

Abschlussarbeit zur Erlangung des Grades Master of Science
in Statistik an der Technischen Universität Dortmund

**Vergleich verschiedener nichtlinearer Modelle für die
Prognose von Risswachstum**

Frieder Wolff

6. Mai 2015

Prof. Dr. Christine Müller

Prof. Dr. Katja Ickstadt

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Problemstellung	4
2.1	Datenmaterial	4
2.2	Zielsetzungen	6
3	Statistische Methoden	7
3.1	Modelle auf Basis der Paris-Erdogan Gleichung	7
3.2	Allgemeiner Modellierungsansatz	10
3.3	Prognoseintervalle	18
3.3.1	Lineare Modelle	18
3.3.2	Nichtlineare Modelle	22
3.3.3	Partielle Ableitungen	26
3.4	Interval Score	29
4	Statistische Auswertung	29
4.1	Modellanpassung	29
4.1.1	Anpassung an die unveränderten Daten	31
4.1.2	Anpassung von transformierten Funktionen	37
4.1.3	Anpassung an transformierte Rissdaten	40
4.2	Modelldiagnose (Residualanalyse)	43
4.3	Prognosen	57
5	Zusammenfassung	67
	Literaturverzeichnis	70

1 Einleitung

In dieser Arbeit sollen verschiedene Modelle zur Prognose von Risswachstum verglichen werden. Mit den einzelnen Modellen soll vorhergesagt werden, wie schnell sich bereits beobachtete Risse fortpflanzen. Zuverlässige Prognosen von Risswachstum sind in mehreren Bereichen der Technometrie gefragt. So müssen beispielsweise Risse in Brücken oder Gebäuden überwacht werden. Aussagekräftige Vorhersagen für den weiteren Verlauf dieser Risse können bei der Entscheidung helfen, wann Reparaturen notwendig sind.

Der in dieser Arbeit verwendete Datensatz ist von Virkler et. al (1979) erstellt. Er beinhaltet Daten zu 68 Rissen in 2024-T3 Aluminiumprüfkörpern. Die Prüfkörper werden zur Datengewinnung zyklischer Belastung ausgesetzt. Dies geschieht unter experimentellen Bedingungen. Eine detaillierte Beschreibung des Datenmaterials erfolgt in Kapitel 2.1.

Vor der Berechnung von Prognosen, wird zunächst versucht die vorliegenden Daten möglichst gut zu modellieren. Die dabei verwendeten Modelle werden in der statistischen Methodik vorgestellt. So finden sich in Kapitel 3.1 drei Modelle, die aus der Paris-Erdogan Gleichung abgeleitet werden. In Kapitel 3.2 wird ein allgemeiner Modellierungsansatz mit vier verschiedenen Wachstumsfunktionen beschrieben. Zum einen werden die Modelle an die unveränderten Rissdaten angepasst (Kap. 4.1.1) und zum anderen an transformierte Rissdaten (Kap. 4.1.3). Eine weitere Idee besteht darin, die Wachstumsfunktionen zu transformieren, um die Risse auf diese Weise möglicherweise besser zu beschreiben. Für diejenigen Modelle, mit denen die jeweiligen Rissdaten vergleichsweise gut beschrieben werden können, werden anschließend Prognoseintervalle für zukünftige Beobachtungen berechnet. Dafür wird nur ein Teil der Risse als bekannt vorausgesetzt, der übrige Teil dient dazu die Prognosegüte zu bestimmen. Abschließend werden die Prognosen der verschiedenen Modelle miteinander verglichen. Die Ergebnisse der statistischen Auswertung werden in Kapitel 5 zusammengefasst.

2 Problemstellung

Im Folgenden wird zunächst das Datenmaterial beschrieben, das in diesem Bericht verwendet wird. Anschließend werden Zielsetzungen formuliert, auf deren Basis die statistische Auswertung erfolgt.

2.1 Datenmaterial

Dieser Arbeit liegt ein von Virkler et. al. (1979) vorgestellter Datensatz zugrunde. Zur Datengewinnung führen Virkler und Kollegen eine Reihe von 68 Versuchen unter identischen Bedingungen durch. In jedem Versuch wird das Zentrum eines 558.8 Millimeter langen, 152.4 Millimeter breiten und 2.54 Millimeter dicken 2024-T3 Aluminiumprüfkörpers zyklischer Belastung ausgesetzt. Die zur Rissinitiierung vergleichsweise hoch eingestellte Schwingungsbreite der Belastung wird mit zunehmender Risslänge reduziert und verbleibt im eigentlichen Beobachtungszeitraum konstant. Sobald der Riss eine Länge (l) von neun Millimetern erreichte, wurde erfasst, wie schnell er sich ab diesem Zeitpunkt fortsetzt. Anstatt die Zeit (t) direkt zu messen, zeichneten Virkler und Kollegen auf, wie viele Belastungszyklen auf den Prüfkörper einwirkten. Im Folgenden entspricht eine Zeiteinheit dabei 10^4 Belastungszyklen. Der Abstand Δ_l zwischen den vorgegeben Messzeitpunkten hängt von der Risslänge ab (Tab. 1).

Tabelle 1: Abstände Δ_l zwischen den Messzeitpunkten in Abhängigkeit von der Risslänge l .

Risslänge	Δ_l
$l \in [9 \text{ mm}, 36.2 \text{ mm}]$	0.2 mm
$l \in (36.2 \text{ mm}, 44.2 \text{ mm}]$	0.4 mm
$l \in (44.2 \text{ mm}, 49.8 \text{ mm}]$	0.8 mm

Überwacht wird die Risslänge dabei durch ein Stereo Zoom Mikroskop (150fache Vergrößerung), installiert auf einem digitalen Verschiebesystem mit einer Rasterung von 0.001 Millimetern.

In einem Testverfahren ermitteln Virkler und Kollegen einen mittleren Messfehler des Systems von gerade einmal 0.00141 Millimetern, fehlende Werte liegen nicht vor. Es kann also von einer hohen Qualität der Daten ausgegangen werden.

Durch die zuvor beschriebene Festlegung der Messzeitpunkte, werden bei jedem der 68 Versuche 164 Datenpunkte zur Beschreibung des Risswachstums erhoben (Abb. 1).

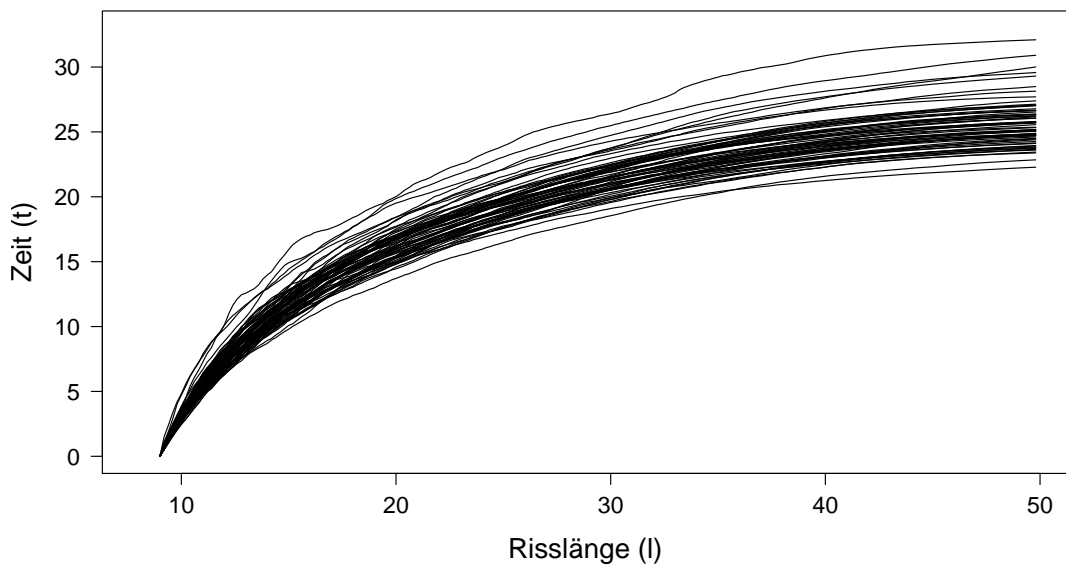


Abbildung 1: Ergebnisse der 68 Versuche von Virkler et. al (1979).

Es fällt auf, dass sich die Risse mit zunehmender Länge insgesamt schneller fortpflanzen. Allerdings nimmt die Wachstumsgeschwindigkeit bei vielen Versuchen nicht monoton zu, sondern steigt und sinkt mitunter sprunghaft. Virkler und Kollegen führen dieses Phänomen auf kleine Bereiche mit abweichenden Eigenschaften bezüglich der Rissentwicklung in dem ansonsten homogenen Material der Prüfkörper zurück. Des Weiteren ist festzustellen, dass sich die Entwicklung der Risse zu Beginn vergleichsweise ähnelt, während im weiteren Verlauf immer deutlichere Unterschiede zwischen den einzelnen Versuchen erkennbar sind.

2.2 Zielsetzungen

Das erste Ziel dieser Arbeit besteht darin, die vorliegenden Rissdaten möglichst genau zu modellieren. Jeder der 68 Risse soll dabei einzeln angepasst werden. Bei den Modellen mit nichtlinearen Wachstumsfunktionen muss zur Minimierung der Fehlerquadratsumme auf numerische Verfahren zurückgegriffen werden. Diese Verfahren benötigen Startwerte für die jeweils zu schätzenden Parameter, die bei jeder Wachstumsfunktion geeignet gewählt werden müssen. Anhand der erreichten Fehlerquadratsummen und gegebenenfalls des AIC wird beurteilt, welche Modelle sich der tatsächlichen Rissentwicklung gut annähern.

Als nächstes soll geprüft werden, ob Funktionen mit einem Wendepunkt beim Rissbeginn, zu geringeren Abweichungen führen. Deshalb werden, sofern möglich, Transformationen von den klassischen Wachstumsfunktionen bestimmt, die diese Bedingung erfüllen.

Des Weiteren soll untersucht werden, ob sich die Risse möglicherweise besser beschreiben lassen, wenn sie statt bei neun Millimetern bereits nahe bei Null beginnen. Also wird 8,8 von den Risslängen subtrahiert, bevor die Modelle erneut angepasst werden. Warum die Risse besser nicht direkt bei Null beginnen, wird in der statistischen Auswertung thematisiert. Wie zuvor müssen geeignete Startwerte für die numerischen Optimierungsverfahren gefunden werden.

Für jedes der bis dahin berechneten Modelle soll eine Residualanalyse durchgeführt werden, um Rückschlüsse auf die Verteilung der jeweiligen Fehler ziehen zu können. Dabei kommen in dieser Arbeit grafische Methoden zum Einsatz.

Abschließend sollen für alle Modelle, die gute Anpassungswerte liefern, Prognoseintervalle bestimmt werden. Bei jedem Riss werden dabei nur Beobachtungen bis zu einer vorgegebenen Risslänge verwendet, um damit das weitere Risswachstum vorherzusagen. Anhand der tatsächlich beobachteten Werte kann die Güte der Prognosen für die einzelnen Modelle bestimmt und verglichen werden.

3 Statistische Methoden

In diesem Kapitel werden die statistischen Methoden erläutert, die in dieser Arbeit verwendet werden. Zu Beginn werden die Ansätze beschrieben, mit denen das Risswachstum modelliert wird. Anschließend werden, für die anhand der zuvor beschriebenen Modelle vorhergesagten zukünftigen Beobachtungen, Prognoseintervalle hergeleitet. Außerdem wird mit dem Interval-Score ein Verfahren erläutert, mit dem die Prognosegüte der Intervalle gemessen werden kann.

3.1 Modelle auf Basis der Paris-Erdogan Gleichung

Laut Ortiz und Kiremidjian (1986) bildet die Paris-Erdogan Gleichung (1) einen möglichen Ansatz zur Erstellung von Modellen für Risswachstum.

$$\frac{\partial l}{\partial t} = \theta_1 \cdot l^{\theta_2} \quad (1)$$

Dabei ist l die Risslänge zum Zeitpunkt t . Die Lösung dieser Differentialgleichung hängen von θ_2 ab und sind in Behauptung 1.1 zusammengefasst (vgl. Müller, 2013).

Behauptung 1.1

Die Paris-Erdogan Gleichung (1) lässt sich in Abhängigkeit von θ_2 lösen wie folgt:

$$(i) \quad \theta_2 = 1 \Rightarrow l = l(t) = \theta_0 \cdot \exp(\theta_1 \cdot t)$$

mit $\theta_0 > 0$

$$(ii) \quad \theta_2 < 1 \Rightarrow l = l(t) = \alpha_1 \cdot (t - \alpha_0)^{\alpha_2}$$

$$\text{mit } \alpha_0 < t, \quad \alpha_1 = (\theta_1 \cdot (1 - \theta_2))^{\frac{1}{1-\theta_2}}, \quad \alpha_2 = \frac{1}{1 - \theta_2} > 0$$

$$(iii) \quad \theta_2 > 1 \Rightarrow l = l(t) = \alpha_1 \cdot (\alpha_0 - t)^{-\alpha_2}$$

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

Beweis:

$$\begin{aligned}
\text{(i)} \quad \frac{\partial l}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} [\theta_0 \cdot \exp(\theta_1 \cdot t)] = \theta_0 \cdot \exp(\theta_1 \cdot t) \cdot \theta_1 = \theta_1 \cdot l \\
\text{(ii)} \quad \frac{\partial l}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} [\alpha_1 \cdot (t - \alpha_0)^{\alpha_2}] = \frac{\partial}{\partial t} \left[(\theta_1 \cdot (1 - \theta_2))^{\frac{1}{1-\theta_2}} \cdot (t - \alpha_0)^{\frac{1}{1-\theta_2}} \right] \\
&= (\theta_1 \cdot (1 - \theta_2))^{\frac{1}{1-\theta_2}} \cdot (1 - \theta_2)^{-1} \cdot (t - \alpha_0)^{\frac{1}{1-\theta_2} - 1} \\
&= \theta_1^{\frac{1}{1-\theta_2}} \cdot (1 - \theta_2)^{\frac{1}{1-\theta_2}} \cdot (1 - \theta_2)^{-\frac{1-\theta_2}{1-\theta_2}} \cdot (t - \alpha_0)^{\frac{1}{1-\theta_2} - \frac{1-\theta_2}{1-\theta_2}} \\
&= \theta_1^{\frac{1}{1-\theta_2}} \cdot (1 - \theta_2)^{\frac{1}{1-\theta_2}} \cdot (1 - \theta_2)^{-\frac{1-\theta_2}{1-\theta_2}} \cdot (t - \alpha_0)^{\frac{1}{1-\theta_2} - \frac{1-\theta_2}{1-\theta_2}} \\
&= \theta_1^{\frac{1-\theta_2}{1-\theta_2}} \cdot \theta_1^{\frac{\theta_2}{1-\theta_2}} \cdot (1 - \theta_2)^{\frac{\theta_2}{1-\theta_2}} \cdot (t - \alpha_0)^{\frac{\theta_2}{1-\theta_2}} \\
&= \theta_1 \cdot \left((\theta_1 \cdot (1 - \theta_2))^{\frac{1}{1-\theta_2}} \cdot (t - \alpha_0)^{\frac{1}{1-\theta_2}} \right)^{\theta_2} \\
&= \theta_1 \cdot (\alpha_1 \cdot (t - \alpha_0)^{\alpha_2})^{\theta_2} = \theta_1 \cdot l^{\theta_2} \\
\text{(iii)} \quad \frac{\partial l}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} [\alpha_1 \cdot (\alpha_0 - t)^{-\alpha_2}] = \frac{\partial}{\partial t} \left[(\theta_1 \cdot (\theta_2 - 1))^{\frac{-1}{\theta_2-1}} \cdot (\alpha_0 - t)^{-\frac{1}{\theta_2-1}} \right] \\
&= (\theta_1 \cdot (\theta_2 - 1))^{\frac{-1}{\theta_2-1}} \cdot -(\theta_2 - 1)^{-1} \cdot (\alpha_0 - t)^{-\frac{1}{\theta_2-1} - 1} \cdot (-1) \\
&= \theta_1^{\frac{-1}{\theta_2-1}} \cdot (\theta_2 - 1)^{\frac{-1}{\theta_2-1}} \cdot (\theta_2 - 1)^{-\frac{\theta_2-1}{\theta_2-1}} \cdot (\alpha_0 - t)^{-\frac{1}{\theta_2-1} - \frac{\theta_2-1}{\theta_2-1}} \\
&= \theta_1^{\frac{\theta_2-1}{\theta_2-1}} \cdot \theta_1^{\frac{-\theta_2}{\theta_2-1}} \cdot (\theta_2 - 1)^{-\frac{\theta_2}{\theta_2-1}} \cdot (\alpha_0 - t)^{-\frac{\theta_2}{\theta_2-1}} \\
&= \theta_1 \cdot \left((\theta_1 \cdot (\theta_2 - 1))^{\frac{-1}{\theta_2-1}} \cdot (\alpha_0 - t)^{-\frac{1}{\theta_2-1}} \right)^{\theta_2} \\
&= \theta_1 \cdot (\alpha_1 \cdot (\alpha_0 - t)^{-\alpha_2})^{\theta_2} = \theta_1 \cdot l^{\theta_2} \quad \square
\end{aligned}$$

Da im weiteren Verlauf dieser Arbeit die benötigte Zeit in Abhängigkeit von der Risslänge modelliert wird, müssen die Umkehrfunktionen der in Behauptung 1.1 vorgestellten Lösungen der Paris-Erdogan Gleichung bestimmt werden. Die resultierenden Umkehrfunktionen werden in Korollar 1.2 auf der folgenden Seite angegeben (vgl. Müller, 2013).

Korollar 1.2

Die Inversen der Lösungen $l(t)$ aus Behauptung 1.1 lauten wie folgt:

$$(i) \quad \theta_2 = 1 \Rightarrow t = t(l) = \beta_0 + \beta_1 \cdot \ln(l)$$

$$\text{mit } \beta_0 = -\frac{1}{\theta_1} \cdot \ln(\theta_0), \beta_1 = \frac{1}{\theta_1}$$

$$(ii) \quad \theta_2 < 1 \Rightarrow t = t(l) = \beta_0 + \beta_1 \cdot l^{\beta_2}$$

$$\text{mit } \beta_0 = \alpha_0 < t, \beta_1 = \left(\frac{1}{\alpha_1}\right)^{\frac{1}{\alpha_2}} > 0, \beta_2 = \frac{1}{\alpha_2} > 0$$

$$(iii) \quad \theta_2 > 1 \Rightarrow t = t(l) = \beta_0 + \beta_1 \cdot l^{\beta_2}$$

$$\text{mit } \beta_0 = \alpha_0 > t, \beta_1 = -\left(\frac{1}{\alpha_1}\right)^{\frac{1}{-\alpha_2}} < 0, \beta_2 = -\frac{1}{\alpha_2} < 0$$

Beweis:

$$(i) \quad l = l(t) = \theta_0 \cdot \exp(\theta_1 \cdot t) \Leftrightarrow \ln(l) = \ln(\theta_0) + \theta_1 \cdot t$$

$$\Leftrightarrow t = \frac{1}{\theta_1} \cdot \ln(l) - \frac{1}{\theta_1} \cdot \ln(\theta_0) \Leftrightarrow t = t(l) = \beta_0 + \beta_1 \cdot \ln(l)$$

$$(ii) \quad l = l(t) = \alpha_1 \cdot (t - \alpha_0)^{\alpha_2} \Leftrightarrow \left(\frac{l}{\alpha_1}\right)^{\frac{1}{\alpha_2}} = t - \alpha_0$$

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

$$(iii) \quad l = l(t) = \alpha_1 \cdot (\alpha_0 - t)^{-\alpha_2} \Leftrightarrow \left(\frac{l}{\alpha_1}\right)^{\frac{1}{-\alpha_2}} = \alpha_0 - t$$

$$\Leftrightarrow t = \alpha_0 - \left(\frac{l}{\alpha_1}\right)^{\frac{1}{-\alpha_2}} \Leftrightarrow t = t(l) = \beta_0 + \beta_1 \cdot l^{\beta_2} \quad \square$$

Aus der Paris-Erdogan Gleichung können somit mehrere Modelle hergeleitet werden, um für Risse mit den Längen l_n , $n = 1, \dots, N$ die jeweils erforderliche Zeit T_n zu bestimmen.

$$T_n = \beta_0 + \beta_1 \cdot \ln(l_n) + E_n \quad (2)$$

$$T_n = \beta_0 + \beta_1 \cdot l_n^{\beta_2} + E_n \quad (3)$$

$$T_n = \beta_0 + \beta_1 \cdot l_n + \beta_2 \cdot l_n \cdot \ln(x_n) + E_n \quad (4)$$

Das lineare Modell (2) wird im Folgenden als einfaches logistisches Modell bezeichnet. Modell (3) wird nichtlineares Modell genannt und Modell (4) stellt eine linearisierte Form von Modell (3) dar (vgl. Müller, 2013).

3.2 Allgemeiner Modellierungsansatz

Unabhängig von der Paris-Erdogan Gleichung können die erforderlichen Zeiten T_n für Risse mit den Längen l_n , $n = 1, \dots, N$ durch einen allgemeinen Ansatz mit einer stetigen Wachstumsfunktion f modelliert werden.

$$T_n = f(l_n, \phi) + E_n$$

In dieser Arbeit werden für f die folgenden nichtlinearen Funktionen verwendet.

$$f(l, \phi) = a \cdot \exp(-b \cdot \exp(-c \cdot l)) , \phi = (a, b, c) \quad (5)$$

$$f(l, \phi) = \frac{a}{1 + b \cdot \exp(-c \cdot l)} , \phi = (a, b, c) \quad (6)$$

$$f(l, \phi) = \frac{a}{(1 + b \cdot \exp(-c \cdot l))^d} , \phi = (a, b, c, d) \quad (7)$$

$$f(l, \phi) = a - b \cdot \exp(-c \cdot l^d) , \phi = (a, b, c, d) \quad (8)$$

Diese klassischen Wachstumsfunktionen werden Gompertz- (5), Logistic- (6), Richards- (7) und Weibull-Funktion (8) genannt (vgl. Kenney & Keeping, 1939; Weisstein, 2015; Richards, 1959; Hartung, 1999). Im Folgenden werden Transformationen der Wachstumsfunktionen (5) - (7) betrachtet.

Durch die Transformation wird dafür gesorgt, dass die Funktionen an einer bestimmten Stelle einen Wendepunkt aufweisen. Ob sich das Risswachstum dadurch besser beschreiben lässt, wird in der statistischen Auswertung untersucht.

Behauptung 2.5

Bei der transformierten Gompertz-Funktion

$$f(l, \phi) = a \cdot \exp(-\exp(-b \cdot (l - l_0))) - a \cdot \exp(-1), \quad \phi = (a, b), \quad a \neq 0, \quad b \neq 0 \quad (9)$$

liegt in dem Punkt $(l_0 / 0)$ eine Wendestelle vor.

Beweis:

Zuerst werden die Ableitungen von $f(l, \phi)$ nach l bestimmt.

$$\begin{aligned} f(l, \phi) &= a \cdot \exp(-\exp(-b \cdot (l - l_0))) - a \cdot \exp(-1), \quad \phi = (a, b) \\ \frac{\partial f}{\partial l} &= a \cdot \frac{\partial}{\partial l} [\exp(-\exp(-b \cdot (l - l_0)))] \\ &= a \cdot \exp(-\exp(-b \cdot (l - l_0))) \cdot \frac{\partial}{\partial l} [-\exp(-b \cdot (l - l_0))] \\ &= a \cdot \exp(-\exp(-b \cdot (l - l_0))) \cdot (-\exp(-b \cdot (l - l_0))) \cdot (-b) \\ &= a \cdot b \cdot \exp(-\exp(-b \cdot (l - l_0)) - b \cdot (l - l_0)) \\ \frac{\partial f}{\partial l^2} &= a \cdot b \cdot \frac{\partial}{\partial l} [\exp(-\exp(-b \cdot (l - l_0)) - b \cdot (l - l_0))] \\ &= a \cdot b \cdot \exp(-\exp(-b \cdot (l - l_0)) - b \cdot (l - l_0)) \\ &\quad \cdot \frac{\partial}{\partial l} [-\exp(-b \cdot (l - l_0)) - b \cdot (l - l_0)] \\ &= a \cdot b \cdot \exp(-\exp(-b \cdot (l - l_0)) - b \cdot (l - l_0)) \cdot (-\exp(-b \cdot (l - l_0)) \cdot (-b) - b) \\ &= -a \cdot b^2 \cdot \exp(-\exp(-b \cdot (l - l_0)) - b \cdot (l - l_0)) \cdot (1 - \exp(-b \cdot (l - l_0))) \\ \frac{\partial f}{\partial l^3} &= a \cdot b^2 \cdot \frac{\partial f}{\partial l} [\exp(-\exp(-b \cdot (l - l_0)) - b \cdot (l - l_0)) \cdot (1 - \exp(-b \cdot (l - l_0)))] \\ &= -a \cdot b^2 \cdot \left(\frac{\partial f}{\partial l} [\exp(-\exp(-b \cdot (l - l_0)) - b \cdot (l - l_0))] \cdot (1 - \exp(-b \cdot (l - l_0))) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial f}{\partial l} [1 - \exp(-b \cdot (l - l_0))] \cdot \exp(-\exp(-b \cdot (l - l_0)) - b \cdot (l - l_0)) \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -a \cdot b^2 \cdot \left(\exp(-\exp(-b \cdot (l - l_0)) - b \cdot (l - l_0)) \right. \\
&\quad \cdot \frac{\partial f}{\partial l} \left[-\exp(-b \cdot (l - l_0)) - b \cdot (l - l_0) \right] \cdot (1 - \exp(-b \cdot (l - l_0))) \\
&\quad \left. - \exp(-b \cdot (l - l_0)) \cdot (-b) \cdot \exp(-\exp(-b \cdot (l - l_0)) - b \cdot (l - l_0)) \right) \\
&= -a \cdot b^2 \cdot \left(\exp(-\exp(-b \cdot (l - l_0)) - b \cdot (l - l_0)) \right. \\
&\quad \cdot (-\exp(-b \cdot (l - l_0)) \cdot (-b) - b) \cdot (1 - \exp(-b \cdot (l - l_0))) \\
&\quad \left. - \exp(-b \cdot (l - l_0)) \cdot (-b) \cdot \exp(-\exp(-b \cdot (l - l_0)) - b \cdot (l - l_0)) \right) \\
&= a \cdot b^3 \cdot \left(\exp(-\exp(-b \cdot (l - l_0)) - b \cdot (l - l_0)) \cdot (1 - \exp(-b \cdot (l - l_0)))^2 \right. \\
&\quad \left. - \exp(-\exp(-b \cdot (l - l_0)) - 2 \cdot b \cdot (l - l_0)) \right)
\end{aligned}$$

notwendige Bedingung: $\frac{\partial f}{\partial l^2} \Big|_{l=l_0} = 0$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f}{\partial l^2} \Big|_{l=l_0} &= -a \cdot b^2 \cdot \exp(-\exp(-b \cdot (l_0 - l_0)) - b \cdot (l_0 - l_0)) \cdot (1 - \exp(-b \cdot (l_0 - l_0))) \\
&= -a \cdot b^2 \cdot \exp(-1) \cdot (1 - 1) = 0
\end{aligned}$$

hinreichende Bedingung: $\frac{\partial f}{\partial l^2} \Big|_{l=l_0} = 0$ und $\frac{\partial f}{\partial l^3} \Big|_{l=l_0} \neq 0$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f}{\partial l^3} \Big|_{l=l_0} &= a \cdot b^3 \cdot \left(\exp(-\exp(-b \cdot (l_0 - l_0)) - b \cdot (l_0 - l_0)) \cdot (1 - \exp(-b \cdot (l_0 - l_0)))^2 \right. \\
&\quad \left. - \exp(-\exp(-b \cdot (l_0 - l_0)) - 2 \cdot b \cdot (l_0 - l_0)) \right) \\
&= a \cdot b^3 \cdot \left(\exp(-1) \cdot (1 - 1)^2 - \exp(-1) \right) = -a \cdot b^3 \cdot \exp(-1) \neq 0
\end{aligned}$$

Somit ist l_0 eine Wendestelle. Bestimme abschließend $f(l_0)$:

$$\begin{aligned}
f(l_0) &= a \cdot \exp(-\exp(-b \cdot (l_0 - l_0))) - a \cdot \exp(-1) \\
&= a \cdot \exp(-1) - a \cdot \exp(-1) = 0 \quad \square
\end{aligned}$$

Behauptung 2.6

Bei der transformierten Logistic-Funktion

$$f(l, \phi) = \frac{a}{1 + \exp(-b \cdot (l - l_0))} - \frac{a}{2}, \quad \phi = (a, b), \quad a \neq 0, \quad b \neq 0 \quad (10)$$

liegt in dem Punkt $(l_0 / 0)$ eine Wendestelle vor.

Beweis:

Zuerst werden die Ableitungen von $f(l, \phi)$ nach l bestimmt.

$$\begin{aligned} f(l, \phi) &= \frac{a}{1 + \exp(-b \cdot (l - l_0))} - \frac{a}{2}, \quad \phi = (a, b) \\ \frac{\partial f}{\partial l} &= a \cdot \frac{\partial}{\partial l} \left[\frac{1}{1 + \exp(-b \cdot (l - l_0))} \right] = a \cdot \frac{-\frac{\partial}{\partial l} [\exp(-b \cdot (l - l_0))]}{(1 + \exp(-b \cdot (l - l_0)))^2} \\ &= a \cdot b \cdot \frac{\exp(-b \cdot (l - l_0))}{(1 + \exp(-b \cdot (l - l_0)))^2} \\ \frac{\partial f}{\partial l^2} &= a \cdot b \cdot \frac{\partial}{\partial l} \left[\frac{\exp(-b \cdot (l - l_0))}{(1 + \exp(-b \cdot (l - l_0)))^2} \right] \\ &= a \cdot b \cdot \left[\frac{\frac{\partial}{\partial l} [\exp(-b \cdot (l - l_0))] \cdot (1 + \exp(-b \cdot (l - l_0)))^2}{(1 + \exp(-b \cdot (l - l_0)))^4} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\frac{\partial}{\partial l} [(1 + \exp(-b \cdot (l - l_0)))^2] \cdot \exp(-b \cdot (l - l_0))}{(1 + \exp(-b \cdot (l - l_0)))^4} \right] \\ &= a \cdot b \cdot \left[\frac{\exp(-b \cdot (l - l_0)) \cdot (-b) \cdot (1 + \exp(-b \cdot (l - l_0)))^2}{(1 + \exp(-b \cdot (l - l_0)))^4} \right. \\ &\quad \left. - \frac{2 \cdot (1 + \exp(-b \cdot (l - l_0))) \cdot (\exp(-b \cdot (l - l_0)))^2 \cdot (-b)}{(1 + \exp(-b \cdot (l - l_0)))^4} \right] \\ &= a \cdot b^2 \cdot \left[\frac{2 \cdot (\exp(-b \cdot (l - l_0)))^2 - \exp(-b \cdot (l - l_0)) \cdot (1 + \exp(-b \cdot (l - l_0)))}{(1 + \exp(-b \cdot (l - l_0)))^3} \right] \\ &= a \cdot b^2 \cdot \left[\frac{(\exp(-b \cdot (l - l_0)))^2 - \exp(-b \cdot (l - l_0))}{(1 + \exp(-b \cdot (l - l_0)))^3} \right] \\ \frac{\partial f}{\partial l^3} &= a \cdot b^2 \cdot \frac{\partial f}{\partial l} \left[\frac{(\exp(-b \cdot (l - l_0)))^2 - \exp(-b \cdot (l - l_0))}{(1 + \exp(-b \cdot (l - l_0)))^3} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= a \cdot b^2 \cdot \left[\frac{\frac{\partial f}{\partial l} \left[(\exp(-b \cdot (l - l_0)))^2 - \exp(-b \cdot (l - l_0)) \right] \cdot (1 + \exp(-b \cdot (l - l_0)))^3}{(1 + \exp(-b \cdot (l - l_0)))^6} \right. \\
&\quad \left. - \frac{\frac{\partial f}{\partial l} \left[(1 + \exp(-b \cdot (l - l_0)))^3 \right] \cdot \left((\exp(-b \cdot (l - l_0)))^2 - \exp(-b \cdot (l - l_0)) \right)}{(1 + \exp(-b \cdot (l - l_0)))^6} \right] \\
&= a \cdot b^2 \cdot \left[\frac{2 \cdot (\exp(-b \cdot (l - l_0)))^2 \cdot (-b) - \exp(-b \cdot (l - l_0)) \cdot (-b)}{(1 + \exp(-b \cdot (l - l_0)))^3} \right. \\
&\quad \left. - \frac{3 \cdot \exp(-b \cdot (l - l_0)) \cdot (-b) \cdot \left((\exp(-b \cdot (l - l_0)))^2 - \exp(-b \cdot (l - l_0)) \right)}{(1 + \exp(-b \cdot (l - l_0)))^4} \right] \\
&= -a \cdot b^3 \cdot \left[\frac{2 \cdot (\exp(-b \cdot (l - l_0)))^2 - \exp(-b \cdot (l - l_0))}{(1 + \exp(-b \cdot (l - l_0)))^3} \right. \\
&\quad \left. - \frac{3 \cdot \exp(-b \cdot (l - l_0)) \cdot \left((\exp(-b \cdot (l - l_0)))^2 - \exp(-b \cdot (l - l_0)) \right)}{(1 + \exp(-b \cdot (l - l_0)))^4} \right]
\end{aligned}$$

notwendige Bedingung: $\frac{\partial f}{\partial l^2} \Big|_{l=l_0} = 0$

$$\frac{\partial f}{\partial l^2} \Big|_{l=l_0} = a \cdot b^2 \cdot \left[\frac{(\exp(-b \cdot (l_0 - l_0)))^2 - \exp(-b \cdot (l_0 - l_0))}{(1 + \exp(-b \cdot (l_0 - l_0)))^3} \right] = a \cdot b^2 \cdot \frac{1 - 1}{2^3} = 0$$

hinreichende Bedingung: $\frac{\partial f}{\partial l^2} \Big|_{l=l_0} = 0$ und $\frac{\partial f}{\partial l^3} \Big|_{l=l_0} \neq 0$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f}{\partial l^3} \Big|_{l_0=l_0} &= -a \cdot b^3 \cdot \left[\frac{2 \cdot (\exp(-b \cdot (l_0 - l_0)))^2 - \exp(-b \cdot (l_0 - l_0))}{(1 + \exp(-b \cdot (l_0 - l_0)))^3} \right. \\
&\quad \left. - \frac{3 \cdot \exp(-b \cdot (l_0 - l_0)) \cdot \left((\exp(-b \cdot (l_0 - l_0)))^2 - \exp(-b \cdot (l_0 - l_0)) \right)}{(1 + \exp(-b \cdot (l_0 - l_0)))^4} \right] \\
&= -a \cdot b^3 \cdot \left[\frac{2 - 1}{2^3} - \frac{3 \cdot (1 - 1)}{2^4} \right] = \frac{-a \cdot b^3}{8} \neq 0
\end{aligned}$$

Somit ist l_0 eine Wendestelle. Bestimme abschließend $f(l_0)$:

$$f(l_0) = \frac{a}{1 + \exp(-b \cdot (l_0 - l_0))} - \frac{a}{2} = \frac{a}{1 + 1} - \frac{a}{2} = 0 \quad \square$$

Behauptung 2.7

Bei der transformierten Richards-Funktion

$$f(l, \phi) = \frac{a}{\left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l - l_0))}{c}\right)^c} - \frac{a}{\left(1 + \frac{1}{c}\right)^c}, \quad \phi = (a, b, c), \quad a \neq 0, b \neq 0, c \notin \{-1, 0\} \quad (11)$$

liegt in dem Punkt $(l_0 / 0)$ eine Wendestelle vor.

Beweis:

Zuerst werden die Ableitungen von $f(l, \phi)$ nach l bestimmt.

$$\begin{aligned} f(l, \phi) &= \frac{a}{\left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l - l_0))}{c}\right)^c} - \frac{a}{\left(1 + \frac{1}{c}\right)^c}, \quad \phi = (a, b, c) \\ \frac{\partial f}{\partial l} &= a \cdot \frac{\partial}{\partial l} \left[\left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l - l_0))}{c}\right)^{-c} \right] \\ &= a \cdot (-c) \cdot \left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l - l_0))}{c}\right)^{-c-1} \cdot \frac{\exp(-b \cdot (l - l_0))}{c} \cdot (-b) \\ &= a \cdot b \cdot \exp(-b \cdot (l - l_0)) \cdot \left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l - l_0))}{c}\right)^{-c-1} \\ \frac{\partial f}{\partial l^2} &= a \cdot b \cdot \frac{\partial}{\partial l} \left[\exp(-b \cdot (l - l_0)) \cdot \left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l - l_0))}{c}\right)^{-c-1} \right] \\ &= a \cdot b \cdot \left(\frac{\partial}{\partial l} [\exp(-b \cdot (l - l_0))] \cdot \left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l - l_0))}{c}\right)^{-c-1} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial}{\partial l} \left[\left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l - l_0))}{c}\right)^{-c-1} \right] \cdot \exp(-b \cdot (l - l_0)) \right) \\ &= a \cdot b \cdot \left(\exp(-b \cdot (l - l_0)) \cdot (-b) \cdot \left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l - l_0))}{c}\right)^{-c-1} \right. \\ &\quad \left. + (-c - 1) \cdot \left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l - l_0))}{c}\right)^{-c-2} \cdot \exp(-b \cdot (l - l_0))^2 \cdot \frac{-b}{c} \right) \\ &= -a \cdot b^2 \cdot \left(\exp(-b \cdot (l - l_0)) \cdot \left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l - l_0))}{c}\right)^{-c-1} \right. \\ &\quad \left. - \frac{c + 1}{c} \cdot \left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l - l_0))}{c}\right)^{-c-2} \cdot \exp(-b \cdot (l - l_0))^2 \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f}{\partial \beta} &= -a \cdot b^2 \cdot \frac{\partial f}{\partial l} \left[\exp(-b \cdot (l - l_0)) \cdot \left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l - l_0))}{c} \right)^{-c-1} \right. \\
&\quad \left. - \frac{c+1}{c} \cdot \left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l - l_0))}{c} \right)^{-c-2} \cdot \exp(-b \cdot (l - l_0))^2 \right] \\
&= -a \cdot b^2 \cdot \left(\frac{\partial f}{\partial l} [\exp(-b \cdot (l - l_0))] \cdot \left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l - l_0))}{c} \right)^{-c-1} \right. \\
&\quad + \frac{\partial f}{\partial l} \left[\left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l - l_0))}{c} \right)^{-c-1} \right] \cdot \exp(-b \cdot (l - l_0)) \\
&\quad - \frac{c+1}{c} \cdot \frac{\partial f}{\partial l} \left[\left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l - l_0))}{c} \right)^{-c-2} \right] \cdot \exp(-b \cdot (l - l_0))^2 \\
&\quad \left. - \frac{c+1}{c} \cdot \frac{\partial f}{\partial l} [\exp(-b \cdot (l - l_0))^2] \cdot \left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l - l_0))}{c} \right)^{-c-2} \right) \\
&= -a \cdot b^2 \cdot \left(\exp(-b \cdot (l - l_0)) \cdot (-b) \cdot \left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l - l_0))}{c} \right)^{-c-1} \right. \\
&\quad - \frac{c+1}{c} \cdot \left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l - l_0))}{c} \right)^{-c-2} \cdot \exp(-b \cdot (l - l_0))^2 \cdot (-b) \\
&\quad + \frac{c+1}{c} \cdot \frac{c+2}{c} \cdot \left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l - l_0))}{c} \right)^{-c-3} \cdot \exp(-b \cdot (l - l_0))^3 \cdot (-b) \\
&\quad \left. - \frac{c+1}{c} \cdot 2 \cdot \exp(-b \cdot (l - l_0))^2 \cdot (-b) \cdot \left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l - l_0))}{c} \right)^{-c-2} \right) \\
&= a \cdot b^3 \cdot \left(\exp(-b \cdot (l - l_0)) \cdot \left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l - l_0))}{c} \right)^{-c-1} \right. \\
&\quad + \frac{c+1}{c} \cdot \frac{c+2}{c} \cdot \left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l - l_0))}{c} \right)^{-c-3} \cdot \exp(-b \cdot (l - l_0))^3 \\
&\quad \left. - 3 \cdot \frac{c+1}{c} \cdot \exp(-b \cdot (l - l_0))^2 \cdot \left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l - l_0))}{c} \right)^{-c-2} \right)
\end{aligned}$$

notwendige Bedingung: $\frac{\partial f}{\partial l^2} \Big|_{l=l_0} = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial l^2} \Big|_{l=l_0} &= -a \cdot b^2 \cdot \left(\exp(-b \cdot (l_0 - l_0)) \cdot \left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l - l_0))}{c} \right)^{-c-1} \right. \\ &\quad \left. - \frac{c+1}{c} \cdot \left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l_0 - l_0))}{c} \right)^{-c-2} \cdot \exp(-b \cdot (l_0 - l_0))^2 \right) \\ &= -a \cdot b^2 \cdot \left(\left(\frac{c+1}{c} \right)^{-c-1} - \frac{c+1}{c} \cdot \left(\frac{c+1}{c} \right)^{-c-2} \right) = 0 \end{aligned}$$

hinreichende Bedingung: $\frac{\partial f}{\partial l^2} \Big|_{l=l_0} = 0$ und $\frac{\partial f}{\partial l^3} \Big|_{l=l_0} \neq 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial l^3} \Big|_{l=l_0} &= a \cdot b^3 \cdot \left(\exp(-b \cdot (l_0 - l_0)) \cdot \left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l_0 - l_0))}{c} \right)^{-c-1} \right. \\ &\quad \left. + \frac{c+1}{c} \cdot \frac{c+2}{c} \cdot \left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l_0 - l_0))}{c} \right)^{-c-3} \cdot \exp(-b \cdot (l_0 - l_0))^3 \right. \\ &\quad \left. - 3 \cdot \frac{c+1}{c} \cdot \exp(-b \cdot (l - l_0))^2 \cdot \left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l_0 - l_0))}{c} \right)^{-c-2} \right) \\ &= a \cdot b^3 \cdot \left(\left(\frac{c+1}{c} \right)^{-c-1} + \frac{c+1}{c} \cdot \frac{c+2}{c} \cdot \left(\frac{c+1}{c} \right)^{-c-3} - 3 \cdot \frac{c+1}{c} \cdot \left(\frac{c+1}{c} \right)^{-c-2} \right) \\ &= a \cdot b^3 \cdot \left(\frac{c+2}{c} \cdot \left(\frac{c+1}{c} \right)^{-c-2} - 2 \cdot \left(\frac{c+1}{c} \right)^{-c-1} \right) \neq 0 \end{aligned}$$

Somit ist l_0 eine Wendestelle. Bestimme abschließend $f(l_0)$:

$$f(l_0) = \frac{a}{\left(1 + \frac{\exp(-b \cdot (l_0 - l_0))}{c} \right)^c} - \frac{a}{\left(1 + \frac{1}{c} \right)^c} = 0 \quad \square$$

3.3 Prognoseintervalle

Ein Ziel dieser Arbeit ist die Prognose von Risswachstum. Ausgehend von Rissen der Länge l_N soll vorhergesagt werden, wie schnell sich diese Risse fortsetzen. In Definition 3.1 wird beschrieben welche Voraussetzung ein (approximatives) Prognoseintervall für zukünftige Beobachtungen erfüllen muss.

Definition 3.1

Damit $\hat{P}I_F(T)$ ein Prognoseintervall zum Niveau $1 - \alpha$, auf Basis der Beobachtungen $T = (T_1, \dots, T_N)$, für die zukünftige Beobachtung T_F ($F > N$) darstellt, muss gelten (vgl. Hartung, 1999):

$$P_\beta(T_F \in \hat{P}I_F(T)) \geq 1 - \alpha \quad \forall \beta \in \mathbb{R}^q \quad (12)$$

Gilt die Bedingung (12) nur für $N \rightarrow \infty$, ist $\hat{P}I_F(T)$ ein approximatives Prognoseintervall für T_F zum Niveau $1 - \alpha$.

3.3.1 Lineare Modelle

Wie zuvor erläutert, können verschiedene Modelle verwendet werden um das Risswachstum zu beschreiben. Betrachtet werden zunächst lineare Modelle der Form

$$T_n = z_n^T \beta + E_n, \quad z_n, \beta \in \mathbb{R}^q \quad (13)$$

bei denen die Residuen unabhängig identisch normalverteilt sind:

$$E_1, \dots, E_N, E_F \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2) \text{ u.i.v.}, \quad \sigma^2 > 0 \quad (14)$$

In Tabelle 2 auf der folgenden Seite ist aufgelistet, wie die in dieser Arbeit verwendeten linearen Modelle durch die Wahl von z_n bestimmt werden.

Tabelle 2: Wahl von $z_n \in \mathbb{R}^q$ in (13) um Modell (2) oder (4) zu bilden.

Modell	q	z_n
(2)	2	$(1, \ln(l_n))^\top$
(4)	3	$(1, l_n, l_n \cdot \ln(l_n))^\top$

Bemerkungen 3.2

- Ein erwartungstreuer KQ-Schätzer für $\beta \in \mathbb{R}^q$ im linearen Modell (13) ist durch

$$\hat{\beta}(T) = (Z^\top Z)^{-1} Z^\top T \quad (15)$$

gegeben, wobei $Z = (z_1, \dots, z_N)^\top$ und $T = (T_1, \dots, T_N)^\top$ (vgl. Hartung, 1999).

- Ein erwartungstreuer KQ-Schätzer für $\sigma^2 > 0$ im linearen Modell (13) ist durch

$$\hat{\sigma}^2(T) = \frac{1}{N - q} \cdot \sum_{n=1}^N (T_n - z_n^\top \hat{\beta})^2 = \frac{1}{N - q} \cdot \sum_{n=1}^N \hat{E}_n^2 \quad (16)$$

gegeben (vgl. Fahrmeier et al., 2004).

- Die Varianz des Prognosefehlers im linearen Modell (13) ist durch

$$\text{Var}(T_F - z_F^\top \hat{\beta}(T)) = \sigma^2 \cdot (1 + z_F^\top (Z^\top Z)^{-1} z_F) \quad (17)$$

gegeben, wobei ($F > N$) (vgl. Fahrmeier et al., 2004)

Um Prognoseintervalle für zukünftige Beobachtungen beim linearen Modell (13) zu bestimmen wird die t-Verteilung benötigt. Die Definition folgt auf der nächsten Seite.

Definition 3.3

Seien $X \sim \mathcal{N}(0, 1)$, $Z \sim \chi^2(N)$ sowie X und Y unabhängig. Dann heißt die Verteilung der Zufallsvariable

$$Z = \frac{X}{\sqrt{\frac{Y}{N}}} \quad (18)$$

t-Verteilung mit n Freiheitsgraden, kurz $Z \sim t(N)$ (vgl. Fahrmeier et al., 2004).

Lemma 3.4 (ohne Beweis)

Unter den Voraussetzungen des linearen Modells (13) gilt (vgl. Caspary & Wichmann, 1994):

$$\frac{1}{\sigma^2} \cdot \sum_{n=1}^N \hat{E}_n^2 \sim \chi^2(N - q). \quad (19)$$

Korollar 3.5

Die Zufallsvariable

$$Z = \frac{T_F - z_F^\top \hat{\beta}(T)}{\sqrt{1 + z_F^\top (Z^\top Z)^{-1} z_F}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\hat{\sigma}(T)^2}} \quad (20)$$

ist t-verteilt mit $N - q$ Freiheitsgraden.

Beweis:

$$\begin{aligned} Z &= \frac{T_F - z_F^\top \hat{\beta}(T)}{\sqrt{1 + z_F^\top (Z^\top Z)^{-1} z_F}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\hat{\sigma}(T)^2}} \\ &= \frac{T_F - z_F^\top \hat{\beta}(T)}{\sqrt{\sigma^2 \cdot (1 + z_F^\top (Z^\top Z)^{-1} z_F)}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{N-q} \cdot \frac{1}{\sigma^2} \sum_{n=1}^N \hat{E}_n^2}} \end{aligned}$$

Mit (15), (17) und (19) gilt:

$$\frac{T_F - z_F^\top \hat{\beta}(T)}{\sqrt{\sigma^2 \cdot (1 + z_F^\top (Z^\top Z)^{-1} z_F)}} \sim \mathcal{N}(0, 1)$$

und

$$\frac{1}{\sigma^2} \cdot \sum_{n=1}^N \hat{E}_n^2 \sim \chi^2(N - q).$$

T_1, \dots, T_N, T_F sind nach Voraussetzung stochastisch unabhängig, also gilt mit den obigen Verteilungsannahmen laut Definition 3.3 (18): $Z \sim t(N - q)$. \square

Behauptung 3.6

Im linearen Modell (13) ist

$$\hat{P}I_F(T) = \left[z_F^\top \hat{\beta}(T) \pm \sqrt{\hat{\sigma}(T)^2 \cdot (1 + z_F^\top (Z^\top Z)^{-1} z_F)} \cdot t_{N-2; 1-\alpha/2} \right] \quad (21)$$

ein Prognoseintervall zum Niveau $1 - \alpha$ für die zukünftige Beobachtung T_F ($F > N$) (vgl. Müller, 2013).

Beweis:

Weise die Bedingung (12) aus Definition 3.1 nach:

$$\begin{aligned} T_F \in \hat{P}I_F(T) &= \left[z_F^\top \hat{\beta}(T) \pm \sqrt{\hat{\sigma}(T)^2 \cdot (1 + z_F^\top (Z^\top Z)^{-1} z_F)} \cdot t_{N-2; 1-\alpha/2} \right] \\ &\Leftrightarrow |T_F - z_F^\top \hat{\beta}(T)| \leq \sqrt{\hat{\sigma}(T)^2 \cdot (1 + z_F^\top (Z^\top Z)^{-1} z_F)} \cdot t_{N-2; 1-\alpha/2} \\ &\Leftrightarrow \frac{|T_F - z_F^\top \hat{\beta}(T)|}{\sqrt{\hat{\sigma}(T)^2 \cdot (1 + z_F^\top (Z^\top Z)^{-1} z_F)}} \leq t_{N-2; 1-\alpha/2} \end{aligned}$$

Da die t-Verteilung symmetrisch ist folgt mit Korollar 3.5 (20):

$$P_\beta(T_F \in \hat{P}I_F(T)) \geq 1 - \alpha \quad \forall \beta \in \mathbb{R}^q \quad \square$$

3.3.2 Nichtlineare Modelle

Die Herleitung von Prognoseintervallen bei nichtlinearen Modellen basiert auf den, von Jennrich (1969) formulierten, asymptotischen Eigenschaften nichtlinearer KQ-Schätzer. Zunächst werden die von Jennrich getroffenen Annahmen aufgelistet.

- (a) Eine Folge von realisierten Beobachtungen y_t hat den Aufbau

$$y_t = f_t(\theta_0) + e_t, \quad t = 1, 2, 3, \dots$$

wobei die bekannten f_t auf einer kompakten Teilmenge Θ eines euklidischen Raumes stetig sind und die Residuen e_t unabhängig identisch verteilt sind mit Erwartungswert Null und endlicher Varianz $\sigma^2 > 0$.

- (b) Das Skalarprodukt von $f = (f_t)$ mit sich selbst existiert und $Q(\phi) = |f(\phi) - f(\phi_0)|^2$ hat ein eindeutiges Minimum bei $\theta = \theta_0$.

Die folgende Annahme bezieht sich auf die Ableitungen

$$f'_{ii}(\theta) = \frac{\partial}{\partial \theta_i} f_t(\theta) \quad \text{und} \quad f''_{ij}(\theta) = \frac{\partial^2}{\partial \theta_i \partial \theta_j} f_t(\theta).$$

- (c) Für $i, j = 1, \dots, q$ gilt, dass $f'_i = (f'_{ii})$ und $f''_{ij} = (f''_{ij})$ existieren und auf Θ stetig sind. Des Weiteren existieren alle Skalarprodukte $g * h$ mit $g, h = f, f'_i, f''_{ij}$.
- (d) Der wahre Parametervektor θ_0 ist ein innerer Punkt von Θ . Für jedes $\theta \in \Theta$ sei

$$a_{nij}(\theta) = n^{-1} \cdot \sum_{t=1}^n f'_{ii}(\theta)^\top f'_{ij}(\theta), \quad \mathbf{a}_n(\theta) = (a_{nij}(\theta)),$$

$$a_{ij}(\theta) = \lim_{n \rightarrow \infty} a_{nij}(\theta), \quad \mathbf{a}(\theta) = (a_{ij}(\theta)),$$

wobei die Matrix $\mathbf{a}(\theta)$ invertierbar ist.

Behauptung 3.7 (ohne Beweis)

Sei $(\hat{\theta}_n)$ eine Folge von KQ-Schätzern. Unter den Annahmen (a) und (b) sind $\hat{\theta}_n$ und

$$\hat{\sigma}^2 = Q_n(\hat{\theta}_n) = n^{-1} \sum_{i=1}^n (y_i - f_i(\hat{\theta}_n))^2 \quad (22)$$

konsistente Schätzer für θ_0 beziehungsweise σ^2 (vgl. Jennrich, 1969).

Behauptung 3.8 (ohne Beweis)

Sei $(\hat{\theta}_n)$ eine Folge von KQ-Schätzern. Unter den Annahmen (a) bis (d) gilt

$$\sqrt{n} \cdot (\hat{\theta}_n - \theta_0) \xrightarrow{d} \mathcal{N}(0, \sigma^2 \cdot \mathbf{a}(\theta)^{-1}). \quad (23)$$

Außerdem ist mit $\mathbf{a}_n(\hat{\theta}_n)$ ein konsistenter Schätzer für $\mathbf{a}(\theta_0)$ gegeben (vgl. Jennrich, 1969).

Bei der Herleitung eines approximativen Prognoseintervalls bei nichtlinearen Modellen werden die multivariate Delta-Methode (3.9) und das multivariate Slutsky-Theorem (3.10) benötigt.

Behauptung 3.9 (ohne Beweis)

Sei $g : \mathbb{R}^q \rightarrow \mathbb{R}$ eine Funktion mit stetigen ersten partiellen Ableitungen und Gradienten $g'(\theta)$. Dann gilt (vgl. Schervish, 1995):

$$\begin{aligned} \sqrt{n} \cdot (T_n - \theta) &\xrightarrow{d} \mathcal{N}(0, \Sigma) \\ \Rightarrow \sqrt{n} \cdot (g(T_n) - g(\theta)) &\xrightarrow{d} \mathcal{N}(0, g'(\theta)^\top \Sigma g'(\theta)). \end{aligned}$$

Behauptung 3.10 (ohne Beweis)

Wenn

$$(T_1^{(n)}, \dots, T_k^{(n)}) \xrightarrow{d} (T_1, \dots, T_k)$$

und die Zufallsvariablen $A_i^{(n)}$ und $B_i^{(n)}$ ($i = 1, \dots, k$) in Wahrscheinlichkeit gegen die Konstanten a_i und b_i konvergieren, gilt (vgl. Lehmann, 1999):

$$(A_1^{(n)} + B_1^{(n)} \cdot T_1^{(n)}, \dots, A_k^{(n)} + B_k^{(n)} \cdot T_k^{(n)}) \xrightarrow{d} (a_1 + b_1 \cdot T_1, \dots, a_k + b_k \cdot T_k)$$

Die in dieser Arbeit verwendeten nichtlinearen Modelle haben die Form:

$$T_n = f_n(\phi) + E_n = f(l_n, \phi) + E_n, \quad n = 1, \dots, N, F. \quad (24)$$

Bemerkungen 3.11

In der Notation von Modell (24) lassen sich $\hat{\sigma}^2$ (22) und $\mathbf{a}_N(\hat{\phi}_N)$ aus (3.8) schreiben als:

$$\hat{\sigma}^2 = Q_N(\hat{\phi}_N) = N^{-1} \sum_{n=1}^N (T_n - f(l_n, \hat{\phi}_N))^2 = N^{-1} \sum_{n=1}^N \hat{E}_n^2, \quad (25)$$

mit KQ-Schätzer $\hat{\phi}_N$ und

$$\mathbf{a}_N(\hat{\phi}_N) = N^{-1} \cdot \dot{F}(\hat{\phi}_N) \dot{F}(\hat{\phi}_N)^\top, \quad (26)$$

mit $\dot{F}(\hat{\phi}_N) = (f'(l_1, \hat{\phi}_N), \dots, f'(l_N, \hat{\phi}_N))$, $f'(l, \hat{\phi}_N) = \left. \frac{\partial}{\partial \phi} f(l, \phi) \right|_{\phi=\hat{\phi}_N}$.

Behauptung 3.12

Sei $\hat{\phi}_N$ ein KQ-Schätzer. Wenn das nichtlineare Modell (24) die Annahmen (a) - (d) erfüllt, ist

$$\hat{P}I_F = \left[f(l_F, \hat{\phi}_N) \pm \sqrt{\hat{\sigma}^2 \left(1 + \dot{f}(l_F, \hat{\phi}_N)^\top \left(\dot{F}(\hat{\phi}_N) \dot{F}(\hat{\phi}_N)^\top \right)^{-1} \dot{f}(l_F, \hat{\phi}_N) \right)} q_{N(0,1), 1-\frac{\alpha}{2}} \right] \quad (27)$$

ein approximatives Prognoseintervall zum Niveau $1 - \alpha$ für die zukünftige Beobachtung T_F (vgl. Müller, 2013).

Beweis:

Weise die Bedingung (12) aus Definition 3.1 nach:

Vorausgesetzt das Modell (24) erfüllt die Annahmen (a) - (d) und $\hat{\phi}_N$ ist ein KQ-Schätzer für den wahren Parameter ϕ_0 , dann lässt sich mit Behauptung 3.8 folgern, dass

$$\sqrt{N} \cdot (\hat{\phi}_N - \phi_0) \xrightarrow{d} \mathcal{N}(0, \sigma^2 \cdot \mathbf{a}(\phi_0)^{-1}), \quad (28)$$

mit $\mathbf{a}(\phi)$ wie in (d). Aus Behauptung 3.7 (22) geht hervor, dass $\mathbf{a}_N(\phi_0)$ durch $\mathbf{a}_N(\hat{\phi})$ konsistent geschätzt wird. Mit dem Slutsky-Theorem (3.10) lässt sich aus (28) also folgern, dass

$$\sqrt{N} \cdot (\hat{\phi}_N - \phi_0) \xrightarrow{d} \mathcal{N}(0, \sigma^2 \cdot \mathbf{a}_N(\hat{\phi})^{-1}) \stackrel{(26)}{=} \mathcal{N}(0, \sigma^2 \cdot (N^{-1} \cdot \dot{F}(\hat{\phi}) \dot{F}(\hat{\phi})^\top)^{-1}) \quad (29)$$

$$\Rightarrow (\hat{\phi}_N - \phi_0) \xrightarrow{d} \mathcal{N}(0, \sigma^2 \cdot (\dot{F}(\hat{\phi}) \dot{F}(\hat{\phi})^\top)^{-1}) \quad (30)$$

Betrachte nun die Differenz zwischen der nichtlinearen Prognose und der zukünftigen Beobachtung:

$$f(l_F, \hat{\phi}_N) - T_F = f(l_F, \hat{\phi}_N) - f(l_F, \phi_0) - E_F \quad (31)$$

Nach Voraussetzung erfüllt f die Bedingungen um die Delta-Methode (3.9) anzuwenden, also folgt aus (30):

$$(f(l_F, \hat{\phi}_N) - f(l_F, \phi_0)) \xrightarrow{d} \mathcal{N}(0, \sigma^2 \cdot \dot{f}(l_n, \hat{\phi}_N)^\top (\dot{F}(\hat{\phi}) \dot{F}(\hat{\phi})^\top)^{-1} \dot{f}(l_n, \hat{\phi}_N)) \quad (32)$$

Dabei ist $\dot{f}(l_n, \hat{\phi}_N) = \frac{\partial}{\partial \phi} f(l, \phi)|_{\phi=\hat{\phi}_N}$ wie in (26).

Da E_F nach Voraussetzung unabhängig von der obigen Verteilung (32) verteilt ist, mit Erwartungswert Null und Varianz $\sigma^2 > 0$, gilt für die Differenz (31):

$$(f(l_F, \hat{\phi}_N) - T_F) \xrightarrow{d} \mathcal{N}(0, \sigma^2 \cdot \dot{f}(l_n, \hat{\phi}_N)^\top (\dot{F}(\hat{\phi}) \dot{F}(\hat{\phi})^\top)^{-1} \dot{f}(l_n, \hat{\phi}_N) + \sigma^2) \quad (33)$$

Nach Behauptung 3.7 wird σ^2 durch $\hat{\sigma}^2$ (25) konsistent geschätzt. Mit dem Slutzy-Theorem (3.10) folgt aus (32):

$$(f(l_F, \hat{\phi}_N) - T_F) \xrightarrow{d} \mathcal{N}(0, \hat{\sigma}^2 \cdot \dot{f}(l_n, \hat{\phi}_N)^\top (\dot{F}(\hat{\phi}) \dot{F}(\hat{\phi})^\top)^{-1} \dot{f}(l_n, \hat{\phi}_N) + \hat{\sigma}^2) \quad (34)$$

$$\Rightarrow \frac{(f(l_F, \hat{\phi}_N) - T_F)}{\sqrt{\hat{\sigma}^2 \cdot (1 + \dot{f}(l_n, \hat{\phi}_N)^\top (\dot{F}(\hat{\phi}) \dot{F}(\hat{\phi})^\top)^{-1} \dot{f}(l_n, \hat{\phi}_N))}} \xrightarrow{d} \mathcal{N}(0, 1) \quad (35)$$

Demnach gilt approximativ:

$$P_\phi(T_F \in \hat{P}I_F(T)) \geq 1 - \alpha \quad \forall \phi \in \mathbb{R}^q \quad \square$$

3.3.3 Partielle Ableitungen

Wie in dem Kapitel zuvor beschrieben, werden die partiellen Ableitungen der nicht-linearen Funktionen benötigt um Prognoseintervalle berechnen zu können. In Kapitel 4.3 werden Prognosen auf Basis des nichtlinearen Modells (3) sowie des allgemeinen Modellierungsansatz mit der Richards- und Weibullfunktion erstellt. Die folgenden Behauptungen fassen jeweils die partiellen Ableitungen erster Ordnung dieser Funktionen zusammen.

Behauptung 3.13

Die partiellen Ableitungen der Wachstumsfunktion $f(l, \beta)$ im nichtlinearen Modell (3) lauten:

$$\frac{\partial f}{\partial \beta_0} = 1 \quad , \quad \frac{\partial f}{\partial \beta_1} = l^{\beta_2} \quad , \quad \frac{\partial f}{\partial \beta_2} = \beta_1 \cdot \beta_2 \cdot \ln(l)$$

Beweis:

$$\begin{aligned}
 f(l, \beta) &= \beta_0 + \beta_1 \cdot l^{\beta_2} \\
 \frac{\partial f}{\partial \beta_0} &= 1 \\
 \frac{\partial f}{\partial \beta_1} &= l^{\beta_2} \\
 \frac{\partial f}{\partial \beta_2} &= \beta_1 \cdot \frac{\partial}{\partial \beta_2} [l^{\beta_2}] = \beta_1 \cdot \beta_2 \cdot \ln(l) \quad \square
 \end{aligned}$$

Behauptung 3.14

Die partiellen Ableitungen der Richards-Funktion (7) lauten:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial f}{\partial a} &= \frac{1}{(1 + b \cdot \exp(-c \cdot l))^d} \\
 \frac{\partial f}{\partial b} &= a \cdot d \cdot \frac{-\exp(-c \cdot l)}{(1 + b \cdot \exp(-c \cdot l))^{d+1}} \\
 \frac{\partial f}{\partial c} &= a \cdot b \cdot d \cdot \frac{l \cdot \exp(-c \cdot l)}{(1 + b \cdot \exp(-c \cdot l))^{d+1}} \\
 \frac{\partial f}{\partial d} &= a \cdot \frac{-\ln(1 + b \cdot \exp(-c \cdot l))}{(1 + b \cdot \exp(-c \cdot l))^d}
 \end{aligned}$$

Beweis:

$$\begin{aligned}
 f(l, \phi) &= \frac{a}{(1 + b \cdot \exp(-c \cdot l))^d}, \quad \phi = (a, b, c, d) \\
 \frac{\partial f}{\partial a} &= \frac{1}{(1 + b \cdot \exp(-c \cdot l))^d} \\
 \frac{\partial f}{\partial b} &= a \cdot \frac{\partial}{\partial b} \left[\frac{1}{(1 + b \cdot \exp(-c \cdot l))^d} \right] = a \cdot \frac{-\frac{\partial}{\partial b} [(1 + b \cdot \exp(-c \cdot l))^d]}{(1 + b \cdot \exp(-c \cdot l))^{2 \cdot d}} \\
 &= a \cdot \frac{-d \cdot \exp(-c \cdot l)^{d-1} \cdot \exp(-c \cdot l)}{(1 + b \cdot \exp(-c \cdot l))^{2 \cdot d}} = a \cdot d \cdot \frac{-\exp(-c \cdot l)}{(1 + b \cdot \exp(-c \cdot l))^{d+1}} \\
 \frac{\partial f}{\partial c} &= a \cdot \frac{\partial}{\partial c} \left[\frac{1}{(1 + b \cdot \exp(-c \cdot l))^d} \right] = a \cdot \frac{-\frac{\partial}{\partial c} [(1 + b \cdot \exp(-c \cdot l))^d]}{(1 + b \cdot \exp(-c \cdot l))^{2 \cdot d}}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= a \cdot \frac{-d \cdot (1 + b \cdot \exp(-c \cdot l))^{d-1} \cdot b \cdot \exp(-c \cdot l) \cdot (-l)}{(1 + b \cdot \exp(-c \cdot l))^{2 \cdot d}} \\
&= a \cdot b \cdot d \cdot \frac{l \cdot \exp(-c \cdot l)}{(1 + b \cdot \exp(-c \cdot l))^{d+1}} \\
\frac{\partial f}{\partial d} &= a \cdot \frac{\partial}{\partial d} \left[\frac{1}{(1 + b \cdot \exp(-c \cdot l))^d} \right] = a \cdot \frac{-\frac{\partial}{\partial d} [(1 + b \cdot \exp(-c \cdot l))^d]}{(1 + b \cdot \exp(-c \cdot l))^{2 \cdot d}} \\
&= a \cdot \frac{-\ln(1 + b \cdot \exp(-c \cdot l)) \cdot (1 + b \cdot \exp(-c \cdot l))^d}{(1 + b \cdot \exp(-c \cdot l))^{2 \cdot d}} \\
&= a \cdot \frac{-\ln(1 + b \cdot \exp(-c \cdot l))}{(1 + b \cdot \exp(-c \cdot l))^d} \quad \square
\end{aligned}$$

Behauptung 3.14

Die partiellen Ableitungen der Weibull-Funktion (8) lauten:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f}{\partial a} &= 1 \quad , \quad \frac{\partial f}{\partial b} = -\exp(-c \cdot l^d) \\
\frac{\partial f}{\partial c} &= -b \cdot \exp(-c \cdot l^d) \cdot (-l^d) = b \cdot l^d \cdot \exp(-c \cdot l^d) \\
\frac{\partial f}{\partial d} &= b \cdot c \cdot l^d \cdot \ln(t) \cdot \exp(-c \cdot l^d)
\end{aligned}$$

Beweis:

$$f(l, \phi) = a - b \cdot \exp(-c \cdot l^d), \quad \phi = (a, b, c, d)$$

$$\frac{\partial f}{\partial a} = 1$$

$$\frac{\partial f}{\partial b} = -\exp(-c \cdot l^d)$$

$$\frac{\partial f}{\partial c} = -b \cdot \frac{\partial}{\partial c} [\exp(-c \cdot l^d)] = -b \cdot \exp(-c \cdot l^d) \cdot (-l^d) = b \cdot l^d \cdot \exp(-c \cdot l^d)$$

$$\frac{\partial f}{\partial d} = -b \cdot \frac{\partial}{\partial d} [\exp(-c \cdot l^d)] = -b \cdot \exp(-c \cdot l^d) \cdot (-c) \cdot \ln(t) \cdot l^d$$

$$= b \cdot c \cdot l^d \cdot \ln(t) \cdot \exp(-c \cdot l^d) \quad \square$$

3.4 Interval Score

Der von Gneiting und Raftery (2007) entwickelte Interval Score stellt ein Instrument dar, mit dem die Güte von Prognoseintervallen quantifiziert werden kann, wenn die tatsächlich realisierte Beobachtung t bekannt ist. Der Interval Score S_{α}^{int} (12) wird bei klassischen zentrierten Prognoseintervallen zum Niveau $1 - \alpha$ mit unterer Grenze u und oberer Grenze o genutzt.

$$S_{\alpha}^{\text{int}}(u, o, t) = (o - u) + \frac{2}{\alpha}(l - t) \cdot \mathcal{I}(t < u) + \frac{2}{\alpha}(t - o) \cdot \mathcal{I}(t > o) \quad (36)$$

Demnach setzt sich der Score aus der Intervallbreite und einem Strafterm zusammen, der addiert wird, falls die realisierte Beobachtung t außerhalb des Prognoseintervalls befindet. Je geringer der Interval Score, desto höher ist die Güte des Prognoseintervalls.

4 Statistische Auswertung

In diesem Kapitel erfolgt die statistische Auswertung des vorliegenden Datenmaterials. Alle in der Auswertung durchgeführten statistischen Verfahren werden mit dem Softwareprogramm R der Version 3.0.3 berechnet (vgl. R Development Core Team, 2014). In Kapitel 4.1 wird zunächst versucht die vorliegenden Rissdaten mit Hilfe verschiedener Modelle möglichst gut zu beschreiben. Für die Modelle, mit denen vergleichsweise gute Anpassungen gelingen, wird im zweiten Unterkapitel untersucht, inwieweit die zukünftige Rissentwicklung mit ihnen jeweils prognostiziert werden kann.

4.1 Modellanpassung

Im Folgenden werden verschiedene Modelle an die von Virkler et al. 1979 erhobenen Rissdaten angepasst und anschließend miteinander verglichen. Der Datensatz umfasst 68 Versuchsreihen mit jeweils 164 Datenpunkten (vgl. Abbildung 1, S. 5). In Kapitel 2.1 wird eine detaillierte Beschreibung der durchgeführten Versuche geliefert.

Zunächst werden noch einige Kennzahlen des vorliegenden Datenmaterials genannt. So vergehen im Durchschnitt 25,716 Zeiteinheiten, bis die Risse die maximal vorgegebene Länge von 49.8 mm erreichten. Der am schnellsten wachsende Riss erreicht diese Länge bereits nach 22,279 Zeiteinheiten, während der am langsamsten wachsende Riss dafür 23,100 Zeiteinheiten benötigt. In Abbildung 2 sind die Varianzen über alle 68 Versuche für jede der 164 vorgegebenen Risslängen dargestellt.

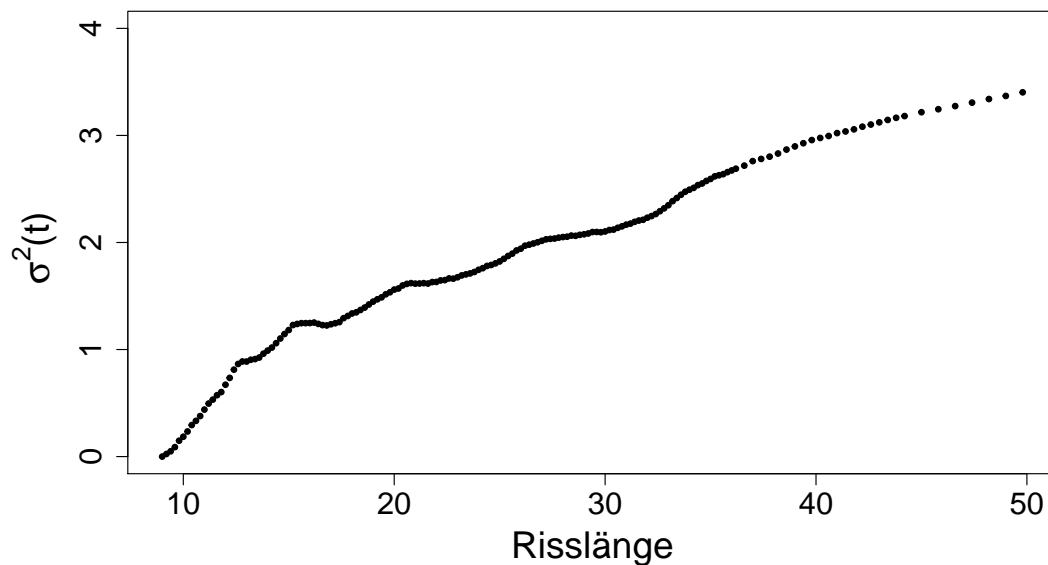


Abbildung 2: Varianz der benötigten Zeit, in Abhängigkeit von den vorgegebenen Risslängen.

Es ist ersichtlich, dass die Varianz mit zunehmender Risslänge größer wird. Je weiter die Risse also fortgeschritten sind, desto deutlicher unterscheiden sich die einzelnen Versuche voneinander. Auffällig ist außerdem der vergleichsweise starke Anstieg der Varianz im Frühstadium der Risse. Dies kann ein Indiz dafür sein, dass sich die Risse zu Beginn der Versuche noch wenig homogen fortpflanzen.

4.1.1 Anpassung an die unveränderten Daten

Als erstes werden die aus der Paris-Erdogan-Gleichung abgeleiteten Modelle (2), (3) und (4) an die vorliegenden Rissdaten angepasst. Für jeden der 68 Risse wird eine Anpassung durchgeführt. Dabei ist $n = 1, \dots, 164$, $l_n \in [9, \dots, 49.8]$ und T_n beschreibt die benötigte Zeit, bis der Riss die Länge l_n erreicht.

$$(2) \quad T_n = \beta_0 + \beta_1 \cdot \ln(l_n) + E_n$$

$$(3) \quad T_n = \beta_0 + \beta_1 \cdot l_n^{\beta_2} + E_n$$

$$(4) \quad T_n = \beta_0 + \beta_1 \cdot l_n + \beta_2 \cdot l_n \cdot \ln(x_n) + E_n$$

Das einfache logistische Modell (2) und das linearisierte Modell (4) sind linear, daher kann die Regression in diesen Fällen mit der Funktion *lm* durchgeführt werden. Zur Anpassung des nichtlinearen Modells (3) wird die Funktion *nls* mit einem Gauß-Newton Algorithmus verwendet. Um singuläre Gradienten während der Optimierung zu vermeiden, werden die dabei benötigten Startwerte ähnlich bestimmt wie von Box & Tidwell (1962) beschrieben. So wird der KQ-Schätzer $\hat{\beta}_2$ aus dem linearisierten Modell in das nichtlineare Modell für β_2 eingesetzt, um mit der Funktion *lm* KQ-Schätzer für β_0 und β_1 berechnen zu können. Diese beiden KQ-Schätzer bilden zusammen mit $\hat{\beta}_2$ aus Modell (4) die Startwerte der Optimierung.

Die Anpassungsgüte der drei Modelle wird anhand der durchschnittlichen Fehlerquadratsummen von den 68 Versuchsreihen verglichen (Tab. 3).

Tabelle 3: Mittlere Fehlerquadratsummen über 68 Versuche bei den Modellen (2)-(4).

	mittlere Fehlerquadratsumme
Einfaches logistisches Modell (2)	192,78
Nichtlineares Modell (3)	6,1665
Linearisiertes Modell (4)	64,352

Es wird deutlich, dass nur das nichtlineare Modell eine akzeptable mittlere Fehlerquadratsumme liefert.

Da die mittlere Fehlerquadratsumme beim einfachen logistischen Modell drastisch schlechter ist als bei den übrigen Modellen, wird an dieser Stelle von einem Vergleich des Informationskriteriums von Akaike (AIC) abgesehen. Im Gegensatz zur Fehlerquadratsumme wird bei der Berechnung des AIC die Anzahl der geschätzten Parameter berücksichtigt.

Nun wird der allgemeine Modellierungsansatz

$$T_n = f(l_n, \phi) + E_n$$

verwendet um die Risse zu beschreiben. Dabei werden für f die folgenden Wachstumsfunktionen verwendet.

$$\begin{aligned} \text{Gompertz (5)} \quad & f(l, \phi) = a \cdot \exp(-b \cdot \exp(-c \cdot l)) , \quad \phi = (a, b, c) \\ \text{Logistic (6)} \quad & f(l, \phi) = \frac{a}{1 + b \cdot \exp(-c \cdot l)} , \quad \phi = (a, b, c) \\ \text{Richards (7)} \quad & f(l, \phi) = \frac{a}{(1 + b \cdot \exp(-c \cdot l))^d} , \quad \phi = (a, b, c, d) \\ \text{Weibull (8)} \quad & f(l, \phi) = a - b \cdot \exp(-c \cdot l^d) , \quad \phi = (a, b, c, d) \end{aligned}$$

Analog zur obigen Vorgehensweise wird jeder Riss einzeln modelliert, um anschließend die unter Verwendung der einzelnen Funktionen erreichte Anpassungsgüte miteinander zu vergleichen. Um jeweils geeignete Startwerte für die Optimierung zu finden, werden die arithmetischen Mittel der benötigten Zeit für jede vorgegebene Risslänge betrachtet. An diese Werte werden die Funktionen (5) - (8) grob angenähert (Abb. 3, S. 33). Die dabei verwendeten Parameterwerte sind in Tabelle 4 zusammengefasst und dienen im Folgenden als Startwerte für die Optimierungsverfahren. Die Startwerte für den Parameter a entsprechen der durchschnittlichen beziehungsweise der maximalen Zeit, bis die Risse die maximal vorgegebene Länge von 49.8 mm erreichen.

Die Anpassungen der Gompertz- und Logisticfunktion an die einzelnen Risse wird mit der *nls* Funktion und einem Gauss-Newton Algorithmus durchgeführt. Unter Verwendung der obigen Startwerte für die Richards- und Weibullfunktion kommt es während des Algorithmus in vielen Fällen zu singulären Gradienten und damit zu einem Abbruch des Verfahrens.

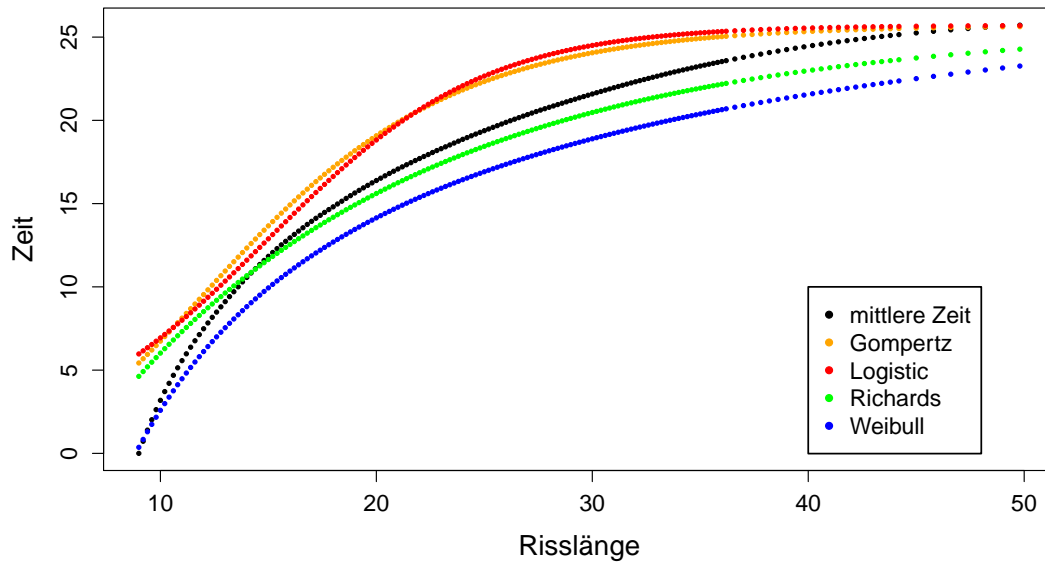


Abbildung 3: Annäherung der durchschnittlich benötigten Zeit durch die verschiedenen Wachstumsfunktionen.

Tabelle 4: Startwerte der zu optimierenden Parameter bei den Funktionen (5) - (8).

	a	b	c	d
(5) Gompertz	25.71645	6	0,15	/
(6) Logistic	25.71645	20	0,2	/
(7) Richards	25.71645	-1,5	0,065	-0,95
(8) Weibull	32.0996	30000	5,5	0,1

Da keine anderen Startwerte gefunden werden konnten, bei denen dieses Problem nicht auftritt, wird dort stattdessen die Funktion *nlsLM* aus dem R-Paket *minpack.lm* genutzt (vgl. Elzhov et al., 2013). Diese Funktion nutzt einen Levenberg-Marquard-Algorithmus zur Optimierung, bei dem das Problem der singulären Gradienten nicht auftritt. Um die Anpassungsgüten zu vergleichen werden zunächst wieder die mittleren Fehlerquadratsummen über alle Versuchsreihen betrachtet (Tab. 5).

Tabelle 5: Mittlere Fehlerquadratsummen über 68 Versuche bei den Wachstumsfunktionen (5) - (9) im allgemeinen Modellierungsansatz.

	mittlere Fehlerquadratsumme
(5) Gompertz	107,88
(6) Logistic	191,54
(7) Richards	7,4390
(8) Weibull	5,8148

Sofort fällt auf, dass nur die beiden vierparametrischen Funktionen akzeptable durchschnittliche Fehlerquadratsummen aufweisen. Die Anpassungsgüte dieser beiden Modelle wird nun detaillierter mit der des nichtlinearen Modells verglichen. In Abbildung 4 sind Boxplots von den Fehlerquadratsummen der 68 Versuchsreihen dargestellt um deren Verteilung vergleichen zu können.

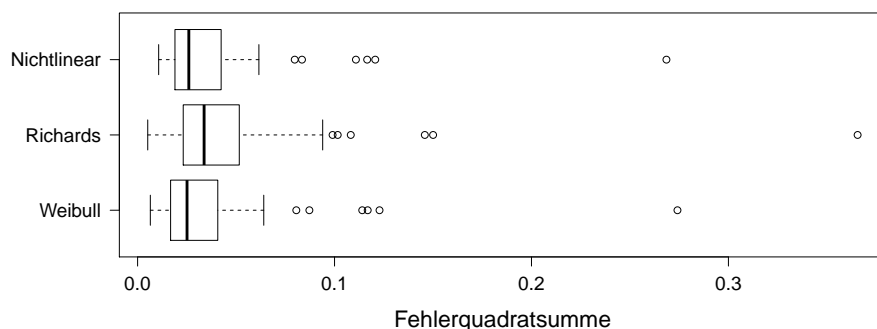


Abbildung 4: Boxplots der Fehlerquadratsummen von allen Versuchsreihen beim nichtlinearen Modell sowie beim allgemeinen Modellierungsansatz mit der Richards- und Weibullfunktion.

Es wird deutlich, dass die Verteilung beim nichtlinearen Modell und bei der Weibullfunktion sehr ähnlich sind. Die sechs Ausreißer in beiden Fällen entsprechen den gleichen Versuchsreihen (27, 28, 37, 47, 49, 57). Bei der Richardsfunktion ist die Streuung in der Verteilung sichtbar höher, die sechs Ausreißer ergeben sich bei den Versuchsreihen 25, 27, 28, 37, 46 und 49. Auffällig ist, dass der extremste Ausreißer jeweils dem Versuch Nummer 49 zugeordnet werden kann. Der Riss in diesem Versuch entwickelte sich am langsamsten und dabei wenig homogen. Er ist optisch vergleichsweise gut von den übrigen Rissen zu unterscheiden (siehe Abb. 1, S. 5).

Da beim nichtlinearen Modell mit nur drei Parametern ähnlich gute Fehlerquadratsummen erzielt werden konnten wie mit der vierparametrischen Weibullfunktion, werden diese beiden Modelle nun auch anhand des AIC verglichen (Abb. 5).

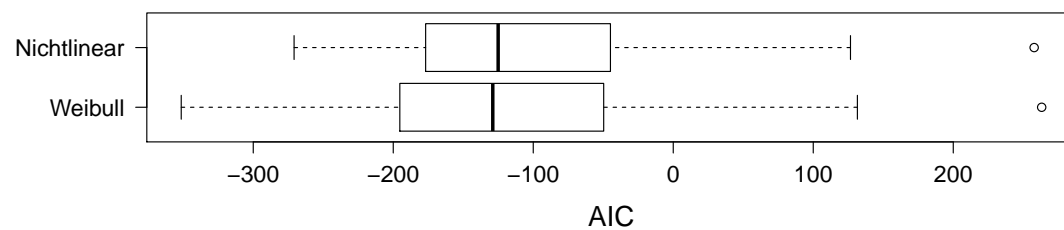


Abbildung 5: Boxplots des AIC aller Versuchsreihen beim nichtlinearen Modell und dem allgemeinen Modellierungsansatz mit der Weibullfunktion .

Offensichtlich ist der strafende Einfluss des zusätzlichen Parameters der Weibullfunktion auf das AIC nicht groß genug, um dem nichtlinearen Modell einen Vorteil zu verschaffen. Der jeweils einzige Ausreißer wird wieder von der Versuchsreihe 49 verursacht. An dieser Stelle kann also bilanziert werden, dass die Anpassungsgüte an die unveränderten Rissdaten bei der Weibullfunktion am höchsten ist, dicht gefolgt vom nichtlinearen Modell und der Richardsfunktion.

Um zu untersuchen, in welchen Bereichen die Risse von den schon näher betrachteten Modellen gut beziehungsweise schlecht beschrieben werden, werden die mittleren absoluten Fehler für die 164 vorgegebenen Risslängen betrachtet (Abb. 6, S. 36).

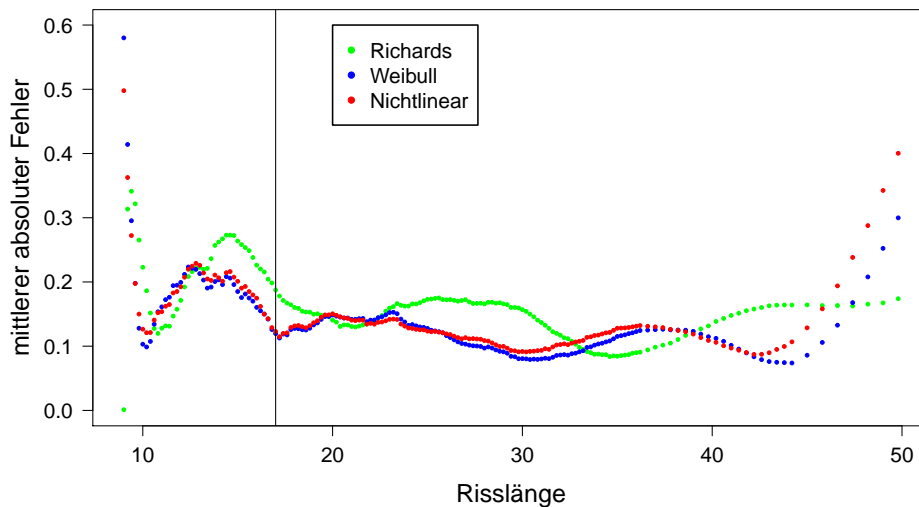


Abbildung 6: Mittleren absolute Fehler beim nichtlinearen Modell sowie dem allgemeinen Modellierungsansatz mit der Richards- und Weibullfunktion, in Abhängigkeit von der Risslänge.

Es fällt auf, dass alle drei Modelle Probleme haben das Frühstadium der Rissentwicklung zu beschreiben. Diese Beobachtung stellt neben den zu Beginn des Kapitels betrachteten Varianzen einen weiteren Anhaltspunkt dafür da, dass die Risse sich zu Beginn nicht sehr homogen entwickeln. Erst ab einer Risslänge von 17 mm pendeln sich die mittleren absoluten Fehler auf einem recht konstanten Niveau ein. Erst zum Ende des Beobachtungszeitraums steigen die mittleren absoluten Fehler wieder merklich an. Bei der Richardsfunktion fällt der Anstieg geringer aus als bei den anderen Modellen. Dieser Fehlerverlauf legt nahe zu prüfen, inwieweit die Anpassung verbessert werden kann, wenn die Risse erst ab einer Länge von 17 mm modelliert werden. Die Rissentwicklung bis zu dieser Länge würde dabei als erweiterte Initialisierungsphase betrachtet. So wird die Anzahl der zur Modellanpassung verwendeten Beobachtungspaare pro Riss um 40 auf 124 reduziert. Ansonsten erfolgt die Optimierung analog zum bisherigen Vorgehen. Da nun weniger Beobachtungen verwendet werden als bisher, stellt die Fehlerquadratsumme kein faires Kriterium für einen Gütevergleich mit den obigen Modellen dar. Stattdessen wird der durchschnittliche quadratische Fehler der insgesamt verwendeten Beobachtungen betrachtet (Tab. 6, S. 37).

Tabelle 6: Mittlerer quadratischer Fehler der jeweils verwendeten Beobachtungen aller Versuchsreihen, beim Modellieren der vollständigen Risse und der Risse ab einer Länge von 17 mm.

	vollständig	l_1017
(3) Nichtlinear	0,03546	0,01646
(7) Richards	0,04536	0,006608
(8) Weibull	0,03760	0,006295

Bei allen Modellen konnte der mittlere quadratische Fehler durch die Reduktion der verwendeten Beobachtungen verbessert werden. Besonders deutlich fällt die Verbesserung bei der Richards- und Weibullfunktion aus. Inwieweit sich auch die Prognosen zukünftiger Beobachtungen auf diese Weise optimieren lassen, wird im weiteren Verlauf dieser Arbeit untersucht.

4.1.2 Anpassung von transformierten Funktionen

In Abbildung 7 auf der folgenden sind die Wachstumsfunktionen (5) - (8) mit einer sehr simplen Parameterwahl dargestellt. Anhand dieser Grafik sollen die Transformationen der Funktionen motiviert werden. So ist ersichtlich, dass bei der Gompertz-, Logistic- und Richardsfunktion jeweils eine Wendestelle vorliegt.

Wenn die Parameter so in Abhängigkeit gesetzt werden, dass diese Wendestelle beim Beginn der Risse liegt, kann die Anpassung möglicherweise verbessert werden. Am Ende von Abschnitt 3.2 dieser Arbeit sind Transformationen der Funktionen (5) - (7) angegeben, die diese Bedingung erfüllen, wenn $l_0 = 9$ gesetzt wird (Beh. 2.5 - Beh. 2.7). Durch die Transformationen wurde die Anzahl der zu schätzenden Parameter jeweils um eins reduziert. Da bei der Weibullfunktion keine Wendestelle auftritt und sie die Risse durch ihre normale Form bereits gut beschreibt, wird sie nicht transformiert.

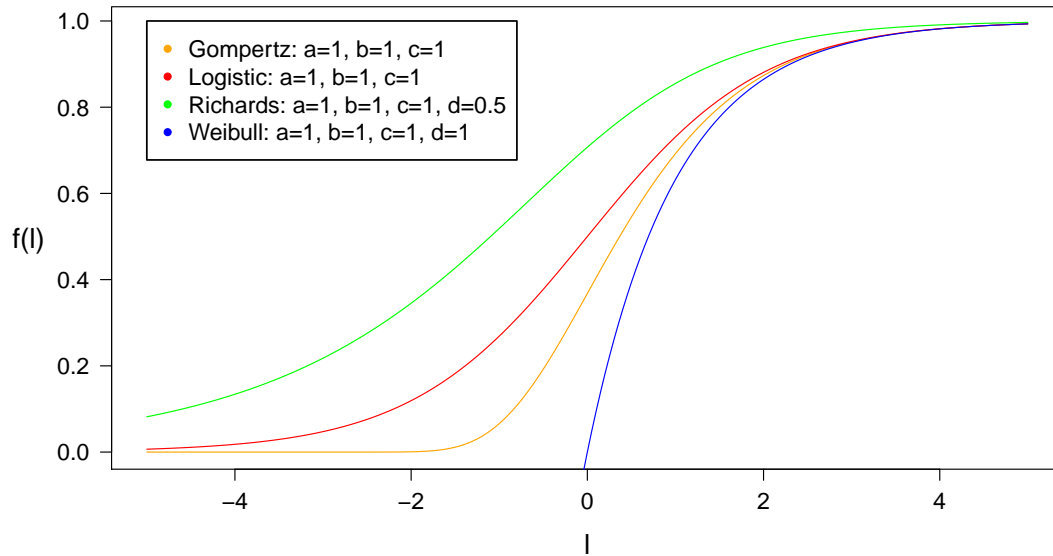


Abbildung 7: Klassische Wachstumsfunktionen mit simpler Parameterwahl.

Wie im Abschnitt zuvor, wird jeder Riss separat modelliert. Bei den drei transformierten wird dazu die Funktion nls verwendet. Um jeweils geeignete Startwerte für die Optimierung zu finden, werden die arithmetischen Mittel der benötigten Zeit grob angenähert (Abb. 8, S. 39). Die dabei verwendeten Parameterwerte sind in Tabelle 7 zusammengefasst.

Tabelle 7: Startwerte der zu optimierenden Parameter bei den transformierten Funktionen.

	a	b	c
Gompertz	35	0,1	/
Logistic	40	0,15	/
Richards	40	0,1	0,95

Um die Anpassungsgüte der transformierten Funktionen untereinander und mit den unveränderten Funktionen vergleichen zu können, wird zunächst die mittlere Fehlerquadratsumme über alle Versuchsreihen betrachtet (Tab. 8, S. 39).

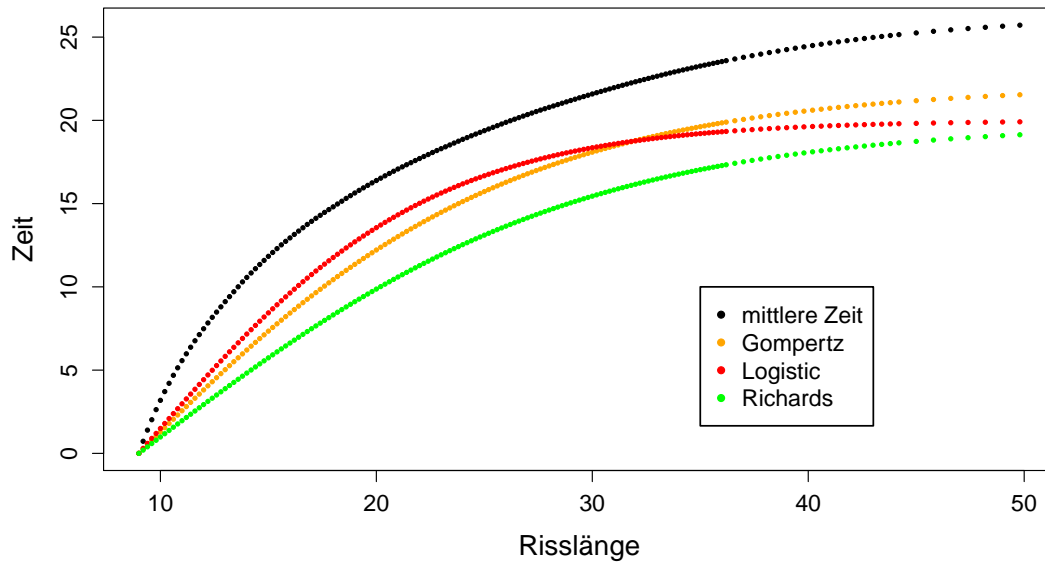


Abbildung 8: Annäherung der im Mittel benötigten Zeit durch die verschiedenen transformierten Wachstumsfunktionen.

Tabelle 8: Mittlere Fehlerquadratsummen über 68 Versuche bei den transformierten und unveränderten Wachstumsfunktionen.

	trans.	unver.
Gompertz	139,59	107,88
Logistic	171,374	191,54
Richards	71,348	7,4390

Nur bei der Logisticfunktion konnte die mittlere Fehlerquadratsumme durch die Transformation reduziert werden. Auch bei den Transformierten schneidet die Richardsfunktion bezüglich der mittleren Fehlerquadratsumme am besten ab, wobei die Anpassung durch die unveränderte Richardsfunktion eine deutlich höhere Güte aufweist. Da die Anzahl der zu schätzenden Parameter durch die Transformation um eins reduziert wurde, wird in Abbildung 8 die Verteilung des AIC bei beiden Formen der Richardsfunktion betrachtet.

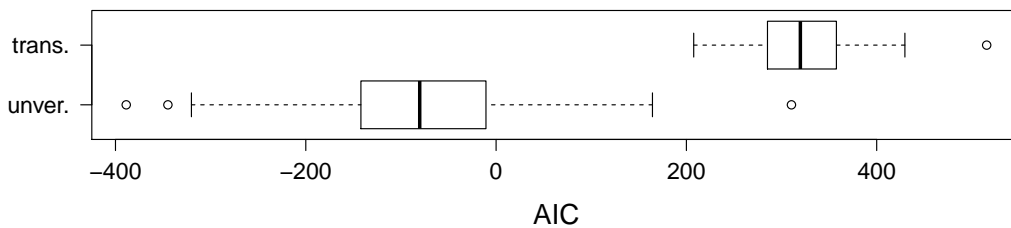


Abbildung 9: Boxplots des AIC aller Versuchsreihen beim allgemeinen Modellierungsansatz mit der unveränderten und transformierten Richardsfunktion.

So wird deutlich, dass die Anpassung durch die unveränderte Richardsfunktion auch bezüglich des AIC besser ist als durch die Transformierte. Der jeweils einzige Ausreißer nach oben wird wieder von der 49. Versuchsreihe verursacht. An dieser Stelle lässt sich zusammenfassen, dass die Risse durch die Transformation nicht entscheidend besser beschrieben werden können als durch die unveränderten Wachstumsfunktionen.

4.1.3 Anpassung an transformierte Rissdaten

In dem vorangegangenen Abschnitt wird analysiert wie gut die Risse durch transformierte Wachstumsfunktionen beschrieben werden können. Eine andere Idee besteht darin, die Rissdaten vor der Anpassung zu transformieren. So wird untersucht, ob die unveränderten Modelle Risse besser annähern, die nahe bei Null beginnen. Würden die Risse bei Null beginnen, käme es im weiteren Verlauf bei einigen der Modelle zu Problemen, denn es gilt $\ln(l) \xrightarrow{l \rightarrow 0} -\infty$.

Im Folgenden wird daher 8,8 von den vorgegebenen Risslängen l_n ($n = 1, \dots, 164$) subtrahiert. So beginnen die in diesem Abschnitt modellierten Risse bei $l_1 = 0.2$.

Zunächst werden die beiden linearen Modelle (2) und (4) an die transformierten Rissdaten angepasst. Dazu wird, wie in Abschnitt 4.1.1, die Funktion lm verwendet. Beim dritten aus der Paris-Erdogan-Gleichung abgeleiteten Modell, dem nichtlinearen Modell, wird wieder die Funktion nls mit einem Gauß-Newton-Verfahren genutzt, um die Fehlerquadratsumme zu minimieren. Analog zum Vorgehen in Abschnitt 4.1.1 werden die benötigten Startwerte so ähnlich bestimmt, wie von Box und Tidwell (1962) beschrieben. Die sich ergebenden mittleren Fehlerquadratsummen werden untereinander und mit den in Abschnitt 4.1.1 erzielten Ergebnissen verglichen (Tab. 9).

Tabelle 9: Mittlere Fehlerquadratsummen über 68 Versuche bei den Modellen die aus der Paris-Erdogan-Gleichung hervorgehen, für unveränderte und transformierte Rissdaten.

	$l_1 = 0,2$	unver.
Einfaches logistisches Modell (2)	236,04	192,78
Nichtlineares Modell (3)	41,972	6,1665
Linearisiertes Modell (4)	19,636	64,352

Beim einfachen logistischen und beim nichtlinearen Modell konnten die Rissdaten in ihrer ursprünglichen Form besser beschrieben werden als nach der Subtraktion. Beim linearisierten Modell hingegen konnte die mittlere Fehlerquadratsumme durch die Transformation der Daten um einen Faktor größer drei reduziert werden. Dennoch liegt sie mit 19.636 recht deutlich über den in Abschnitt 4.1.1 erzielten Bestwerten.

Nun wird untersucht, wie gut sich die transformierten Rissdaten durch den allgemeinen Ansatz mit den klassischen Wachstumsfunktionen (5) - (8) beschreiben lassen. Wie in den Abschnitten zuvor müssen geeignete Startwerte für die Optimierungsverfahren gefunden werden. Dazu wird wieder die mittlere Anzahl von benötigten Belastungszyklen je vorgegebener Risslänge grob angenähert (Abb. 10, S. 42). Die dabei verwendeten Parameterwerte stellen anschließend die Startwerte dar (Tab. 10, S. 42).

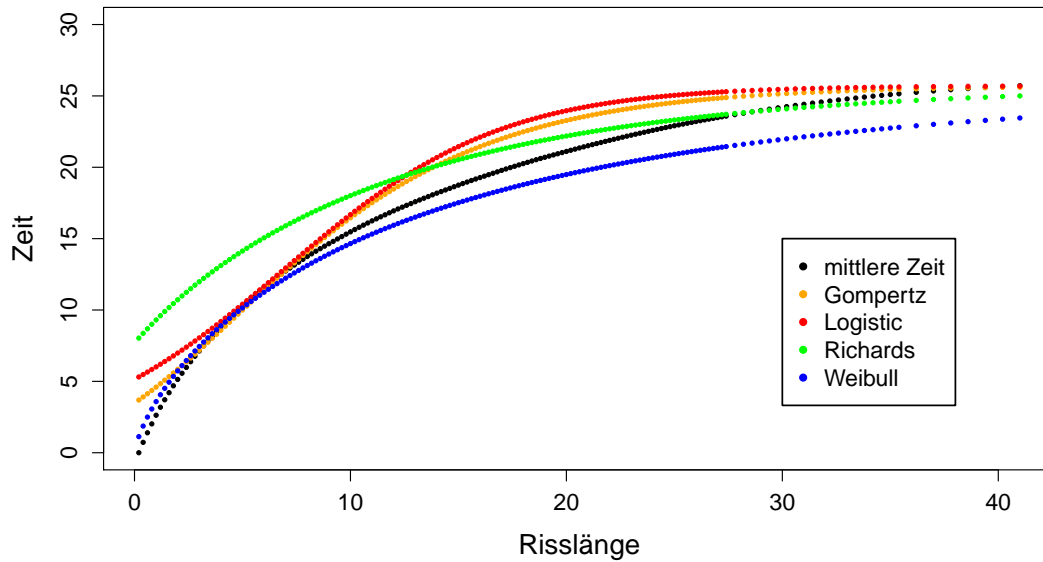


Abbildung 10: Annäherung der im Mittel benötigten Zeit durch die verschiedenen Wachstumsfunktionen.

Tabelle 10: Startwerte der zu optimierenden Parameter bei den transformierten Rissdaten ($l_1 = 0.2$).

	a	b	c	d
Gompertz	25,71645	2	0,15	/
Logistic	25,71645	4	0,2	/
Richards	25,71645	-0,8	0,075	-0,75
Weibull	25,71645	25,71645	0,15	0,75

Die Modellierung bei der Gompertz-, Logistic- und Weibullfunktion konnte ohne Probleme mit dem Gauß-Newton-Verfahren der Funktion *nls* durchgeführt werden. Bei der Richardsfunktion hingegen kommt es, unter Verwendung der obigen Startwerte (und ähnlicher Werte), zu Fehlern beim numerischen Berechnen der Ableitungen. Deshalb wird wieder auf die Funktion *nlsLM* zurückgegriffen. Diese Funktion verwendet einen Levenberg-Marquart Algorithmus und funktioniert mit den angegebenen Startwerten fehlerfrei. Die resultierenden mittleren Fehlerquadratsummen sind in Tabelle 11 zusammengefasst. Zum Vergleich sind die in Abschnitt 4.1.1 erzielten Ergebnisse mit den unveränderten Rissdaten ebenfalls aufgeführt.

Tabelle 11: Mittlere Fehlerquadratsummen über 68 Versuche der Wachstumsfunktionen (5) - (9) im allgemeinen Modellierungsansatz für bei den transformierten und unveränderten Rissdaten.

	$l_1 = 0,2$	unver.
(5) Gompertz	107,88	107,88
(6) Logistic	191,54	191,54
(7) Richards	7.7572	7,4390
(8) Weibull	3.5788	5,8148

Sofort fällt auf, dass es bei der Gompertz- und Logisticfunktion keinen Unterschied macht, bei welcher Länge die zu modellierenden Risse beginnen. Bei der Richardsfunktion verschlechterte sich die Anpassung durch die Längentransformation leicht. Im Gegensatz dazu verminderte sich die mittlere Fehlerquadratsumme bei der Weibullfunktion verhältnismäßig deutlich. Auch die transformierten Daten lassen sich also durch den allgemeinen Modellierungsansatz mit der Weibullfunktion am besten beschreiben, gefolgt von der Richardsfunktion. Eine zumindest akzeptable Modellierung ist außerdem mit dem linearisierten Modell möglich.

4.2 Modelldiagnose (Residualanalyse)

In diesem Abschnitt werden die Residuen der zuvor angepassten Modelle untersucht. Zuerst werden dabei die beiden linearen Modelle (2) und (4) betrachtet.

Um die Normalverteilungsannahme (14) zu prüfen, werden die Quantile der normierten Residuen gegen die theoretischen Quantile einer Standardnormalverteilung abgetragen. Normiert werden die Residuen, in dem sie durch $\sqrt{\hat{\sigma}^2}$ (16) dividiert werden. Wenn die Punkte in einem solchen Q-Q-Plot nahe bei der Winkelhalbierenden liegen, spricht dies für identisch normalverteilte Fehler. Starke Abweichungen der Randpunkte von der Geraden können als Ausreißer interpretiert werden (vgl. Hartung, 1999). Aus Gründen der Übersichtlichkeit werden bei jedem Modell nur Q-Q-Plots der ersten beiden Versuchsreihen betrachtet.

In den Abbildung 11 und 12 (S. 45) finden sich die Q-Q-Plots für das einfache logistische Modell, angewendet auf die unveränderten beziehungsweise transformierten ($I_1 = 0.2$) Rissdaten. Die recht deutlichen Abweichungen der Punkte von der Geraden sprechen in beiden Fällen gegen eine Normalverteilung der Residuen. Das trifft ebenso auf beim linearisierten Modell mit den unveränderten Rissdaten zu (Abb. 13, S. 45). Angewendet auf die transformierten Daten spricht zumindest der Q-Q-Plot der ersten Versuchsreihe nicht so deutlich gegen die Annahme normalverteilter Residuen (Abb. 14, S. 46).

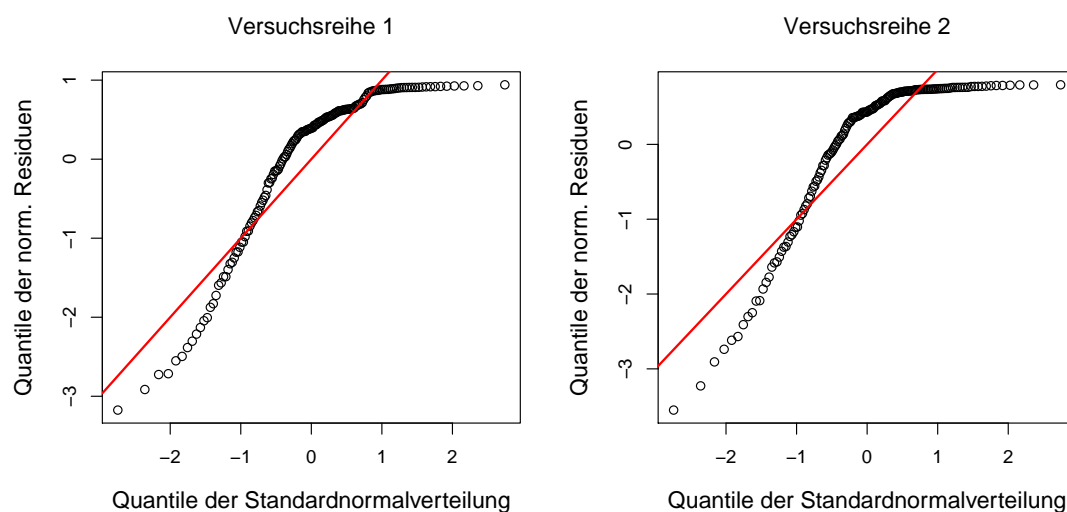


Abbildung 11: Q-Q-Plots bei dem einfachen logistischen Modell mit unveränderten Rissdaten.

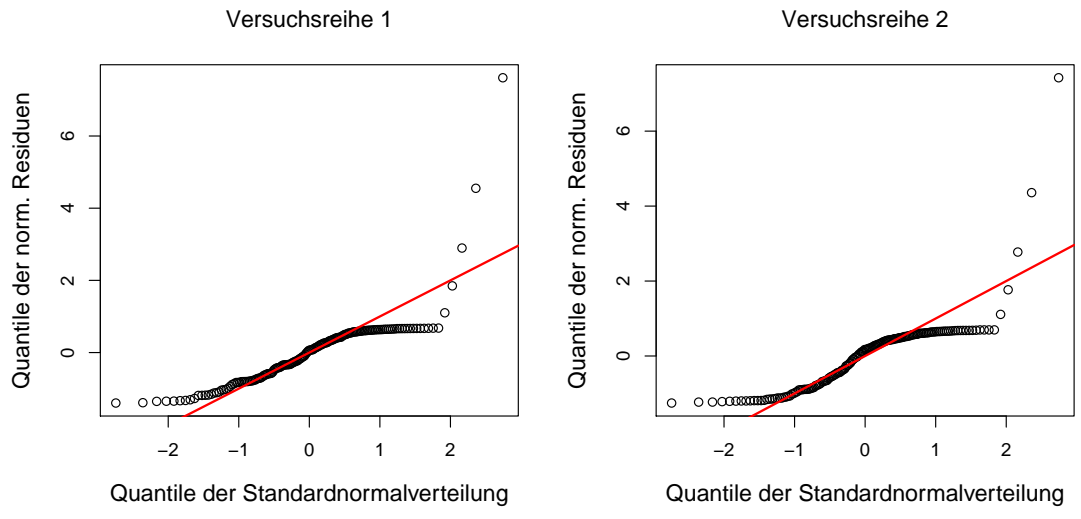


Abbildung 12: Q-Q-Plots bei dem logistischen Modell mit transformierten Rissdaten.

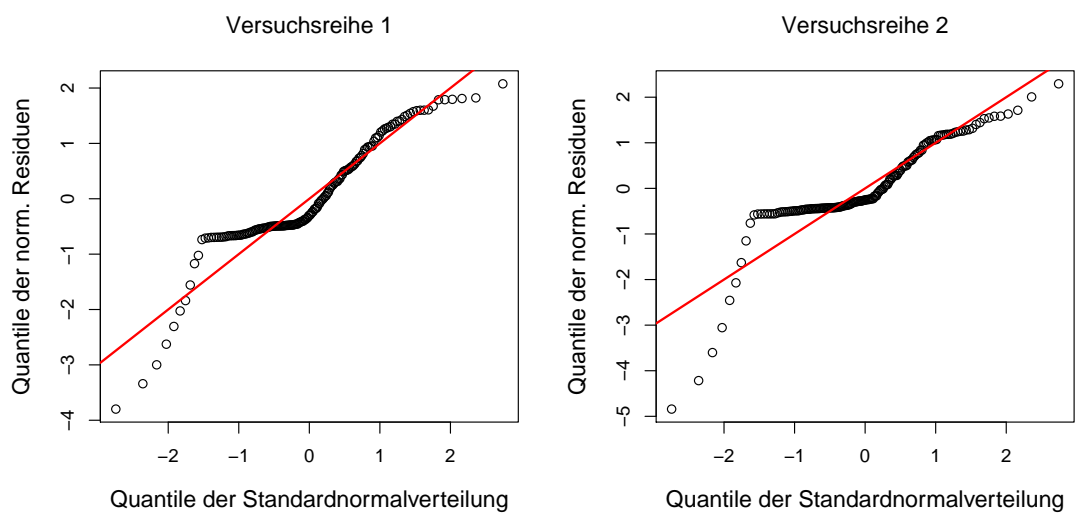


Abbildung 13: Q-Q-Plots bei dem linearisierten Modell mit unveränderten Rissdaten.

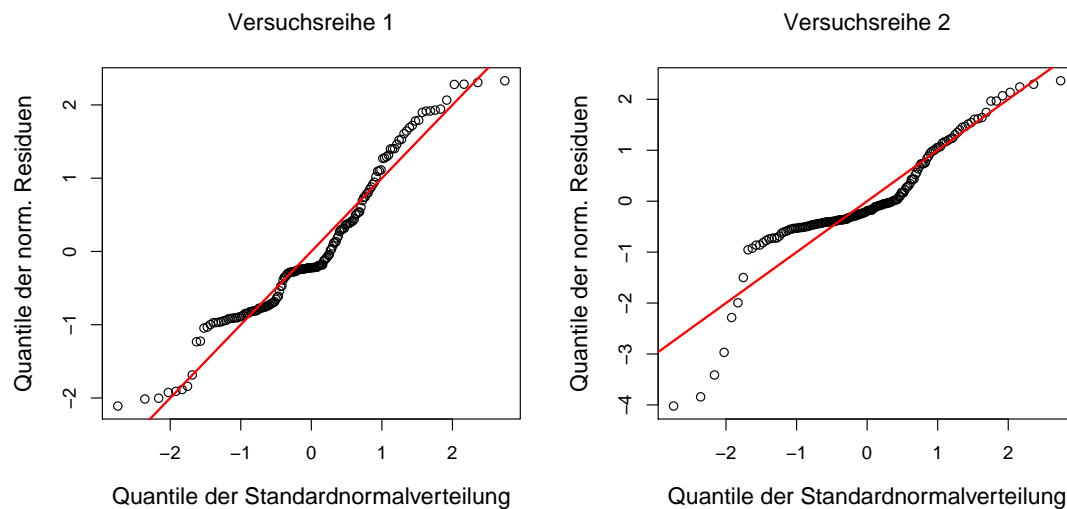


Abbildung 14: Q-Q-Plots bei dem linearisierten Modell und transformierten Rissdaten.

Auch bei dem nichtlinearen Modell (3) und dem allgemeinen Modellierungsansatz mit den Wachstumsfunktionen (5) - (8), gilt es, eine Verteilungsannahme an die Residuen zu prüfen. Um zu beurteilen, ob sie identisch verteilt sind, mit Erwartungswert Null und Varianz σ^2 größer Null, werden analog zum obigen Vorgehen Q-Q-Plots erstellt. Dabei wird die Normierung allerdings mit der Wurzel aus $\hat{\sigma}^2$ wie in Behauptung 3.7 (22) durchgeführt. Die Q-Q-Plots der genannten Modelle mit den unveränderten Daten finden sich in den Abbildungen 15 - 19 auf den Seiten 47 - 49. Besonders deutlich gegen die zuvor formulierte Verteilungsannahme sprechen die Grafiken bei der Gompertz- und Logisticfunktion. Bei den übrigen Modellen sind die Abweichungen nicht so drastisch, es sollte aber auch dort nicht vorbehaltlos davon ausgegangen werden, dass sie die Annahme erfüllen.

Als Nächstes werden die Fehler bei diesen Modellen mit den transformierten Daten ($l_1 = 0, 2$) betrachtet (Abb. 20 - 24, S. 49 - 51). Anders als bei den unveränderten Rissdaten kann beim nichtlinearen Modell nicht davon ausgegangen werden, dass die Verteilungsannahme erfüllt ist; die Abweichungen sind zu deutlich. Bei den klassischen Wachstumsfunktionen verhält es sich wie zuvor bei den unveränderten Daten. So sprechen die Q-Q-Plots bei der Richards- und Weibullfunktion nicht klar gegen identisch verteilte Residuen mit Erwartungswert Null und Varianz $\sigma^2 > 0$.

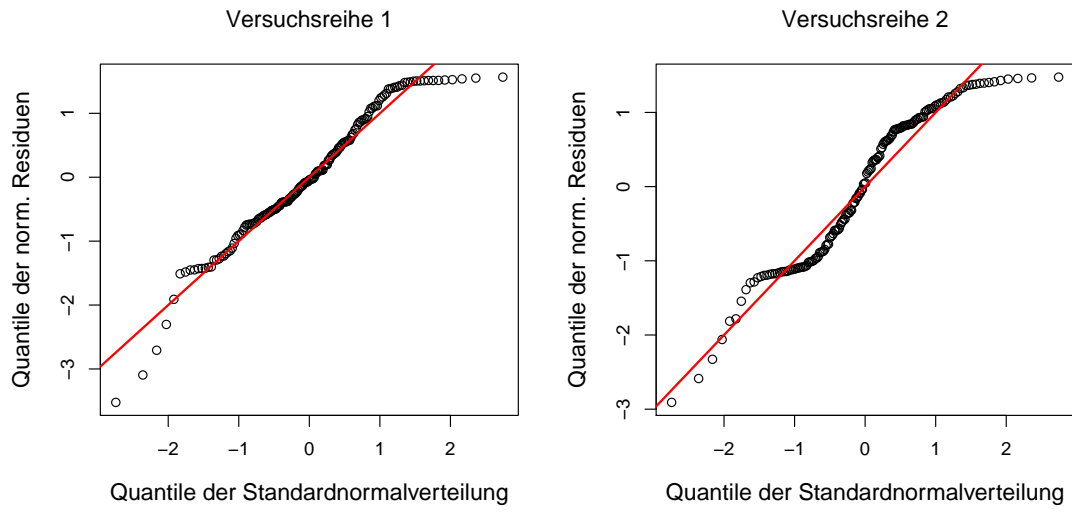


Abbildung 15: Q-Q-Plots bei dem nichtlinearen Modell mit unveränderten Rissdaten.

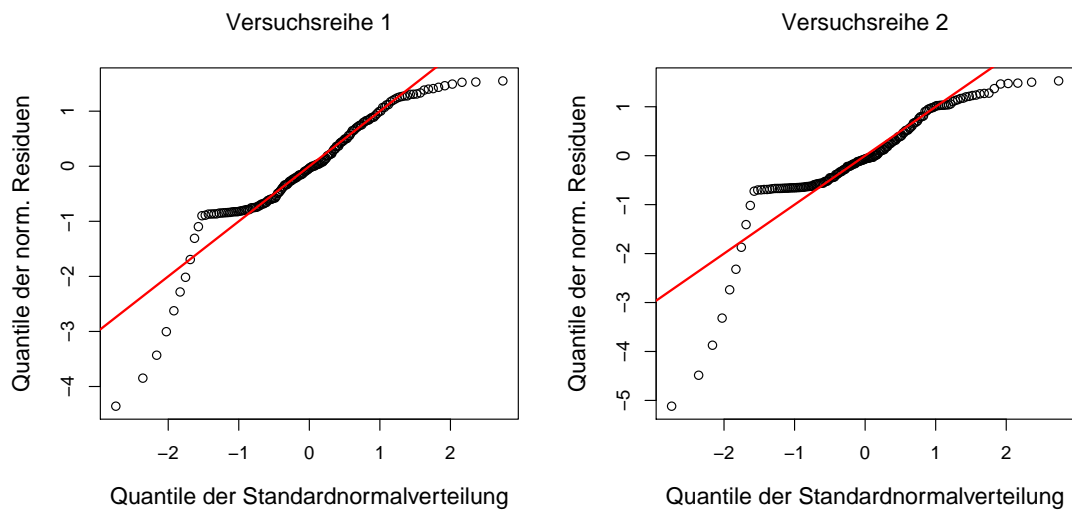


Abbildung 16: Q-Q-Plots bei dem Modell mit der Gompertzfunktion und unveränderten Rissdaten.

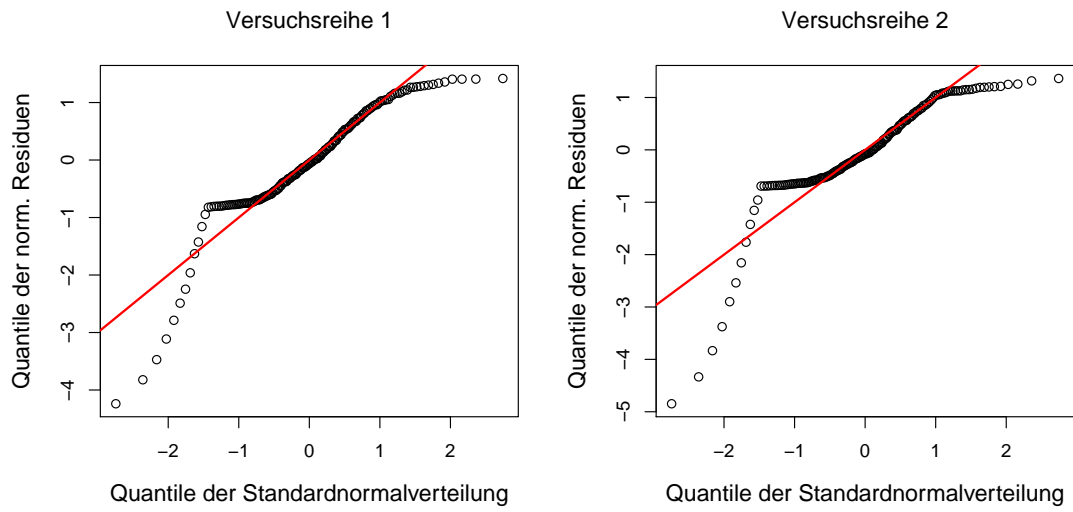


Abbildung 17: Q-Q-Plots bei dem Modell mit der Logisticfunktion und unveränderten Rissdaten.

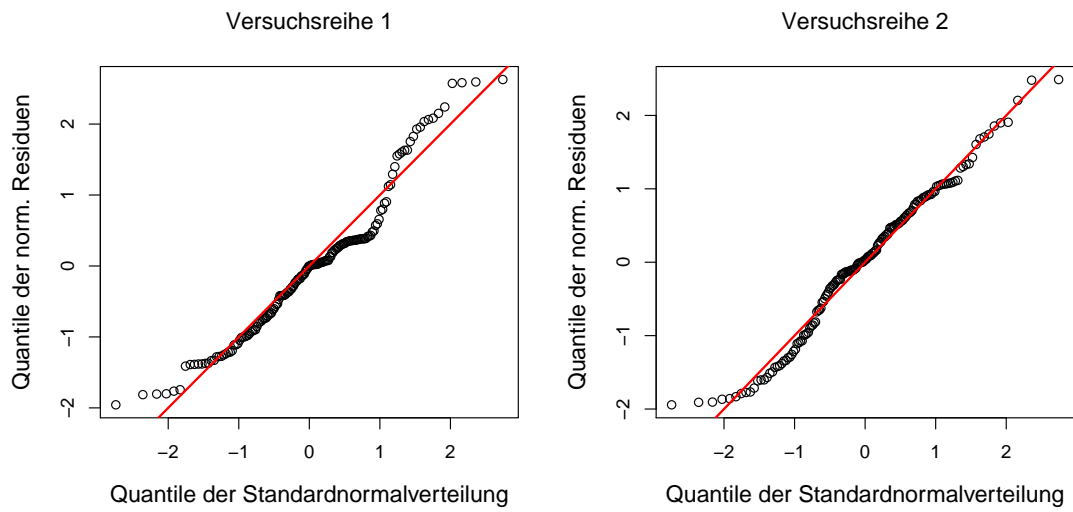


Abbildung 18: Q-Q-Plots bei dem Modell mit der Richardsfunktion und unveränderten Rissdaten.

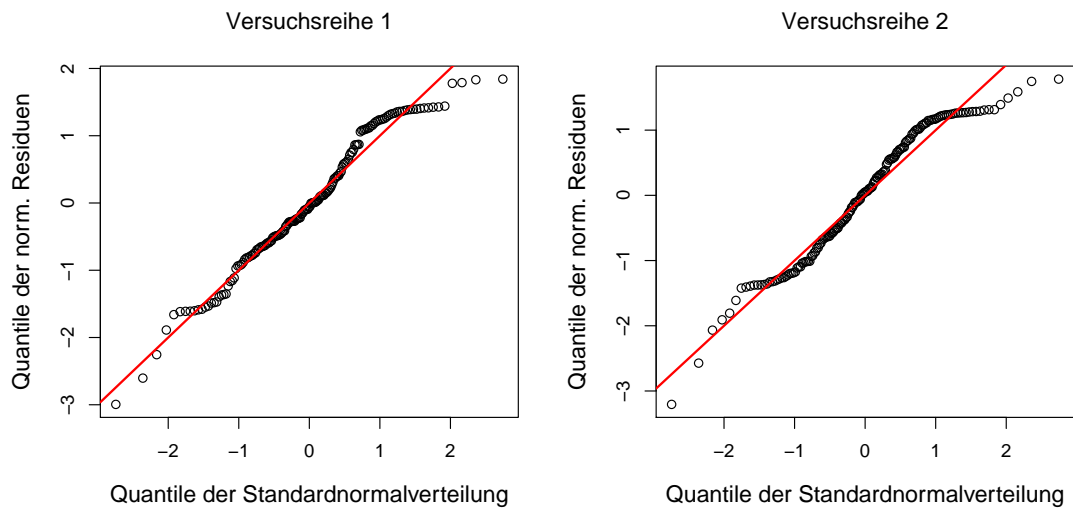


Abbildung 19: Q-Q-Plots bei dem Modell mit der Weibullfunktion und unveränderten Rissdaten.

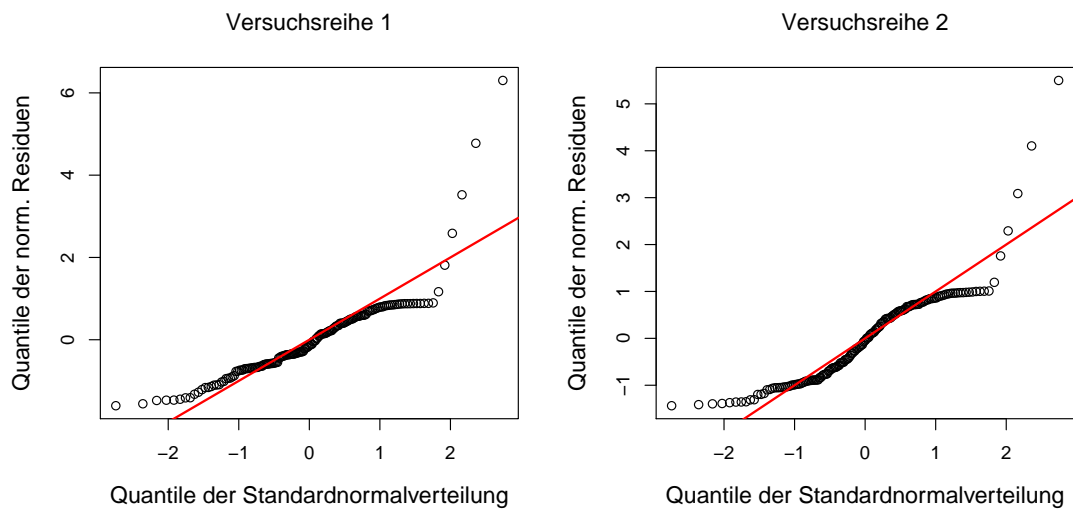


Abbildung 20: Q-Q-Plots bei dem nichtlinearen Modell mit transformierten Rissdaten.

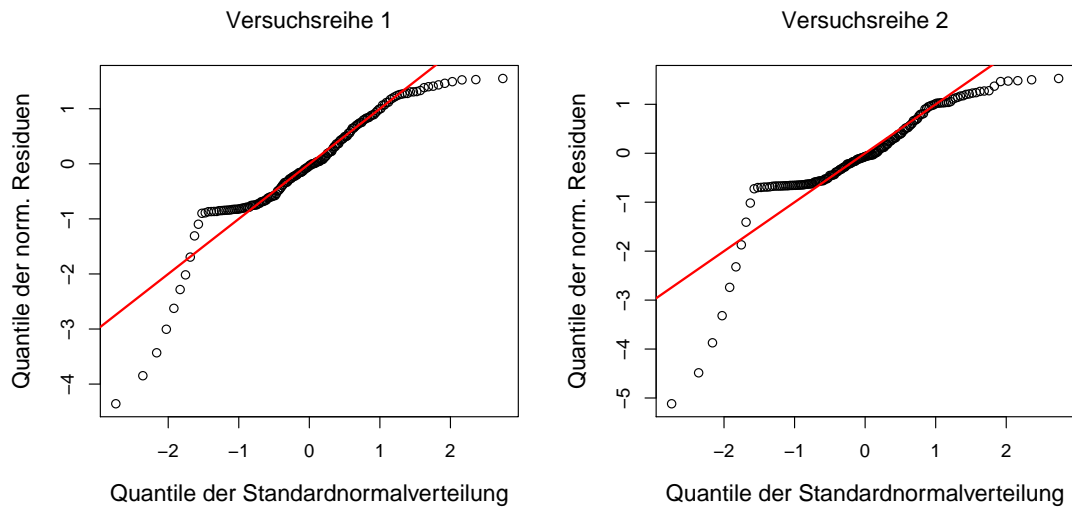


Abbildung 21: Q-Q-Plots bei dem Modell mit der Gompertzfunktion und transformierten Rissdaten.

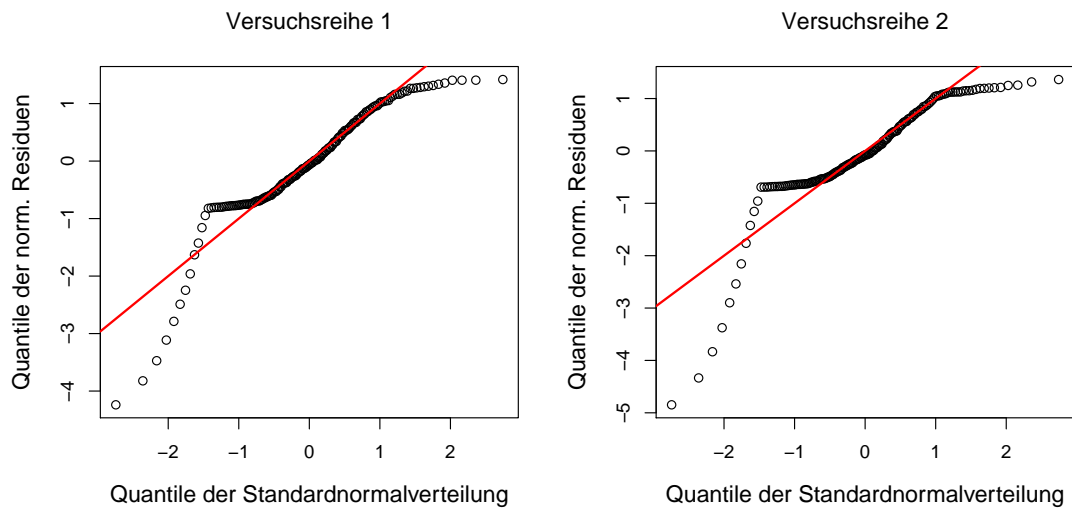


Abbildung 22: Q-Q-Plots bei dem Modell mit der Logisticfunktion und transformierten Rissdaten.

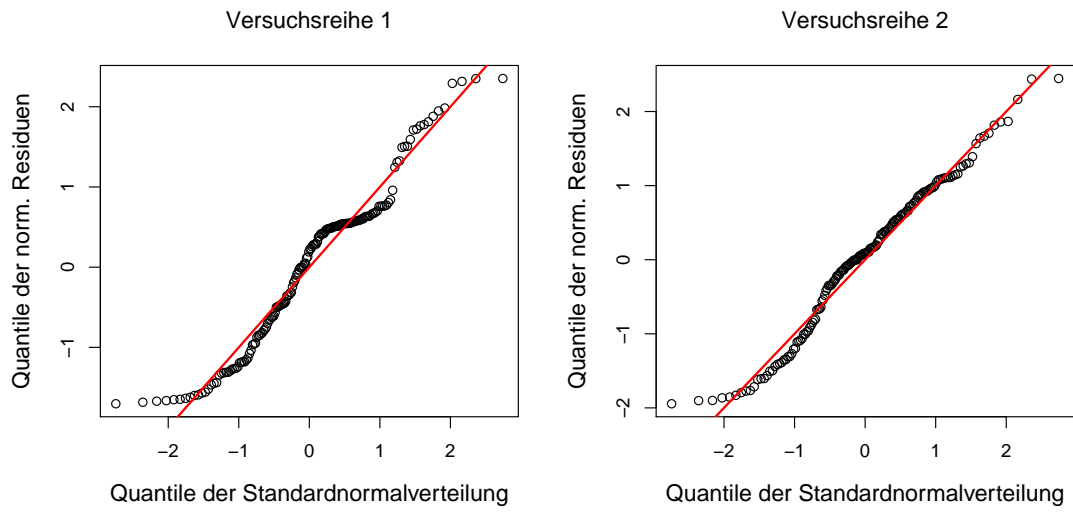


Abbildung 23: Q-Q-Plots bei dem Modell mit der Richardsfunktion und transformierten Rissdaten.

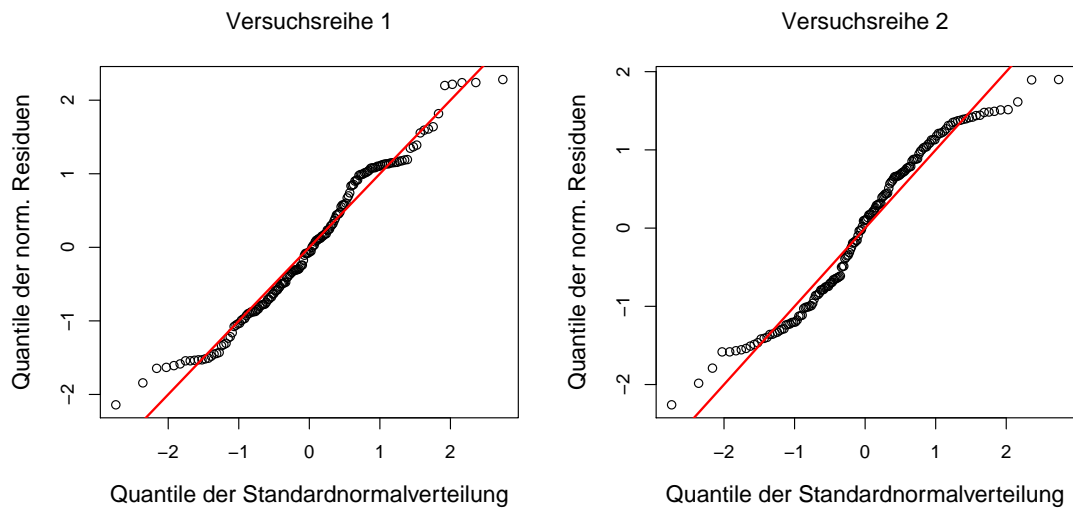


Abbildung 24: Q-Q-Plots bei dem Modell mit der Weibullfunktion und transformierten Rissdaten.

Zum Ende von Kapitel 4.1.1 werden das nichtlineare Modell sowie die Richards- und Weibullfunktion außerdem an die Risse ab einer Länge von $l_1 = 17$ angepasst. Hier erscheint die Verteilungsannahme in allen drei Fällen gerechtfertigt (Abb. 25 - 27, S. 53 - 54).

Abschließend werden noch die Q-Q-Plots für transformierten Wachstumsfunktionen aus Kapitel 4.1.2 betrachtet (Abb. 28 -31, S. 54 - 55). Hier weichen die Punkte jeweils recht deutlich von der Winkelhalbierenden ab. Die Verteilungsannahme wird bei den Transformierten demnach nicht als erfüllt angesehen.

Bisher wurden die Verteilungen der Residuen nur bezüglich ihre Identität untersucht. Die Annahmen (14) aus Kapitel 3.3.1 und (a) aus Kapitel 3.3.2 fordern außerdem die Unabhängigkeit der Fehler.

Beim nichtlinearen Modell sowie bei der Richards- und Weibullfunktion deuten die Q-Q-Plots bei den unveränderten Daten und bei den Rissen ab der Länge $l_1 = 17$ nicht auf eine Verletzung der Annahme identisch verteilter Residuen hin. Allerdings weisen die Fehler der ersten Versuchsreihe jeweils eine erkennbare Struktur auf, wenn sie gegen die Risslänge abgetragen werden (Abb. 31 und 32, S. 56). Benachbarte Fehler sind offensichtlich korreliert. Somit kann nicht behauptet werden, die Residuen seien unabhängig verteilt.

Bezogen auf die transformierten Rissdaten ($l_1 = 0, 2$) sprechen die Q-Q-Plots beim linearisierten Modell sowie bei der Richards- und Weibullfunktion nicht gegen die Identität. In Abbildung 33 auf Seite 57 sind die Residuen von diesen Modellen für die erste Versuchsreihe dargestellt. Es ist ebenfalls eine deutliche Struktur in den Punkten erkennbar, die klar gegen unabhängig verteilte Fehler spricht.

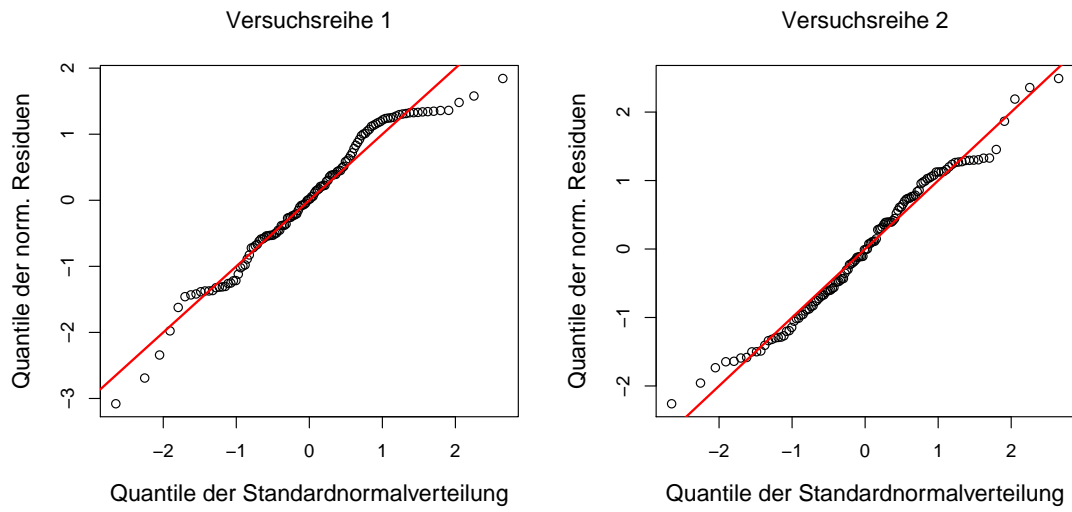


Abbildung 25: Q-Q-Plots beim nichtlinearen Modell, angepasst an Risse die bei $l_1 = 17$ beginnen.

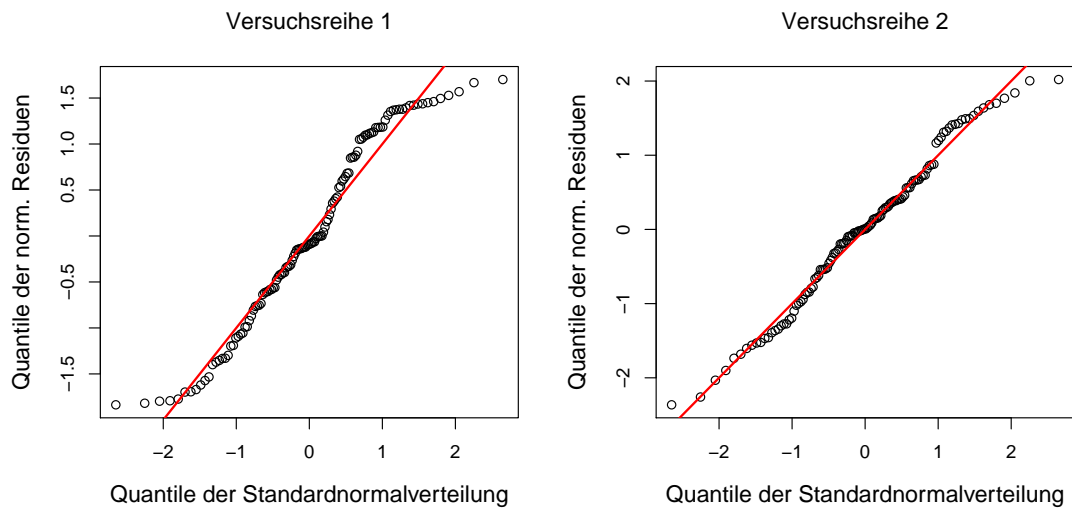


Abbildung 26: Q-Q-Plots beim Modell mit der Richardsfunktion, angepasst an Risse die bei $l_1 = 17$ beginnen.

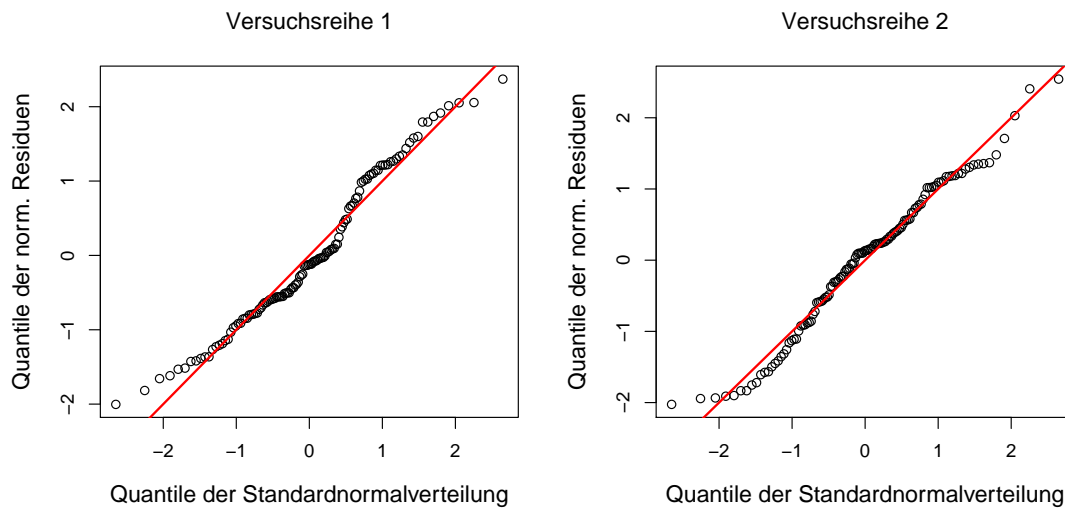


Abbildung 27: Q-Q-Plots beim Modell mit der Weibullfunktion, angepasst an Risse die bei $l_1 = 17$ beginnen.

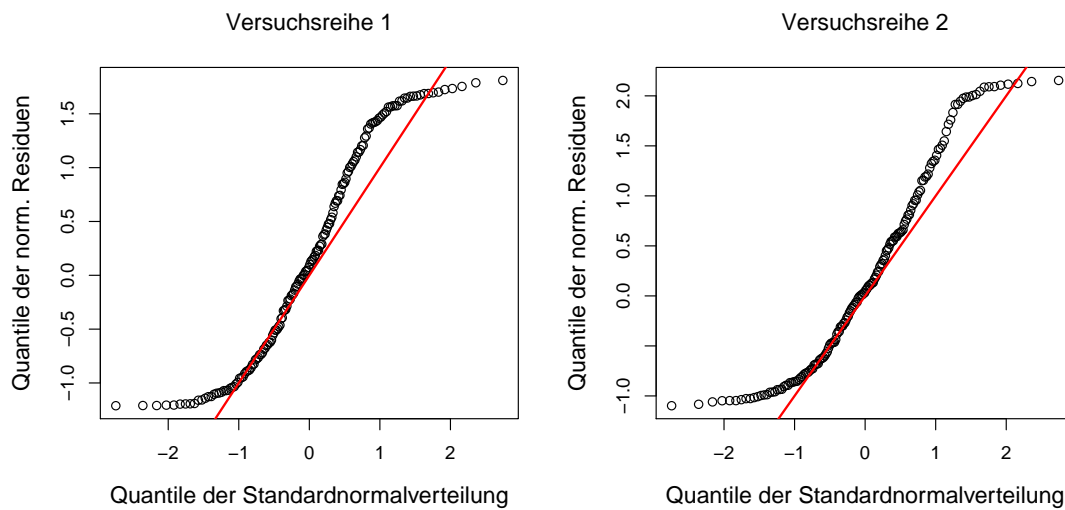


Abbildung 28: Q-Q-Plots beim Modell mit der transformierten Gompertzfunktion.

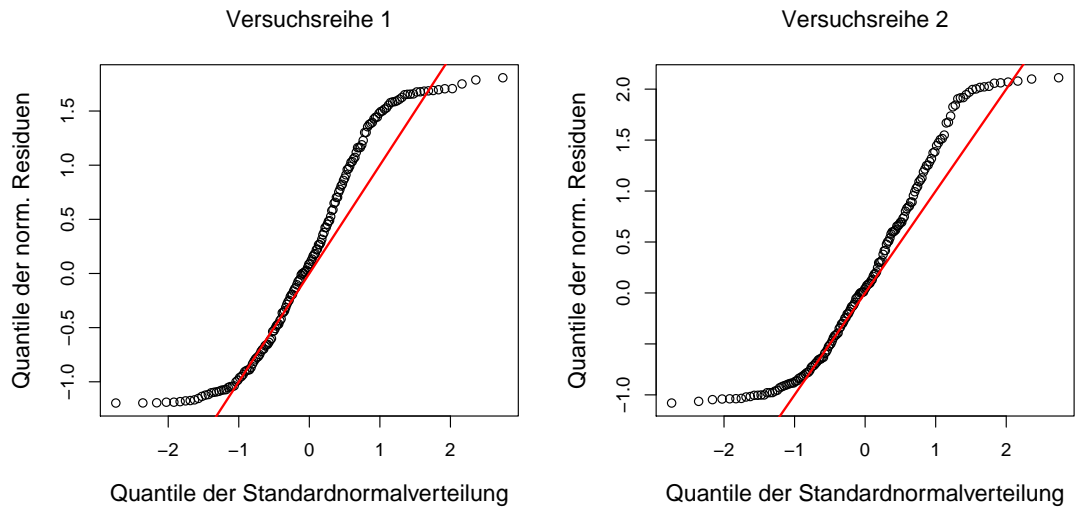


Abbildung 29: Q-Q-Plots beim Modell mit der transformierten Logisticfunktion.

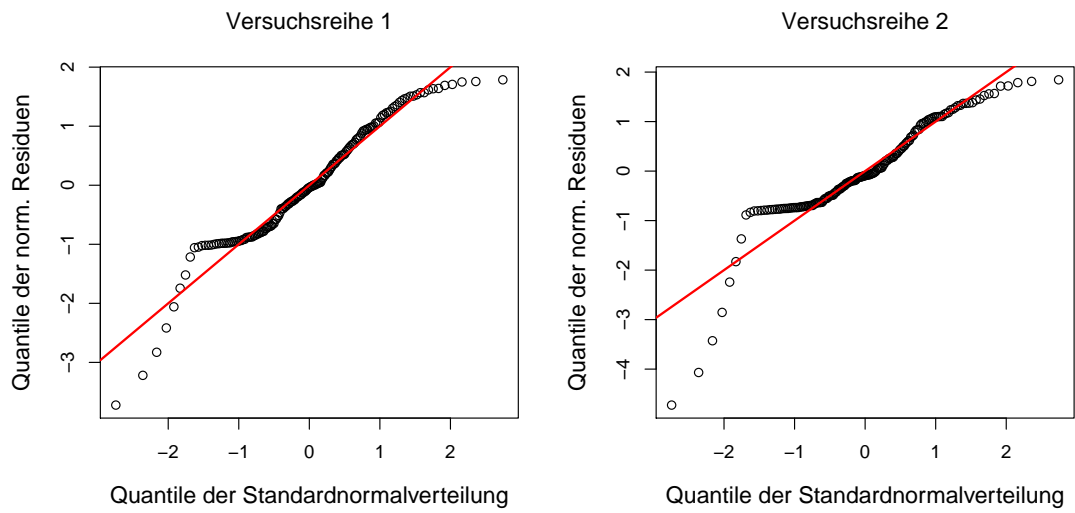


Abbildung 30: Q-Q-Plots beim Modell mit der transformierten Richardsfunktion.

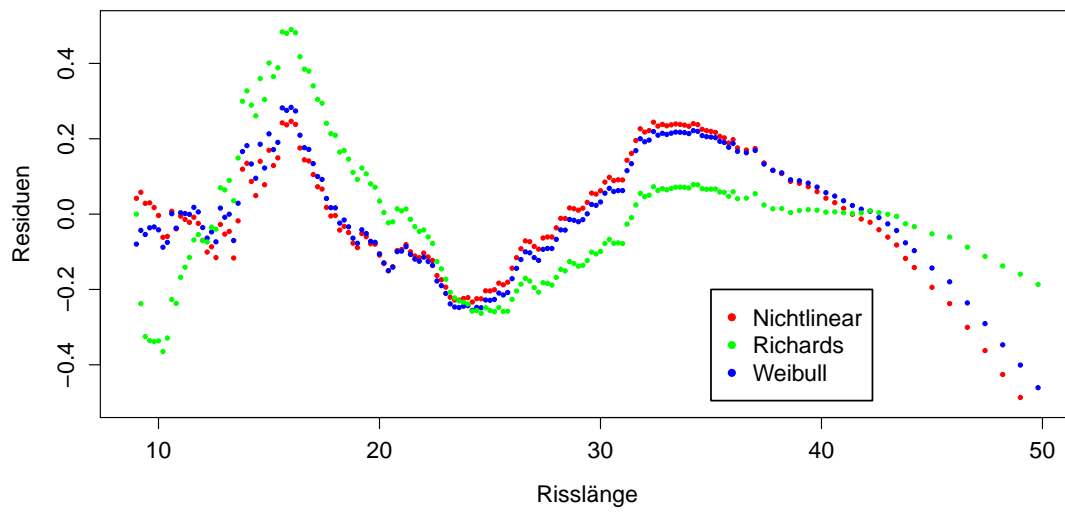


Abbildung 31: Residuen des linearisierten Modell sowie der Richards- und Weibull-funktion für die erste Versuchsreihe.

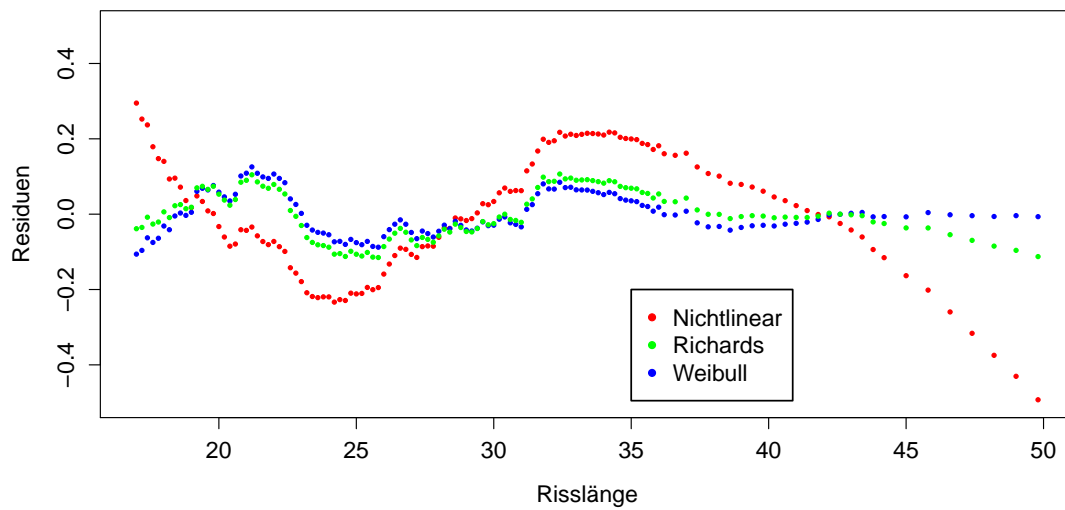


Abbildung 32: Residuen des linearisierten Modell sowie der Richards- und Weibull-funktion für die erste Versuchsreihe.

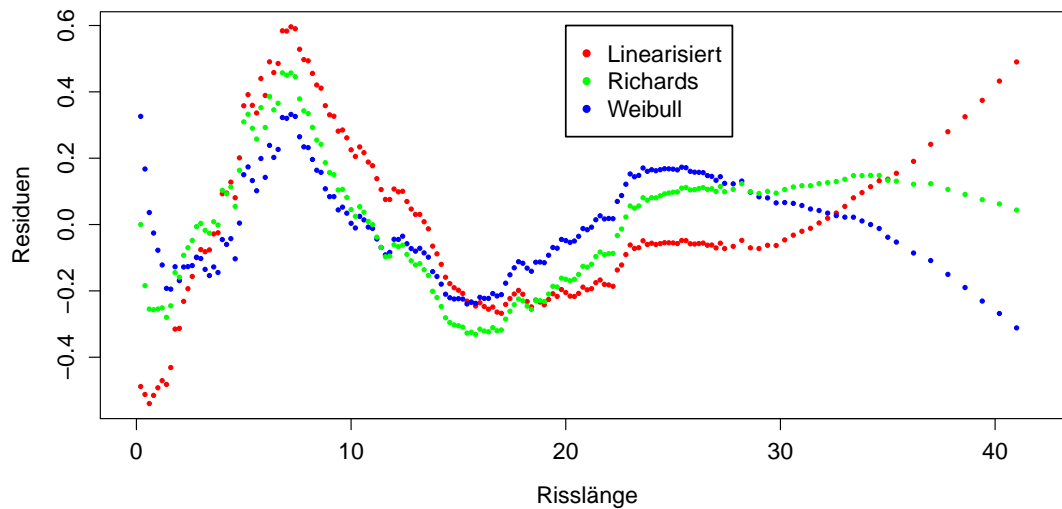


Abbildung 33: Residuen des linearisierten Modells sowie der Richards- und Weibullfunktion für die erste Versuchsreihe.

4.3 Prognosen

In diesem Kapitel wird untersucht, wie gut sich zukünftige Beobachtungen mit einigen der zuvor angepassten Modelle vorhersagen lassen. Es werden dabei nur Prognosen bei den Modellen berechnet, die eine vergleichsweise hohe Anpassungsgüte aufweisen. Damit die Prognosegüte bestimmt werden kann, müssen die tatsächlich realisierten Beobachtungen bekannt sein. Deshalb wird bei jeder Versuchsreihe jeweils nur ein Teil der Beobachtungen verwendet, um dann die übrigen zu prognostizieren.

Unter Verwendung der unveränderten Daten liefern das nichtlineare Modell sowie die Richards- und Weibullfunktion gute Anpassungen (Kap. 4.1.1). Für diese Modelle werden nun für jede Versuchsreihe approximative Prognoseintervalle $\hat{P}I_F$ (Beh. 3.12) zum Niveau 0.95 ($\alpha = 0.05$) berechnet. Dabei wird $N = 130$ gewählt. So werden jeweils die Rissdaten bis zu einer Länge von $l_{130} = 35$ verwendet, um den weiteren Verlauf $F \in [131, 132, \dots, 164]$ zu prognostizieren. Die KQ-Schätzung der jeweiligen Parameter wird mit denselben Funktionen und Startwerten wie in Kapitel 4.1.1 durchgeführt.

So wird bei dem nichtlinearen Modell die Funktion nls verwendet, mit Startwerten ähnlich wie von Box und Tidwell (1962) beschrieben, während bei den übrigen Modellen die Funktion $nlsLM$ mit den Startwerten aus Tabelle 4 genutzt wird. Zunächst wird die mittlere absolute Abweichung der prognostizierten Zeit für die vorgegeben Risslängen $l_F (F \in [131, \dots, 164])$ mit den tatsächlich benötigten Zeiten verglichen (Abb. 34). Bei der Weibullfunktion und dem nichtlinearen Modell werden sehr ähnliche Abweichungen erzielt. Erst bei Prognosen für Risslängen größer als 45 sind leichte Unterschiede erkennbar. Die mittlere Abweichung bei der Richardsfunktion ist deutlich größer.

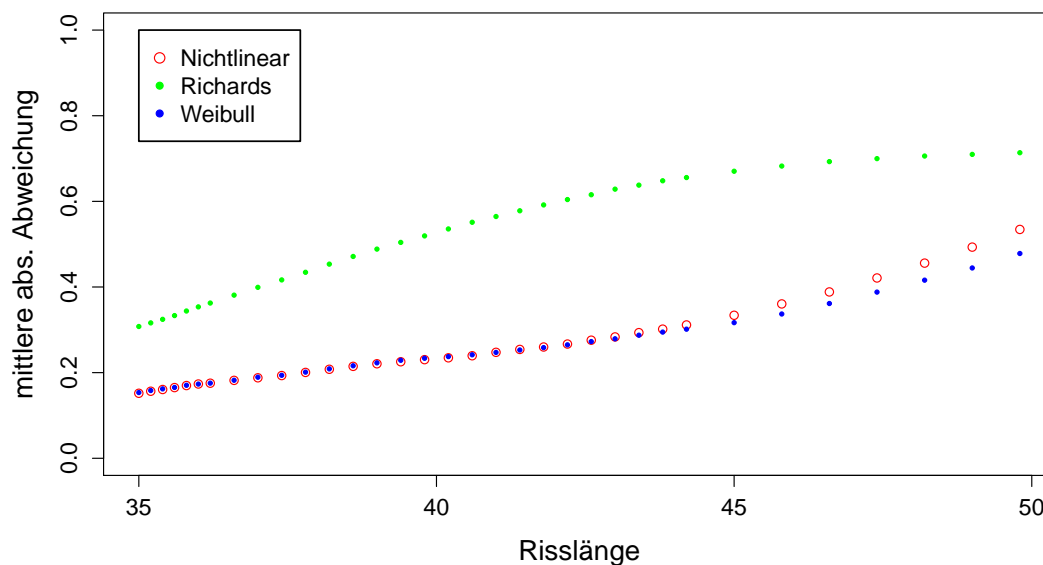


Abbildung 34: Mittlere absolute Abweichung der prognostizierten Zeit von der beobachteten Zeit, in Abhängigkeit von der Risslänge.

In den Abbildungen 35 und 36 auf der folgenden Seite werden die mittleren Intervallbreiten, beziehungsweise die Überdeckungsrate der Prognoseintervalle in Abhängigkeit von den Risslängen $l_F (F \in [131, \dots, 164])$ dargestellt. Die mittleren Intervallbreiten verbleiben bei allen Modellen nahezu konstant. Zwischen dem nichtlinearen Modell und der Weibullfunktion sind wiederum kaum Unterschiede sichtbar, während die Intervalle bei der Richardsfunktion durchschnittlich breiter sind.

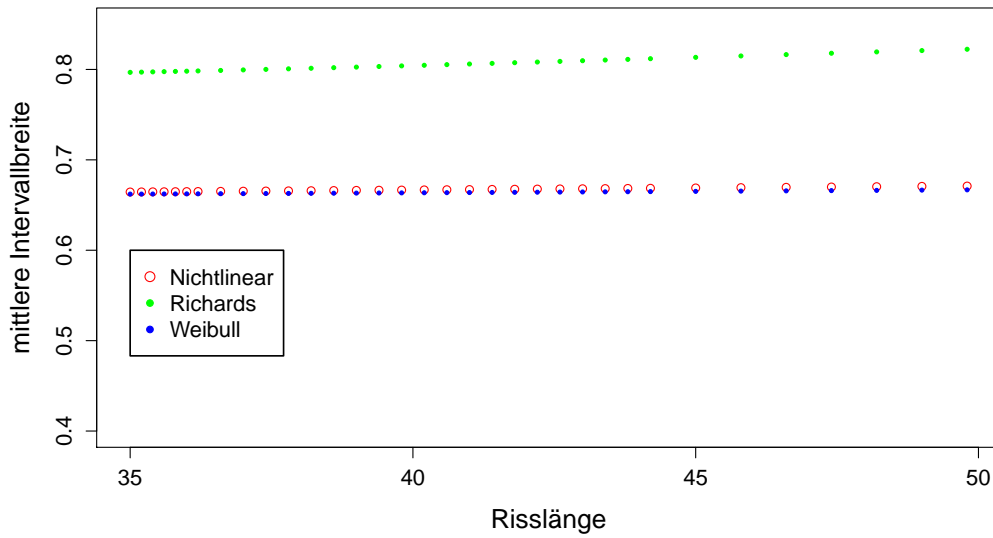


Abbildung 35: Mittlere Breite der Prognoseintervalle in Abhängigkeit von der Risslänge.

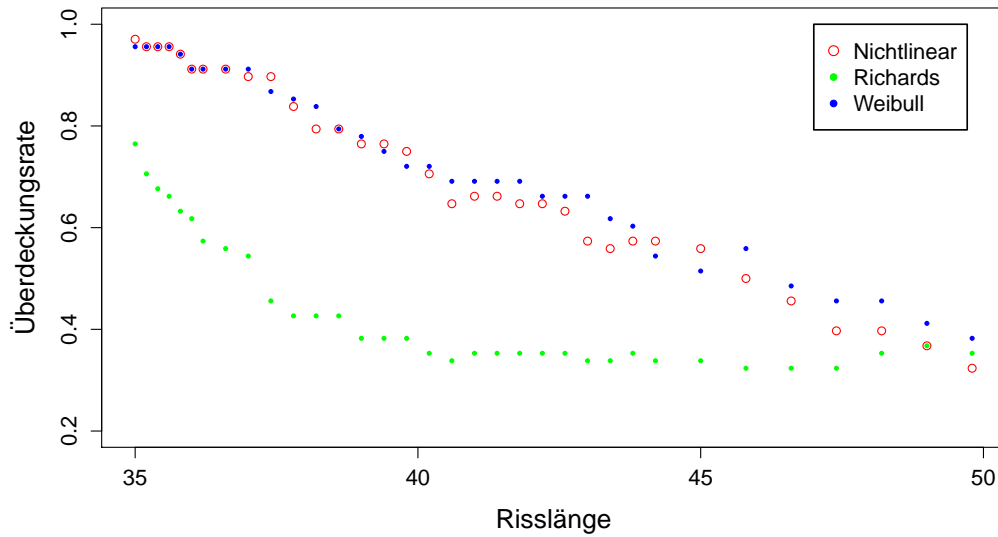


Abbildung 36: Überdeckungsrate der Prognoseintervalle in Abhängigkeit von der Risslänge.

Trotzdem ist die Überdeckungsrate der Intervalle bei der Richardsfunktion meist am geringsten. Nicht einmal für Prognosen nahe am Beobachtungszeitraum wird dort eine Überdeckungsrate von 0,95 erreicht. Bei dem nichtlinearen Modell und der Weibullfunktion wird zumindest für die ersten vier prognostizierten Zeiten eine Überdeckungsrate größer als 0,95 erreicht. Anschließend nähert sich die Überdeckungsrate der Intervalle dieser beiden Modellen langsam der durch die Richardsfunktion erzielten Überdeckungsrate an.

In Kapitel 3.4 wird mit dem Interval Score von Gneiting und Raftery (2007) eine weitere Möglichkeit vorgestellt, die Güte von Prognoseintervallen zu messen. Je geringer der Interval Score, desto besser ist die Prognose durch das Intervall. Wie zu erwarten, sind zwischen dem mittleren Interval Score bei dem linearisierten Modell und der Weibullfunktion keine großen Unterschiede erkennbar (Abb. 37). Der Interval Score bei der Richardsfunktion liegt durchschnittlich deutlich über dem der anderen Modelle.

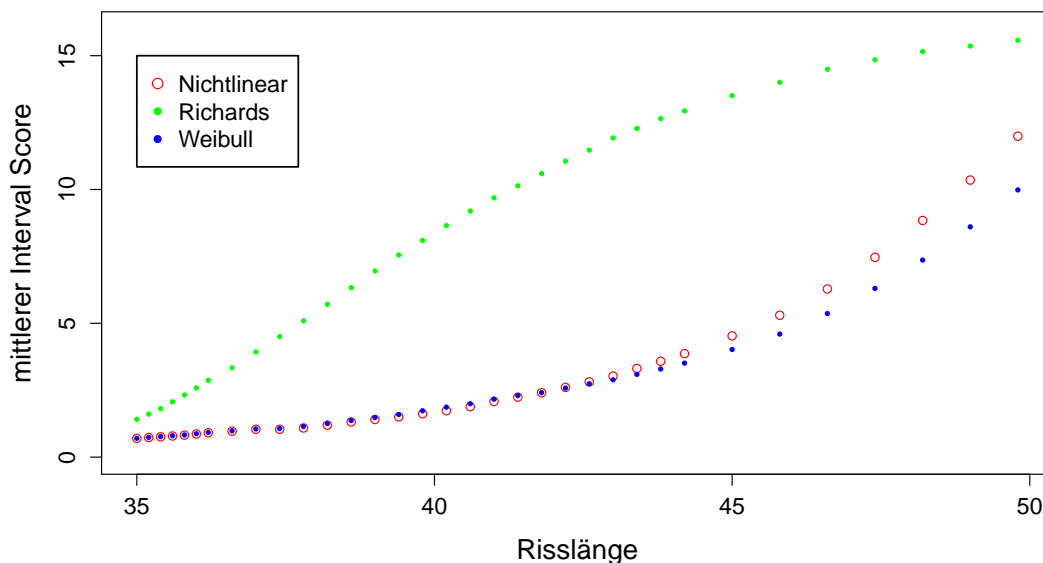


Abbildung 37: Mittlerer Interval Score der Prognoseintervalle in Abhängigkeit von der Riszlänge.

An dieser Stelle kann also resümiert werden, dass sich das nichtlineare Modell und die Weibullfunktion am besten eignen, die zukünftige Rissentwicklung zu prognostizieren, wenn die unveränderten Daten verwendet werden.

Zum Ende von Kapitel 4.1.1 kommt die Frage auf, ob sich die zukünftige Rissentwicklung besser vorhersagen lässt, wenn nur Beobachtungen mit Risslängen von mehr als 17 Millimetern verwendet werden. Schließlich wird die Anpassung in Hinsicht auf die durchschnittlichen quadratischen Fehler auf diese Weise bei den drei Modellen verbessert. Wie zuvor sollen die benötigten Zeiten für Risslängen größer 35 Millimeter prognostiziert werden. Nach Missachtung der ersten 40 Beobachtungen werden die verbleibenden Beobachtungen neu indiziert ($l_1 = 17$). Zur Berechnung der Prognoseintervalle wird anschließend $N = 90$ gewählt, da nun $l_{90} = 35$ ist. Die KQ-Schätzer der Parameter werden wieder so berechnet wie in Kapitel 4.1.1 beschrieben. Analog zum obigen Vorgehen werden zunächst wieder die mittleren absoluten Abweichungen für die zukünftigen Risslängen betrachtet (Abb. 38).

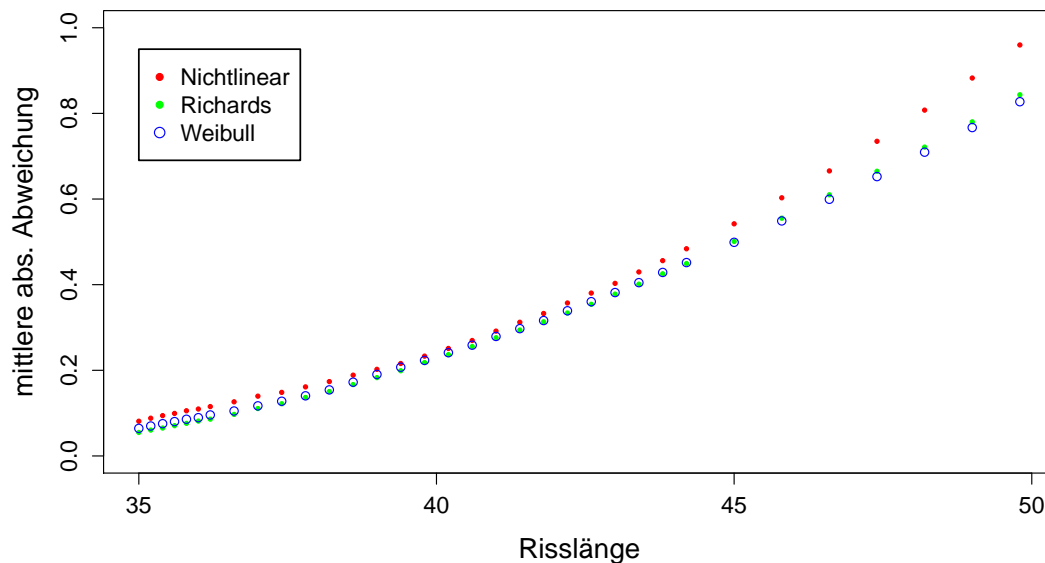


Abbildung 38: Mittlere absolute Abweichung der ohne die ersten 40 Beobachtungen prognostizierten Zeit von der beobachteten Zeit in Abhängigkeit von der Risslänge.

Es wird deutlich, dass sich die drei Modelle unter Verwendung der reduzierten Daten bezüglich der absoluten Abweichungen stärker ähneln als zuvor. Dafür steigen sie für weit vom Beobachtungszeitraum entfernte Risslängen schneller an und erreichen letztlich ein höheres Niveau als in Abbildung 34. Die Intervalle sind beim linearen Modell im Mittel am breitesten, gefolgt von der Weibullfunktion und der Richardsfunktion (Abb. 39).

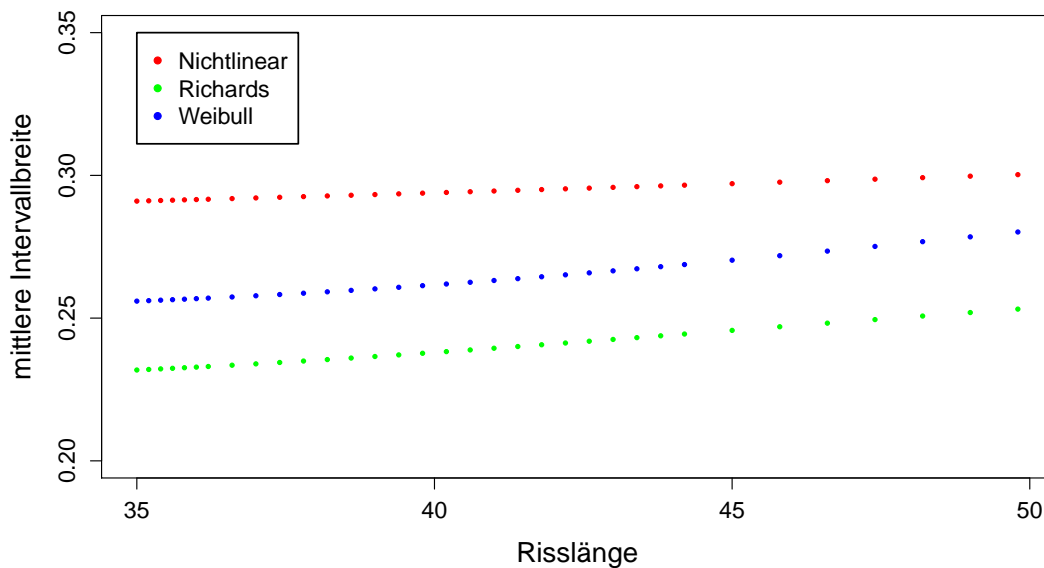


Abbildung 39: Mittlere Breite der ohne die ersten 40 Beobachtungen berechneten Prognoseintervalle in Abhängigkeit von der Risslänge.

Insgesamt sind die Intervalle deutlich schmäler als die zuvor berechneten Intervalle. Dafür werden bei dem nichtlinearen Modell und der Weibullfunktion jeweils deutlich weniger tatsächlich beobachtete Zeiten von den Prognoseintervallen überdeckt (Abb. 40, S.63). Nur bei der Richardsfunktion liegt die Überdeckungsrate zu Beginn über den zuvor erreichten Werten. Letztlich fällt aber auch sie unter das zuvor erreichte Niveau.

In Abbildung 41 auf der folgenden Seite sind die mittleren Werte des Interval-Score für die zukünftigen Risslängen eingezeichnet. Bis zu einer zukünftigen Risslänge von 45 sind kaum Unterschiede zwischen den drei Modellen zu bemerken.

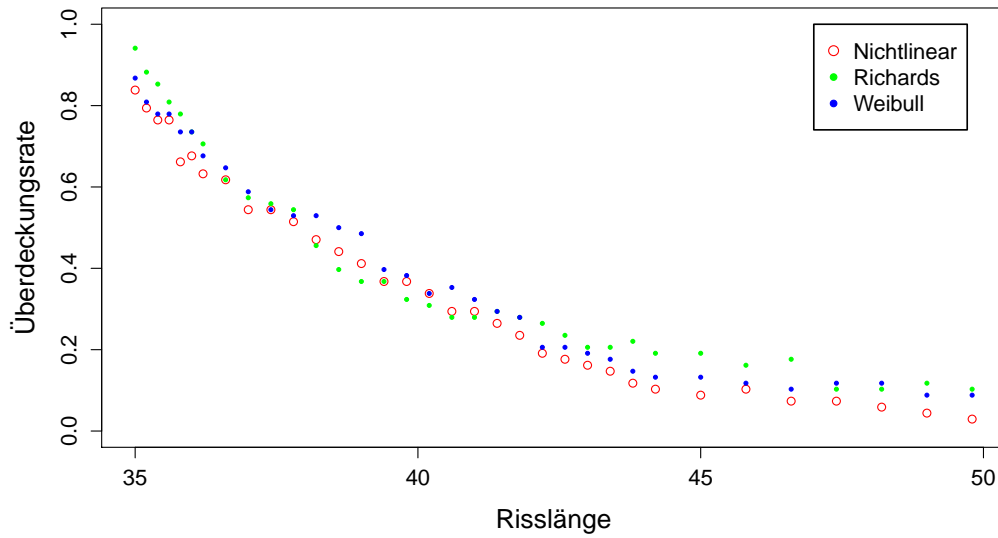


Abbildung 40: Überdeckungsrate der ohne die ersten 40 Beobachtungen berechneten Prognoseintervalle in Abhängigkeit von der Risslänge.

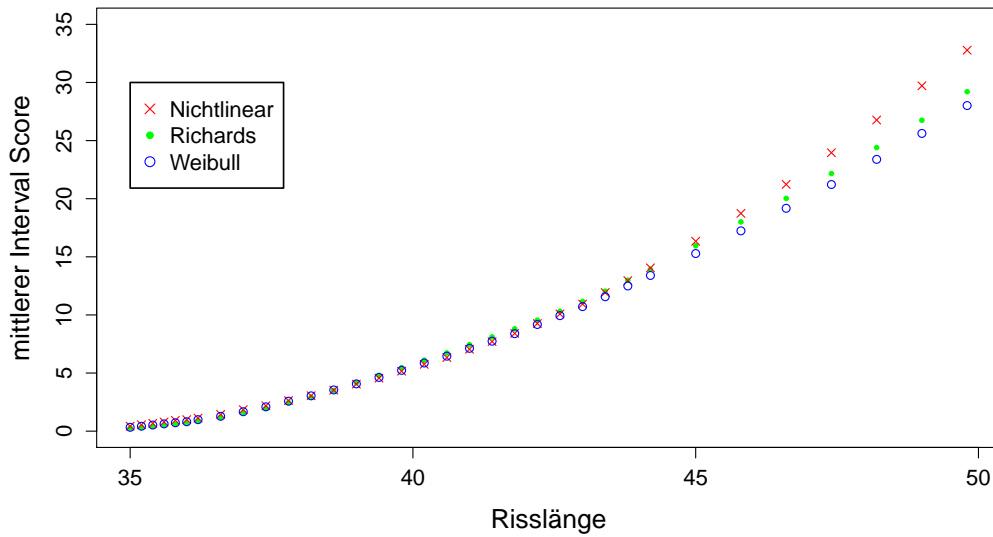


Abbildung 41: Mittlerer Interval Score der ohne die ersten 40 Beobachtungen berechneten Prognoseintervalle in Abhängigkeit von der Risslänge.

Anschließend steigt der Score bei dem nichtlinearen Modell am stärksten und bei der Weibullfunktion am geringsten an. In allen drei Fällen steigt der durchschnittliche Intervall-Score weiter an als bei den zuvor berechneten Intervallen. Ähnlich wie bei der Überdeckungsrate liegt der Score bei der Richardsfunktion zu Beginn allerdings unter den zuvor erreichten Werten.

Die in Kapitel 4.1.2 an die Rissdaten angepassten transformierten Wachstumsfunktionen wiesen keine akzeptable Güte auf. Auf ihrer Basis werden in dieser Arbeit daher keine Prognosen erstellt. Werden statt der Funktionen die Rissdaten transformiert ($l_n - 8,8$ für $n = 1, \dots, 164$), liefern das linearisierte Modell sowie der allgemeine Modellierungsansatz mit der Richards- und Weibullfunktion vergleichsweise hohe Anpassungsgüten (Kap. 4.1.3). Inwieweit sich anhand der transformierten Rissdaten mit diesen Modellen das zukünftige Risswachstum prognostizieren lässt, wird im Folgenden untersucht. Wie zu Beginn des Kapitels wird $N = 130$ und damit $l_{130} = 26,2$ gewählt, um wieder die benötigten Zeiten der letzten 34 Beobachtungen zu prognostizieren. Die Prognosen mit den zugehörigen Intervallen für das linearisierte Modell werden berechnet wie in Kapitel 3.3.1 beschrieben. Zur Berechnung der KQ-Schätzer für die Richardsfunktion wird die Funktion *nlsLM* benutzt, während bei der Weibullfunktion die Funktion *nls* verwendet wird. Die jeweiligen Startwerte finden sich in Tabelle 10. Beim Berechnen der (approximativen) Prognoseintervalle mit diesen Funktionen wird deutlich, warum die Risse auch dort nicht bei Null beginnen können. Für $l = 0$ sind die partiellen Ableitungen der Richardsfunktion (Beh. 3.14) nicht definiert, wenn sich durch die geschätzten Parameter negative Radikanden ergeben. Bei der partiellen Ableitung der Weibullfunktion nach d (Beh. 3.15) müsste hingegen der natürliche Logarithmus von Null berechnet werden.

In Abbildung 42 auf der folgenden Seite sind die mittleren absoluten Abweichungen der Prognosen von den tatsächlich beobachteten Zeiten eingezeichnet. Bei dem linearisierten Modell steigt die Abweichung mit zunehmender Risslänge deutlich stärker an als bei den übrigen Modellen. Durchgängig am geringsten ist die Abweichung bei der Weibullfunktion. Dort sind auch die Intervalle im Mittel am schmalsten (Abb. 43, S. 65). Die breitesten Intervalle ergeben sich wiederum beim linearisierten Modell.

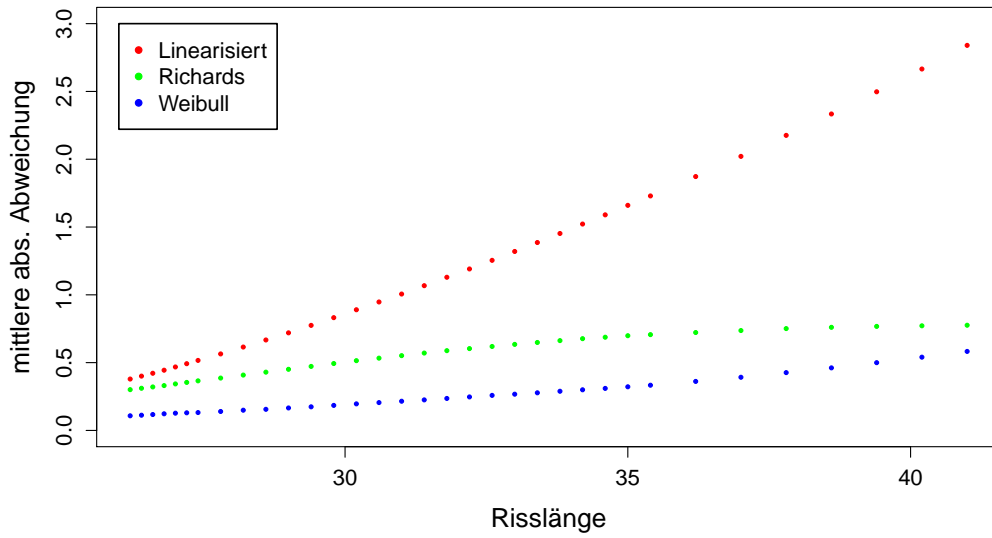


Abbildung 42: Mittlere absolute Abweichung der ohne die ersten 40 Beobachtungen prognostizierten Zeit von der beobachteten Zeit in Abhängigkeit von der Risslänge.

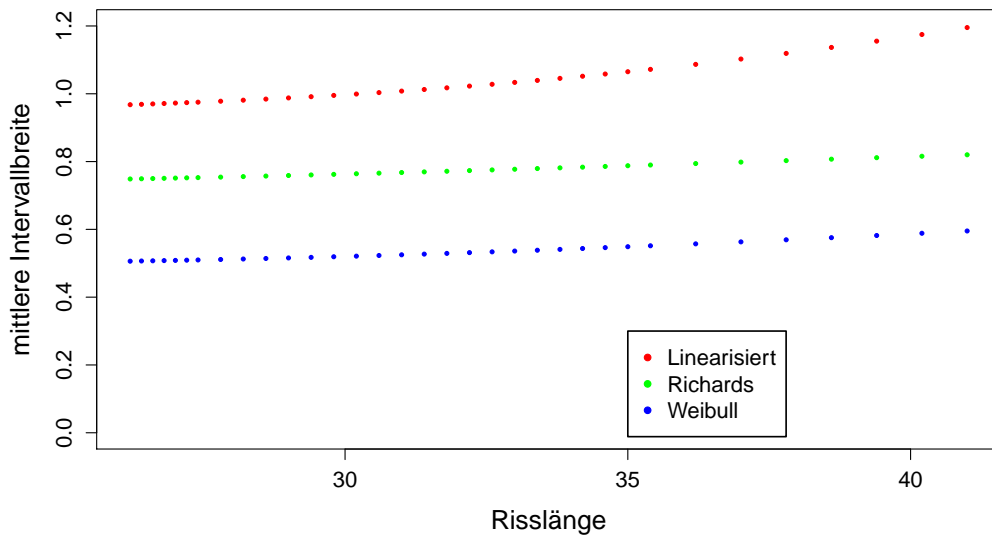


Abbildung 43: Mittlere Breite der ohne die ersten 40 Beobachtungen berechneten Prognoseintervalle in Abhängigkeit von der Risslänge.

Trotzdem fällt die Überdeckungsrate für das linearisierte Modell am schnellsten ab (Abb. 44). Die Überdeckungsrate bei der Richards- und Weibullfunktion verhält sich ähnlich wie unter Verwendung der unveränderten Daten.

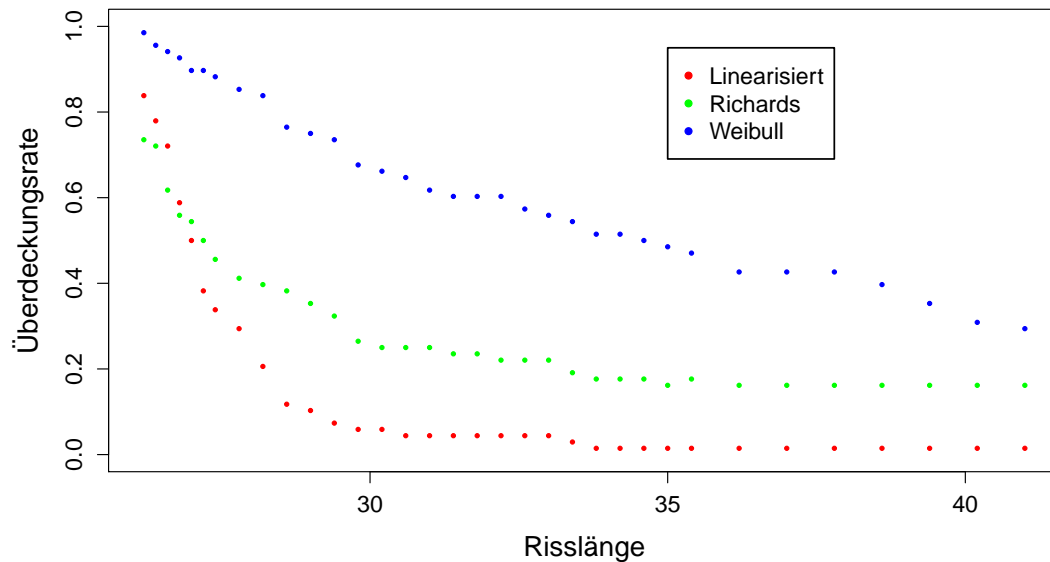


Abbildung 44: Überdeckungsrate der ohne die ersten 40 Beobachtungen berechneten Prognoseintervalle in Abhängigkeit von der Risslänge.

Das lässt sich ebenfalls für den mittleren Interval Score der Richardsfunktion festhalten (Abb. 45, S.67). Bei der Weibullfunktion ist der mittlere Interval Score zunächst etwas höher als bei den unveränderten Daten, steigt aber im weiteren Verlauf nicht so weit an wie dort. Weit entfernte Prognosen lassen sich also noch am ehesten mit der Weibullfunktion unter Verwendung der transformierten Daten berechnen.

Unter Berücksichtigung aller in diesem Kapitel durchgeführten Prognosen kann zusammengefasst werden, dass zukünftige Beobachtungen, die dem jeweiligen Beobachtungszeitraum nicht sehr nahe liegen, durch keines der Verfahren verlässlich vorhergesagt werden können. Dass die Residuen, wie im vorangegangenen Kapitel erörtert, nicht unabhängig verteilt sind könnte ein Grund dafür sein. Außerdem wurden die Annahmen (c) - (d) aus Behauptung 3.10 vorausgesetzt, ohne sie explizit nachzuweisen.

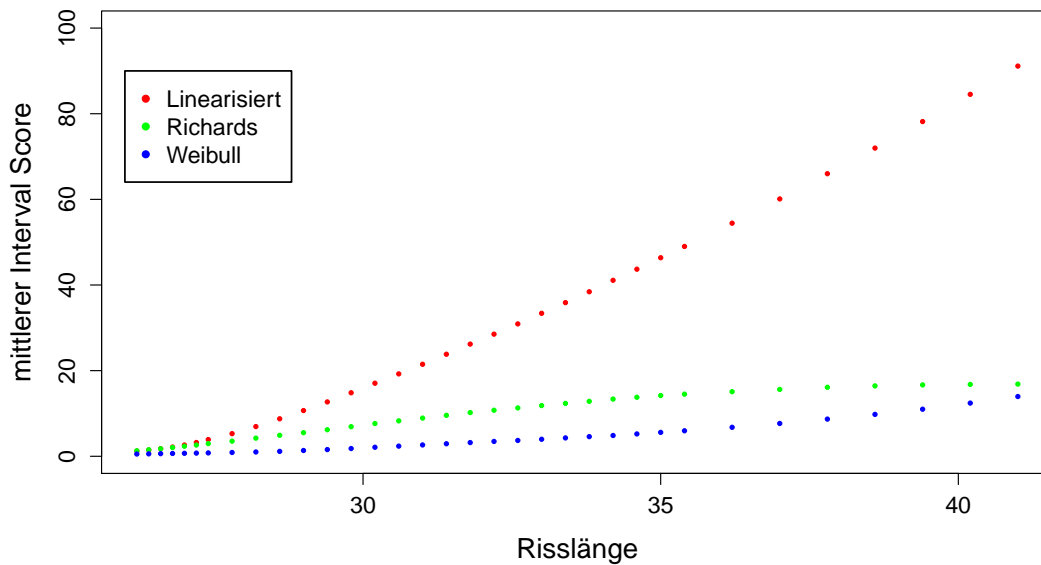


Abbildung 45: Mittlerer Interval Score der ohne die ersten 40 Beobachtungen berechneten Prognoseintervalle in Abhängigkeit von der Risslänge.

5 Zusammenfassung

Thema dieser Arbeit ist die Anpassung und Prognose von Risswachstum mit verschiedenen Modellen. Brauchbare Prognosen von Risswachstum, können beispielsweise genutzt werden um zu entscheiden, wann Brücken saniert oder Verschleißteile diverser Maschinen ersetzt werden müssen.

Der dieser Arbeit zugrunde liegende Datensatz umfasst das Wachstum von künstlich erzeugten Risse. Zur Datengewinnung setzen Virkler et al. (1979) Aluminiumprüfkörper zyklischen Belastungen aus und messen die Zeit, bis die Risse vorgegebene Längen erreichen. Auf diese Weise werden in jedem der 68 Versuche 164 Beobachtungspunkte aufgezeichnet.

Im Folgenden werden die in dieser Arbeit verwendet Modelle genannt. Aus der Paris-Erdogan Gleichung werden das einfache logistische Modell, ein nichtlineare Modell und das linearisierte Modell hergeleitet.

Außerdem wird ein allgemeiner Modellierungsansatz mit je einer von vier klassischen Wachstumsfunktionen (Gompertz, Logistic, Richards, Weibull) verwendet.

In der statistischen Auswertung wird zunächst untersucht mit welchen Modellen sich die beobachteten Risse am besten beschreiben lassen. Jeder der 68 Risse wird separat modelliert. Die erzielte Anpassungsgüte ist beim allgemeinen Modellierungsansatz mit der Weibullfunktion am Höchsten. Ähnlich gute Anpassungen gelingen auch unter Verwendung der Richardsfunktion und dem aus der Paris-Erdogan Gleichung hervorgehenden nichtlinearen Modell. Mit den übrigen Modellen gelingt keine akzeptable Annäherung der Risse. Für die drei Modelle mit, denen gute Anpassungen möglich sind, wird noch untersucht, ob sich die Anpassung bezüglich der durchschnittlichen quadratischen Fehler verbessern lässt, wenn die Rissdaten erst ab einer Länge von 17 mm modelliert werden. In der Frühphase der Rissentwicklung weisen die Modelle nämlich vergleichsweise hohe Abweichungen auf. In allen drei Fällen kann der durchschnittliche quadratische Fehler durch die Reduktion der zur Anpassung verwendeten Daten reduziert werden.

Anschließend wird geprüft, ob sich das Risswachstum besser durch transformierte Wachstumsfunktionen beschreiben lässt. Dabei werden Transformationen der Gompertz-, Logistic- und Richardsfunktion verwendet. Bei diesen Transformationen liegt an der ersten vorgegebenen Risslänge eine Wendestelle vor. Es wird ermittelt, dass sich die Risse durch die transformierte Gompertz- und Richardsfunktion schlechter annähern lassen als mit den ursprünglichen Funktionen. Verhältnismäßig besonders drastisch sinkt die Anpassungsgüte bei der Richardsfunktion. Bei der Logisticfunktion konnte die Anpassung durch die Transformation zwar leicht verbessert werden, aber sie erreicht dennoch kein akzeptables Niveau.

Wie in der Zielsetzung formuliert, wird außerdem analysiert, ob sich ihr Wachstum besser beschreiben lässt, wenn die Risse Nahe bei Null beginnen. Während sich die Anpassung beim nichtlinearen Modell (aus der Paris-Erdogan Gleichung abgeleitet) deutlich verschlechtert, gelingt mit dem linearisierten Modell eine vergleichsweise gute Annäherung. Beim allgemeinen Modellierungsansatz mit der Gompertz- und Logisticfunktion ändert sich nichts. Auch auf Basis der veränderten Daten können die Risse mit der Weibullfunktion am besten beschrieben werden, gefolgt von der Richardsfunktion.

Bei der Weibullfunktion konnte die Anpassung gegenüber den unveränderten Daten sogar noch weiter verbessert werden.

Nach den Anpassungen werden die jeweils resultierenden Residuen untersucht. Anhand von Q-Q-Plots wird geprüft, ob die Residuen identisch (normal-) verteilt sind. Aus Gründen der Übersichtlichkeit werden stets nur die Residuen der ersten beiden Versuchsreihen betrachtet. Bei allen Modellen, für die im Folgenden Prognosen berechnet werden, sprechen die Q-Q-Plots nicht gegen identisch (normal-) verteilte Fehler. An dieser Stelle muss darauf hingewiesen werden, dass der Q-Q-Plot nur eine graphische Methode zur Überprüfung von Verteilungsannahmen darstellt und somit einen gewissen Interpretationsspielraum liefert. Möglicherweise könnten Anpassungstest, durchgeführt für alle Versuchsreihen, verlässlichere Schlussfolgerungen ermöglichen. Anschließend werden die Residuen, in Abhängigkeit von der Risslänge bei der ersten Versuchsreihe, bei den zum Prognostizieren verwendeten Modellen betrachtet. Dabei wird klar, dass die Fehler nicht unabhängig voneinander sind.

Zum Ende der statistischen Auswertung werden für die Modelle, die gute Anpassungen liefern, Prognosen mit den zugehörigen Intervallen berechnet. Bei den unveränderten und den reduzierten Rissdaten gelang dies mit dem nichtlinearen Modell (Paris-Erdogan), sowie dem allgemeinen Modellierungsansatz mit der Richards- und Weibullfunktion. Wenn die Risse nahe bei Null beginnen, gilt dies nicht mehr für das nichtlineare Modell sondern stattdessen für das linearisierte Modell. Während der Analyse der Prognosegüten wird deutlich, dass nur zukünftiges Wachstum der Risse nahe dem Beobachtungszeitraum verlässlich vorhergesagt werden kann. Ein Grund dafür wird in den nicht unabhängig (normal-) verteilten Residuen vermutet. Außerdem werden weitere Annahmen, die zur Berechnung von Prognoseintervallen bei nichtlinearen Funktionen getroffen werden müssen, nicht explizit nachgewiesen.

Anhand des vorliegenden Datenmaterials sollten also noch weitere Verfahren zur Prognose von Rissdaten getestet werden. So wird beispielsweise von Müller (2013) erläutert, wie Prognosen mittels stochastischer Differentialgleichungen berechnet werden können.

Literaturverzeichnis

Box, G. E. P. & Tidwell, P. W. (1962). *Transformation of the independent variables*. Technometrics 4, 531-550.

Caspary, W. & Wichmann, K. (1994). *Lineare Modelle*. Oldenbourg, München.

Elzhov T. V., Mullen K. M., Spiess A.-N. & Bolker B. (2013). *minpack.lm: R interface to the Levenberg-Marquardt nonlinear least-squares algorithm found in MINPACK, plus support for bounds*. R-Paket, Version 1.1-8.

Fahrmeier, L., Künstler, R., Pigeot, I. & Tutz, G. (2004). *Statistik, Der Weg zur Datenanalyse*. Springer, Berlin.

Gneiting, T. & Raftery, A. E. (2007). *Strictly Proper Scoring Rules, Prediction, and Estimation*. Journal of the American Statistical Association 102, 359-378.

Hartung, J. (1999). *Statistik*. Oldenbourg, München.

Jennrich, R. I. (1969). *Asymptotic properties of non-linear least squares estimation*. Annals of Mathematical Statistics 40, 633-643.

Kenney, J. F. & Keeping, E. S. (1939). *Mathematics of Statistics Part I*. Chapman & Hall, London.

Lehmann, E. L. (1999). *Elements of large sample theory*. New York, Springer.

Müller, C. (2013). *Prediction of growth processes*. Technische Universität Dortmund.

Ortiz, K. & Kiremidjian, A. S. (1986). *Stochastic Modeling of Fatigue Crack Growth*. Engineering Fracture Mechanics 24, 657-675.

R Core Team (2014). *R: A language and environment for statistical computing*. R Foundation for Statistical Computing, Wien, Österreich.

Richards, F. J. (1959). *A Flexible Growth Function for Empirical Use*. Journal of Experimental Botany 10, 290-300.

Schervish, M. J. (1995). *Theory of Statistics*. Springer, New York.

Virkler, D. A., Hillberry B. M. & Goel, P. K. (1979). *The Statistical Nature of Fatigue Crack Propagation*. Journal of Engineering Materials and Technology 101, 148-153.

Weisstein, E. W. *Logistic Equation*. MathWorld—A Wolfram Web Resource, <http://mathworld.wolfram.com/LogisticEquation.html> [09.03.2015].