor ist in Abbildung 6 der wahre Verlauf dieser Messreihe dargestellt. Außerdem sind auch hier die möglichen Pfade, ihr empirisches 95%-Konfidenzband und die Prognose der Zeit in Abhängigkeit von der Risslänge dargestellt.



Abbildung 6: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode der Residualmomente bei gegebener Risslänge von 35mm für Messreihe 32

Wie bei der ersten Messreihe überdeckt auch hier das Konfidenzband den wahren Verlauf. Die möglichen Pfade scheinen wie zuvor bei Betrachtung der Konfidenzgrenzen eher nach oben abzuweichen. Jedoch fällt auf, dass die Prognose den wahren Verlauf eher unterschätzt. Ebenso ist ersichtlich, dass der Prognosefehler, also der Abstand zwischen Prognose und wahrer Beobachtung, geringer zu sein scheint als bei der ersten Messreihe. Außerdem fällt auf, dass die möglichen Pfade des Risswachstums nicht so gleichmäßig verlaufen wie bei der ersten Messreihe.

Weitere Ausreißer in den Startschätzungen sind in Messreihe 44 zu erkennen. Abbildung 7 zeigt für diese Messreihe wiederum den wahren Verlauf, die möglichen Pfade, ihr empirisches 95%-Konfidenzband und die Prognose der Zeit in Abhängigkeit von der Risslänge.



Abbildung 7: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode der Residualmomente bei gegebener Risslänge von 35mm für Messreihe 44

Es ergibt sich wiederum ein anderes Bild. So ist in diesem Fall ersichtlich, dass das Konfidenzband im Vergleich zu den anderen beiden Messreihen schmaler zu sein scheint. Das wahre Risswachstum verläuft an der oberen Grenze des Konfidenzbandes, scheint jedoch noch innerhalb der Grenzen zu liegen. Die möglichen Pfade scheinen sich eher in Richtung der unteren Grenze des Konfidenzbandes zu orientieren. Damit liegt auch die Prognose des Verlaufs unter dem wahren Verlauf.

Auch Messreihe 47 hat in den Startschätzungen Ausreißer ergeben. Wie zuvor sind in Abbildung 8 der wahre Verlauf, die möglichen Pfade, ihr empirisches 95%-Konfidenzband und die Prognose der Zeit in Abhängigkeit von der Risslänge dargestellt.


Abbildung 8: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode der Residualmomente bei gegebener Risslänge von 35mm für Messreihe 47

Es ergibt sich ein ähnliches Bild wie in Messreihe 44. Das Konfidenzband scheint jedoch in diesem Fall noch schmaler geworden zu sein. Wieder unterschätzt die Prognose den wahren Verlauf. Außerdem ist negativ zu bewerten, das der wahre Verlauf nun außerhalb des Konfidenzbandes liegt.

Eine mögliche Ursache des empirisch schwach zu beurteilenden Verlaufs liegt eventuell darin, dass der Verlauf der beobachteten Zeit in Abhängigkeit von der Risslänge im Vergleich nicht sonderlich glatt zu sein scheint. Dies führt anscheinend zu Problemen bei der Prognose.

Weitere Ausreißer sind in Messreihe 57 zu finden. Auch für diese Messreihe sind in Abbildung 9 der wahre Verlauf, die möglichen Pfade, ihr empirisches 95%-Konfidenzband und die Prognose der Zeit in Abhängigkeit von der Risslänge dargestellt.



Abbildung 9: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode der Residualmomente bei gegebener Risslänge von 35mm für Messreihe 57

Es ergibt sich wiederum ein ähnliches Bild wie in Messreihe 44. Jedoch scheint auch hier das Konfidenzband schmaler geworden zu sein. Allerdings liegt der wahre Verlauf im Gegensatz zu der Prognose bei Messreihe 47 noch im Konfidenzband.

Empirisch betrachtet scheint die Prognose in dieser Messreihe ziemlich gut zu sein. Gründe dafür sind, dass das Konfidenzband vergleichsweise schmal ist, den wahren Verlauf jedoch noch überdeckt. Die Prognose weicht nach unten ab. Dies ist im Vergleich zu einer Abweichung nach oben in der Praxis vorzuziehen. Aus Sicherheitsaspekten zum Beispiel scheint es sinnvoller die Zeit bis zu einer gewissen Risslänge zu unterschätzen als sie zu überschätzen.

Weitere Beispiele für den Prognoseverlauf bei anderen Messreihen sind in den Abbildungen A.4 bis A.7 zu finden.

Um die Prognose zu verbessern wird in einem nächsten Schritt versucht das genutzte Raster zu vergrößern. Die unteren Grenzen des Rasters bleiben bestehen, da sie sich analytisch ergeben. Hingegen werden die oberen Grenzen für die Parameter θ_0 und θ_1 auf dreimal den Startparameter erhöht. Die obere Grenze für den Parameter θ_2 wird auf das Vierfache des Startparameters vergrößert. Einen guten Proxy für eine mögliche Verbesserung der Prognose liefert dabei Messreihe 47, da die Schätzung in diesem Fall mit der ursprünglichen Rastergröße vergleichsweise schlecht ist. Ebenso wird als Vergleichsreihe wiederum die erste Messreihe herangezogen.

Abbildung 10 zeigt den wahren Verlauf, die möglichen Pfade, ihr empirisches 95%-Konfidenzband und die Prognose der Zeit in Abhängigkeit von der Risslänge für Messreihe 1 bei diesem vergrößerten Raster.



Abbildung 10: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode der Residualmomente bei gegebener Risslänge von 35mm für Messreihe 1 bei vergrößertem Raster

Es fällt auf, dass sich am Ergebnis nicht großartig etwas geändert hat. Das Konfidenzband scheint etwas breiter geworden zu sein. Ebenso sind ein paar extremere Ausreißer der Pfade nach oben zu erkennen. Die Beobachtung war jedoch nicht anders zu erwarten, da lediglich das Raster nach oben vergrößert wurde.

Eine Veränderung der Prognose und des Konfidenzbands bei Messreihe 47 ist graphisch nicht zu erkennen (vgl. Abbildung 11). Der wahre Verlauf liegt weiterhin außerhalb des Konfidenzbandes. Eine genauere Analyse, ob eine Verbesserung vorliegt, wird später anhand des in Kapitel 3 vorgestellten Intervallscores durchgeführt.



Abbildung 11: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode der Residualmomente bei gegebener Risslänge von 35mm für Messreihe 47 bei vergrößertem Raster

Im nächsten Schritt wird nun die Prognose durch die Methode der Datentiefe-Schätzung betrachtet. Ebenso wird überprüft, ob sich die Prognose im Vergleich zur vorherigen Methodik verbessert.

Wie zuvor werden für eine erste Betrachtung die Messreihen, in denen Ausreißer bei den Startschätzungen vorliegen, verwendet. Zum Vergleich wird wiederum die erste Messreihe herangezogen.

Der wahre Pfad der ersten Messreihe ist in Abbildung 12 dargestellt. Ebenso sind dort die möglichen Pfade, das 95%-Konfidenzintervall und die Prognose abgebildet.



Abbildung 12: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode über die Datentiefe bei gegebener Risslänge von 35mm für Messreihe 1

Das Konfidenzband scheint eine ähnliche Breite aufzuweisen wie zuvor bei der Schätzung über die Residualmomente. Auch wird der wahre Verlauf vom Konfidenzband überdeckt. Allerdings scheint die Zeit, die für eine gegebene Risslänge benötigt wird, weniger stark überschätzt zu werden. Dies gilt insbesondere im Vergleich zur Schätzung bei einem vergrößerten Raster.

Als nächste Messreihe wird wiederum Reihe 32 betrachtet. Abbildung 13 zeigt ihren wahren Verlauf, die möglichen Pfade, das 95%-Konfidenzintervall und die Prognose.



Abbildung 13: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode über die Datentiefe bei gegebener Risslänge von 35mm für Messreihe 32

Wiederum überdeckt das Konfidenzband den wahren Verlauf und wie zuvor wird der wahre Verlauf durch die Prognose leicht überschätzt. Dies steht im Gegensatz zu der Prognose anhand der Residualmomente. Hier wurde der wahre Verlauf noch leicht unterschätzt. Weitere Ausreißer in den Startschätzungen sind in Messreihe 44 zu finden. Bei Betrachtung der Prognose für diese Reihe fällt auf, dass sich die Schätzung im Vergleich stark verbessert zu haben scheint (vgl. Abbildung 14)



Abbildung 14: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode über die Datentiefe bei gegebener Risslänge von 35mm für Messreihe 44

Das Konfidenzband ist im Gegensatz zu zuvor schmaler geworden und überdeckt weiterhin den wahren Verlauf. Auch die Prognose ist nun nahezu identisch mit dem wahren Verlauf des Risswachstums.

Die Schätzung für Messreihe 47 kann scheinbar ebenso durch die Methode der Datentiefe-Schätzung verbessert werden (vgl. Abbildung 15).



Abbildung 15: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode über die Datentiefe bei gegebener Risslänge von 35mm für Messreihe 47

Das Konfidenzband scheint im Verglauch zwar etwas breiter geworden zu sein. Jedoch wird der wahre Verlauf dieser Zeitreihe nun auch von dem Konfidenzband überdeckt. Als letzte Messreihe wird wiederum die Reihe 57 betrachtet. Ihr Verlauf, die möglichen Pfade, das 95%-Konfidenzband und ihre Prognose sind in Abbildung 16 dargestellt.



Abbildung 16: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode über die Datentiefe bei gegebener Risslänge von 35mm für Messreihe 57

Es fällt insbesondere auf, dass sich das Konfidenzband bei ähnlicher Breite wie bei der anderen Methodik nach oben verschoben hat. Damit unterschätzt auch die Prognose nicht mehr den wahren Verlauf, sondern überschätzt ihn leicht. Weitere graphische Darstellungen der Schätzungen und ebenso Darstellungen bei vergrößertem Raster sind in den Abbildungen A.8 bis A.13 dargestellt.

4.1.3 Scores

Bei Betrachtung dieser Beispiele kann angenommen werden, dass sich die Prognose bei Verwendung der Datentiefe zu verbessern scheint. Um dies statistisch valide zu belegen, werden im Folgenden die Intervallscores der Prognoseintervalle wie in Kapitel 3 vorgestellt betrachtet. Ebenso wird überprüft, ob sich die Prognosegüte im Vergleich unter den Messreihen unterscheidet. Außerdem wird die Veränderung der Güte im Bezug auf die Entfernung von der letzten Beobachtung betrachtet.

In Abbildung 17 sind die durchschnittlichen Intervallscores der einzelnen Messreihen dargestellt.



Abbildung 17: Durchschnittliche Intervallscores der 68 Messreihen nach Methode der Residualmomente

Wie bereits bei der empirischen Betrachtung der Prognosen aufgefallen ist, schneidet die Prognose der Messreihe 47 vergleichsweise schlecht ab. Während die gemittelten Scores im Mittel – sowohl im Bezug auf das arithmetische Mittel als auch im Bezug auf den Median – bei ca. 3,6 liegen, weist diese Messreihe einen durchschnittlichen Score von 13,04 auf. Ebenso können jedoch auch vergleichsweise gute Schätzungen ermittelt werden. Es handelt sich dabei um die Messreihen 44 und 57. Auch bei diesen lagen bereits bei den Startschätzungen Ausreißer vor. Diese haben jedoch bei gegebenen Scores von 1,70 und 1,01 die Prognose verbessert. Die weiteren Messreihen weisen Intervallscores nahe dem Mittel auf.

Als Nächstes soll nun überprüft werden, ob es in den einzelnen Messreihen Ausreißer im Bezug auf die Intervallscores gibt. Dazu zeigt Abbildung 18 Boxplots von den Intervallscores der einzelnen Messreihen.



Abbildung 18: Boxplots der Intervallscores von den 68 Messreihen bei Methode der Residualmomente

Wie bereits zuvor erkannt schneiden die Messreihen 44 und 57 erstaunlich gut und Messreihe 47 vergleichsweise schlecht ab. Signifikante Ausreißer können nicht ausgemacht werden. Als nächstes wird überprüft, ob die Vergrößerung des Rasters eine Verbesserung der Prognose mit sich bringt. Dazu sind Boxplots von den Differenzen der Intervallscores in Abbildung 19 dargestellt.



Abbildung 19: Boxplots der Differenzen der Intervallscores von den 68 Messreihen bei Methode der Residualmomente von vergrößertem und ursprünglichem Raster

Es fällt auf, dass sich die Scores im Allgemeinen durch ein größeres Raster eher verschlechtern denn verbessern. Nur in wenigen Ausnahmen kann eine geringfügige Verbesserung erreicht werden. Dies ist vermutlich dann der Fall, wenn die ürsprüngliche Prognose den wahren Verlauf eher unterschätzt hat, da das Raster nur nach oben vergrößert werden kann und nach unten analytisch festgelegt ist.

Eine Überprüfung der Prognosegüte wie oben wird nun auch bei den Datentiefe-Schätzungen durchgeführt. Abbildung 20 zeigt die durchschnittlichen Intervallscores jeder Messreihe.



Abbildung 20: Durchschnittliche Intervallscores der 68 Messreihen nach Methode über die Datentiefe

Es fällt auf, dass die durchschnittlichen Scores stärker zu variieren scheinen als bei der anderen Methode. Wiederum liegt eine vergleichsweise schlechte Prognose vor. Allerdings ist diese nicht bei Messreihe 47 wie zuvor zu finden, sondern bei Messreihe 14. Mit einem durchschnittlichen Score von 9,90 ist die Prognose auch im Vergleich nicht allzu schlecht. Bei Betrachtung von Abbildung A.9 fällt auf, dass auch hier wie bei Messreihe 47 bei der anderen Schätzmethode das Prognoseintervall den wahren Verlauf nicht überdeckt.

Die weiteren durchschnittlichen Scores bewegen sich im Bereich von ca. 1 bis 5 bei einem arithmetischen Mittel von 2,77 und einem Median von 2,47. Dies lässt vermuten, dass die Datentiefe-Schätzungen vergleichweise bessere Prognosen liefern.

In einem nächsten Schritt wird nun wiederum überprüft, ob Ausreißer in den Intervallscores ausgemacht werden können. Wie in Abbildung 21 zu sehen, können bei den Messreihen 11 und 35 Ausreißer gefunden werden. Dies liegt bei Messreihe 11 daran, dass das Prognoseintervall die wahre Beobachtung nicht immer überdeckt(vgl. Abbildung A.8). Bei Messreihe 35 überdeckt das Prognoseintervall ebenso insbesondere bei wachsender Entfernung zur letzten Beobachtung nicht immer die wahre Beobachtung(vgl. Abbildung A.10).



Abbildung 21: Boxplots der Intervallscores von den 68 Messreihen bei Methode über die Datentiefe

In einem weiteren Schritt wird nun wieder geprüft, ob eine Verbesserung der Prognosen durch Vergrößerung des Rasters erreicht werden kann. Abbildungen A.12 und A.13 zeigen die Prognosen der Messreihen 11 und 35 bei vergrößertem Raster. Es fällt auf, dass der wahre Verlauf weiterhin nicht immer vom Prognoseintervall überdeckt wird. Es kann also in Bezug auf diese Zeitreihen keine Verbesserung festgestellt werden.

Um eine mögliche Verbesserung allgemein in Bezug auf die 68 beobachteten Zeitreihen ausschließen zu können, werden wiederum die Scoredifferenzen zwischen dem ürsprünglichen und vergrößertem Raster verglichen. Abbildung 22 zeigt Boxplots dieser Differenzen für die einzelnen Messreihen.



Abbildung 22: Boxplots der Differenzen der Intervallscores von den 68 Messreihen bei Methode über die Datentiefe von vergrößertem und ursprünglichem Raster

Es fällt auf, dass sich die Intervallscores im Allgemeinen wie auch mit der anderen Methode eher verschlechtern denn verbessern. Lediglich bei Messreihe 14 scheint sich die Prognose erwähnenswert zu verbessert. Diese Verbesserung wird jedoch durch Verschlechterungen in verschiedenen anderen Messreihen mehr als revidiert. Im Folgenden kann also davon ausgegangen werden, dass eine Vergrößerung des Rasters nicht weiter überprüft werden muss.

Wie zuvor dargestellt scheint die Prognose über die Datentiefe besser zu sein als die über die Residualmomente. Um diese Vermutung zu verifizieren werden im nächsten Schritt die durchschnittlichen Scores über die einzelnen Messreihen betrachtet. Diese sind in Abhängigkeit vom Abstand zur letzten gegebenen Beobachtung in Abbildung 23 zu finden. Neben den Intervallscores des ursprünglichen Rasters sind hier auch noch einmal die durchschnittlichen Scores der vergrößerten Raster abgebildet. Ebenso sind die durchschnittlichen Scores bei einem verkleinerten Raster dargestellt. Als obere Grenzen wurde hier für θ_0 und θ_1 das anderthalbfache der Startschätzung genutzt, für θ_2 das doppelte der Startschätzung.



Abbildung 23: Durchschnittliche Intervallscores der Tiefe- und Residualmomente-Schätzungen unterteilt nach Abstand zur letzten Beobachtung

Wie bereits zuvor vermutet verschlechtert sich die Prognose bei größerem Raster. Ebenso ist auffällig, dass die Prognose über die Datentiefe selbst bei größerem Raster zu besseren Ergebnissen führt als die Prognose über die Resdidualmomente bei ursprünglichem Raster. Bei Berücksichtigung der durchschnittlichen Scores bei kleinerem Raster fällt auf, dass sich die Prognosegüte weiter verbessert.

4.2 Prognose bei gegebener Risslänge von 25mm

In einem weiteren Schritt soll nun überprüft werden, in wieweit eine Reduktion der Beobachtungen die Prognose beeinträchtigt. Dabei wird im Folgenden von gegebenen Beobachtungen bis zu einer Risslänge von 25 Millimetern ausgegangen. Es sind also 50 Beobachtungspunkte weniger vorhanden. Da bereits festgestellt wurde, dass eine Vergrößerung des Rasters allgemein zu einer Verschlechterung der Prognose führt und eine Verkleinerung zu einer Verbesserung, werden im Folgenden nur die ursprünglichen Raster unterteilt nach den beiden Methoden betrachtet.

4.2.1 Ermittlung der Startschätzungen

Dazu werden wie zuvor zunächst die Startschätzungen nach dem Box-Tidwell-Verfahren ermittelt. Tabelle 6 zeigt die wichtigsten Kennzahlen dieser Startschätzungen für die 68 Messreihen.

Parameter	β_0	β_1	β_2
Minimum	26,60	-611,9	-1,3604
Oberes Quartil	30,55	-253,1	-0,9684
Median	32,51	-205,8	-0,8479
Mittelwert	34,05	-232,1	-0,8581
Oberes Quartil	36,41	-178,3	-0,7426
Maximum	62,35	-132,1	-0,4033

Tabelle 6: Kennzahlen der Box-Tidwell-Schätzungen für das nichtlineare Modell bei gegebener Risslänge bis 25mm

Für die Schätzung von β_0 ergibt sich ein ähnlich kleiner Interquartilsabstand wie zuvor bei mehr Beobachtungen von ungefähr sechs. Die gesamte Bandbreite der jeweiligen Schätzungen scheint in einem ähnlichen Bereich zu liegen wie zuvor. Das Minimum ist hier bei 26,6 angesiedelt, während es zuvor bei 29,9 lag. Das Maximum liegt bei 62,35. Zum Vergleich: Zuvor lag es bei 58,89. Der Wert des arithmetischen Mittels und insbesondere der des Medians ist vergleichsweise geringer geworden (34,05 und 32,51 im Vergleich zu 36,79 und 36,2).

Aufgrund der Größe der Schätzungen bei β_1 sind hier zahlenmäßig stärkere Abweichungen zu beobachten. Der Interquartilsabstand, sowie die Quartile, der Median und das arithmetische Mittel scheinen jedoch ebenso wie bei β_0 vertretbare Abweichungen aufzuweisen. Auch das Maximum liegt bei einer Differenz von ungefähr 12 zum vorherigen Wert im vertretbaren Bereich. Lediglich das Minimum unterscheidet sich stark zum Vorherigen (-611,9 und zuvor -321,2). Dies lässt darauf schließen, dass aufgrund der niedrigeren Beobachtungszahlen stärkere Ausreißer vorliegen als zuvor.

Die Schätzungen für β_2 scheinen ähnlich wie bei β_0 kaum nennenswerte Veränderungen aufzuweisen. Jedoch hat sich auch hier die Bandbreite der Schätzungen vergrößert.

Im nächsten Schritt werden diese Schätzungen wiederum als Startschätzungen für das nichtlineare Modell verwendet. Anschließend werden die Schätzungen des nichtlinearen Modells so umgeformt, dass sie für die stochastische Differentialgleichung verwendet werden können. Kennzahlen dieser umgeformten Schätzungen aus dem nichtlinearen Modell sind in Tabelle 7 zu finden.

Parameter	$ heta_1$	$ heta_0$	θ_2
Minimum	$1,604\cdot 10^{-6}$	$26,\!60$	1,735
Unteres Quartil	$6,373 \cdot 10^{-4}$	$30,\!55$	2,033
Median	$1,485\cdot 10^{-3}$	$32,\!51$	2,179
Mittelwert	$2,557\cdot 10^{-3}$	$34,\!05$	2,234
Oberes Quartil	$2,922 \cdot 10^{-3}$	$36,\!41$	2,347
Maximum	$1,370\cdot 10^{-2}$	$62,\!35$	3,479

Tabelle 7: Kennzahlen der Schätzungen im nichtlinearen Modell bei gegebener Risslänge bis 25mm

Aufgrund der geringen Abweichungen in den Box-Tidwell-Schätzungen für β_0 und β_2 weisen auch hier die Schätzungen für θ_0 und θ_2 nur geringe Abweichungen zu den Schätzungen bei einer gegebenen Risslänge von 35 Millimetern auf. Dies liegt daran, dass sich diese Parameter aus Umformungen von β_0 und β_2 ergeben. Für die Berechnung des Parameters θ_1 wird der Parameter β_1 benötigt. Daher ergeben sich auch hier wieder stärkere Abweichungen. So ist die Bandbreite – damit ist der Abstand zwischen Minimum und Maximum gemeint – um fast das 100-fache größer. Vergleiche dazu auch Abbildung 24.



Abbildung 24: Boxplots der Differenzen der Schätzungen im nichtlinearen und Box-Tidwell-Modell bei gegebener Risslänge von 25mm umgerechnet für die stochastische Differentialgleichung

Interessant ist im nächsten Schritt zu überprüfen, ob es wiederum bei den selben Messreihen wie zuvor Ausreißer in den Startschätzungen gibt. Boxplots für die Startschätzungen sind in den Abbildungen A.14 bis A.16 dargestellt. Ausreißer können insbesondere bei den Messreihen 10, 44, 49, 57 und 65 ausgemacht werden. Damit ergeben sich Überschneidungen in der Ausreißerdetektion bei den Messreihen 44 und 57. Zuvor gab es jedoch noch Ausreißer in den Reihen 32 und 47. Hier sind keine Ausreißer mehr zu finden. Stattdessen sind die Reihen 10, 49 und 65 hinzugekommen. Die Ausreißer sind hier jedoch nicht so stark wie bei den Reihen 44 und 57.

4.2.2 Ergebnisse der Rastersuche

Als Nächstes werden nun wieder die Pfade des weiteren Verlaufs unter Annahme des Zugrundeliegens der stochastischen Differentialgleichung $\frac{\partial y(x)}{\partial x} = \theta_1(\theta_0 - y(x))^{\theta_2}dx + \sigma\theta_1(\theta_0 - y(x))^{\theta_2}dW(x)$ ermittelt. Dabei ist wie zuvor eingeführt W(x) der Wiener Prozess. Aus diesen Pfaden werden wieder eine Prognose als Median der Pfade und Prognoseintervalle als empirische 0.025- bzw. 0.975-Quantile bestimmt. Um einen Vergleich herzustellen und eine gewisse Übersichtlichkeit zu gewährleisten, werden in den folgenden graphischen Betrachtungen die möglichen Pfade nicht abgebildet, da sie eine eher untergeordnete Rolle spielen.

Für eine erste deskriptive Betrachtung werden zunächst wieder Messreihen genutzt, bei denen Ausreißer ausgemacht werden können. Überschneidungen in der Ausreißerdetektion liegen bei den Reihen 44 und 57 vor. Daher werden diese als nächstes betrachtet. Ebenso wird zunächst die Prognose anhand von Annahmen an die Residualmomente betrachtet. Abbildung 25 zeigt den wahren Verlauf der Messreihe 44. Ebenso sind die Prognoseintervalle und Prognosen bei gegebenen Risslängen von 25 bzw. 35 Millimetern nach der Methode der Residualmomente abgebildet.



Abbildung 25: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode der Residualmomente bei gegebener Risslänge von 25 bzw. 35mm für Messreihe 44

Es fällt auf, dass die Prognose bei einer Risslänge von 25mm den wahren Verlauf vergleichsweise stärker unterschätzt als zuvor. Der Verlauf der Prognose gestaltet sich jedoch ähnlich. Die obere Grenze des Prognoseintervalls stimmt nahezu überein, die untere Grenze verläuft stark unterhalb der Grenze bei gegebener Risslänge von 35mm. Die Richtung des Verlaufs ist allerdings wie auch bei der Prognose ähnlich wie zuvor.

Ein fast übereinstimmender Verlauf der Prognose und der Grenzen der Prognoseintervalle ist auch bei Messreihe 57 zu erkennen (vgl. Abbildung 26).



Abbildung 26: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode der Residualmomente bei gegebener Risslänge von 25 bzw. 35mm für Messreihe 57

Damit ist anzunehmen, dass eine Reduktion der Beobachtungszahlen in diesen beiden Fällen nicht zu einer Verschlechterung der Prognose führt.

In einem nächsten Schritt wird nun Messreihe 47 betrachtet, da es hier bei gegebenem Beobachtungshorizont bis zu einer Risslänge von 35mm zu einer vergleichsweise schlechten Prognose kommt. Abbildung 27 zeigt wiederum den wahren Verlauf, die jeweiligen Prognosen und Prognoseintervalle dieser Zeitreihe.



Abbildung 27: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode der Residualmomente bei gegebener Risslänge von 25 bzw. 35mm für Messreihe 47

Wie zuvor ergibt sich bei beiden Prognosen bzw. bei den Prognoseintervallen ein ähnlicher Verlauf, jedoch überdeckt das Konfidenzband nun den wahren Verlauf der Messreihe. Eventuell ist dies dadurch zu erklären, dass die obere Grenze des Rasters in Abhängigkeit der Startparameter gewählt wird und damit das Raster zufällig verbessert worden ist. Eine andere mögliche Ursache liegt darin, dass bei einer Risslänge von ungefähr 25mm ein abrupter Abfall der Steigung der Zeitreihe zu beobachten ist.

Messreihe 65 liefert Ausreißer in den Startschätzungen bei gegebener Risslänge bis 25mm, jedoch nicht bei gegebener Risslänge bis 35mm. Daher wird diese Zeitreihe als Nächstes betrachtet. Wie zuvor scheinen Prognose und Prognoseintervalle ähnlich zu verlaufen (vgl. Abbildung 28). Auch hier kann scheinbar von einer ähnlich guten Prognose wie bei größerer Beobachtungszahl ausgegangen werden.



Abbildung 28: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode der Residualmomente bei gegebener Risslänge von 25 bzw. 35mm für Messreihe 65

Weiterführend werden wiederum die Prognosen anhand der Methode der Datentiefe betrachtet. Genutzt für eine graphische Betrachtung werden wie zuvor die Messreihen 44, 47, 57 und 65.

Abbildung 29 zeigt den wahren Verlauf der Messreihe 44. Ebenso sind die Prognosen und Prognoseintervalle dargestellt.



Abbildung 29: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode über die Datentiefe bei gegebener Risslänge von 25 bzw. 35mm für Messreihe 44

Wie bereits bei der Methode über die Residualmomente fällt auf, dass sich der Verlauf der Prognose und Prognoseintervalle ähnelt. Durch die Reduktion der Beobachtungspunkte verläuft die Prognose allerdings nicht mehr so nahe dem wahren Verlauf. Die Überdeckung des wahren Verlaufs ist aber weiterhin gewährleistet.

Bei Messreihe 57 ergibt sich mit Blick auf die Prognoseintervalle ein ähnliches Bild (vgl. Abbildung 30). Die Prognose ist wiederum sehr gut, bis zu einer Risslänge von 35mm verläuft die Prognose bei einer reduzierten Beobachtungszahl gar nahe gleich den wahren Beobachtungen.



Abbildung 30: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode über die Datentiefe bei gegebener Risslänge von 25 bzw. 35mm für Messreihe 57

Wie bereits bei der Methode über die Residualmomente beobachtet scheint sich auch die Prognose über die Methode der Datentiefe bei Messreihe 47 zu verbessern (vgl. Abbildung 31). Gründe hierfür sind vermutlich wie zuvor in veränderten Startschätzungen und dem Verlauf der Zeitreihe zu suchen.



Abbildung 31: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode über die Datentiefe bei gegebener Risslänge von 25 bzw. 35mm für Messreihe 47

Mit Messreihe 65 kann ein weiteres Beispiel ausgemacht werden, in dem der wahre Verlauf bei Beobachtungen bis zu einer Risslänge von 35mm nur knapp von den Prognoseintervallen überdeckt wird (vgl. Abbildung 32). Dieses Bild scheint sich wiederum mit Reduktion der Beobachtungszahlen zu verbessern.



Abbildung 32: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode über die Datentiefe bei gegebener Risslänge von 25 bzw. 35mm für Messreihe 65

Insgesamt scheint sich die Güte der Prognose bei Reduktion der Beobachtungszahlen eher zu verbessern und nicht wie eigentlich zu erwarten zu verschlechtern. Um diese empirische Beobachtung statistisch valide zu belegen, werden im Folgenden wiederum die Intervallscores betrachtet.

4.2.3 Scores

Zunächst wird dazu verglichen, in wieweit sich die Intervallscores unter den Messreihen bei Zugrundeliegen von Beobachtungen bis zu einer Risslänge von 25 Millimetern verändern. In Abbildung 33 sind zunächst Boxplots der Intervallscores zu sehen, wenn Annahmen an die Residualmomente zugrunde gelegt werden.



Abbildung 33: Boxplots der Intervallscores von den 68 Messreihen bei Methode der Residualmomente

Es fällt auf, dass sich die Unterschiede unter den Intervallscores der verschiedenen Messreihen im Vergleich zu einer höheren Anzahl Beobachtungen reduziert zu haben scheinen. Die Verteilung der Boxen ist gleichmäßiger. Allerdings muss auch darauf hingewiesen werden, dass die Scores im Allgemeinen mit teils Größen um die 20 einiges höher sind als zuvor. Hier wieß nur die Messreihe 47 Scores in diesem Bereich auf. Allerdings ist zu bemerken, dass aufgrund der geringeren Beobachtungszahl auch ein höherer Prognosehorizont betrachtet wird. Daher macht diese Beobachtung Sinn. Ähnlich wie bei Beobachtungen bis Risslängen von 35mm kann auch hier bemerkt werden, dass Messreihe 44 vergleichsweise gut prognostiziert werden kann. Außerdem fiel auf, dass bei größerer Beobachtungszahl Messreihe 57 am besten vorhergesagt werden kann. Dies kann bei niedrigerer Beobachtungszahl nicht festgestellt werden.

Ein ähnlicher Zusammenhang kann auch bei Annahmen an die Datentiefe festgestellt werden (vgl. Abbildung 34). Während bei einer größeren Beobachtungszahl noch verschiedene Ausreißer in den Intervallscores vorliegen, kann eine solche Feststellung bei Beobachtungen bis 25mm Risslänge nicht gemacht werden. Wie zuvor hat sich auch hier der Wertebereich der Scores vergrößert. Wiederum ist dies über den gestiegenden Prognosehorizont zu erklären.



Abbildung 34: Boxplots der Intervallscores von den 68 Messreihen bei Methode über die Datentiefe

Um einen direkten Vergleich zwischen den Scores der unterschiedlichen Beobachtungshorizonte durchzuführen, erscheint es sinnvoll wie zuvor die durchschnittlichen Scores über alle Messreihen unterteilt nach dem Prognosehorizont zu betrachten. Eine Darstellung dieser durchschnittlichen Scores ist in Abbildung 35 zu finden.



Abbildung 35: Durchschnittliche Intervallscores der Tiefe- und Residualmomente-Schätzungen unterteilt nach Abstand zur letzten Beobachtung

Die zuvor betrachteten Messreihen lassen vermuten, dass sich Güte der Prognose bei geringerer Beobachtungszahl verbessert. Bei Betrachtung der durchschnittlichen Scores fällt auf, dass die Reduktion der Beobachtungszahl bei der Schätzung über Annahmen an die Residualmomente zu einer Verbesserung der Prognose führt. Bei Annahmen an die Datentiefe wird die Prognose beim betrachteten Horizont verschlechtert. Insgesamt ist festzustellen, dass die Prognose über die Datentiefe bei gegebenen Beobachtungen bis 35mm Risslänge zumindest bei geringerem Prognosehorizont am besten abschneidet. Es wundert jedoch, dass die Prognose bei Annahmen an die Residualmomente bei geringerer Beobachtungszahl ab einem gewissen Prognosehorizont die vergleichsweise beste Güte aufzuweisen scheint.

5 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wird versucht das Risswachstum von 2024-T3 Aluminiumprüfkörpern anhand von stochastischen Differentialgleichungen zu modellieren. Dieses Material findet zum Beispiel bei Flugzeugen Verwendung. Eine Prognose des weiteren Verlaufs des Risswachstums ist dazu von Nöten, um auf der einen Seite Kosten für Reparaturen möglichst gering zu halten – es soll nicht früher als nötig repariert bzw. ausgetauscht werden müssen. Auf der anderen Seite muss jedoch auch ein hohes Maß an Sicherheit gewährleistet sein. Als Datengrundlage werden dazu 68 Messreihen von Virkler u. a. 1979 verwendet. Diese Messreihen werden zunächst beschrieben. Es stellt sich heraus, dass bei jeweils 164 Messpunkten zu 68 Messreihen ohne fehlenden Werten von einer guten Datenqualität ausgegangen werden kann. Ebenso kann festgestellt werden, dass das Risswachstum mal glatter, mal weniger glatt verläuft.

Im Anschluss wird auf die genutzten Methoden eingegangen. Das zugrundeliegende Modell, welches sich als stochastische Differentialgleichung darstellt wird aus einem in der Literatur vorgeschlagenen Zusammenhang, der Paris-Erdogan-Gleichung, hergeleitet. Dazu werden zunächst Umformungen dieser Gleichung dargestellt. Anschließend wird auf lineare Modelle eingegangen, welche eine Grundlage für das Box-Tidwell-Verfahren liefern. Dieses Verfahren kann wiederum genutzt werden, um Startwerte für eine numerische Lösung von nichtlinearen Modellen zu generieren. Ein solches nichtlineares Modell bildet den deterministischen Teil der verwendeten stochastischen Differentialgleichung. Die zugrundeliegende stochastische Differentialgleichung kann nicht analytisch gelöst werden, weswegen eine Rastersuche durchgeführt wird. Für diese Rastersuche werden verschiedene Verteilungsannahmen benötigt. Dabei werden in dieser Arbeit zwei mögliche Verfahren unterschieden. Zunächst wird eine Methodik basierend auf den Residualmomenten hergeleitet und im Anschluss eine Methode basierend auf der vereinfachten Datentiefe. Diese sollen im weiteren Verlauf miteinander verglichen werden. Abschließend wird der Intervallscore vorgestellt, welcher ein mögliches Verfahren für den Vergleich der Güte von Prognosen liefert.

Zunächst wird in der Auswertung Bezug auf Prognosen bei gegebener Risslänge bis 35 Millimetern genommen. Es fällt auf, dass bei verschiedenen Messreihen bzgl. der Startschätzungen im Vergleich Ausreißer vorhanden zu sein scheinen. Daher finden diese im weiteren Vorgehen intensivere Betrachtung. Außerdem kann festgestellt werden, dass aus numerischen Gründen auf die Schätzung eines nichtlinearen Modells verzichtet werden kann. Dies verbessert die Schätzungen des zuvor durchgeführten Box-Tidwell-Verfahrens nicht nennenswert.

Mit den Startschätzungen durch das nichtlineare Modell werden im nächsten Schritt die beiden verschiedenen Rastersuchen durchgeführt. Bei Betrachtung verschiedener Messreihen fällt auf, dass im Allgemeinen sowohl die Methode basierend auf den Residualmomenten, als auch die Methode basierend auf der Datentiefe gute Prognosen zu liefern scheinen. Der Intervallscore erhärtet diesen Verdacht mit wenigen Ausnahmen. Ein Vergleich zwischen den Methoden führt zu der Erkenntnis, dass die Methode basierend auf der vereinfachten Datentiefe bessere Prognosen liefert. Außerdem kann festgestellt werden, dass ein Verkleinerung des Rasters die Prognose verbessert, eine Vergrößerung sie jedoch verschlechtert. Da die Größe des Rasters auf den Startparametern aus der nichtlinearen Schätzung beruht, lässt sich vermuten, dass bereits die Startschätzungen recht gute Prognosen liefern könnten.

In einem nächsten Schritt werden Prognosen bei gegebenen Beobachtungen bis zu einer Risslänge von 25 Millimetern in den Vergleich mit einbezogen. Dabei werden wieder die ursprünglichen Vielfachen der Startschätzungen für die Größe des Rasters genutzt. Eine deskriptive Betrachtung verschiedener Prognosen lässt vermuten, dass sich die Prognosegüte kaum zu verändern scheint bei weniger Beobachtungen. Es kann jedoch festgestellt werden, dass sich die Bandbreite der Startschätzungen vergrößert hat. Ebenso kann festgestellt werden, dass die Ausreißer in den Startschätzungen sich leicht verändern. Ein abschließender Vergleich der Methoden anhand ihrer durchschnittlichen Intervallscores in Abhängigkeit von der Entfernung zur letzten Beobachtung liefert das Bild, dass bei verringerter Beobachtungszahl die Methode durch die Residualmomente besser abschneidet. Ebenso kann vermutet werden, dass sich die Methoden bei steigendem Prognosehorizont bei gegebener Risslänge bis 25 Millimetern im Vergleich zu einer gegebenen Risslänge von 35 Millimetern zu verbessern scheinen.

Dies ist eine Thematik, die in einer weiteren Arbeit mehr Betrachtung finden könnte. Außerdem wäre ein Vergleich mit Prognosen, welche über andere Modelle gewonnen werden, sinnvoll, insbesondere auch um zu überprüfen, ob eine solch komplexe Modellierung über stochastische Differentialgleichungen überhaupt notwendig ist. Falls sich dies als wahr herausstellt, könnte in einer weiteren Untersuchung der Wiener Prozess in der hier genutzten stochastischen Differentialgleichung durch andere Prozesse ersetzt werden und geprüft werden, ob dadurch weitere Verbesserungen erreicht werden können.

Literatur

- [Box und Tidwell 1962] Box, G. E. P.; TIDWELL, Paul W.: Transformation of the Independent Variables. In: *Technometrics* 4 (1962), November, Nr. 4, S. 531–550
- [DasGupta 2008] DASGUPTA, Anirban: Asymptotic Theory of Statistics and Probability. Springer, 2008
- [Fahrmeir u. a. 2010] FAHRMEIR, Ludwig ; KÜNSTLER, Rita ; PIGEOT, Iris ; TUTZ, Gerhard: Statistik, der Weg zur Datenanalyse. 7. Springer, 2010
- [Gneiting und Raftery 2007] GNEITING, Tilmann; RAFTERY, Adrian E.: Strictly Proper Scoring Rules, Prediction, and Estimation. In: Journal of the American Statistical Association (2007), S. 359–378
- [Groß 2010] GROSS, Jürgen: Grundlegende Statistik mit R. Vieweg + Teubner, 2010
- [Iacus 2008] IACUS, Stefano M.: Simulation and Inference for Stochastic Differential Equations. With R Examples. Springer, 2008
- [Koya und Goshu 2013] KOYA, Purnachandra R. ; GOSHU, Ayele T.: Generalized Mathematical Model for Biological Growths. In: Open Journal of Modelling and Simulation (2013), S. 42–53
- [Kustosz u. a. 2016] KUSTOSZ, Christoph P. ; MÜLLER, Christine H. ; WENDLER, Martin: Simplified simplicial depth for regression and autoregressive growth processes. In: Journal of Statistical Planning and Inference (2016), Nr. 173, S. 125–146
- [Li u. a. 2001] LI, Baibing ; MARTIN, Elaine B. ; MORRIS, A.Julian: BoxTidwell transformation based partial least squares regression. In: *Computers & Chemical Engineering* 25 (2001), September, S. 1219–1233
- [M.Ahmed 2009] M.AHMED, Hamdy: Euler-Maruyama Numerical solution of some stochastic functional differential equations. In: International Journal of Applied Mathematics and Computation 1 (2009), Nr. 2, S. 67–78. – URL http://www.darbose. in/ojs/index.php/ijamc/article/viewFile/1.2.1/13
- [Ortiz und Kiremidjian 1986] ORTIZ, K. ; KIREMIDJIAN, A.S.: Stochastic Modeling of Fatigue Crack Growth. In: *Engineering Fracture Mechanics* 24 (1986), S. 657–675
- [R Core Team 2015] R CORE TEAM: R: A Language and Environment for Statistical Computing. Vienna, Austria: R Foundation for Statistical Computing (Veranst.), 2015.
 URL https://www.R-project.org/
- [Sachs und Hedderich 2009] SACHS, Lothar ; HEDDERICH, Jürgen: Angewandte Statistik, Methodensammlung mit R. 13. Springer, 2009

- [Schlittgen 2013] SCHLITTGEN, Prof. Dr. R.: Regressions analysen mit R. Oldenbourg Verlag, 2013
- [Virkler u. a. 1979] VIRKLER, D. A.; HILLBERRY, B. M.; GOEL, P. K.: The Statistical Nature of Fatigue Crack Propagation. In: Journal of Engineering Materials and Technology 101 (1979), S. 148–153

A Anhang



Abbildung A.1: Boxplot der Box-Tidwell-Schätzungen bei gegebener Risslänge bis 35mm für den Parameter β_0



Abbildung A.2: Boxplot der Box-Tidwell-Schätzungen bei gegebener Risslänge bis 35mm für den Parameter β_1



Abbildung A.3: Boxplot der Box-Tidwell-Schätzungen bei gegebener Risslänge bis 35mm für den Parameter β_2



Abbildung A.4: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode der Residualmomente bei gegebener Risslänge von 35mm für Messreihe 5


Abbildung A.5: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode der Residualmomente bei gegebener Risslänge von 35mm für Messreihe 22



Abbildung A.6: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode der Residualmomente bei gegebener Risslänge von 35mm für Messreihe 33



Abbildung A.7: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode der Residualmomente bei gegebener Risslänge von 35mm für Messreihe 50



Abbildung A.8: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode über die Datentiefe bei gegebener Risslänge von 35mm für Messreihe 11



Abbildung A.9: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode über die Datentiefe bei gegebener Risslänge von 35mm für Messreihe 14



Abbildung A.10: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode über die Datentiefe bei gegebener Risslänge von 35mm für Messreihe 35



Abbildung A.11: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode über die Datentiefe bei gegebener Risslänge von 35mm für Messreihe 50



Abbildung A.12: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode über die Datentiefe bei gegebener Risslänge von 35mm für Messreihe 11 bei vergrößertem Raster



Abbildung A.13: Wahrer Verlauf und Prognose nach Methode über die Datentiefe bei gegebener Risslänge von 35mm für Messreihe 35 bei vergrößertem Raster



Abbildung A.14: Boxplot der Schätzungen im nichtline
aren Modell bei gegebener Risslänge bis 25mm umgerechnet für die stochastische Differential
gleichung für den Parameter θ_1



Abbildung A.15: Boxplot der Schätzungen im nichtline
aren Modell bei gegebener Risslänge bis 25mm umgerechnet für die stochastische Differential
gleichung für den Parameter θ_0



Abbildung A.16: Boxplot der Schätzungen im nichtline
aren Modell bei gegebener Risslänge bis 25mm umgerechnet für die stoch
astische Differentialgleichung für den Parameter θ_2

Eidesstattliche Versicherung

Name, Vorname

Matr.-Nr.

Ich versichere hiermit an Eides statt, dass ich die vorliegende Bachelorarbeit/Masterarbeit* mit dem Titel

selbstständig und ohne unzulässige fremde Hilfe erbracht habe. Ich habe keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie wörtliche und sinngemäße Zitate kenntlich gemacht. Die Arbeit hat in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen.

Ort, Datum

Unterschrift

*Nichtzutreffendes bitte streichen

Belehrung:

Wer vorsätzlich gegen eine die Täuschung über Prüfungsleistungen betreffende Regelung einer Hochschulprüfungsordnung verstößt, handelt ordnungswidrig. Die Ordnungswidrigkeit kann mit einer Geldbuße von bis zu 50.000,00 € geahndet werden. Zuständige Verwaltungsbehörde für die Verfolgung und Ahndung von Ordnungswidrigkeiten ist der Kanzler/die Kanzlerin der Technischen Universität Dortmund. Im Falle eines mehrfachen oder sonstigen schwerwiegenden Täuschungsversuches kann der Prüfling zudem exmatrikuliert werden. (§ 63 Abs. 5 Hochschulgesetz - HG -)

Die Abgabe einer falschen Versicherung an Eides statt wird mit Freiheitsstrafe bis zu 3 Jahren oder mit Geldstrafe bestraft.

Die Technische Universität Dortmund wird gfls. elektronische Vergleichswerkzeuge (wie z.B. die Software "turnitin") zur Überprüfung von Ordnungswidrigkeiten in Prüfungsverfahren nutzen.

Die oben stehende Belehrung habe ich zur Kenntnis genommen: